LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

PROBLÈMES RÉSOLUS

TOME 2

Victor Mikhailovich GALITSKY
Boris Mikhailovich KARNAKOV
Vladimir Il'yich KOGAN

EDP SCIENCES

17, avenue du Hoggar
Parc d'Activité de Courtabœuf, BP 112
91944 Les Ulis Cedex A, France

Ouvrages Grenoble Sciences édités par EDP Sciences

Collection Grenoble Sciences

Chimie. Le minimum vital à savoir *(J. Le Coarer)* - Electrochimie des solides *(C. Déportes et al.)* - Thermodynamique chimique *(M. Oturan & M. Robert)* - Chimie organométallique *(D. Astruc)*

Introduction à la mécanique statistique *(E. Belorizky & W. Gorecki)* - Mécanique statistique. Exercices et problèmes corrigés *(E. Belorizky & W. Gorecki)* - La symétrie en mathématiques, physique et chimie *(J. Sivardière)* - La cavitation. Mécanismes physiques et aspects industriels *(J.P. Franc et al.)* - La turbulence *(M. Lesieur)* - Magnétisme : I Fondements, II Matériaux et applications *(sous la direction d'E. du Trémolet de Lacheisserie)* - Du Soleil à la Terre. Aéronomie et météorologie de l'espace *(J. Lilensten & P.L. Blelly)* - Sous les feux du Soleil. Vers une météorologie de l'espace *(J. Lilensten & J. Bornarel)* - Mécanique. De la formulation lagrangienne au chaos hamiltonien *(C. Gignoux & B. Silvestre-Brac)* – Analyse statistique des données expérimentales *(K. Protassov)*

Exercices corrigés d'analyse, Tomes 1 et 2 *(D. Alibert)* - Introduction aux variétés différentielles *(J. Lafontaine)* - Analyse numérique et équations différentielles *(J.P. Demailly)* - Mathématiques pour les sciences de la vie, de la nature et de la santé *(F. & J.P. Bertrandias)* - Approximation hilbertienne. Splines, ondelettes, fractales *(M. Attéia & J. Gaches)* - Mathématiques pour l'étudiant scientifique, Tomes 1 et 2 *(Ph.J. Haug)*

Bactéries et environnement. Adaptations physiologiques *(J. Pelmont)* - Enzymes. Catalyseurs du monde vivant *(J. Pelmont)* - La plongée sous-marine à l'air. L'adaptation de l'organisme et ses limites *(Ph. Foster)* - L'ergomotricité. Le corps, le travail et la santé *(M. Gendrier)* - Endocrinologie et communications cellulaires *(S. Idelman & J. Verdetti)*

L'Asie, source de sciences et de techniques *(M. Soutif)* - La biologie, des origines à nos jours *(P. Vignais)* - Naissance de la physique. De la Sicile à la Chine *(M. Soutif)*

Minimum Competence in Scientific English *(J. Upjohn, S. Blattes & V. Jans)* - Listening Comprehension for Scientific English *(J. Upjohn)* - Speaking Skills in Scientific English *(J. Upjohn, M.H. Fries & D. Amadis)*

Grenoble Sciences - Rencontres Scientifiques

Radiopharmaceutiques. Chimie des radiotraceurs et applications biologiques *(sous la direction de M. Comet & M. Vidal)* - Turbulence et déterminisme *(sous la direction de M. Lesieur)* - Méthodes et techniques de la chimie organique *(sous la direction de D. Astruc)*

AVANT-PROPOS

Ce recueil propose plus de 800 problèmes de divers niveaux se rapportant pour l'essentiel à la mécanique quantique non relativiste. Il est destiné aux physiciens, étudiants et thésards, expérimentateurs et théoriciens.

Les problèmes illustrent suivant les cas, les principes de la mécanique quantique, les instruments mathématiques ou les exemples d'application concrètes, essentiellement en physique atomique, en physique nucléaire et en physique des particules. Outres les problèmes traditionnels de la mécanique quantique, le recueil comprend un grand nombre de problèmes nouveaux inspirés par les derniers développements de la mécanique quantique et par ses multiples applications physiques. Une tel ouvrage est en fait un complément naturel des manuels de mécanique quantique tels que ceux de L.D. Laundau et E.M. Lifchitz, de Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë ou de A. Messiah.

Tous les problèmes proposés sont corrigés souvent de façon détaillée. Les solutions permettent une acquisition pratique des connaissances théoriques.

Ce livre est une traduction améliorée du " Recueil de problèmes de mécanique quantique " de V.M. Galitsky, B.M. Karnakov et V.I. Kogan (publié par Nauka en russe), problèmes qui furent proposés aux étudiants de l'Institut des ingénieurs et des physiciens de Moscou.

Le lecteur dispose pour optimiser son travail la liste des notations les plus courantes et des valeurs numériques des constantes nécessaires à la résolution de problèmes de physique de l'atome et du noyau. Notons que, dans ce livre, on utilise le système d'unités CGS qui est mieux adapté à ce type de problèmes. Une annexe fournit les résultats des problèmes de mécanique quantique de l'oscillateur linéaire, de l'atome d'hydrogène et un complément sur certaines fonctions spéciales (les harmoniques sphériques, les fonctions de Bessel, etc).

L'ouvrage sera particulièrement utile aux étudiants de physique de second et troisème cycle (les exercices correspondant au niveau du troisème cycle sont marqués par une étoile) mais également à tous ceux qui sont concernés par la mécanique quantique.

SYMBOLES ET CONSTANTES

SYMBOLES

La signification des symboles utilisés est expliquée soit dans les énoncés soit dans la solution de chaque problème. Il existe, toutefois, un certain nombre de grandeurs pour lesquelles on a utilisé des notations standards. *Les notations de ces grandeurs dans tous les cas où cela ne conduit pas à des ambiguïtés n'ont pas été expliquées dans le texte.*

$\hat{}$	symbole d'opérateur ou de matrice
$\tilde{f}$	l'opérateur transposé de l'opérateur $\hat{f}$
f^*	l'opérateur complexe conjugué de l'opérateur $\hat{f}$
$\hat{f}^\dagger$	l'opérateur conjugué hermitien de l'opérateur $\hat{f}$
$\langle m\|f\|n\rangle \equiv f_{mn} \equiv f_n^m$ $\equiv \int \Psi_m^* \hat{f} \Psi_n d\tau$	élément matriciel de l'opérateur $\hat{f}$
$\propto$	symbole de proportionnalité
$\sim$	symbole d'ordre de grandeur
$\Psi_f(q)$	dans la notation de la fonction d'onde, q désigne en général l'ensemble des variables de la représentation utilisée, tandis que f représente les valeurs propres des grandeurs physiques ou bien les nombres quantiques de l'état considéré
Ψ_n^{osc}	fonction propre de l'oscillateur harmonique
e	charge de la particule[1]
c	vitesse de la lumière
$\hat{H}$	hamiltonien
E	énergie
$\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$	intensité des champs électrique et magnétique
$\mathbf{A}$	potentiel vecteur
U	énergie potentielle (potentiel)
$\hat{V}$	opérateur perturbation

1 Mais s'il s'agit d'une particule réelle (électron, proton, noyau atomique, etc.), e désigne la charge élémentaire $e \approx 4,80 \times 10^{-10}$ CGS (de sorte que la charge de l'électron vaut $-e$, celle du proton $+e$, celle du noyau atomique Ze, etc.).

$\mathbf{d}$	moment dipolaire
a_0	rayon de Bohr
δ_l	déphasage
$\boldsymbol{\sigma}$	matrices de Pauli
w, W	probabilité de transition, probabilité de transition par unité de temps
Z, Ze	charge du noyau
R	rayon du potentiel
m, M	masse, nombre quantique magnétique
μ	masse, moment magnétique
A	nombre atomique du noyau
$\mathbf{p}$, $\mathbf{P}$	impulsion
$\mathbf{k}$	vecteur d'onde
ω	fréquence (pulsation)
l, L, j, J	moment (orbital, total)
s, S	spin
$J_\nu(z)$	fonction de Bessel
$H_n(x)$	polynôme d'Hermite
$Y_{lm}(\theta, \varphi)$	harmonique sphérique

CONSTANTES

La résolution des nombreux problèmes de physique atomique, de physique moléculaire et de physique nucléaire nécessite des calcul numériques destinés à comparer les solutions aux données expérimentales (figurant dans les énoncés). Pour faciliter les calculs, on donne ici les valeurs numériques des principales constantes physiques[2].

Constante de Planck $h = 1,054 \times 10^{-27}$ erg $\times$ s
Charge élémentaire $e = 4,80 \times 10^{-10}$ unités CGS
Masse de l'électron $m_e = 9,11 \times 10^{-28}$ g
Vitesse de la lumière $c = 3,00 \times 10^{-10}$ cm/s
Rayon de Bohr (unité de longueur atomique) $a_0 = 0,53 \times 10^{-8}$ cm
Unité atomique d'énergie $m_e e^4/\hbar^2 = 4,36 \times 10^{-11}$ erg $= 27,2$ eV
Unité atomique de fréquence $m_e e^4/\hbar^3 = 4,13 \times 10^{16}$ s^{-1}
Unité atomique d'intensité du champ électrique $e/a_0^2 = 5,14 \times 10^9$ V/cm
Constante de structure fine $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$
Masse du proton $m_p = 1836 m_e = 1,67 \times 10^{-24}$ g
Différence de masses entre neutron et proton $m_n - m_p \approx 2,5 m_e$
Energie au repos de l'électron $m_e c^2 = 0,51$ MeV
Rayon du noyau $R \approx 1,2 \times 10^{-13} A^{1/3}$ cm
1 eV $= 1,60 \times 10^{-12}$ erg

2 Ces valeurs sont approchées ; pour plus de précision voir les ouvrages spécialisés.

CHAPITRE 9

APPROXIMATION QUASI-CLASSIQUE

9.1 QUANTIFICATION DES NIVEAUX D'ÉNERGIE. FONCTIONS D'ONDE QUASI-CLASSIQUES

9.1. Donner, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, les niveaux d'énergie d'un oscillateur harmonique linéaire. Indiquer la condition de validité du résultat obtenu. Comparer à la solution exacte.

9.2. Obtenir la règle de quantification des niveaux d'énergie et chercher les fonctions d'ondes dans le cadre de l'approximation quasi-classique pour un potentiel de la forme donnée sur la fig. 1.

9.3. Obtenir, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, les niveaux d'énergie d'une particule placée dans un champ de pesanteur homogène lorsque son mouvement est limité par le bas par un miroir parfait. Indiquer la condition de validité du résultat obtenu (bien que pour les niveaux d'énergie les plus bas du spectre $n \sim 1$, l'approximation quasi-classique ne soit pas formellement valable, il est utile de comparer le résultat obtenu pour $n = 0$ à la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental (voir 2.15 du Tome I)).

9.4. Pour une particule se trouvant dans le potentiel

$$U(x) = U_0|x/a|^\nu \; ; \qquad U_0 > 0, \qquad \nu > 0,$$

chercher dans l'approximation quasi-classique comment varie la distance entre des niveaux voisins en fonction de la valeur du paramètre ν. Quelle est la densité des états du spectre discret ?

9.5. Chercher, dans l'approximation quasi-classique, la densité d'états du spectre discret pour une particule placée dans un puits de potentiel unidimensionnel.

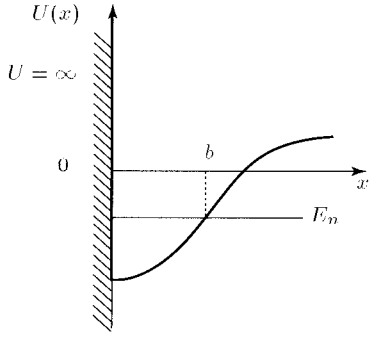

Figure 1

9.6. L'énergie potentielle d'une particule au voisinage du point x_0 est de la forme ($\nu > 0$)

$$U(x) \approx \pm\alpha|x - x_0|^{-\nu}.$$

Pour quelles valeurs du paramètre ν peut-on utiliser l'approximation quasi-classique au voisinage de ce point ? Qu'en est-il pour $\nu = 2$?

9.7. Pour une particule se trouvant dans le potentiel central $U(r) = -\alpha r^{-\nu}$, $\alpha > 0$, $\nu > 0$, établir dans quel domaine de l'espace l'approximation quasi-classique est applicable pour une particule dans l'état s d'énergie $E = 0$.

9.8. En utilisant l'approximation quasi-classique, chercher les niveaux élevés du spectre discret (c'est-à-dire les niveaux d'énergie $E_n \to 0$) d'une particule dans un potentiel $U(x)$ de la forme

$$U(x) = \begin{cases} -\alpha/x^2, & x > a \quad (a > 0), \\ \infty, & x < a. \end{cases}$$

Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

9.9. Obtenir dans l'approximation quasi-classique les fonctions d'onde et les niveaux d'énergie des états s d'une particule dans le potentiel coulombien $U(r) = -\alpha/r$. Comparer le résultat obtenu à la solution exacte du problème.

9.10. Généraliser le résultat du problème précédent pour un potentiel central de la forme $U(r) = -\alpha/r^\nu$; $0 < \nu < 2$.

9.11. Généraliser le résultat du problème 9.9 pour les états stationnaires d'une particule ayant un moment cinétique non nul dans un potentiel coulombien.

9.12. En utilisant l'approximation quasi-classique, chercher les valeurs des paramètres du potentiel

$$U(x) = -\frac{U_0 a^4}{(x^2 + a^2)^2},$$

pour lesquels il y a apparition d'un nouvel état lié. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

9.13. Même question que dans le problème précédent, mais pour le potentiel

$$U(x) = -\frac{U_0 a^4}{x^4 + a^4}.$$

9.14. Une particule se trouve dans un puits de potentiel $U(x)$ ayant pour $x \to \pm\infty$ la forme $U(x) \propto |x|^{-\nu}$ avec $\nu > 2$.

Obtenir dans le cadre de l'approximation quasi-classique la formule permettant de déterminer les valeurs des paramètres du potentiel pour lesquelles apparaissent de nouveaux états liés à mesure que le puits s'approfondit.

9.15. Pour une particule se trouvant dans le potentiel

$$U(x) = U_0 \left|\frac{x}{a}\right|^{\nu} \qquad (U_0 > 0, \nu > 0),$$

établir pour quelles valeurs du paramètre ν on peut utiliser les formules usuelles de l'approche quasi-classique : règle de quantification de Bohr-Sommerfeld et conditions de raccordement des fonctions d'onde quasi-classiques au voisinage des points de rebroussement.

9.16. Grâce à la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld, obtenir l'expression donnant le déplacement des niveaux d'énergie d'une particule lors d'une variation du potentiel $\delta U(x)$.

Montrer que le résultat obtenu est en accord avec celui obtenu au premier ordre du calcul des perturbations stationnaires.

9.17. Démontrer le théorème du viriel dans le cadre de l'approximation quasi-classique.

9.18. En supposant connu le spectre d'énergie E_n d'une particule, déterminer son énergie cinétique moyenne dans le $n^{\text{ème}}$ état stationnaire pour $n \gg 1$.

9.19. Dans le cadre de l'approximation quasi-classique, chercher les éléments matriciels F_{mn} de l'opérateur $\widehat{F}$ ayant la forme $\widehat{F} = F(x)$ pour $|m - n| \sim 1$, c'est-à-dire pour des états voisins en énergie. Etablir la correspondance entre les éléments matriciels F_{mn} et les composantes de Fourier $\widetilde{F}_s$ de la fonction $F(x(t))$ en mécanique classique

$$F(x(t)) = \sum_{s=-\infty}^{\infty} \widetilde{F}_s \mathrm{e}^{is\omega t}, \qquad \widetilde{F}_s = \frac{1}{T}\int_0^T F(x(t))\mathrm{e}^{-is\omega t}dt,$$

où $T = 2\pi/\omega$ est la période du mouvement au sein du potentiel dans lequel la particule classique a une énergie $E_n \approx E_m$.

Chercher, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, les éléments matriciels de l'opérateur coordonnée de l'oscillateur et les comparer aux valeurs exactes.

9.20. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent pour un opérateur $\widehat{F} = F(\widehat{p})$ où la fonction $F(z)$ peut être développée en série $F = \sum c_k z^k$.

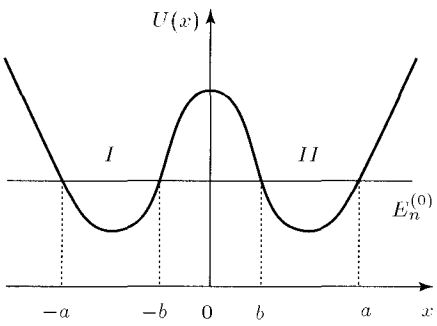

Figure 2

9.21. Le potentiel $U(x)$ est constitué de deux puits identiques (I et II, fig. 2) séparés par une barrière. Si la barrière est infranchissable on a des niveaux d'énergie correspondant au mouvement de la particule dans un seul puits (I ou II), avec les mêmes niveaux pour les deux puits. La possibilité de franchir la barrière conduit à une levée de la dégénérescence et à la séparation de ces niveaux en deux niveaux voisins correspondant à des états pour lesquels la particule se déplace dans les deux puits.

Dans le cadre de l'approximation quasi-classique, déterminer la valeur de la séparation des niveaux.

9.22. En utilisant l'approche quasi-classique, établir la règle de quantification du moment cinétique et chercher la forme asymptotique des harmoniques sphériques Y_{lm}.

Indiquer les conditions de validité des résultats obtenus.

9.23. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas $l - |m| \sim 1$ ($|m| \gg 1$).

9.24. Même question que dans les deux problèmes précédents, mais pour le cas $|m| \sim 1$.

9.25. A partir de la solution de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur linéaire obtenue dans l'approximation quasi-classique, chercher la forme asymptotique des polynômes d'Hermite $H_n(x)$ pour $n \to \infty$ (et pour x fixé).

9.2 FRANCHISSEMENT DES BARRIÈRES DE POTENTIEL

9.26. Calculer grâce à l'approximation quasi-classique le coefficient de transmission d'une barrière parabolique de la forme

$$U(x) = \begin{cases} U_0(1 - x^2/a^2), & |x| < a, \\ 0, & |x| > a. \end{cases}$$

Indiquer la condition de validité du résultat obtenu (on discutera, en particulier, le cas des particules lentes $E \to 0$).

9.27. Déterminer grâce à l'approximation quasi-classique le coefficient de transmission d'une barrière de la forme

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0(1 - x/a), & x > 0. \end{cases}$$

Quelle est la précision du résultat obtenu (comparer à 9.31 et 9.32) ?

9.28. Même question que dans le problème précédent, mais pour une barrière de la forme

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ U_0 \exp(-x/a), & x > 0 \end{cases}$$

(voir de même 9.31).

9.29. Calculer, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, le coefficient de transmission de la barrière

$$U(x) = \frac{U_0}{\mathrm{ch}^2(x/a)}.$$

Comparer le résultat obtenu à la valeur exacte (voir 2.52 du Tome I).

9.30. Chercher, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, le coefficient de transmission de la barrière

$$U(x) = \frac{U_0 a^2}{x^2 + a^2}$$

pour une énergie suffisamment petite de la particule.

9.31. Le coefficient de transmission d'une barrière est donné, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, par la formule

$$D(E) = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p| dx\right].$$

Pour trouver cette expression, on doit pouvoir développer le potentiel au premier ordre autour des points de rebroussement.

Dans le cas d'une barrière de la forme

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \widetilde{U}(x), & x > 0 \end{cases}$$

où $\widetilde{U}(0) \neq 0$, montrer que le coefficient de transmission s'écrit

$$D(E) = A \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p| dx\right].$$

et trouver l'expression du facteur A.

9.32. Appliquer le résultat obtenu dans le problème précédent à la barrière de potentiel étudiée dans le problème 9.27 et comparer à la solution exacte (voir problème 2.53 du Tome I).

9.33. Discuter les conditions de validité de l'expression quasi-classique standard du coefficient de transmission de la barrière

$$D(E) = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p|dx\right]$$

pour un potentiel décroissant comme une puissance de x pour $x \to \pm\infty$: $U(x) \propto |x|^{-\nu}$ et pour des particules d'énergie E qui tend vers 0. Dans le cas où ces conditions sont remplies, donner la loi de décroissance $D(E)$ pour $E \to 0$.

9.34. Chercher le coefficient de transmission des particules à travers une barrière, dans le cadre de l'approximation quasi-classique, quand l'énergie de la particule E_0 est égale à $U_{\max} \equiv U(x_0)$ (fig. 3).

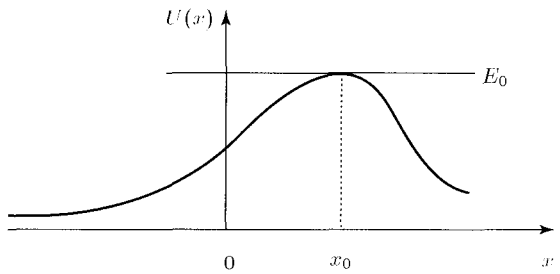

Figure 3

On suppose que $U''(x_0) \neq 0$. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu et, pour la barrière étudiée dans le problème 9.29, comparer à la valeur exacte (voir 2.52 du Tome I).

CHAPITRE 10

PARTICULES IDENTIQUES

10.1 SYMÉTRIE DES FONCTIONS D'ONDE

10.1. Soit un système de deux particules identiques de spin s, chercher le nombre d'états de spin qui sont symétriques ou antisymétriques par rapport à la permutation des variables de spin des deux particules.

Quelle est la nature de la symétrie des états ayant une valeur déterminée du spin total des deux particules ?

10.2. Soient $\varphi_{f_i}(\mathbf{r})$ les fonctions représentant la partie spatiale des fonctions d'onde d'une particule dans un champ extérieur. Deux de ces particules identiques, de spin s, sans interaction entre elles, se trouvent dans ce champ dans des états orbitaux correspondant aux nombres quantiques f_1 et f_2.

Chercher le nombre total d'états, compte tenu des degrés de liberté de spin, en supposant que les particules sont :
a) des bosons;
b) des fermions.

Etudier les cas où les nombres quantiques f_1 et f_2 sont identiques ou différents.

10.3. Montrer que si n particules identiques de spin s se trouvent dans des états ayant des fonctions d'onde spatiales différentes $\varphi_{f_1}(\mathbf{r})$, $\varphi_{f_2}(\mathbf{r})$, ..., $\varphi_{f_n}(\mathbf{r})$, le nombre total d'états, compte tenu des degrés de liberté de spin, est alors égal à $G = (2s+1)^n$ que ces particules soient des bosons ou des fermions.

10.4. Soient $\psi_{f_i}(\xi)$ les fonctions d'onde d'états à une particule normées à l'unité (f_i représente un ensemble complet de nombres quantiques ; $\xi = (\mathbf{r}, \sigma)$ où σ est la variable de spin). Ecrire les fonctions d'onde, normées à l'unité, des états du système composé de trois bosons identiques se trouvant dans des états correspondant aux nombres quantiques f_1, f_2, f_3.

10.5. Trois bosons identiques de spin $s = 1$ se trouvent dans des états décrits par la même fonction d'onde spatiale $\varphi(\mathbf{r})$. Trouver les fonctions d'onde normées incluant les degrés de liberté de spin. Quel est le nombre de ces états ?

10.6. Trois bosons identiques de spin $s = 0$ sans interaction se trouvent dans des états stationnaires ayant les mêmes nombres quantiques n_r et l, avec $l = 1$ dans un champ central. Quel est le nombre d'états différents du système ?

10.7. Montrer que le moment total L du système de trois bosons décrit dans le problème précédent ne peut pas prendre la valeur $L = 0$.

10.8. Soit un système de deux bosons identiques, de spin $s = 0$, décrit par la fonction d'onde normée $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Trouver la probabilité pour qu'une particule se trouve dans le volume dV_1, tandis que l'autre est dans le volume dV_2. Discuter de la normalisation de l'expression obtenue. Quelles sont les probabilités pour
a) que les deux particules se trouvent à l'intérieur d'un volume V ;
b) qu'une des particules se trouve au sein du volume V, tandis que l'autre est à l'extérieur de ce volume ?

10.9. Dans un système composé de deux bosons identiques sans spin l'une des particules se trouve dans l'état décrit par la fonction d'onde $\psi_1(\mathbf{r})$ et l'autre par $\psi_2(\mathbf{r})$. Ces fonctions sont normées à l'unité et possèdent des parités déterminées et opposées. Chercher la probabilité qu'une des particules soit dans le volume dV quand la position de l'autre est arbitraire (non fixée).

Quelles sont les probabilités
a) qu'une particule ;
b) que les deux particules
se trouvent dans le domaine de l'espace $z \geq 0$? Comparer les valeurs obtenues dans le cas où les particules sont discernables.

10.10. Résoudre le problème précédent pour un système composé de deux fermions identiques se trouvant dans le même état de spin.

10.11. Pour un système de deux bosons identiques de spin $s = 0$, chercher la fonction de distribution en position relative entre les deux particules. Comment se manifeste l'identité des particules dans la distribution obtenue ? Quelle est la signification de l'expression $\int |\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ ($\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ étant la fonction d'onde normée du système) ?

10.12. Comme on le sait, dans le problème à deux corps, le mouvement du centre de masse et le mouvement relatif sont indépendants. Montrer que la symétrie de la fonction d'onde de deux particules identiques, par rapport à leur permutation, permet de retrouver cette indépendance.

10.13. Déterminer les valeurs que peut prendre le spin total S de deux bosons identiques de spin s ayant un moment orbital relatif L, ce qui revient à chercher les états possibles d'un système de deux bosons identiques. Etudier, en particulier, le cas des bosons de spin $s = 0$.

10.14. Même question que dans le problème précédent, mais pour des fermions identiques. Etudier, en particulier, le cas de fermions de spin 1/2.

10.15. Deux bosons identiques de spin $s = 0$ sont liés par un potentiel de la forme $U = k(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2/2$. Quel est le spectre d'énergie du système ?

10.16. Un système est composé de trois particules identiques : $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ et $\mathbf{r}_3$ sont les rayons vecteurs des particules dans le système du centre d'inertie. Comment se comporte la grandeur $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$ dans la permutation des positions de la 1e et de la 3e particule ? Symétriser cette grandeur par rapport aux permutations de n'importe quelle particule du système.

10.17. Montrer que pour un système de trois particules (non forcément identiques), les états, ayant un moment orbital total $L = 0$ dans le système du centre d'inertie, possèdent une parité positive.

10.2 FONDEMENTS DU FORMALISME DE LA SECONDE QUANTIFICATION

10.18. Donner la relation de commutation vérifiée par les composantes hermitienne et antihermitienne de l'opérateur d'annihilation $\widehat{a}$ (ou de création $\widehat{a}^\dagger$) pour des bosons.

10.19. Construire à partir des opérateurs coordonnée $\widehat{x}$ et impulsion $\widehat{p}$ d'une particule les opérateurs $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$ ayant les propriétés des opérateurs d'annihilation et de création des bosons.

Chercher la fonction d'onde $\Psi_0(x)$ qui, en termes de "particules" fictives (dont $\widehat{a}$ et $\widehat{a}^\dagger$ sont les opérateurs d'annihilation et de création), correspond au vide.

10.20. Chercher les fonctions propres et les valeurs propres des opérateurs de création et d'annihilation pour des bosons et des fermions. Dans ces états, chercher la distribution du nombre de particules.

10.21. A partir des relations d'anticommutativité associées aux opérateurs d'annihilation $\widehat{b}$ et de création $\widehat{b}^\dagger$ des fermions, montrer que les valeurs propres de l'opérateur nombre de particules $\widehat{n} = \widehat{b}^\dagger\widehat{b}$ sont 0 et 1.

10.22. Est-ce que le passage des opérateurs $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ aux nouveaux opérateurs $\hat{a}' = \hat{a} + \alpha$, $\hat{a}'^\dagger = \hat{a}^\dagger + \alpha^*$ (α étant un nombre complexe) constitue une transformation unitaire ? Faire cette étude pour des bosons et des fermions.

Décrire l'état vide de "nouvelles" particules $|0'\rangle$ (particules dont les opérateurs d'annihilation et de création sont $\hat{a}'$, $\hat{a}'^\dagger$) à l'aide des particules initiales.

10.23. Même question que dans le problème précédent, mais pour la transformation

$$\hat{a}' = \alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^\dagger, \qquad \hat{a}'^\dagger = \alpha\hat{a}^\dagger + \beta\hat{a}.$$

(α, β étant des nombres réels ; établir au préalable pour quelles valeurs de α, β cette transformation est unitaire).

10.24. Peut-on, pour la transformation

$$\hat{a}' = \hat{a}^\dagger, \qquad \hat{a}'^\dagger = \hat{a},$$

assimiler $\hat{a}'$, $\hat{a}'^\dagger$ à des opérateurs d'annihilation et de création de nouvelles particules ?

Décrire l'état $|n'\rangle$ (c'est-à-dire l'état à n nouvelles particules) à l'aide des particules initiales.

10.25. Soit $\hat{a}^\dagger_{f_i}$ l'opérateur de création d'une particule dans l'état Ψ_{f_i} (f_i étant un ensemble complet de nombres quantiques). Un état à une particule, $|1\rangle$, peut se représenter sous la forme

$$|1\rangle = \sum_i C_{f_i} \hat{a}^\dagger_{f_i} |0\rangle.$$

Quel est, en mécanique quantique, le sens des coefficients C_{f_i} ?

Etudier, en particulier, l'état à une particule de la forme

$$|1\rangle = \int \varphi(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) d\mathbf{r} |0\rangle$$

pour une particule sans spin.

10.26. Les opérateurs $\hat{a}^\dagger_{f_i}$, $\hat{a}_{f_i}$ et $\hat{a}^\dagger_{g_k}$, $\hat{a}_{g_k}$ sont des opérateurs de création et d'annihilation d'une particule dans les états définis par des ensembles complets de nombres quantiques f_i et g_k.

Indiquer les relations liant ces opérateurs.

10.27. Un état à deux particules identiques (bosons ou fermions) est décrit par un vecteur d'état $|2\rangle = \hat{a}^\dagger_{f_1} \hat{a}^\dagger_{f_2} |0\rangle$, où $\hat{a}^\dagger_{f_i}$ est l'opérateur de création de la particule dans un état défini par un ensemble complet de nombres quantiques f_i.

Normer le vecteur d'état à l'unité. Distinguer les cas où les nombres quantiques f_1 et f_2 sont identiques et différents. Indiquer la forme des fonctions d'onde normées des états étudiés en représentation $\mathbf{r}$ (pour les bosons et les fermions).

10.28. Même question que dans le problème précédent, mais pour un état à trois particules $|3\rangle = \hat{a}^\dagger_{f_1}\hat{a}^\dagger_{f_2}\hat{a}^\dagger_{f_3}|0\rangle$. Les trois ensembles de nombres quantiques f_1, f_2, f_3 sont distincts.

10.29. Pour un système de particules identiques, indiquer, dans le cadre de la seconde quantification, la forme des opérateurs suivants :
a) hamiltonien $\widehat{H}$ pour des particules libres ;
b) impulsion totale $\widehat{\mathbf{P}}$;
c) rayon vecteur du centre d'inertie $\widehat{\mathbf{R}}_{\text{c.i.}}$.

10.30. En utilisant les résultats du problème précédent, donner l'expression de l'opérateur vitesse du centre d'inertie $\mathbf{V}_{\text{c.i.}}$ d'un système de N particules identiques libres.

10.31. Pour un système composé de particules identiques, chercher la forme des opérateurs densité du nombre de particules $n(\mathbf{r})$ (au point d'espace $\mathbf{r}$) et du nombre de particules $\widehat{N}(v)$ occupant un certain volume v.

10.32. Démontrer les relations

$$[\widehat{\mathbf{P}}, \widehat{\Psi}(\mathbf{r})]_- = i\hbar\widehat{\Psi}(\mathbf{r}), \qquad [\widehat{\mathbf{P}}, \widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})]_- = i\hbar\widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$$

où $\widehat{\mathbf{P}}$, $\widehat{\Psi}(\mathbf{r})$ sont des opérateurs impulsion et champ (opérateurs $\widehat{\Psi}$) d'un système de bosons identiques sans spin.

Généraliser ces relations pour des bosons ayant un spin non nul et pour des fermions.

10.33. Chercher, dans l'espace de Fock, la forme de l'opérateur $\widehat{F}^2$ carré d'une grandeur additive ($F = \sum_a f_a$).

On invite à résoudre le problème de deux manières :
a) en partant de l'égalité $\widehat{F}^2 = \widehat{F}\widehat{F}$ et en utilisant la forme de l'opérateur à une particule (voir 10.29) ;
b) en partant de l'égalité

$$\left(\sum_a \widehat{f}(\xi_a)\right)^2 = \sum_a \widehat{f}^2(\xi_a) + \sum_{a\neq b} \widehat{f}(\xi_a)\widehat{f}(\xi_b)$$

et en utilisant la forme standard des opérateurs à une et à deux particules dans le cadre de la seconde quantification.

Comparer les résultats obtenus.

10.34. Chercher la forme de l'opérateur produit de densités du nombre de particules $n_1 n_2$ en deux points de l'espace $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ ($\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$).

Notons que la valeur moyenne $\overline{n_1 n_2}$ décrit la corrélation spatiale des fluctuations de densité (voir 10.36 et 10.38).

10.3 SYSTÈMES COMPOSÉS D'UN GRAND NOMBRE, $N \gg 1$, DE PARTICULES

10.35. Dans l'état fondamental d'un gaz de bosons composé de N particules sans interaction et sans spin, qui occupe un volume V, chercher la densité moyenne du nombre de particules, le nombre moyen de particules occupant un certain volume v et la fluctuation (écart quadratique moyen) de ce nombre de particules.

10.36. Dans les mêmes conditions que dans le problème précédent, étudier la corrélation spatiale des fluctuations de la densité du nombre de particules. Pour un système homogène, elle peut être caractérisée par la fonction de corrélation $\nu(r)$:

$$\nu(r) = \frac{\overline{n_1 n_2} - \overline{n}^2}{\overline{n}}, \qquad (n_1 \equiv n(\mathbf{r}_1), \text{ etc.}),$$

où $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ et $\overline{n}$ est la densité moyenne du nombre de particules. Comparer à un système de N particules classiques sans interaction occupant un volume V.

10.37. Dans l'état fondamental d'un système de N fermions sans interaction se trouvant dans un volume V (gaz de Fermi parfait), chercher la densité moyenne du nombre de particules et le nombre moyen de particules dans un certain volume v.

10.38. Dans les mêmes conditions que dans le problème précédent, étudier la corrélation entre les densités de particules ayant des valeurs déterminées de la projection du spin sur l'axe z en différents points de l'espace : chercher $\overline{n(\mathbf{r}_1, s_{z1}) n(\mathbf{r}_2, s_{z2})}$ et comparer au produit $\overline{n(\mathbf{r}_1, s_{z1})} \cdot \overline{n(\mathbf{r}_2, s_{z2})}$. Étudier les cas où s_{z1} et s_{z2} sont identiques ou différents. Chercher la fonction de corrélation de la densité (voir 10.36).

10.39. En assimilant l'interaction entre les particules à une perturbation, chercher, au premier ordre du calcul des perturbations, l'énergie de l'état fondamental d'un gaz de bosons composé de N particules sans spin occupant un volume V (l'interaction entre deux particules est décrite par un potentiel répulsif $U(|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \geq 0$, agissant à courte distance).

10.40. Même question que dans le problème précédent, mais pour un gaz de fermions de spin $s = 1/2$. On admet que l'interaction de dépend pas du spin et satisfait à la condition $k_F R_0 \ll 1$, où R_0 est le rayon d'action du potentiel et $\hbar k_F$ l'impulsion de Fermi.

10.41. Un gaz parfait de fermions composé de particules neutres de spin $s = 1/2$ possédant un moment magnétique μ_0 (de sorte que $\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_0 \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$) se trouve dans un champ magnétique extérieur homogène. Dans l'état fondamental de ce système, chercher :
a) les nombres d'occupation des états à une particule ;
b) la susceptibilité magnétique du gaz (pour un champ suffisamment faible).
L'interaction entre les moments magnétiques est négligeable.

CHAPITRE 11

ATOMES ET MOLÉCULES

11.1 ETATS STATIONNAIRES D'ATOMES À UN ET DEUX ÉLECTRONS[1]

11.1. Chercher, au premier ordre du calcul des perturbations, la correction à apporter aux niveaux d'énergie de l'atome hydrogénoïde[2] du fait de la relation relativiste liant la masse de la particule (de l'électron) à la vitesse. Comparer la grandeur de la correction aux valeurs des niveaux d'énergie de l'atome.

Pour une particule sans spin le résultat obtenu donne une structure fine des niveaux de l'atome hydrogénoïde. Par contre, pour l'électron, d'après l'équation de Dirac, outre la correction mentionnée, l'hamiltonien comporte encore un terme décrivant l'interaction spin-orbite dont l'effet sur le déplacement des niveaux est du même ordre de grandeur que la correction calculée dans le présent problème.

11.2. Calculer, au premier ordre du calcul des perturbations, le déplacement du niveau d'énergie de l'état fondamental de l'atome hydrogénoïde dû à la nature non ponctuelle du noyau. Le noyau est assimilé à une sphère de rayon R, dans laquelle la charge Ze a une distribution volumique uniforme. Estimer la valeur numérique de la correction et la comparer à l'effet relativiste (voir problème précédent). Quelle est l'importance du fait que le noyau du mésoatome a une taille finie ?

11.3. Etudier le mouvement d'un muon chargé négativement dans le champ d'un noyau de charge Ze (assimilé à une sphère de rayon R chargée uniformément en volume ; $R = 1,2A^{1/3}10^{-13}$ cm, $A \approx 2Z$, A étant le nombre de masse du noyau) ; la nature de l'interaction du muon et du noyau est purement électrostatique.

Chercher les fonctions d'onde des états stationnaires et les niveaux d'énergie du muon dans les cas limites des valeurs petites et des valeurs très grandes de Z.

---

1 Dans les problèmes de ce chapitre on utilise, sans le mentionner spécialement, les *unités atomiques* (u. a.) : $e = \hbar = m_e = 1$.

2 On appelle atome ou ion hydrogénoïde (et de façon analogue, héliogénoïde, un système composé d'un noyau de charge quelconque et de un ou deux électrons.

Estimer l'énergie des photons γ émis lors des transitions atomiques dans la partie basse du spectre d'énergie du mésoatome.

11.4. Etudier la structure hyperfine des niveaux des états s d'un atome hydrogénoïde liée à l'interaction des moments magnétiques de l'électron et du noyau. Le noyau, supposé ponctuel, a un spin I et un moment magnétique μ_0, de sorte que $\boldsymbol{\mu} = \frac{\mu_0}{I}\mathbf{I}$. Déterminer la grandeur de la décomposition hyperfine et la comparer aux écarts de la structure fine (voir problème 11.1 ; les valeurs caractéristiques des moments magnétiques du noyau sont $e\hbar/m_p c$, m_p étant la masse du proton, $I \sim 1$).

Dans le cas de l'atome d'hydrogène, comparer le résultat obtenu à la valeur expérimentale de la structure hyperfine (HFS) de l'état fondamental $\Delta\nu_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar = 1420$ MHz[3] ; le moment magnétique du proton vaut $\mu_p = 1,39 e\hbar/m_p c$.

11.5. Calculer, au premier ordre du calcul des perturbations, l'énergie de l'état fondamental d'un atome (ou d'un ion) à deux électrons, en assimilant l'interaction des deux électrons à une perturbation. Obtenir la valeur du potentiel d'ionisation du système et la comparer aux données expérimentales pour l'atome d'hélium et pour les ions lithium, béryllium, carbone : $I(\text{He}) = 24,5$ eV ; $I(\text{Li}^+) = 75,6$ eV ; $I(\text{Be}^{++}) = 153,6$ eV ; $I(\text{C}^{4+}) = 393$ eV.

11.6. Au premier ordre du calcul des perturbations, calculer l'énergie de l'état fondamental et le potentiel d'ionisation d'un atome (ou d'un ion) à deux électrons en choisissant un hamiltonien non perturbé de la forme

$$H_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - Z_{\text{eff}}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right)$$

(dans le système d'unités atomiques). Ici, le paramètre Z_{eff} doit être choisi de manière à annuler la correction du premier ordre sur le niveau d'énergie du système. Comparer au résultat obtenu dans le problème précédent (voir de même le problème suivant).

11.7. Chercher l'énergie et le potentiel d'ionisation de l'état fondamental d'un ion à deux électrons en utilisant le principe variationnel. En guise de fonction d'essai, choisir le produit de fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène avec une charge effective Z_{eff} jouant le rôle de paramètre variationnel. Comparer au résultat obtenu dans le problème 11.5 et aux données expérimentales qui sont incluses. Peut-on, sur la base du résultat obtenu, conclure à l'existence d'un ion hydrogène stable H^- ?

11.8. Chercher l'énergie moyenne d'un ion à deux électrons avec un noyau de charge Ze dans l'état décrit par une fonction d'onde de la forme

$$\Psi(r_1, r_2) = C[\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2)].$$

En utilisant l'expression obtenue et une fois choisies les valeurs des paramètres $\alpha = 1$, $\beta = 0,25$, démontrer l'existence de l'ion hydrogène stable H^-.

3 L'énergie correspondant à la fréquence $\nu = 1$ MHz vaut $\varepsilon \approx 4,14 \cdot 10^{-9}$ eV.

11.9. Chercher de façon approchée les niveaux d'énergie du spectre discret et les fonctions d'onde correspondantes pour un système composé d'un noyau de charge Ze, d'un électron et d'un méson μ^-.

11.10. Calculer la structure hyperfine de l'état triplet 2^3S de l'atome d'hélium avec le noyau ^{3}He (le spin du noyau est égale à $I = 1/2$, le moment magnétique $\mu = -1,064e\hbar/m_p c$). Utiliser la forme approchée de la fonction d'onde d'état 2^3S en négligeant l'interaction entre les électrons. Comparer le résultat à la valeur expérimentale de la décomposition hyperfine $\Delta\nu_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar \approx 6740$ MHz.

11.11. Quelles valeurs peut prendre le moment du mouvement relatif de l'électron dans les états ortho et para d'atomes héliogénoïdes ?

11.12. Chercher les niveaux d'énergie et les potentiels d'ionisation des états excités d'atomes héliogénoïdes dans l'approximation selon laquelle l'interaction des électrons est prise en compte en l'assimilant à un écrantage de la charge du noyau par l'électron se trouvant dans l'état fondamental $1s$. Comparer le résultat obtenu aux données expérimentales fournies dans la solution du problème.

11.13. Calculer les niveaux d'énergie et les potentiels d'ionisation des états $2S$ singulet et triplet d'un atome (d'un ion) à deux électrons en assimilant l'interaction des électrons à une perturbation.

Comparer les résultats obtenus aux données expérimentales pour l'atome d'hélium : $I_{\text{He}}(2^3S) \approx 0,175$ u.a. $\approx 4,76$ eV, $I_{\text{He}}(2^1S) \approx 0,146$ u.a. $\approx 3,97$ eV et pour l'ion de lithium Li^+ : $I_{\text{Li}^+}(2^3S) \approx 0,605$ u.a. $\approx 16,5$ eV.

11.14. Chercher l'énergie et le potentiel d'ionisation de l'état 2^3S d'un atome héliogénoïde par la méthode variationnelle. Comme fonction d'essai, choisir le produit convenablement symétrisé des fonctions des états $1s$ et $2s$ de l'hydrogène, avec une charge effective du noyau Z_{eff} jouant le rôle de paramètre variationnel.

Pour l'atome d'hélium et l'ion de lithium Li^+, comparer le résultat obtenu aux données expérimentales (voir 11.13).

11.15. Montrer que, pour les atomes héliogénoïdes, tous les états excités stables (c'est-à-dire stables vis-à-vis d'une séparation en un atome hydrogénoïde et un électron libre) possèdent la configuration électronique $1snl$, c'est-à-dire qu'un des électrons se trouve obligatoirement dans l'état fondamental $1s$.

11.16. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent au cas d'atomes lithiogénoïdes (trois électrons dans le champ coulombien du noyau de charge Ze, $Z \geq 3$) : montrer que ne sont stables que les états du système dont la configuration électronique est de la forme $(1s)^2nl$, c'est-à-dire que deux électrons sont obligatoirement dans l'état fondamental $1s$.

11.17. Estimer les valeurs des potentiels d'ionisation de l'état fondamental ^2S (configuration électronique $(1s)^2 2s$) et du premier état excité ^2P (configuration électronique $(1s)^2 2p$) d'un atome lithiogénoïde en supposant que l'interaction des électrons dans l'état fondamental avec un électron "excité" se réduit à un écrantage de deux unités de charge du noyau.

Dans le cas de l'atome de lithium, comparer les valeurs obtenues avec celles de l'expérience : $I(^2S) = 5,37$ eV et $I(^2P) = 3,52$ eV.

11.18. Calculer, par la méthode variationnelle, l'énergie de l'état fondamental d'un atome lithiogénoïde. Les fonctions d'onde des électrons sont choisies sous forme des fonctions adéquates de l'atome d'hydrogène, avec une charge effective du noyau Z_{eff}, qui joue le rôle de paramètre variationnel. Faire ce calcul par deux procédés :

a) en négligeant les effets d'échange ;
b) en choisissant comme fonction d'onde, le produit convenablement symétrisé de fonctions d'onde uniparticulaires.

Dans le cas de l'atome de lithium, comparer les résultats obtenus à la valeur expérimentale $E_0 \approx -203,4$ eV $\approx -7,48$ u.a.

11.2 ATOMES À PLUSIEURS ÉLECTRONS

11.19. Chercher les termes possibles des états excités d'un atome avec une configuration électronique (en plus des couches remplies ; $n \neq n'$) :

a) $nsn'p$;
b) $npn'p$;
c) $npn'd$.

11.20. Chercher les termes possibles d'un atome dont la configuration électronique est la suivante (en plus des couches remplies) :

a) $(np)^2$;
b) $(np)^3$;
c) $(np)^4$;
d) $(nd)^2$.

En appliquant la règle de Hund, indiquer le terme fondamental de l'atome.

11.21. Déterminer les termes fondamentaux des atomes N, Cl, et des ions N^+, Cl^+.

11.22. Quelle est la parité des termes atomiques présentant une configuration électronique (en plus des couches remplies) :

a) $(ns)^k$;
b) $(np)^k$;
c) $(nd)^k$;
d) $(np)^k (nd)^i$?

11.23. Indiquer les termes atomiques possibles pour la configuration électronique $(nl)^2$.

11.24. Quels sont la multiplicité $2S + 1$ et le moment orbital total L de l'état fondamental d'un atome avec une configuration électronique $(nl)^k$, en plus des couches remplies?

11.25. Quel est le nombre d'états différents indépendants (mais pas de termes !) d'un atome correspondant à la configuration électronique $(nl)^k$, en plus des couches remplies ?

11.26. Quel est le nombre d'états différents indépendants d'un atome avec une configuration électronique $(nl)^3$ correspondant à la valeur $S = 3/2$ du spin total des électrons ?

11.27. Aux états excités d'un atome avec la configuration électronique $nsn'l$ $(n \neq n')$ correspondent deux termes : ${}^1L$ et ${}^3L$ (L étant le moment orbital total, $L = l$). En assimilant l'interaction entre les électrons à une perturbation, montrer que l'énergie du terme triplet est inférieure à celle du terme singulet. Ne pas expliciter la forme des fonctions radiales des électrons ns et $n'l$.

11.28. Un atome comporte, en plus des couches pleines, deux électrons np. En assimilant l'interaction entre les électrons à une perturbation, chercher l'ordre des niveaux d'énergie des termes possibles ${}^1S$, ${}^1D$, ${}^3P$ de l'atome. Vérifier que les valeurs des nombres quantiques S et L du terme fondamental confirment la règle de Hund.

Conseil. Avec l'établissement des fonctions correctes non perturbées correspondant à une valeur déterminée L du moment, il est commode de se servir du formalisme tensoriel (voir problèmes du paragraphe 4, chapitre 3 du Tome I). Ne pas expliciter la forme de la dépendance radiale des fonctions d'onde des électrons np.

11.29. En utilisant l'expression de la densité électronique d'un atome neutre, conformément au modèle de Thomas-Fermi, chercher la dépendance en Z de la distance moyenne de l'électron au noyau, ainsi que la valeur moyenne du carré de cette grandeur. Quelle valeur prend $\overline{r^n}$ pour $n \geq 3$?

11.30. Chercher la distribution des impulsions des électrons dans un atome neutre de charge nucléaire Z, selon le modèle de Thomas-Fermi. Tenir compte de ce que la fonction universelle $\chi(x)$ de ce modèle, qui définit la densité volumique des électrons, décroît de façon monotone avec r. En utilisant ce résultat, chercher la dépendance en Z des grandeurs moyennes de l'impulsion et de l'énergie cinétique de l'électron.

11.31. Dans le cadre du modèle de Thomas-Fermi de l'atome neutre, chercher la dépendance en fonction de la charge du noyau Z :

a) de la grandeur caractéristique du moment orbital de l'électron ;
b) de l'énergie d'ionisation totale de l'atome.

11.32. Déterminer la dépendance en Z du nombre d'électrons se trouvant dans l'état s de la distribution de Thomas-Fermi.

11.33. Exprimer dans le modèle de Thomas-Fermi de l'atome neutre, en se servant de la densité électronique $n(r)$, l'énergie cinétique des électrons, l'énergie de leur interaction mutuelle et de leur interaction avec le noyau.

En utilisant les expressions ainsi obtenues, le théorème du viriel et le comportement aux petites distances, $r \to 0$, du potentiel électrostatique du champ self-consistant des électrons et du noyau

$$\phi(r) \approx \frac{Z}{r} - 1,80Z^{4/3},$$

déterminer une valeur numérique de l'énergie d'ionisation totale de l'atome.

11.34. Dans l'approximation de Thomas-Fermi, obtenir l'expression de l'énergie totale d'un atome neutre au moyen de la densité électronique $n(r)$.

En étudiant la fonctionnelle $E[n(r)]$, montrer que la fonction normée $\left(\int n(r)dV = Z\right)$ minimisant cette fonctionnelle est la solution de l'équation de Thomas-Fermi.

En utilisant le résultat obtenu, chercher l'énergie d'ionisation totale de l'atome par la méthode variationnelle en choisissant comme fonction universelle $\chi(x)$ du modèle la forme $\chi_{\text{essai}}(x) = A\exp(-\alpha x)$, α étant le paramètre variationnel. Comparer l'expression obtenue de l'énergie d'ionisation et la fonction d'essai $\chi_{\text{essai}}(x)$ pour des x petits aux résultats connus de la solution numérique exacte.

11.35. En utilisant les propriétés extrêmes de la fonctionnelle $E[n(r)]$, établies dans le problème précédent, démontrer dans le cadre du modèle de Thomas-Fermi :
a) le théorème du viriel ;
b) la relation $U_{\text{e noy}} = -7U_{\text{ee}}$ entre les énergies d'interaction mutuelle des électrons U_{ee} et d'interaction des électrons avec le noyau $U_{\text{e noy}}$.

11.3 PRINCIPALES REPRÉSENTATIONS DE LA THÉORIE MOLÉCULAIRE

11.36. Classer les termes possibles d'un ion moléculaire d'hydrogène H_2^+ [4]. Indiquer les valeurs que peut prendre le moment orbital de l'électron L (par rapport au centre de symétrie de l'ion) pour les différents termes de l'ion.

4 Dans les problèmes liés à la classification des termes des molécules, il s'agit de la description de certaines propriétés formelles des systèmes atomiques pour une position fixée de noyaux, car, dans ce cas, le problème de la stabilité d'un tel système par rapport à la "séparation" de ce dernier en atomes (ou ions) demeure irrésolu. Dans le cas de l'ion H_2^+, seul l'état Σ_g^+ ($\Lambda = 0$) est stable.

11.37. L'état d'un système de deux électrons est décrit par une fonction d'onde $\Psi = \chi_{\alpha\beta}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, où $\chi_{\alpha\beta}$ est la fonction de spin, tandis que $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ est la fonction des coordonnées qui prend la forme :
a) $\psi = f(r_1, r_2)$;
b) $\psi = (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{n}_0 + \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2)$;
c) $\psi = ((\mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2)$;
d) $\psi = (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{n}_0 + \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{n}_0)((\mathbf{r}_1 \wedge \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{n}_0) f(r_1, r_2)$;
($\mathbf{n}_0$ étant un vecteur constant). Procéder à la classification adoptée dans la théorie des molécules diatomiques des états mentionnés.

11.38. Indiquer les termes de l'ion moléculaire d'hydrogène H_2^+ que l'on peut obtenir en combinant un proton à un atome d'hydrogène se trouvant dans l'état de nombre quantique principal $n = 2$.

11.39. Déterminer les termes des molécules diatomiques N_2, LiH, HCl, NO que l'on peut obtenir en combinant les atomes correspondants se trouvant dans l'état fondamental.

11.40. Peut-on obtenir par une séparation adiabatique des protons, à partir des termes d'une molécule d'hydrogène H_2, deux atomes d'hydrogène, se trouvant tous les deux dans un état excité ?

11.41. Est-ce que les termes de la molécule LiH peuvent donner un atome d'hydrogène dans un état excité, par séparation adiabatique de noyaux, (rappelons que le potentiel d'ionisation dans l'état fondamental de l'atome de lithium vaut $I = 0,20$ u.a.) ?

11.42. Estimer, pour une molécule diatomique, l'ordre de grandeur des rapports suivants :
a) des écarts entre les niveaux électroniques, vibrationnels et rotationnels ;
b) de la séparation entre les noyaux et de l'amplitude des vibrations de point zéro des noyaux ;
c) des périodes caractéristiques et des vitesses des mouvements des électrons et des noyaux.

11.43. En supposant connues les caractéristiques suivantes de la molécule d'hydrogène H_2 :
a) l'énergie de séparation de l'état fondamental de la molécule en deux atomes non excités d'hydrogène, $I_0 = 4,46$ eV ;
b) la pulsation des vibrations ω_e de la molécule, $\hbar\omega_e = 0,54$ eV ;
c) la constante rotationnelle $B_e = 7,6 \cdot 10^{-3}$ eV,

chercher les grandeurs correspondantes des molécules HD et D_2, c'est-à-dire des molécules où un ou deux protons sont remplacés par le deutéron.

Comparer les effets de déplacement isotopique des niveaux de l'atome et de la molécule d'hydrogène.

11.44. Quels sont les états rotationnels possibles des molécules d'hydrogène H_2, de deutérium D_2 et de HD se trouvant dans l'état fondamental Σ_g^+, suivant la valeur du spin nucléaire total des molécules ($s_d = 1$) ?

11.45. Discuter la possibilité d'existence d'un moment dipolaire électrique moyen différent de zéro dans un système à deux atomes dans un état stationnaire :
a) du terme électronique, c'est-à-dire du sous-système électronique pour une position fixée des noyaux ;
b) de la molécule.

Etudier les états relatifs à différentes valeurs de Λ ($\Lambda = 0$; $\Lambda \neq 0$) et les cas où les noyaux des atomes sont :
a) identiques ;
b) des isotopes d'un même élément ;
c) différents.

11.46. Obtenir l'expression de l'énergie $E_0(R)$ du terme fondamental de l'ion moléculaire d'hydrogène H_2^+ par la méthode variationnelle, en approximant la fonction d'onde du terme par une fonction de la forme

$$\Psi_{\text{essai}}(r) = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi R^3}} \exp\left\{-\frac{\alpha r}{R}\right\},$$

où r est la distance de l'électron au centre du segment reliant les protons, α étant le paramètre variationnel.

Après avoir choisi dans l'expression obtenue de $E_0(R, \alpha)$, le paramètre $\alpha = 1,9$ (avec cette valeur de α, la fonction de deux variables $E_0(R, \alpha)$ présente un minimum absolu pour un certain R_0 à calculer), chercher la dimension de l'ion R_0 (R_0 étant la distance qui sépare les noyaux des ions en position d'équilibre), l'énergie minimale du terme E_0 et l'énergie des vibrations de point zéro des protons de l'ion $E_{\text{vib},0}$. Comparer les résultats obtenus aux données expérimentales : $R_0 \approx 2,0$ u.a., $E_0 \approx -0,60$ u.a., $E_{\text{vib},0} \approx 0,0044$ u.a.

Peut-on, sur la base de la solution du problème, conclure à l'existence de l'ion stable H_2^+ ?

11.47. Pour un système de deux particules, dont l'une a un moment $l_1 = 1$, chercher la dépendance angulaire des fonctions d'onde $\Psi_{JJ_z\Lambda}$ des états du système correspondant à des valeurs déterminées de son moment total $J = 0, 1$, de sa projection J_z sur l'axe z et de la projection du moment Λ sur la direction du rayon vecteur de la seconde particule (se limiter au cas $\Lambda = 0$). Généraliser les résultats obtenus au cas de valeurs arbitraires des grandeurs l_1, J, J_z (mais toujours avec $\Lambda = 0$).

Conseil. Dans la résolution du problème on peut utiliser le formalisme tensoriel (voir 3.68 du Tome I). Cette situation se présente pour des molécules diatomiques où le rôle de la "première" particule est joué par le sous-système électronique et celui de la "seconde" par le sous-système nucléaire (il est vrai que les moments orbitaux des électrons et des noyaux n'ont pas séparément de valeur déterminée).

11.48. Pour une particule de spin $s = 1/2$, chercher la relation spin-angulaire des fonctions d'onde $\Psi_{JJ_z\lambda}$ des états de la particule avec des valeurs déterminées $J = 1/2$ du moment total de la particule, $J_z = \pm 1/2$ de sa projection sur l'axe z et $\lambda = \pm 1/2$ de la projection λ du spin de la particule sur la direction de son rayon vecteur. Quels sont le moment orbital de la particule et la parité de ces états ?

11.49. Chercher les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes des états stationnaires d'une toupie asymétrique de moment $J = 1$ en représentation $J_z J_\zeta$.

11.50. Les moments d'inertie principaux d'une toupie asymétrique satisfont aux conditions $I_1 \sim I_2 \gg I_3$. Chercher les niveaux d'énergie de la toupie, au premier ordre du calcul des perturbations. Quelle est la nature du spectre d'énergie et, en particulier, quelle est la multiplicité des niveaux dans cette approximation ? A quel ordre du calcul des perturbations se produit une levée supplémentaire de la dégénérescence des niveaux ?

11.51. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas où les moments d'inertie principaux satisfont à la condition $|I_1 - I_2| \ll I_1 \sim I_3$.

11.4 ATOMES ET MOLÉCULES DANS DES CHAMPS EXTÉRIEURS. INTERACTION ENTRE ATOMES ET MOLÉCULES

11.52. Comme on le sait, la polarisabilité β_0 de l'état fondamental d'un atome se définit par l'expression (on suppose que $J = 0$)

$$\beta_0 = 2 \sum_{k \neq 0} \frac{|\langle k|\mathbf{d} \cdot \mathbf{n}_0|0\rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_0^{(0)}}, \tag{1}$$

où $d_i = -e \sum_a x_{ai}$ est l'opérateur moment dipolaire de l'atome (la somme est effectuée sur tous les électrons); $\mathbf{n}_0$ - un vecteur unitaire quelconque ; dans l'expression (1) la somme est prise sur tous les états excités du système (mais si les états $|k\rangle$ correspondent au spectre continu, il faut assimiler la somme à une intégrale).

Montrer que la polarisabilité β_0 satisfait à l'inégalité (avec, évidemment, $\beta_0 > 0$)

$$\beta_0 < \frac{2}{3} \frac{e^2}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}} \sum_{a,b} \langle 0|\mathbf{r}_a \cdot \mathbf{r}_b|0\rangle|,$$

où $E_1^{(0)}$ est l'énergie du premier état excité de l'atome. Obtenir de même une borne inférieure de la grandeur β_0, en ne prenant dans la somme (1) que le premier terme non nul.

Pour l'atome d'hydrogène, établir les limites supérieure et inférieure de la grandeur β_0 et comparer à la valeur exacte $\beta_0 = 9/2$ u.a. $= 9a_0^3/2$, a_0 étant le rayon de Bohr.

11.53. Préciser les limites supérieure et inférieure de la valeur de la polarisabilité β_0 de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, obtenues dans le problème précédent, en incluant dans l'étude un terme supplémentaire (état excité) dans la somme (1) (voir problème précédent).

11.54. Calculer la polarisabilité de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène par la méthode variationnelle. En résolvant le problème, utiliser des fonctions d'essai de la forme :
a) $\Psi_{\text{essai}} = C\Psi_0(r)[1 + \alpha(\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r})] \equiv C\Psi_0(r)[1 + \alpha r\mathcal{E}_0 \cos\theta]$;
b) $\Psi_{\text{essai}} = C(\Psi_0 + \alpha\mathcal{E}_0\Psi_1)$,
où

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \mathrm{e}^{-r/a_0}, \qquad \Psi_1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \frac{r}{2\sqrt{6a_0^5}} \mathrm{e}^{-r/2a_0}$$

sont les fonctions d'onde de l'état fondamental ($n = 1, l = 0, m = 0$) et du premier état excité (2, 1, 0) de l'atome d'hydrogène en l'absence de champ électrique extérieur ; l'axe z est dirigé suivant le champ, α est le paramètre variationnel. Comparer les résultats obtenus à la valeur exacte $\beta_0 = 9a_0^3/2$ (voir de même problème suivant).

11.55. Préciser le résultat du problème précédent en utilisant des fonctions d'essai de la forme

$$\Psi_{\text{essai}} = C(\Psi_0 + \alpha\mathcal{E}_0\Psi_1) \equiv \frac{C}{\sqrt{\pi}}[\mathrm{e}^{-r} + \alpha\mathcal{E}_0\sqrt{\gamma^5} r\cos\theta \mathrm{e}^{-\gamma r}].$$

où α, γ sont des paramètres variationnels. En obtenant la valeur numérique de la polarisabilité β_{var} choisir la valeur $\gamma = 0,8$ de ce paramètre.

11.56. Etudier l'effet Stark sur les états excités de l'atome d'hydrogène de nombre quantique principal $n = 2$, au premier ordre du calcul des perturbations. En résolvant le problème, utiliser les fonctions propres de l'hamiltonien non perturbé en coordonnées sphériques Ψ_{nlm}. Indiquer les conditions de validité des résultats obtenus (en tenant compte du fait que, dans la solution du problème, on néglige les effets relativistes donnant lieu à une structure fine du niveau ; l'intervalle de structure fine du niveau $n = 2$ vaut $\Delta E_{\text{FS}} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}$ eV).

11.57. En utilisant la valeur connue $\beta_0 = 9a_0^3/2 = 9/2$ u.a. de la polarisabilité de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental, obtenir une valeur approchée de la polarisabilité de l'état fondamental de l'atome d'hélium :
a) en négligeant complètement l'interaction entre des électrons ;
b) en tenant compte de l'interaction des électrons sous forme d'un écrantage partiel de la charge du noyau (la charge effective du noyau qu'il faut choisir est $Z_{\text{eff}} = 27/16$, voir 11.7).

Calculer la permittivité diélectrique de l'hélium dans les conditions normales et comparer à la valeur expérimentale $\varepsilon_0 \approx 1,000070$ (à cette valeur de ε_0 correspond une polarisabilité $\beta = 1,40$ u.a.).

11.58. Estimer l'ordre de grandeur de la polarisabilité du modèle d'un atome Thomas-Fermi, c'est-à-dire le rapport entre le moment dipolaire d des électrons Thomas-Fermi, créé sous l'action du champ électrique appliqué, et l'intensité de ce champ $\mathcal{E}$. Comparer avec la contribution à la polarisabilité de l'atome des électrons de valence.

11.59. Estimer, pour des molécules diatomiques, l'ordre de grandeur de la polarisabilité β de l'état fondamental dans les cas où :
a) le moment dipolaire moyen de la molécule $\mathbf{d} = 0$;
b) $\mathbf{d} \neq 0$.
Le moment dipolaire est calculé dans le système de coordonnées lié de façon rigide à l'axe de symétrie de la molécule. Par hypothèse le terme fondamental de la molécule est $^1\Sigma$. Comparer ces valeurs entre elles ainsi qu'à la polarisabilité de l'atome.

11.60. Chercher la décomposition Stark des niveaux rotationnels du terme électronique $^1\Sigma$ d'une molécule diatomique possédant un moment dipolaire constant (la décomposition Stark est supposée petite par rapport à l'écartement entre les niveaux rotationnels voisins). Comparer au résultat obtenu dans le problème 8.12 (Tome I).

11.61. Etudier l'effet Zeeman pour un mésoatome hydrogénoïde, le spin du méson étant $s = 0$. L'interaction du méson avec le noyau (supposé ponctuel) est supposée purement électrostatique. Quelle est la nature de la levée de dégénérescence des niveaux de nombre quantique principal n ?

11.62. Même question que dans le problème précédent, mais pour l'atome d'hydrogène. Le champ magnétique est supposé assez intense pour que la décomposition Zeeman soit très supérieure à la structure fine des niveaux. Indiquer pour le niveau $n = 2$ les conditions de validité des résultats obtenus (l'intervalle de la structure fine de ce niveau est $\Delta E_{FS} \approx 4,5 \cdot 10^{-5}$ eV).

11.63. Etudier l'effet Zeeman sur les composantes triplet et singulet de la structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène en supposant la décomposition Zeeman petite par rapport à la grandeur de la structure hyperfine.

11.64. Etudier l'influence de la masse finie du noyau sur les effets Stark et Zeeman dans un atome hydrogénoïde (ou dans un mésoatome).

11.65. Chercher la décomposition Zeeman des niveaux du positronium (état lié de l'électron et du positron) en la supposant beaucoup plus grande que la structure fine. Comparer au cas de l'atome d'hydrogène.

11.66. Chercher la susceptibilité magnétique χ_{at} de l'atome d'hélium dans son état fondamental en utilisant la forme approchée de la fonction d'onde établie dans 11.7. Calculer la susceptibilité magnétique de un cm^3 de gaz d'atomes d'hélium χ_{gaz} dans les conditions normales et la comparer à la valeur expérimentale $-8,6 \cdot 10^{-11}$.

11.67. Pour l'état triplet 2^3P de l'atome d'hélium, on a les termes suivants : $^3P_0$, $^3P_1$, $^3P_2$ qui, compte tenu d'effets relativistes, ont des énergies différentes (structure fine). Estimer la susceptibilité magnétique de l'atome dans l'état $^3P_0$ et la comparer à la susceptibilité magnétique et à la polarisabilité de l'état fondamental de l'atome.

11.68. Chercher la décomposition Zeeman des composantes rotationnelles du terme électronique $^1\Sigma$ d'une molécule diatomique (la décomposition Zeeman est supposée petite par rapport à l'écartement entre les niveaux rotationnels voisins).

11.69. Chercher l'énergie d'interaction d'une particule chargée (proton, muon, électron, etc.) avec un atome d'hydrogène non excité à de grandes distances mutuelles.

11.70. Etudier le système composé de deux particules chargées et de l'atome d'hydrogène neutre dans son état fondamental, la distance entre l'atome et les particules chargées étant beaucoup plus grande que le rayon de Bohr. Chercher l'énergie d'interaction du système considéré. Est-elle douée de propriétés additives ?

11.71. Chercher l'énergie d'interaction d'une particule chargée et d'une molécule diatomique situées à une grande distance l'une de l'autre. On suppose que la molécule a un moment dipolaire constant $\mathbf{d}$ (dans un système de coordonnées lié de façon rigide à l'axe de la molécule) et se trouve dans l'état fondamental vis-à-vis de tous les nombres quantiques. Le terme électronique de la molécule est $^1\Sigma$.

11.72. Chercher l'énergie d'interaction de deux atomes d'hydrogène dans leur état fondamental à une grande distance R l'un de l'autre, par la méthode variationnelle. Dans les calculs, utiliser les fonctions d'essai de la forme :
a) $\Psi_{\text{essai}} = C\Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2)[1 + \alpha z_1 z_2]$;
b) $\Psi_{\text{essai}} = C\Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2)[1 + \alpha(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2)$,
où

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène ; $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ sont les rayons vecteurs des électrons du premier et du second atome par rapport à leur noyau, l'axe z étant dirigé suivant l'axe passant par les noyaux ; α est le paramètre variationnel.

Avec les notations adoptées, l'opérateur interaction des atomes dans l'approximation dipôle-dipôle est de la forme

$$V = \frac{(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2)R^2 - 3(\mathbf{R} \cdot \mathbf{d}_1)(\mathbf{R} \cdot \mathbf{d}_2)}{R^5} = -\frac{e^2(2z_1z_2 - x_1x_2 - y_1y_2)}{R^3}$$

11.73. Chercher l'énergie d'interaction aux grandes distances pour deux molécules douées de moments dipolaires constants $\mathbf{d}_1$ et $\mathbf{d}_2$. On suppose que les molécules se trouvent dans leur état fondamental vis-à-vis de tous les nombres quantiques ; les termes électroniques des molécules sont $^1\Sigma$.

11.5 PHÉNOMÈNES NON STATIONNAIRES DANS LES ATOMES ET LES MOLÉCULES

11.74. L'atome d'hydrogène se trouve dans son état fondamental. Le noyau de l'atome est le triton, isotope superlourd de l'hydrogène. Par suite de la désintégration β le tritium se transforme en hélium :

$$^3\mathrm{H} \to \mathrm{e} + \tilde{\nu} + {}^3\mathrm{He}.$$

Chercher la probabilité pour que l'ion d'hélium formé du fait de la désintégration soit dans son état fondamental.

En calculant le phénomène, tenir compte du fait que la variation de la charge du noyau est l'effet dominant par rapport aux effets de recul du noyau (voir à ce propos 11.77 et 11.78) et de l'interaction de l'électron de désintégration β avec l'électron atomique (la vitesse de l'électron de désintégration β est beaucoup plus grande que celle de l'électron de l'atome : $v \gtrsim 10v_{\mathrm{at}}$).

11.75. Dans les conditions du problème précédent, chercher les probabilités d'excitation des différents états de l'ion d'hélium (atome hydrogénoïde avec $Z = 2$) avec le nombre quantique principal $n = 2$.

11.76. Dans les conditions du problème 11.74, chercher la valeur moyenne de l'énergie acquise par l'électron atomique à la suite de la désintégration β du noyau.

11.77. Le noyau d'un atome, dans l'état stationnaire Ψ_0, subit un choc brusque de durée τ et, par conséquent, acquiert une vitesse $\mathbf{v}$ (par exemple, du fait du recul dû à l'émission d'un quantum γ par le noyau excité).

En supposant réalisées les inégalités $\tau \ll T$ et $\tau \ll a/v$, où T et a sont les ordres de grandeurs des périodes électroniques et des dimensions de l'enveloppe électronique respectivement, exprimer sous forme générale la probabilité de transition de l'atome dans l'état Ψ_n après cette "secousse".

11.78. En utilisant le résultat obtenu dans le problème précédent, calculer la somme des probabilités totales d'excitation et d'ionisation de l'atome d'hydrogène (se trouvant initialement dans l'état fondamental) engendrées par une "secousse" brusque au cours de laquelle une impulsion $\mathbf{P}$ est communiquée au noyau (proton). Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

11.79. Généraliser le résultat du problème 11.77 au cas d'une molécule diatomique, c'est-à-dire obtenir l'expression générale de la probabilité de transition de la molécule de l'état stationnaire Ψ_0 à l'état Ψ_n à la suite d'une " secousse " brusque au cours de laquelle est communiquée une impulsion $\mathbf{P}$ à l'un des noyaux de la molécule.

11.80. Dans les conditions du problème précédent, chercher la probabilité pour que la molécule demeure dans son état initial si la variation brusque V de la vitesse du noyau est très inférieure aux vitesses caractéristiques des électrons de la molécule. Le terme électronique de la molécule est $^1\Sigma$ et cette dernière se trouve dans son état fondamental pour tous les nombres quantiques ($v = K = 0$).

11.81. Un atome d'hydrogène se trouvant pour $t = 0$ dans son état fondamental est soumis à un champ électrique homogène périodique dans le temps (cette dépendance en temps est de la forme $\sin \omega t$).

En utilisant le calcul des perturbations, calculer la probabilité, par unité de temps, d'ionisation de l'atome. On suppose, pour simplifier, que dans l'état final l'électron est libre.

11.82. Chercher la probabilité d'éjection d'un électron K de l'atome sous l'effet d'une transition dipolaire du noyau par suite de l'interaction électrostatique directe de l'électron avec les protons du noyau (conversion interne).

Comme fonction d'onde initiale, utiliser la fonction Ψ de d'un électron K d'atome hydrogénoïde. La vitesse de l'électron dans l'état final est supposée beaucoup plus grande que celle de l'atome.

11.83. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas où les états initial et final du noyau ont un moment nul (ces phénomènes sont dénommés conversion de transition monopolaire ou $E0$).

11.84. Chercher la probabilité d'éjection d'un électron K dans un état excité d'un mésoatome μ (l'atome contient un seul muon μ^- sur un niveau excité) du fait de l'effet Auger (c'est-à-dire que le muon μ passe dans un état d'énergie inférieure, tandis que l'énergie de la transition est transmise à l'électron de l'atome du fait de l'interaction électrostatique du muon et de l'électron).

Se limiter à l'étude de la transition dite dipolaire ou transition P d'Auger pour laquelle la variation du moment orbital du muon vaut $|\Delta l| = 1$.

Dans les calculs, supposer que les dimensions de l'orbite du muon sont beaucoup plus petites que celles des électrons, l'électron dans l'état final demeurant libre.

Indiquer les conditions d'application du résultat obtenu. Etudier, en particulier, la transition muonique $2p \to 1s$.

11.85. Même question que dans le problème précédent, mais pour le cas $\Delta l = 0$ (transitions S d'Auger). Pour simplifier, se limiter au cas où le moment orbital de l'électron dans les états initial et final est nul.

Etudier, en particulier, la transition muonique $2s \to 1s$.

CHAPITRE 12

LE NOYAU ATOMIQUE

12.1 NOTIONS GÉNÉRALES SUR LES FORCES NUCLÉAIRES. DEUTÉRON

12.1. Comme on le sait, les forces nucléaires se caractérisent par un petit rayon d'action et une grande intensité. C'est ainsi que les manifestations qualitatives de l'interaction nucléon-nucléon de basse énergie ne peuvent s'expliquer qu'en admettant que le potentiel nucléaire a un rayon d'action $R_0 \approx 2 \cdot 10^{-13}$ cm (à de plus grandes distances les forces nucléaires décroissent très rapidement) et une grandeur caractéristique $U_0 \approx 40$ MeV.

Chercher les valeurs caractéristiques des potentiels d'interaction coulombienne de deux protons et d'interaction magnétique des moments magnétiques de spin de deux nucléons à la distance R_0 indiquée et les comparer à la grandeur U_0.

12.2. Quel serait le moment magnétique du deutéron si ce dernier se trouvait dans l'état[1] :
a) $^1S_0$;
b) $^3S_1$;
c) $^1P_1$;
d) $^3P_0$;
e) $^3P_1$;
f) $^3D_1$?

Rappelons que les moments magnétiques du proton et du neutron libres (en unités de magnétons nucléaires) sont : $\mu_p = 2,79$; $\mu_n = -1,91$; la valeur expérimentale du moment magnétique du deutéron est $\mu_d = 0,85$ et son spin vaut $J_d = 1$.

Conseil. Utiliser le résultat obtenu dans le problème 3.54 du Tome I.

1 Puisque les nombres quantiques du deutéron sont rigoureusement établis, il peut sembler que les problèmes du genre de ceux où sont étudiés les états *hypothétiques* du deutéron aient une nature artificielle. Or, il faut savoir, que c'est justement la comparaison avec les données expérimentales des caractéristiques physiques du deutéron calculées à partir de différentes hypothèses sur ses nombres quantiques, qui a permis d'identifier l'état *réel* du deutéron.

12.3. Estimer la valeur moyenne $\overline{r^k}$ ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n$) du deutéron en supposant que la liaison entre le proton et le neutron est faible et en se rappelant que, dans la grande majorité des cas, le deutéron se trouve dans l'état ^3S.

12.4. Quel serait le moment quadrupolaire du deutéron si ce dernier se trouvait dans l'état:
a) $^1S_0$;
b) $^3S_1$;
c) $^1P_1$;
d) $^3P_0$?

Exprimer le moment quadrupolaire du deutéron en termes de la distance quadratique moyenne $\overline{r^2}$; comparer au résultat obtenu dans le problème suivant.

12.5. Même question que dans le problème précédent, mais dans l'hypothèse où l'état du deutéron est $^3P_1$.

Donner une estimation numérique de Q_0 ; comparer au résultat du problème précédent et à la valeur expérimentale du moment quadrupolaire du deutéron $Q_d = 2,82 \cdot 10^{-27}$ cm^2.

12.6. Quelles sont les fonctions propres et les valeurs propres de l'isospin (grandeur T et projection T_3) pour un système composé de deux nucléons ?

12.7. Quelle est la valeur de l'isospin d'un système composé d'un proton et d'un neutron dans un état avec des valeurs déterminées du spin total S et du moment du mouvement relatif L des nucléons ?

Indiquer la partie isotopique de la fonction d'onde du deutéron.

12.8. Indiquer la forme la plus générale de l'opérateur interaction entre deux nucléons qui soit invariante d'isospin.

Exprimer l'opérateur obtenu $\hat{U}$ au moyen des valeurs prises par cet opérateur dans des états à valeur déterminée de l'isospin $U_{T=0,1}$.

12.9. Pour un système à deux nucléons, indiquer la structure isotopique de l'opérateur interaction coulombienne des nucléons.

12.10. En s'appuyant sur l'invariance d'isospin des forces nucléaires et le fait expérimental qu'il existe un état lié unique dans le système "proton + neutron" (deutéron), montrer qu'il ne doit pas exister d'états liés pour un système de deux protons ou de deux neutrons.

Tenir compte des valeurs des nombres quantiques du deutéron : spin $J_d = 1$, parité $P_d = +1$.

12.11. De quelles propriétés d'invariance des forces nucléaires réelles aurait-il fallu se priver, si l'état du deutéron avait été une superposition ${}^1P_1 + {}^3P_1$ (et non pas ${}^3S_1 + {}^3D_1$ comme pour un deutéron réel) ?

Indiquer une forme possible d'interaction pouvant aboutir à l'état mentionné.

12.12. Supposons que l'interaction de deux nucléons possède la structure isotopique suivante :

$$\hat{U} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 \hat{\tau}_3^{(1)} \hat{\tau}_3^{(2)},$$

où $\hat{V}_{1,2}$ sont des opérateurs ne dépendant pas des variables d'isospin (ce sont des opérateurs dans l'espace des coordonnées et des spins, symétriques par rapport à la permutation des nucléons) ; chercher, dans ce cas, la forme de l'interaction dans le système composé :
a) de deux protons ;
b) de deux neutrons ;
c) du proton et du neutron.

Est-ce que l'interaction étudiée s'accorde avec :
1) l'invariance isotopique ;
2) l'indépendance de charge des forces nucléaires réelles ?

12.13. Quelle propriété du deutéron montre que l'interaction proton-neutron dépend des spins des nucléons ?

Après avoir étudié les potentiels dépendant du spin suivants :
a) $\hat{U} = V(r)\hat{\boldsymbol{\sigma}}_\mathrm{p} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_\mathrm{n} = V(r)(2\hat{\mathbf{S}}^2 - 3)$;
b) $\hat{U} = V(r)\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{L}}$ (interaction spin-orbite) ;
c) $\hat{U} = V(r)(6(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n})^2 - 2\hat{\mathbf{S}}^2)$ (forces tensorielles)
($\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_\mathrm{p} - \mathbf{r}_\mathrm{n}$ et $\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_\mathrm{p} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_\mathrm{n})$ est l'opérateur spin total des nucléons), établir lesquels permettent d'expliquer les propriétés du deutéron étudiées plus haut. Indiquer les constantes du mouvement dans ces potentiels.

12.14. Montrer que le potentiel des forces tensorielles

$$\hat{U}_t = V(r)[6(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n})^2 - 2\hat{\mathbf{S}}^2]$$

($\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2)$ est l'opérateur spin total des nucléons), assimilé à une perturbation du potentiel central $U_0(r)$, n'engendre un déplacement du niveau S qu'au second ordre du calcul des perturbations.

12.15. Montrer qu'avec la prise en compte des forces tensorielles, c'est-à-dire avec $\hat{U} = U_0(r) + \hat{U}_t$, où $\hat{U}_t = V(r)\hat{S}_{12}$ et $\hat{S}_{12} \equiv 6(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n})^2 - 2\hat{\mathbf{S}}^2$, la fonction d'onde du deutéron, constituée par la superposition ${}^3S_1 + {}^3D_1$, peut être écrite sous la forme

$$\Psi = [f_0(r) + f_1(r)\hat{S}_{12}]\chi.$$

$\mathbf{S} = \hat{\mathbf{s}}_p + \hat{\mathbf{s}}_n$ est ici l'opérateur spin total des nucléons,

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix},$$

est la fonction générale de spin $S = 1$ en représentation S_z (l'opérateur $\mathbf{S}$ et la fonction d'onde Ψ correspondant au spin total $S = 1$ des nucléons sont aussi donnés en représentation S_z).

Pour quel choix de la fonction de spin χ la fonction d'onde considérée Ψ décrit-elle un état du deutéron ayant une valeur déterminée J_z ?

Chercher $\langle \mathbf{J} \rangle$ dans l'état étudié.

12.16. Comme on le sait, le moment magnétique du deutéron, dont l'état est la superposition $^3S_1 + ^3D_1$, vaut

$$\mu_d = (1 - w)\mu(^3S_1) + w\mu(^3D_1) \approx 0,85 \text{ magn. nucl.}$$

où $\mu(^3S_1)$ et $\mu(^3D_1)$ sont les moments magnétiques du système "proton + neutron" dans les états $^3S_1$, $^3D_1$ (voir 12.2), $w \approx 0,04$ est la probabilité de présence du deutéron dans l'état $^3D_1$.

Expliquer pourquoi, pour le moment quadrupolaire du deutéron, il n'y a pas de relation analogue à celle donnée plus haut pour le moment magnétique. A ce propos, signalons que le moment quadrupolaire de l'état $^3S_1$ est nul, et que celui de l'état $^3D_1$ est négatif, $Q(^3D_1) < 0$, tandis que la valeur expérimentale pour le deutéron est $Q_d \approx 2,82 \cdot 10^{-27}$ cm$^2 > 0$.

12.17. Estimer les dimensions des deux noyaux "miroirs" tritium ^{3}H et hélium ^{3}He à partir du fait que dans la désintégration β, $^3\text{H} \rightarrow ^3\text{He} + e + \tilde{\nu}$, l'énergie cinétique maximale de l'électron est $\varepsilon_0 = 17$ keV. Il faut prendre en compte l'invariance isotopique des forces nucléaires et l'absence d'états excités pour ces noyaux. Rappelons les valeurs numériques suivantes : $(M_n - M_p)c^2 \approx 1,29$ MeV, $m_e c^2 \approx 0,51$ MeV.

12.18. Comme on le sait, les dimensions des noyaux sont données par la relation $R = r_0 A^{1/3}$, où A est le nombre de nucléons dans le noyau.

Estimer la valeur de r_0 à partir des données sur la désintégration β^+ d'un noyau comportant $Z + 1$ protons et Z neutrons (de sorte que $A = 2Z + 1$) en l'exprimant en fonction de la valeur maximale de l'énergie ε_0 des positrons de désintégration. Supposer que le noyau qui se désintègre et que le noyau produit par la fission (constituant des noyaux "miroirs") se trouvent dans les mêmes états (c'est-à-dire possèdent des nombres quantiques identiques, exception faite pour les valeurs des composantes T_3 de l'isospin). L'énergie d'interaction coulombienne des protons au sein du noyau est supposée égale à l'énergie électrostatique d'une sphère régulièrement chargée dont la charge et le rayon sont ceux du noyau.

Obtenir une estimation numérique de r_0 à partir de la réaction de désintégration $^{27}_{14}\text{Si} \rightarrow ^{27}_{13}\text{Al} + e^+ + \nu$, où $\varepsilon_0 = 3,48$ MeV.

12.19. Même question que dans le problème précédent, mais pour la désintégration ${}^{34}_{17}\mathrm{Cl} \to {}^{34}_{16}\mathrm{S} + \mathrm{e}^{+} + \nu$, où $\varepsilon_0 = 5,52$ MeV.

12.2 LE MODÈLE EN COUCHES

12.20. Dans le modèle en couches chaque nucléon du noyau est supposé se mouvoir dans un certain champ moyen (self-consistant) engendré par les autres nucléons du noyau et présentant une symétrie sphérique.

En supposant que le potentiel self-consistant puisse être approximé par le potentiel

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}kr^2,$$

chercher les niveaux d'énergie individuels des nucléons.

A quelles valeurs des nombres magiques aboutit un tel modèle de potentiel self-consistant ?

Quelles variations qualitatives observe-t-on dans la représentation des niveaux individuels pour une petite perturbation $\delta U(r)$ (de symétrie sphérique) du potentiel considéré ?

Quelles prévisions peut-on déduire du modèle en ce qui concerne les moments et les parités des états fondamentaux des noyaux ?

12.21. Comme on le sait, une interprétation des propriétés des états les plus bas des noyaux, en s'appuyant sur le modèle en couches, ne peut être obtenue qu'avec l'introduction, en plus du potentiel self-consistant central $U(r)$, du potentiel d'interaction spin-orbite U_{ls}.

Dans le cadre de ce modèle, où

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}kr^2, \qquad \hat{U}_{ls} = -\alpha \hat{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (\alpha > 0)$$

(comparer au problème précédent), chercher le spectre d'énergie des nucléons individuels. Pour $\alpha \approx \hbar\omega/10$ ($\omega = \sqrt{k/M}$) représenter les niveaux individuels du bas du spectre (ce modèle traduit exactement l'ordre des niveaux individuels, ce qui est essentiel pour la description des propriétés des noyaux pas trop lourds).

Dans le cadre de ce modèle, chercher les moments (les spins) et les parités des états fondamentaux des noyaux: ${}^{6}\mathrm{He}$, ${}^{6}\mathrm{Li}$, ${}^{10}_{5}\mathrm{B}$, ${}^{12}_{6}\mathrm{C}$, ${}^{13}_{6}\mathrm{C}$, ${}^{13}_{7}\mathrm{N}$, ${}^{14}_{6}\mathrm{C}$, ${}^{17}_{8}\mathrm{O}$, ${}^{16}_{8}\mathrm{O}$, ${}^{27}_{13}\mathrm{Al}$, ${}^{40}_{20}\mathrm{Ca}$.

12.22. Chercher les niveaux individuels les plus bas du potentiel d'un oscillateur en présence d'une interaction spin-orbite de la forme

$$\hat{U}_{ls} = -\alpha r^2 \hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}.$$

Discuter la nature de la décomposition des niveaux de l'hamiltonien non perturbé. Comparer au résultat obtenu dans le problème précédent.

12.23. Dans le cadre du modèle en couches, chercher la partie spin-isospin des fonctions d'ondes des états fondamentaux des noyaux du tritium ^{3}H et de l'hélium ^{3}He.

12.24. Indiquer les valeurs possibles du moment total J et du spin isotopique T des noyaux comprenant, en plus des couches pleines, deux nucléons dans l'état $p_{1/2}$ (de même n). Les noyaux possédant cette configuration sont $^{14}_{6}$C, $^{14}_{7}$N, $^{14}_{8}$0 (deux nucléons en plus des couches pleines $(1s_{1/2})^4$ $(1p_{3/2})^8$).

12.25. Même question que pour le problème précédent, mais pour deux nucléons dans l'état $p_{3/2}$.

12.26. Dans le modèle en couches, chercher le moment magnétique et le facteur gyromagnétique d'un noyau ne comportant en plus des couches pleines qu'un seul nucléon (ou possédant une vacance sur une couche pleine).

Appliquer le résultat obtenu aux états fondamentaux des noyaux suivants[2] :
^{3}H $(J = 1/2\ ; \mu = 2,91)$; ^{3}He $(1/2\ ; -2,13)$; $^{11}_{5}$B $(3/2\ ; 2{,}69)$; $^{13}_{6}$C $(1/2\ ; 0{,}70)$; $^{17}_{5}$N $(1/2\ ; -0,28)$; $^{18}_{8}$0 $(5/2\ ; -1,89)$; $^{29}_{14}$Si $(1/2\ ; -0,55)$.

Pour résoudre le problème, utiliser le schéma des niveaux individuels établi dans 12.21.

12.27. Même question que dans le problème précédent, mais pour un noyau comportant, en plus des couches pleines, un proton et un neutron (ou possédant une vacance protonique et une vacance neutronique sur une couche pleine) dans les états identiques (c'est-à-dire avec les mêmes valeurs de n, l, j).

Faire le calcul pour les différentes valeurs du spin du noyau possibles pour la configuration nucléique donnée. Comparer aux données expérimentales des noyaux[2]
^{2}H $(J = 1\ ; \mu = 0,85)$; $^6_3$Li $(1\ ; 0{,}82)$; $^{10}_{5}$B $(3\ ; 1{,}80)$; $^{14}_{7}$N $(\ 1;\ 0{,}40)$.

12.28. Calculer le moment magnétique d'un noyau comportant, en plus des couches pleines, un proton et un neutron (ou possédant une vacance protonique et une vacance neutronique sur une couche pleine) dans des états identiques avec le schéma de couplage LS (les niveaux individuels sont caractérisés par les nombres quantiques n, l, et non pas n, l, j comme dans le schéma de couplage jj).

Appliquer le résultat obtenu à l'état fondamental du noyau ^{6}Li qui a un spin $J = 1$. Chercher μ pour les différentes valeurs possibles de L et de S et comparer à la valeur expérimentale $\mu_{\text{exp}} = 0,82$ et au résultat du problème précédent. Les nucléons, en plus de la couche pleine $(1s)^4$, se trouvent dans l'état $1p$ (c'est-à-dire ont un $l = 1$).

Quel est le spin isotopique des différents états concernés du noyau ^{6}Li ?

12.29. Chercher, dans le schéma du couplage jj, le moment magnétique d'un noyau possédant le même nombre de protons et de neutrons en dehors des couches pleines

2 On a indiqué entre parenthèses les valeurs expérimentales du spin J et du moment magnétique μ du noyau.

dans des états identiques nlj. Appliquer le résultat obtenu au noyau $^{22}_{11}$Na de spin $J = 3$ et de moment magnétique $\mu_{exp} = 1,75$.

12.30. Même question que dans le problème précédent mais dans les conditions du couplage LS (voir 12.28).

12.31. Dans le cadre du modèle en couches, chercher le rapport entre les moments magnétiques des états fondamentaux de noyaux "miroirs". Se limiter à l'étude des noyaux dont tous les nucléons (des deux états de charge), en plus des couches pleines, se trouvent dans les mêmes états njl.

Appliquer le résultat obtenu aux noyaux ^{3}H et ^{3}He et comparer aux données expérimentales : $\mu_{exp}(^3\text{H}) = 2,91$; $\mu_{exp}(^3\text{He}) = -2,13$.

12.32. Chercher le moment quadrupolaire d'un noyau ne possédant en plus des couches pleines qu'un proton dans l'état :
a) $s_{1/2}$;
b) $p_{3/2}$;
c) $d_{5/2}$.

Exprimer Q_0 en fonction de $\overline{r_p^2}$. Quelle est la valeur du moment quadrupolaire d'un noyau ne possédant qu'une vacance protonique sur les couches indiquées ?

12.33. Généraliser le résultat obtenu dans le problème précédent au cas d'un proton dans un état à valeur arbitraire de l et à $j = l + 1/2$.

12.34. Chercher le moment quadrupolaire d'un noyau ne possédant, en plus des couches pleines, qu'un proton dans un état avec une valeur arbitraire de l et $j = l - 1/2$.

Comparer aux résultats obtenus dans les deux problèmes précédents.

12.35. Chercher le moment quadrupolaire d'un noyau ne possédant, en plus des couches pleines, qu'un neutron dans un état de moment orbital l et de moment total $j = l \pm 1/2$.

Conseil. Assimiler le noyau à un système composé de deux sous-systèmes : d'un neutron en plus des couches pleines et des nucléons des couches pleines (pris dans leur ensemble) se mouvant par rapport au centre de masse du noyau[3].

12.36. Comme on le sait, le modèle en couches avec un potentiel self-consistant ayant la forme d'un oscillateur harmonique

$$U(r) = -U_0 + \frac{1}{2}kr^2,$$

3 L'étude des difficultés du modèle en couches liées au caractère fixe du centre de masse du noyau, assimilé à un système de particules indépendantes, est exposée dans la référence [1].

permet de comprendre et d'expliquer (compte tenu du couplage spin-orbite) de nombreuses propriétés de noyaux pas trop lourds.

En admettant que la nature oscillatoire du potentiel self-consistant se conserve également pour les noyaux lourds $A \gg 1$, déterminer, sur la base de considérations quasi classiques, l'expression de la densité de nucléons au sein de ces noyaux. En résolvant le problème, on peut négliger l'interaction coulombienne des protons et considérer les noyaux comme possédant le même nombre de protons et de neutrons.

Est-ce que l'expression obtenue s'accorde avec les données expérimentales ?

12.37. Même question que dans le problème précédent, mais pour un potentiel self-consistant de la forme

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ \infty, & r > R. \end{cases}$$

Une fois choisi, en accord avec les données expérimentales, le paramètre R du modèle sous la forme $R = r_0 A^{1/3}$ (R est le rayon du noyau, $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$ cm), chercher l'impulsion limite p_F des nucléons au sein du noyau. Quelle est dans ce cas la vitesse maximale des nucléons ?

CHAPITRE 13

THÉORIE DE LA DIFFUSION

13.1 L'APPROXIMATION DE BORN

13.1. Montrer que l'amplitude de diffusion d'une particule dans un potentiel extérieur quelconque $U(\mathbf{r})$, peut s'écrire sous la forme de l'intégrale suivante étendue au domaine d'action du potentiel :

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) dV,$$

où $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}$ sont les vecteurs d'onde de la particule avant et après la diffusion et où $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}$ est la fonction d'onde ayant, pour $r \to \infty$, le comportement asymptotique suivant :

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \approx \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})}{r} e^{ikr}.$$

13.2. De quelle façon le potentiel d'interaction doit-il décroître à grande distance pour que le comportement asymptotique de la fonction d'onde $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}$ prenne, pour $r \to \infty$, la forme indiquée dans le problème précédent ? Se limiter aux potentiels de la forme $U(r) \propto r^{-n}$, pour $r \to \infty$.

13.3. Etablir à quelles distances du centre de diffusion la fonction d'onde $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ peut être représentée sous la forme asymptotique donnée dans 13.1. On suppose que, pour $r \gtrsim R$, le potentiel est négligeable (R est ici le "rayon d'action" du potentiel).

13.4. Chercher, dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion et la section totale de diffusion des particules dans les potentiels $U(r)$ suivants :

a) $U(r) = \alpha\delta(r - R)$;

b) $U(r) = U_0 \mathrm{e}^{-r/R}$;

c) $U(r) = \frac{\alpha}{r} \mathrm{e}^{-r/R}$;

d) $U(r) = \alpha/r^2$;

e) $U(r) = \begin{cases} U_0, & r < R, \\ 0, & r > R \end{cases}$;

f) $U(r) = U_0 \mathrm{e}^{-r^2/R^2}$.

Etudier les cas limites des particules de faible et de grande énergie. Indiquer les conditions de validité de l'étude.

13.5. Pour les potentiels $U(r)$ étudiés dans le problème précédent (13.4, a), b)) chercher la valeur $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(0)$ au premier ordre du calcul des perturbations ($\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r})$ est la fonction d'onde décrivant le processus de diffusion des particules d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$).

13.6. Montrer que, dans les conditions de validité de l'approximation de Born, la section efficace totale de diffusion des particules $\sigma(E)$, au sein d'un potentiel central quelconque $U(r)$, satisfait à l'inégalité

$$\frac{d}{dE}[E\sigma(E)] \geq 0,$$

c'est-à-dire que $E\sigma(E)$ est une fonction croissante de l'énergie E.

13.7. Montrer que lors de la diffusion des particules par un potentiel attractif (c'est-à-dire pour $U(\mathbf{r}) \leq 0$) ou par un potentiel répulsif ($U(\mathbf{r}) \geq 0$) dans les conditions de validité de l'approximation de Born, la valeur maximale de la section efficace de diffusion $\sigma(E)$ correspond aux particules d'énergie $E = 0$.

13.8. Obtenir l'expression de l'amplitude de diffusion des particules dans l'approximation de Born pour un potentiel d'échange, c'est-à-dire pour $U_{\text{échan}}\Psi(\mathbf{r}) \equiv U(r)\Psi(-\mathbf{r})$.

Comment l'amplitude de diffusion est-elle liée dans ce cas à l'amplitude de diffusion par le potentiel ordinaire $U(r)$? Quelle différence observe-t-on dans la diffusion des particules rapides entre les des potentiels "ordinaire" et "d'échange"?

13.9. Montrer que, pour des particules de grandes énergies $kR \gg 1$ (R étant le rayon d'interaction), la section efficace totale de diffusion dans un potentiel $U(\mathbf{r}) \equiv U(\boldsymbol{\rho}, z)$ peut, dans l'approximation de Born, être représentée sous la forme

$$\sigma(E) \underset{E \to \infty}{\approx} \frac{m}{2\hbar^2 E} \iint_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} U(\boldsymbol{\rho}, z)dz\right]^2 d^2\rho.$$

Avant la diffusion, l'impulsion des particules est dirigée le long de l'axe z ; $\boldsymbol{\rho}$ est le rayon vecteur situé dans le plan perpendiculaire à l'axe z.

Appliquer la formule donnée pour le potentiel $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$ et comparer au résultat obtenu dans le problème 13.4, f).

13.10. Dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion vers l'avant des particules (d'angle $\theta = 0$) est réelle ($\text{Im} f(\theta = 0) = 0$). Le théorème optique d'après lequel $\sigma(E) = 4\pi \text{Im} f(\theta = 0)/k$ n'est donc pas vérifié.

Expliquer pourquoi ce résultat est naturel et pourquoi la violation du théorème optique ne contredit pas la description correcte des sections efficaces différentielle

et totale de diffusion dans le cadre de l'approximation de Born (naturellement dans les conditions de sa validité ; voir de même le problème suivant).

13.11. Trouver l'expression de l'amplitude de diffusion au second ordre du calcul des perturbations. Chercher $\mathrm{Im}f^{(2)}(\theta = 0)$ et expliquer le résultat obtenu.

13.12. Une caractéristique importante du processus dans l'étude des amplitudes de diffusion des particules est la grandeur

$$\eta(E) = \mathrm{Re}f(E, \theta = 0)/\mathrm{Im}f(E, \theta = 0),$$

rapport de la partie réelle et de la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant.

Exprimer $|\eta(E)|$ au moyen de la section efficace totale de diffusion et de la section efficace différentielle de diffusion frontale des particules. Comment se comporte $\eta(E)$ dans les conditions de validité de l'approximation de Born ?

13.13. Exprimer, dans le cadre de l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion sur deux centres de forces identiques éloignés l'un de l'autre de $\mathbf{a}$, c'est-à-dire que $U(\mathbf{r}) = U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r} - \mathbf{a})$, au moyen de l'amplitude de diffusion f_0^{B} sur un centre unique $U_0(\mathbf{r})$.

Chercher le rapport entre les sections efficaces de diffusion sur deux et sur un centre pour les cas :

a) $ka \ll 1$ (avec une grandeur kR arbitraire, R étant le rayon d'action du potentiel $U_0(\mathbf{r})$) ;
b) $kR \sim 1$ et $a \gg R$ (la distance séparant les centres est beaucoup plus grande que le rayon d'action du potentiel).

13.14. Obtenir, dans l'approximation de Born, l'expression de l'amplitude de diffusion par un système de N centres identiques disposés aux points $\mathbf{a}_n$, $n = 1, 2, \ldots, N$, c'est-à-dire par un potentiel $U(\mathbf{r}) = \sum\limits_n U_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|)$

Appliquer le résultat obtenu à l'analyse de la distribution angulaire des particules diffusées pour des centres alignés sur une droite parallèle à la direction des particules incidentes, l'écartement entre les centres voisins étant constant et égal à b. Discuter, en particulier, le cas de $N \gg 1$.

Dans le cas où $R \lesssim b$ (R étant le rayon d'action du potentiel $U_0(\mathbf{r})$), $bk \ll 1$ mais $Nbk \gg 1$, chercher la section efficace de diffusion totale des particules.

13.15. Chercher, au second ordre du calcul des perturbations, l'amplitude de diffusion des particules dans le potentiel $U(r) = U_0 e^{-r^2/R^2}$ pour de grands transferts d'impulsion $qR \gg 1$. Comparer à l'amplitude obtenue dans l'approximation de Born.

13.16. Comparer, pour des particules d'énergie $E = 0$, les valeurs de l'amplitude de diffusion exacte $f^{ex}(E = 0)$ dans le potentiel $U(r)$ à l'amplitude de diffusion dans l'approximation de Born $f^{B}(0)$, dans le même potentiel pour
a) un potentiel répulsif $U(r) \geq 0$;
b) un potentiel attractif $U(r) \leq 0$, suffisamment peu profond pour qu'il admette pas d'état lié.

Montrer que, dans a), la valeur de la section efficace de diffusion de Born est supérieure à la section efficace de diffusion exacte, tandis que, dans b), c'est le contraire.

13.2 CALCUL DES DÉPHASAGES. DIFFUSION DE PARTICULES LENTES. DIFFUSION RÉSONNANTE

13.17. Obtenir l'expression des déphasages $\delta_l(k)$, dans le cadre de l'approximation de Born, en utilisant directement la décomposition en ondes partielles de l'amplitude de diffusion dans un champ central.

Indication. Utiliser la relation de la théorie des fonctions de Bessel $(x, y > 0)$ [12] :

$$\frac{\sin\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}}{\sqrt{x^2+y^2-2xy\cos\varphi}} = \frac{\pi}{2\sqrt{xy}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)J_{l+1/2}(x)J_{l+1/2}(y)P_l(\cos\varphi).$$

13.18. Obtenir l'expression des déphasages dans l'approximation de Born pour un potentiel d'échange (voir 13.8).

13.19. Dans le cadre de l'approximation de Born, chercher le comportement des déphasages avec l'énergie de la particule quand $E \to 0$. Se limiter aux potentiels $U(r)$ décroissant, pour $r \to \infty$, plus vite que toute puissance de r (par exemple, $U \propto e^{-r/R}$).

13.20. Chercher le comportement des déphasages de Born $\delta_l^{B}(k)$ pour une valeur fixée de l et pour $k \to \infty$. Se limiter à des potentiels dont le comportement pour $r \to 0$ satisfait à la condition $rU(r) \to 0$.

13.21. En se servant de l'expression quasi classique des déphasages, chercher leur comportement pour une valeur fixée de l et $E \to \infty$. Comparer au résultat obtenu dans le problème précédent.

13.22. Chercher dans l'approximation de Born les déphasages des ondes s $(l = 0)$ dans les potentiels :
a) $U(r) = U_0 R\delta(r - R)$;
b) $U(r) = U_0 e^{-r/R}$.
En utilisant les résultats obtenus, chercher, pour ces potentiels, la section efficace de diffusion des particules lentes. Indiquer les conditions de validité des résultats et comparer les aux résultats obtenus dans 13.4, a) et b).

13.23. Donner l'expression du potentiel d'interaction $U(r)$ en fonction de déphasage $\delta_0(k)$ $(l = 0)$, supposé connu pour toutes les énergies de la particule et avec l'hypothèse que $|\delta_0(k)| \ll 1$.

Pour illustrer ce résultat, étudier les cas où $\delta_0(k)$ est de la forme :
a) $\delta_0(k) = \text{cte}$;
b) $\delta_0(k) = \dfrac{\alpha k}{1 + \beta k^2}$.
Pour le cas b) comparer au résultat de 13.22, b).

13.24. Chercher les valeurs exactes des déphasages des ondes s dans les potentiels :
a) $U(r) = \begin{cases} \infty, & r < R, \\ 0, & r > R \ ; \end{cases}$
b) $U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r > R \ ; \end{cases}$
c) $U(r) = -U_0 \mathrm{e}^{-r/R}$.
En utilisant les résultats obtenus, chercher, pour ces potentiels, les sections efficaces de diffusion des particules lentes. Indiquer les conditions de validité des expressions obtenues.

13.25. Chercher la longueur de diffusion et la section efficace de diffusion des particules lentes dans le potentiel $U(r) = \alpha/r^4$, $\alpha > 0$.

13.26. Chercher la longueur de diffusion et la section efficace de diffusion des particules d'énergie $E = 0$ dans le potentiel

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & \dfrac{x^2 + y^2}{b^2} + \dfrac{z^2}{c^2} < 1, \quad c \geq b, \\ 0, & \dfrac{x^2 + y^2}{b^2} + \dfrac{z^2}{c^2} > 1. \end{cases}$$

Discuter, en particulier, les cas limites $c \approx b$ et $c \gg b$.

13.27. Chercher la dépendance en énergie de la section efficace de diffusion $\sigma(E)$,pour des particules d'énergie $E \to 0$, dans un potentiel décroissant à grande distance suivant la loi

$$U(r) \approx \alpha/r^n, \qquad r \to \infty, \qquad 2 < n < 3,$$

13.28. Même question que dans le problème précédent, mais, pour un potentiel, ayant à grande distance le comportement $U(r) \approx \alpha/r^3$.

13.29. Chercher les déphasages $\delta_l(k)$ dans le potentiel $U(r) = \alpha/r^2$, $\alpha > 0$.

Effectuer la sommation de la série constituant le développement de l'amplitude en ondes partielles pour :

a) $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$ pour des angles de diffusion quelconques ;
b) $m\alpha/\hbar^2 \gtrsim 1$ pour des angles de diffusion suffisamment petits ;
c) $m\alpha/\hbar^2 \gg 1$ pour des particules diffusées vers l'arrière ($\theta = \pi$).

Chercher, pour tous ces cas, la section efficace de diffusion différentielle des particules et la comparer aux résultats des calculs dans l'approximation de Born, ainsi qu'aux résultats de la mécanique classique.

13.30. Calculer la section efficace de diffusion totale de particules rapides $kR \gg 1$ sur une sphère dure (impénétrable) de rayon R. Se servir de l'expression quasi classique des déphasages et du théorème optique.

13.31. Dans les mêmes conditions que dans le problème précédent, chercher l'amplitude et la section efficace différentielle de diffusion pour des petits angles de diffusion[1] $kR\theta \lesssim 1$.

13.32. Même question que dans le problème précédent, mais pour des angles de diffusion $\theta \gg (kR)^{-1}$. Comparer au résultat de la mécanique classique.

13.33. Chercher la longueur de diffusion dans les potentiels attractifs :
a) $U(r) = \begin{cases} -U_0, & r < R, \\ 0, & r > R ; \end{cases}$;
b) $U(r) = -U_0 R\delta(r - R)$
en fonction des paramètres du potentiel U_0 et R.

Quels sont les valeurs des paramètres du potentiel pour lesquelles la longueur de diffusion tend vers l'infini ?

13.34. Calculer la section efficace de diffusion des particules lentes dans le potentiel $U(r) = -\alpha\delta(r - R)$ dans les conditions de résonance de l'onde s.

13.35. Même question que dans le problème précédent, mais pour un puits de potentiel sphérique de profondeur U_0 et de rayon R.

13.36. Chercher l'amplitude de diffusion partielle dans l'onde s ($l = 0$) dans le potentiel $U(r) = \alpha\delta(r - R)$. Pour $\alpha R \gg \hbar^2/m$, déterminer la position E_0 et la largeur Γ des niveaux inférieurs quasidiscrets ($E_0 \sim \hbar^2/mR^2$).

Comparer les sections efficaces de diffusion des particules d'énergie $E \sim \hbar^2/mR^2$ sur ce potentiel à celles obtenues pour une sphère dure de rayon identique R. Quelle est la valeur de la différence entre ces sections efficaces pour des énergies des particules proches de l'énergie du niveau s quasi discret ?

---

1 La diffusion sous de petits angles dans les conditions de ce problème est appelée diffractive, car elle est analogue à la diffraction d'un faisceau de lumière parallèle sur un écran (réfléchissant ou absorbant) (diffraction de Fraunhofer, voir [6] et également 13.56).

13.3 DIFFUSION DES PARTICULES RAPIDES (APPROXIMATION EIKONALE). DIFFUSION DES PARTICULES DOUÉES DE SPIN

13.37. Obtenir l'expression de l'amplitude de diffusion de particules rapides dans l'approximation eikonale ($q_\perp \approx q \approx k\theta$)

$$f(k,\theta) = ik\int_0^\infty \left\{1-\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2+z^2})dz\right]\right\} J_0(k\rho\theta)\rho d\rho$$
$$= \frac{ik}{2\pi}\iint \left\{1-\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2+z^2})dz\right]\right\} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}_\perp\cdot\boldsymbol{\rho}} d^2\rho$$

directement à partir de son développement en ondes partielles.

Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

13.38. Montrer que, dans l'approximation eikonale, l'amplitude de diffusion vérifie le théorème optique (comparer avec 13.10 et 13.11).

13.39. Montrer que la section efficace de diffusion totale de particules rapides $kR \gg 1$ (R étant le rayon de potentiel) dans le potentiel $U(r)$ peut être calculée à l'aide de la formule

$$\sigma(E) = 4\pi\int_0^\infty \left\{1-\cos\left[\frac{m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2+z^2})dz\right]\right\}\rho d\rho$$

quelque soit la relation entre l'énergie des particules et l'énergie potentielle, ce qui signifie que pour que cette formule soit applicable, il n'est pas nécessaire que les conditions de validité de l'approximation eikonale soient remplies.

Appliquer le résultat obtenu au calcul de la section efficace de diffusion de la barrière de potentiel : $U = 0$ pour $r > R$ et $U = U_0$ pour $r < R$.

13.40. Chercher la section efficace de diffusion totale dans le potentiel $U(r) = \alpha/r^4$ ($\alpha > 0$) pour des particules d'énergie satisfaisant à la condition

$$\sqrt{\frac{mE}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} \gg 1.$$

13.41. Exprimer, dans l'approximation eikonale, l'amplitude de diffusion sur deux centres de forces situés à une distance $\mathbf{a}$ l'un de l'autre, c'est-à-dire dans le potentiel $U(\mathbf{r}) = U_0(r) + U_0(|\mathbf{r}-\mathbf{a}|)$, en fonction de l'amplitude de diffusion f_0 sur un centre $U_0(r)$.

13.42. L'opérateur décrivant l'interaction d'une particule de spin $s = 1/2$ avec une particule sans spin est de la forme

$$\hat{U} = U_0(r) + U_1(r)\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\mathbf{l}},$$

où $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ est le rayon vecteur entre les deux particules, et $\mathbf{l} = -i\mathbf{r} \wedge \boldsymbol{\nabla}$, l'opérateur moment cinétique du système par rapport au centre de masse.

Chercher, dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion dans cette collision.

13.43. Chercher, dans l'approximation de Born, l'amplitude et la section efficace différentielle de diffusion de neutrons rapides par un champ électrostatique coulombien.

13.44. Obtenir l'expression de la section efficace de diffusion de particules de spin $s = 1/2$ sur des particules sans spin, dans l'approximation de Born. L'opérateur décrivant l'interaction des particules a la forme indiquée dans le problème 13.42.

Quelle est la dépendance en énergie de la section efficace de diffusion totale pour des grandes énergies ? Comparer à la diffusion de particules sans spin.

13.45. Quelles restrictions sont imposées par l'hermiticité de l'hamiltonien sur la forme de l'opérateur décrivant l'interaction d'une particule de spin $s = 1/2$ avec une particule sans spin (voir 13.42)

$$\hat{U} = U_0(r) + U_1(r)\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l},$$

Quelle est la polarisation des particules diffusées dans l'approximation de Born si, initialement (avant la collision), elles n'étaient pas polarisées ?

13.46. Des particules de spin $s = 1/2$ sont, avant la diffusion sur des particules sans spin, polarisées. Le vecteur polarisation est $\mathbf{P} = 2\overline{\mathbf{s}} \neq 0$. Montrer que, dans l'approximation de Born, la diffusion n'implique qu'une rotation du vecteur polarisation, de sorte que $|\mathbf{P}'| = |\mathbf{P}|$, où $\mathbf{P}'$ est le vecteur polarisation des particules après la diffusion (comparer au problème précédent).

13.47. Chercher l'amplitude de diffusion des neutrons lents sur des protons en supposant que leur interaction a les propriétés suivantes :

a) il existe un état lié (deutéron) dont l'énergie de liaison est faible ($\varepsilon_d \ll \hbar^2/mR^2$, R étant le rayon d'interaction) et avec les nombres quantiques $l = 0$ et $S = 1$;
b) il existe un niveau virtuel de faible énergie avec les nombres quantiques $l = 0$ et $S = 0$;
c) pour une faible énergie du système "neutron + proton", le potentiel d'interaction peut être supposé central, mais dépendant du spin total S, c'est-à-dire qu'il a la forme $\hat{U} = U_0(r) + U_1(r)\boldsymbol{\sigma}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_p$.

13.4 DIFFUSION DES PARTICULES COMPOSITES. COLLISIONS INÉLASTIQUES

13.48. Chercher les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion élastique d'électrons rapides par un atome d'hydrogène dans l'état fondamental.

13.49. Même question que dans le problème précédent, mais pour l'atome d'hélium. Choisir la fonction d'onde de l'atome sur la base du calcul variationnel introduit dans le problème 11.7.

13.50. Chercher la section efficace totale d'excitation de l'état $2s$ de l'atome d'hydrogène lors de la collision d'électrons rapides avec des atomes d'hydrogène se trouvant dans leur état fondamental.

13.51. Chercher les sections efficaces différentielle et totale d'excitation d'un noyau par des électrons, lors d'une transition monopolaire (ou $E0$), c'est-à-dire quand l'état initial et l'état final du noyau possèdent le même moment $J = 0$ et la même parité. Les électrons dans l'état initial et l'état final sont considérés comme rapides.

13.52. Un rotateur sphérique de moment d'inertie I, de charge $e = 0$ et de moment dipolaire électrique $\mathbf{d}$ parallèle à l'axe du rotateur (un modèle très simple de ce rotateur est un système de deux particules, de charges de signes opposés, à une distance donnée l'une de l'autre) se trouve dans l'état fondamental.

Calculer au premier ordre du calcul des perturbations les sections efficaces différentielle et totale d'excitation du rotateur sur un niveaux l par diffusion inélastique de particules chargées.

13.53. Chercher la section efficace de diffusion de particules chargées lourdes (par exemple, de protons ou d'ions) par des atomes neutres dont le moment est nul. La vitesse des particules diffusées est supposée très faible par rapport à celles des électrons atomiques. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu.

Indication. Montrer au préalable qu'au cours de la diffusion ce sont les distances grandes par rapport aux distances atomiques qui présentent de l'importance. Se servir de l'expression quasi classique de la section efficace de diffusion (voir 13.39).

13.54. Déterminer les sections efficaces de diffusion élastique et inélastique de particules lentes par un puits de potentiel complexe

$$U(r) = \begin{cases} U_0 - iU_1, & r < R, \quad U_1 > 0, \\ 0, & r > R \end{cases}$$

(pour le sens physique de la partie imaginaire du potentiel voir le problème 7.9 du Tome I). Supposer que les conditions $|U_{0,1}| \ll \hbar^2/mR^2$ sont remplies.

13.55. Chercher la section efficace totale σ_{tot}, les sections efficaces de diffusion élastique $\sigma_{\text{él}}$ et inélastique $\sigma_{\text{inél}}$ de particules rapides, $kR \gg 1$, par une sphère absorbante ("noire") de rayon R. Comparer au résultat obtenu dans 13.30.

Indication. Utiliser les représentations quasi classiques du mouvement des particules. Supposer que toutes les particules ayant atteint la surface de la sphère sont absorbées par cette dernière.

13.56. Dans les conditions du problème précédent, chercher la section efficace différentielle de diffusion élastique des particules. Comparer au résultat obtenu dans le problème 13.31.

13.57. Chercher les relations entre les amplitudes et les sections efficaces différentielles de diffusion élastique d'un neutron sur un proton et d'un neutron sur un atome d'hydrogène se trouvant dans l'état fondamental. Négliger l'interaction du moment magnétique du neutron avec l'électron. Indiquer les conditions de validité du résultat.

13.58. Comme on le sait, l'interaction d'un électron avec un positon peut se terminer par leur annihilation, c'est-à-dire la transformation de la paire en photons. Les niveaux d'énergie du positronium (atome hydrogénoide composé d'un électron et d'un positon) ont une durée de vie fini.

Chercher la relation entre la durée de vie de l'état fondamental du positronium et la section efficace d'annihilation positon lent – électron. On supposera que l'interaction responsable de l'annihilation possède un rayon d'action petit par rapport aux dimensions du positronium et qu'elle peut être assimilée à une perturbation (la forme de l'interaction a peu d'importance).

13.59. En utilisant le principe du bilan détaillé (voir [1]), établir la relation entre la section efficace de capture radiative du neutron par le proton et la photodésintégration du deutéron.

Indication. Le bilan détaillé et la relation qui en découle entre les sections efficaces des réactions inverses à deux particules, sont habituellement établis dans les cours de mécanique quantique pour des particules non relativistes (voir [1]). Mais si l'on assimile la grandeur de l'impulsion du mouvement relatif des deux particules à la grandeur de l'impulsion de ces particules dans le système du centre d'inertie, on peut utiliser ces relations pour des particules relativistes. Rappelons, de plus, qu'en mécanique non relativiste, $p_{\text{rel}} = \mu v_{\text{rel}} = |\mathbf{p}_1| = |\mathbf{p}_2|$, où $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2$ sont les impulsions des particules dans le système du centre d'inertie et μ leur masse réduite, $v_{\text{rel}} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$.

13.60. Chercher la relation entre la section efficace de l'effet photoélectrique sur l'état fondamental de l'atome d'hydrogène et la section efficace de recombinaison radiative de l'électron avec le proton (processus inverse au processus photoélectrique) vers l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. On peut négliger le spin du proton et le moment magnétique qui lui est lié.

CHAPITRE 14

THÉORIE QUANTIQUE DU RAYONNEMENT

14.1 EMISSION DE PHOTONS

14.1. Déterminer la durée de vie et la largeur de l'état excité $2p$ de l'atome d'hydrogène (négliger le spin de l'électron).

Appliquer le résultat obtenu à l'atome muonique et comparer avec la durée de vie du muon libre ($\tau_\mu = 2{,}2 \times 10^{-6}$ s).

14.2. Déterminer la durée de vie du premier niveau excité d'un oscillateur sphérique chargé.

14.3. Montrer que les transitions dipolaires (électriques) suivantes sont *interdites* :

a) entre des niveaux de l'atome de multiplicité différente (par exemple, entre les états ortho et para de l'hélium),
b) entre les composantes de structure fine d'un même terme de l'atome (c'est-à-dire entre les différents multiplets correspondants).

14.4. Estimer pour l'état $2s_{1/2}$ de l'atome d'hydrogène la probabilité de transition électromagnétique (par unité de temps[1]) vers l'état $2p_{1/2}$.

Rappelons que la différence entre les énergies des niveaux $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ (appelée déplacement de Lamb) vaut $\Delta E_{\mathrm{Lamb}} \approx 4{,}4 \times 10^{-6}$ eV.

Comparer le résultat obtenu à la probabilité de transition $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$ avec émission de deux photons, égale à $w_\gamma = 8\ \mathrm{s}^{-1}$ et au résultat obtenu dans 14.8.

14.5. Chercher la probabilité de la transition électromagnétique d'un rotateur sphérique, du premier niveau excité vers l'état fondamental. Le rotateur a un moment d'inertie I et un moment dipolaire électrique $\mathbf{d}$ dirigé suivant l'axe du rotateur.

---

1 Dans les problèmes suivants cette spécification est quelquefois omise pour abréger.

Conseil. L'interaction du rotateur avec le champ radiatif a la forme $V = -\mathbf{d} \cdot \hat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}$, où $\hat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(r)$ est l'opérateur du champ électrique des photons.

14.6. Chercher la probabilité de transition électromagnétique entre les niveaux rotationnels d'une molécule composée de deux atomes possédant un moment dipolaire constant d. Le terme électronique de la molécule est $^1\Sigma$. Se limiter au cas du premier niveau rotationnel excité.

Faire une estimation numérique de la probabilité de transition.

14.7. Une particule neutre libre de spin $s = 1/2$ possédant un moment magnétique de spin μ (de sorte que $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu\hat{\boldsymbol{\sigma}}$) est placée dans un champ magnétique homogène $\mathbf{B}_0$. Elle est dans un état ayant une valeur définie de la projection du spin sur la direction du champ. Chercher la probabilité d'émission d'un photon par unité de temps, due au retournement du spin.

14.8. Chercher la probabilité de transition à un photon de l'atome d'hydrogène de l'état excité $2s_{1/2}$ vers l'état fondamental $1s_{1/2}$. Comparer la valeur obtenue au résultat de 14.4.

14.9. Chercher la probabilité de la transition électromagnétique entre les composantes de la structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène (voir 11.4).

14.10. Quelle est la multipolarité du rayonnement des transitions électromagnétiques dominantes entre les composantes de structure fine d'un même terme de l'un atome ?

Estimer la valeur numérique de la probabilité des transitions électromagnétiques correspondantes par unité de temps.

14.11. Montrer qu'un photon ne peut être dans un état de moment cinétique total nul.

Conseil. En recherchant les fonctions d'onde (en représentation $\mathbf{p}$) des états du photon avec une valeur déterminée de J, recourir au formalisme tensoriel développé dans les problèmes de la section 4, chapitre 3 du Tome I.

14.12. Montrer que le système composé de deux photons ne peut être dans des états de moment total égal à l'unité, $J = 1$ (dans le système du centre d'inertie). Voir l'indication donnée dans le problème précédent ; tenir compte de l'identité des photons.

14.2 DIFFUSION DES PHOTONS. RAYONNEMENT DES PHOTONS EN COLLISION

14.13. Chercher les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion élastique de photons par une particule chargée libre. Comparer au résultat donné par l'électrodynamique classique.

14.14. Chercher les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion élastique de photons par un rotateur sphérique dans l'état fondamental.

Le rotateur a un moment d'inertie I et un moment dipolaire électrique $\mathbf{d}$ dirigé suivant l'axe du rotateur.

14.15. Chercher les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion élastique de photons par un oscillateur sphérique chargé se trouvant dans l'état fondamental.

14.16. Chercher les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion des photons par une particule neutre de spin $s = 1/2$ possédant un moment magnétique μ (de sorte que $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu\hat{\boldsymbol{\sigma}}$).

Etudier les cas suivants :

a) avant la diffusion, la particule est dans un état à valeur déterminée de la projection du spin sur l'axe z (le long duquel est dirigée l'impulsion des photons incidents) $s_z = +1/2$, l'état de spin de la particule ne variant pas au cours de la diffusion ;

b) même situation que dans le point précédent, mais au cours de la diffusion il se produit un retournement du spin de la particule, c'est-à-dire que dans l'état final (après collision) $s_z = -1/2$;

c) diffusion sur des particules non polarisées.

14.17. Chercher, au second ordre du calcul des perturbations, les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion inélastique de photons par un rotateur sphérique dans l'état fondamental s'accompagnant de l'excitation du rotateur. Quels sont, dans ce cas, les états excités du rotateur ?

Le rotateur a un moment d'inertie I et un moment dipolaire électrique $\mathbf{d}$ dirigé suivant l'axe du rotateur[2].

14.18. Pour une particule dans le potentiel $U(\mathbf{r})$, démontrer les relations suivantes (désignées "règle des sommes") :

a) $\sum\limits_m |\langle m|x|n\rangle|^2 = \langle n|x^2|n\rangle$;

b) $\sum\limits_m \omega_{mn}|\langle m|x|n\rangle|^2 = \dfrac{\hbar}{2\mu}$;

2 La solution du problème analogue pour un oscillateur sphérique chargé montre que, dans ce cas, au second ordre du calcul des perturbations et dans l'approximation dipolaire, les processus de diffusion inélastique de photons n'ont pas lieu (comparer à 14.15).

c) $\sum_m \omega_{mn}^2 |\langle m|x|n\rangle|^2 = \dfrac{1}{\mu^2}\langle n|\hat{p}_x^2|n\rangle$;

d) $\sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m|x|n\rangle|^2 = \dfrac{\hbar}{2\mu^2}\langle n|\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2}|n\rangle$,

où μ est la masse de la particule, la sommation s'effectuant sur tous les états stationnaires, $|n\rangle$ étant un état stationnaire du spectre discret.

14.19. Exprimer la section efficace de diffusion de photons de basse énergie $\hbar\omega \to 0$ par un atome dans un état stationnaire de moment nul, en fonction de la polarisabilité de cet atome.

14.20. Chercher la section efficace de l'effet photoélectrique pour un atome hydrogénoïde dans l'état fondamental. On suppose que l'énergie des photons satisfait à la condition $\hbar\omega \gg I$, où I est le potentiel d'ionisation.

14.21. Chercher la section efficace de recombinaison radiative d'un électron rapide avec un proton au repos (processus inverse de l'effet photoélectrique) avec formation d'un atome d'hydrogène dans l'état fondamental.

14.22. Chercher les sections efficaces différentielle et totale de la photodésintégration du deutéron, c'est-à-dire du processus $\gamma + \mathrm{d} \to \mathrm{p} + \mathrm{n}$.

Conseil. Pour la fonction d'onde du deutéron se servir de l'expression approchée établie dans 12.3. Considérer le proton et le neutron dans l'état final comme libres. Faire le calcul dans l'approximation dipolaire.

14.23. Chercher la section efficace différentielle du bremsstrahlung (rayonnement de freinage) d'un électron dans le champ coulombien d'un noyau. Etudier la distribution angulaire et spectrale des photons émis. L'interaction de l'électron et du noyau peut être assimilée à une perturbation.

CHAPITRE 15

EQUATIONS D'ONDE RELATIVISTES

15.1 EQUATION DE KLEIN-GORDON

15.1. Montrer que si $\Psi^{(\pm)}(\mathbf{r},t)$ est un paquet d'ondes composé de solutions particulières de l'équation de Klein-Gordon correspondant à l'énergie (ou à la pulsation) de signe déterminé (soit $\varepsilon \geq mc^2$, soit $\varepsilon \leq -mc^2$) ; alors, indépendamment de la forme concrète de cette superposition, la valeur de la grandeur

$$Q^{(\pm)} = \int \rho^{(\pm)}(\mathbf{r},t)dV = \frac{ih}{2mc^2}\int \left\{ \Psi^{(\pm)*}\frac{\partial \Psi^{(\pm)}}{\partial t} - \frac{\partial \Psi^{(\pm)*}}{\partial t}\Psi^{(\pm)} \right\} dV$$

a un signe déterminé et est constante au cours du temps.

15.2. Montrer que l'équation de Klein-Gordon d'une particule libre est invariante par rapport à la transformation *antilinéaire* suivante

$$\Psi \to \Psi_c(\mathbf{r},t) = \widehat{C}\Psi(\mathbf{r},t) \equiv \Psi^*(\mathbf{r},t).$$

La transformation $\widehat{C}$ est la *conjugaison de charge*. Elle permet de passer à des solutions $\Psi^{(-)}(\mathbf{r},t)$ de l'équation ne présentant pas de sens physique direct ($\Psi^{(-)}(\mathbf{r},t)$ étant une superposition de solutions particulières correspondant formellement aux énergies négatives) aux fonctions $\Psi_c^{(+)} = \widehat{C}\Psi^{(-)}$ qui correspondent aux énergies positives et qui s'interprètent comme des fonctions d'onde de *l'antiparticule*.

Montrer que si la fonction Ψ est une fonction propre d'un quelconque des opérateurs $\widehat{\varepsilon} = ih\frac{\partial}{\partial t}$, $\widehat{\mathbf{p}}$, $\widehat{l}_z$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$, la fonction *conjuguée de charge* Ψ_c l'est également. Comment sont liées les valeurs propres des opérateurs associés à de telles fonctions ?

15.3.

a) Quelle forme prend l'équation de Klein-Gordon pour une particule chargée de spin nul dans un champ électromagnétique extérieur avec la transformation suivante

$$\Psi \to \Psi_c(\mathbf{r},t) = \widehat{C}\Psi(\mathbf{r},t) \equiv \Psi^*(\mathbf{r},t) \ ?$$

b) Quelle transformation du champ électromagnétique doit-on effectuer simultanément à la transformation mentionnée de la fonction $\Psi(\mathbf{r}, t)$ pour que l'équation obtenue ait la même forme qu'initialement ?

c) Sur la base des résultats obtenus, interpréter la transformation $\widehat{C}$ comme une transformation de conjugaison de charge réalisant la transition de la particule à l'antiparticule (comparer avec 15.2).

15.4. Montrer qu'un champ scalaire (par rapport à la transformation de Lorentz) exerce la même action sur une particule sans spin et sur l'antiparticule qui lui correspond. Comparer avec le cas d'une particule dans un champ électromagnétique extérieur (voir 15.3).

Conseil. L'équation décrivant la particule sans spin dans un champ scalaire extérieur $U(\mathbf{r}, t)$ a la forme

$$\{c^2\widehat{\mathbf{p}}^2 + m^2c^4 + 2mc^2U\}\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi.$$

Il ne faut pas confondre le champ scalaire avec le champ électrostatique (ce dernier représente la composante temporelle d'un quadrivecteur). Dans la limite non relativiste, $U(\mathbf{r}, t)$ prend le sens de l'énergie potentielle ordinaire.

15.5. Montrer que les parités intrinsèques d'une particule sans spin et de l'antiparticule correspondante sont les mêmes.

15.6. En se basant sur la constance de la grandeur Q (voir 15.1), discuter le problème d'orthogonalité et de normalisation des fonctions $\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon}(\mathbf{r}, t)$ constituant des solutions de l'équation de Klein-Gordon qui correspondent à des valeurs déterminées de l'énergie (des deux signes) et de l'impulsion.

15.7. Montrer que pour une particule sans spin on peut conserver, dans le cas relativiste, l'interprétation ordinaire de la fonction d'onde en représentation $\mathbf{p}$ comme celle de l'amplitude de probabilité de l'impulsion (à la différence de la représentation en coordonnées, voir 15.1). Quelle est la relation des fonctions d'onde de la particule et de l'antiparticule en représentation $\mathbf{p}$ avec les solutions $\Psi^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ de l'équation de Klein-Gordon ? Comparer au cas non relativiste.

15.8. Obtenir l'expression de la valeur moyenne de l'énergie d'une particule libre sans spin dans un état décrit par la solution $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ de l'équation de Klein-Gordon.

15.9. Même question que dans le problème précédent, mais pour la valeur moyenne de l'impulsion de la particule.

15.10. Même question que dans les deux problèmes précédents, mais pour la valeur moyenne du moment de la particule.

15.11. Chercher, dans le cas relativiste, le spectre d'énergie d'une particule chargée sans spin placée dans un champ magnétique homogène.

Comparer au cas non relativiste.

15.12. Chercher les niveaux d'énergie des états s d'une particule sans spin placée dans le potentiel (voir 15.4)

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq a, \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

Quel est le spectre d'énergie de l'antiparticule dans un tel potentiel ?

Discuter les difficultés de l'interprétation du spectre d'énergie dans le cas d'un approfondissement important du puits.

15.13. Chercher les niveaux d'énergie du spectre discret d'une particule de charge $-e$ sans spin placée dans le champ coulombien d'un noyau de charge Ze (le noyau est supposé ponctuel et de masse infinie).

Dans le cas $Z\alpha \ll 1$ ($\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$), comparer le résultat obtenu à l'expression correspondante de la théorie non relativiste.

Souligner les difficultés surgissant dans l'interprétation du spectre d'énergie pour des valeurs suffisamment grandes de la charge du noyau et en expliquer la raison.

15.14. Obtenir directement à partir de l'équation de Klein-Gordon pour une particule libre
a) l'équation de Schrödinger pour la limite non relativiste ;
b) la première correction relativiste à l'équation obtenue.

15.15. Obtenir directement à partir de l'équation stationnaire de Klein-Gordon pour une particule chargée sans spin placée dans un champ électromagnétique constant :
a) l'équation de Schrödinger pour la limite non relativiste ;
b) la première correction relativiste à l'équation obtenue.

15.16. Montrer que dans un champ électrostatique suffisamment intense la particule chargée sans spin subit une attraction (au sens de la mécanique quantique) indépendamment du signe de sa charge.

15.17. Chercher, dans l'approximation de Born, l'amplitude et la section efficace différentielle de diffusion d'une particule chargée (de charge e_1) relativiste sans spin placée dans le champ coulombien du noyau de charge Ze (le noyau est supposé infiniment lourd).

Comparer au cas d'une particule non relativiste.

Indiquer les conditions de validité des résultats obtenus.

15.18. Chercher, dans l'approximation de Born, la dépendance en énergie de la section efficace de diffusion $\sigma(\varepsilon)$ d'une particule chargée sans spin placée dans le champ électrostatique extérieur $\varphi(r)$ quand $\varepsilon \to \infty$. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu et le comparer au résultat de la théorie non relativiste.

15.19. Chercher, dans l'approximation de Born, la dépendance en énergie de la section efficace de diffusion $\sigma(\varepsilon)$ d'une particule sans spin placée dans un potentiel $U(r)$ (voir conseil dans 15.4) quand $\varepsilon \to \infty$. Indiquer les conditions de validité du résultat obtenu ; le comparer au résultat de la théorie non relativiste et à celui du problème précédent.

15.2 EQUATION DE DIRAC

Dans les problèmes de ce paragraphe, on utilise la représentation suivante des matrices d'ordre quatre de Dirac :

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \qquad \beta = \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\gamma} = i\beta\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & i\boldsymbol{\sigma} \\ -i\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4 = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

où $\boldsymbol{\sigma}$, 1, 0 sont des matrices d'ordre deux : celles de Pauli, la matrice unité et la matrice zéro[1].

15.20. Parmi les opérateurs mentionnés plus bas, établir lesquels commutent avec l'hamiltonien d'une particule relativiste libre de spin $s = 1/2$ (et constituent donc des constantes du mouvement) :

1) $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$;

2) $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar}[\hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}}] = -i[\hat{\mathbf{r}} \wedge \nabla]$;

3) $\hat{\mathbf{l}}^2$;

4) $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}$;

5) $\hat{\mathbf{s}}^2$;

6) $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$;

7) $\hat{\mathbf{j}}^2$;

8) $\hat{\Lambda} = \hat{\mathbf{p}} \cdot \boldsymbol{\Sigma}$;

9) $\hat{R}$ où $\hat{R}\Psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(-\mathbf{r})$;

10) $\hat{P} \equiv \beta\hat{R}$;

11) γ_5.

Comparer au cas d'une particule libre non relativiste.

---

1 Dans les problèmes et les solutions de ce paragraphe, le symbole $\hat{}$ de l'opérateur sur les matrices $\boldsymbol{\alpha}$, β, $\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{\Sigma}$, 1, 0 est omis.

15.21. Chercher la solution de l'équation de Dirac décrivant une particule libre d'impulsion et d'énergie déterminées.

Pour définir l'état de spin de la particule, utiliser la commutativité de l'opérateur $\widehat{\Lambda} = \widehat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{\Sigma}$ avec les opérateurs $\widehat{\mathbf{p}}$ et $\widehat{H}$ (voir de même 15.26).

15.22. Chercher les composantes du quadrivecteur densité de courant d'une particule de Dirac libre dans l'état caractérisé par une valeur déterminée de son impulsion.

Comparer aux expressions correspondantes de la théorie non relativiste.

15.23. Chercher la valeur moyenne du vecteur de spin d'une particule de Dirac d'impulsion déterminée (dans ce cas l'état de spin de la particule est arbitraire). Supposer, pour simplifier, que l'impulsion est dirigée le long de l'axe z.

Comparer au résultat de la théorie non relativiste.

15.24. Etudier la transformation unitaire des bispineurs définie par l'opérateur unitaire (la matrice)

$$\widehat{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Quelle forme prend, dans la nouvelle représentation, l'opérateur spin de la particule et l'équation de Dirac pour les spineurs à deux éléments

$$\left(\Psi' = \widehat{U} \Psi \equiv \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \right) \ ?$$

15.25. On suppose connu l'état de spin d'une particule dans le système du repos, chercher le bispineur $u(\mathbf{p})$ dans le système de coordonnées dans lequel la particule a l'impulsion $\mathbf{p}$.

En utilisant le résultat obtenu, chercher la relation entre les valeurs moyennes du vecteur de spin de la particule dans les systèmes de coordonnées indiqués.

15.26. Comme on le sait (voir 15.21), pour une particule de spin $s = 1/2$, la fonction d'onde de l'état ayant une impulsion $\mathbf{p}$ et une énergie $\varepsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$ a la forme

$$\Psi_{\mathbf{p}} = u(\mathbf{p}) e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon t)} \qquad u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \dfrac{c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}.$$

Cet état est doublement dégénéré, c'est-à-dire il y a deux façon de choisir le spineur φ. Ce fait est lié à l'existence du spin. Etudier ces deux états indépendants ayant la forme φ_λ où

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \varphi_\lambda = \lambda \varphi_\lambda$$

($\mathbf{n}$ est un vecteur unitaire arbitraire, $\lambda = \pm 1$, voir 5.12 du Tome I).

Montrer l'orthogonalité des états de spin de la particule relativiste correspondant aux différentes valeurs de λ.

Compte tenu du résultat obtenu dans le problème précédent, établir le sens physique du vecteur $\mathbf{n}$ et des valeurs propres correspondantes de λ.

Quelle est la signification du vecteur $\frac{1}{2}\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi$ avec la norme $\varphi^*\varphi = 1$?

15.27. Chercher la forme explicite de la fonction d'onde de l'état d'une antiparticule correspondant à la solution de l'équation de Dirac ayant une impulsion déterminée $\mathbf{p}$ et une énergie négative $\varepsilon = -\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$ de la particule. Comparer à la fonction d'onde de l'état *physique* de la particule (d'énergie $\varepsilon \geq mc^2$ et d'impulsion déterminée).

De quels nombres quantiques (impulsion, énergie et hélicité) est douée l'antiparticule dans l'état correspondant à la solution $\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\lambda}$ de l'équation de Dirac ayant une énergie négative de la particule ?

15.28. Montrer que, pour une particule de Dirac de masse $m = 0$, l'opérateur (matrice) γ_5 commute avec l'hamiltonien de la particule libre.

Chercher les valeurs propres de l'opérateur considéré et donner leur sens physique.

15.29. Montrer que les opérateurs (matrices) $\hat{P}_\pm = 1/2(1 \pm \gamma_5)$ sont des projecteurs. Pour une particule de Dirac de masse $m = 0$, ces opérateurs commutent avec l'hamiltonien. Sur quels états de la particule et de l'antiparticule, les opérateurs mentionnés $\hat{P}_\pm$ projettent-ils ?

15.30. La description quantique du photon peut se réaliser au moyen de deux vecteurs $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ et $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ satisfaisant aux mêmes équations que l'équation de Maxwell de l'électrodynamique classique d'un champ électromagnétique libre $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ (c'est-à-dire d'ondes électromagnétiques dans le vide).

Montrer que ces équations peuvent être représentées sous une forme analogue aux équations de Dirac de spineurs à deux éléments (il faut poser que la masse du photon $m = 0$ et son spin $s = 1$).

15.31. Chercher la limite non relativiste (aux termes d'ordre "$1/c$" compris près) des expressions de la densité de charge et de courant d'une particule de Dirac plongée dans un champ électromagnétique extérieur.

15.32. L'hamiltonien d'une particule de spin $s = 1/2$ située dans un champ électromagnétique extérieur est de la forme

$$\hat{H} = c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}) + mc^2\beta + \frac{i\kappa}{2}F_{\mu\nu}\beta\gamma_\mu\gamma_\nu,$$

où κ est un certain paramètre caractérisant la particule et $F_{\mu\nu}$ le tenseur du champ électromagnétique.

Après l'étude de la limite non relativiste (aux termes d'ordre "$1/c$" compris près) de l'équation d'onde[2]

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \widehat{H}\Psi,$$

établir le sens physique du paramètre κ, c'est-à-dire obtenir la relation qui le lie aux caractéristiques électromagnétiques de la particule. Comparer au cas de particules chargées de Dirac, de l'électron et du muon, dont l'hamiltonien est de la forme

$$\widehat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + mc^2\beta + eA_0.$$

15.33. Chercher le spectre d'énergie d'une particule chargée de Dirac plongée dans un champ magnétique homogène.

15.34. Chercher, au premier ordre du calcul des perturbations, la section efficace différentielle de diffusion d'une particule de Dirac dans le champ coulombien d'un noyau de charge Ze, supposé infiniment lourd.

Conseil. Utiliser le calcul des perturbations pour les transitions au sein d'un spectre continu sous l'effet d'une perturbation stationnaire ; voir de même 15.37.

15.35. Chercher, au premier ordre du calcul des perturbations, la dépendance en énergie de la section efficace de diffusion $\sigma(\varepsilon)$ d'une particule chargée de Dirac dans un champ électrostatique extérieur $A_0(r)$ quand $\varepsilon \to \infty$.

Comparer au résultat obtenu dans 15.18.

15.36. Chercher les fonctions de Green $\widehat{G}^{(\pm)}_{\varepsilon\,;\,\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ de l'équation stationnaire de Dirac pour une particule libre d'énergie $\varepsilon \geq mc^2$, satisfaisant à l'équation

$$(\widehat{H} - \varepsilon)\widehat{G}_\varepsilon \equiv (-ihc\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla} + mc^2\beta - \varepsilon)\widehat{G}_\varepsilon = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

et qui prend, pour $r \to \infty$, la forme asymptotique

$$\widehat{G}^{(\pm)} \propto \frac{1}{r}e^{\pm ikr}, \qquad k = \sqrt{\frac{\varepsilon^2 - m^2c^4}{\hbar^2c^2}}.$$

Chercher également la fonction de Green $\widehat{f}^{(\pm)}_\varepsilon$ de l'équation de Dirac écrite sous la forme symétrique :

$$(ic\widehat{p} + mc^2)\Psi_\varepsilon = 0, \qquad \widehat{p} \equiv ih\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla} + \frac{i\varepsilon}{c}\gamma_4.$$

---

2 Cette équation peut etre écrite sous une forme explicitement relativiste et invariante:

$$\left(ic\widehat{p} + \frac{i\kappa}{2}F_{\mu\nu}\gamma_\mu\gamma_\nu + mc^2\right)\Psi = 0, \qquad \left(\widehat{p} \equiv \widehat{p}_\mu\gamma_\mu = \widehat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\gamma} - \frac{\hbar}{c}\gamma_4\frac{\partial}{\partial t}\right).$$

15.37. Chercher, dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion d'une particule de Dirac dans un champ électromagnétique extérieur constant.

Appliquer le résultat obtenu au cas d'un champ électrostatique $A_0 = Ze/r$ et le comparer avec 15.34.

CHAPITRE 16

LOIS DE CONSERVATION

16.1 CINÉMATIQUE DES DÉSINTÉGRATIONS ET DES COLLISIONS

16.1. Une particule au repos A se désintègre en trois particules a : A $\rightarrow$ 3a. Soit Q_0 l'énergie de désintégration[1].

Quelles sont les énergies cinétiques minimale et maximale des particules produites lors de cette désintégration ?

16.2. Une particule au repos A se désintègre en trois particules a : A $\rightarrow$ 3a. L'énergie de désintégration vaut Q_0. Comme $\sum_n \varepsilon_n = Q_0$ où ε_n est l'énergie cinétique de la $n^{\text{ème}}$ particule, on peut faire correspondre à la désintégration un point situé à l'intérieur d'un triangle équilatéral de hauteur $h = Q_0$ tel que les distances entre ce point et les côtés du triangle équilatéral soient égales aux énergies cinétiques des particules. Toutefois, en vertu de la loi de conservation de l'impulsion dans la désintégration, on ne peut à tout point de l'intérieur du triangle faire correspondre une désintégration de la particule A permise par la cinématique.

Montrer que les points du triangle auxquels on peut faire correspondre une désintégration A $\rightarrow$ 3a sont à l'intérieur du cercle inscrit dans le triangle.

16.3. Soient $\mathbf{p}_a$, E_a et $\mathbf{p}_b$, E_b les impulsions et les énergies cinétiques des particules a et b dans un système de coordonnées donné.

Montrer que la combinaison suivante de ces grandeurs :

$$s = -(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E_a + E_b),$$

a la même valeur dans tous les référentiels d'inertie, c'est-à-dire que cette grandeur est invariante par rapport aux transformations galiléennes.

---

1 On appelle *énergie de désintégration* la différence entre l'énergie de la particule avant désintégration et l'énergie des particules produites après la désintégration.

En supposant que les particules a et b sont des particules produites lors de la désintégration d'une particule A : $A \to a + b$, chercher la relation entre s et l'énergie de désintégration Q_0.

16.4. Même question que dans le problème précédent, mais pour la grandeur

$$t = -(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a - m_b)(E_a - E_b).$$

16.5. Lors du choc entre la particule a et la particule au repos b, dans la réaction $a + b \to a + b$, la particule b est excitée. L'énergie d'excitation vaut Q_0.

Chercher la valeur minimale (dite de seuil) de l'énergie cinétique de la particule a pour exciter la particule b. Etudier les cas limites $m_a \ll m_b$ et $m_a \gg m_b$.

16.6. A la suite de la collision des particules a et b, la particule b est excitée. L'énergie d'excitation vaut Q_0.

Construire le diagramme permettant de déterminer graphiquement les relations entre les impulsions des particules avant et après le choc dans le système du centre de masse, ainsi que dans le système du laboratoire. Quelle est la différence entre le diagramme d'un tel processus et celui obtenu pour une diffusion élastique (voir [5]) ?

16.7. Etudier les grandeurs suivantes caractérisant la cinématique d'une collision élastique entre les particules a et b :

$$s = -(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E_a + E_b), \qquad t = -(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}'_a)^2,$$
$$u = -(\mathbf{p}_a - \mathbf{p}'_b)^2 + 2(m_a - m_b)(E_a - E'_b),$$

où $\mathbf{p}_a$, E_a et $\mathbf{p}'_a$, E'_a sont l'impulsion et l'énergie cinétique de la particule a avant et après le choc (notations analogues pour la particule b).

Montrer que les valeurs de ces grandeurs sont indépendantes du système de référence, c'est-à-dire qu'elles sont invariantes par rapport aux transformations galiléennes.

Exprimer s, t, u en fonction de l'énergie cinétique des particules et de l'angle de diffusion dans le système du centre de masse.

Est-ce que ces trois grandeurs sont indépendantes ?

16.8. Soit la collision entre les particules A et B : $A + B \to a + b + c$, où il y a formation de trois particules.

Deux mécanismes pour ce processus peuvent être envisagés :

1) les particules a et b sont les produits de désintégration d'une particule instable R, c'est-à-dire que le processus $A + B \to a + b + c$ s'effectue en deux étapes

$$A + B \to R + c$$
$$\hookrightarrow a + b$$

où l'énergie de désintégration de $R \to a + b$ est Q_0.

2) toutes les particules dans l'état final se forment indépendamment, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de corrélation entre leurs impulsions (excepté la corrélation cinématique régie par les lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion).

Comment, à partir de la distribution des particules en impulsions dans l'état final, peut-on distinguer ces deux mécanismes ?

Conseil. Etudier la distribution suivant la grandeur

$$s = -(\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E_a + E_b),$$

16.2 Constantes du mouvement[2]

16.9. Montrer que si une transformation de coordonnées du système conserve l'hamiltonien, l'opérateur de cette transformation commute avec l'hamiltonien. En particulier, en étudiant pour un système de N particules les transformations de coordonnées suivantes :
a) translation $\mathbf{r}_n \to \mathbf{r}'_n = \mathbf{r}_n + \mathbf{a}$;
b) rotation d'angle $\boldsymbol{\varphi}_0 = \varphi_0 \mathbf{n}_0$ ($\mathbf{n}_0$ étant un vecteur unitaire le long de l'axe de rotation du système de coordonnées, φ_0 la grandeur de l'angle de rotation) ;
c) réflexion $\mathbf{r}_n \to \mathbf{r}'_n = -\mathbf{r}_n$; $n = 1, 2, \ldots, N$,

montrer que l'invariance de l'hamiltonien par rapport à ces transformations entraîne l'existence dans le système concerné des constantes du mouvement : l'impulsion, le moment orbital et la parité.

16.10. Indiquer quelles grandeurs mécaniques ou quelles combinaisons de ces grandeurs (énergie, composantes ou norme du moment, composantes ou norme de l'impulsion, parité) sont conservées pour un système de N particules sans spin dans les potentiels suivants :
1) mouvement libre ;
2) la source du potentiel est un cylindre homogène de longueur infinie ;
3) la source du potentiel est un plan homogène infini ;
4) la source du potentiel est une sphère homogène ;
5) la source du potentiel est un demi-plan homogène infini ;
6) la source du potentiel est constituée de deux points ;
7) le potentiel est homogène et variable ;
8) la source du potentiel est un fil rectiligne chargé uniformément avec une charge variable ;
9) la source du potentiel est un ellipsoïde homogène ;

2 Les constantes du mouvement ont servi à la résolution de nombreux problèmes d'autres chapitres (voir, par exemple, l'utilisation systématique du moment dans les problèmes à symétrie centrale).

Dans les problèmes de ce paragraphe on attache une attention particulière à la question de la *recherche* des constantes du mouvement en rapport avec des propriétés particulières de symétrie des systèmes quantiques étudiés (sans avoir à préciser le type d'interaction).

Certains problèmes d'autres chapitres, y compris du Tome I (tels que 1.29, 4.26, 4.27, 6.19 et autres) pourraient être traités dans ce paragraphe.

10) la source du potentiel est une ligne hélicoïdale cylindrique homogène infinie ;
11) la source du potentiel est un cône homogène :
    a) à une nappe,
    b) à deux nappes ;
12) la source du potentiel est un tore circulaire.

16.11. Montrer que si $\widehat{f}_1$ et $\widehat{f}_2$ sont des constantes du mouvement d'un système, $\widehat{g}_1 = (\widehat{f}_1\widehat{f}_2 + \widehat{f}_2\widehat{f}_1)$ et $\widehat{g}_2 = -i(\widehat{f}_1\widehat{f}_2 - \widehat{f}_2\widehat{f}_1)$ sont aussi des constantes du mouvement.

16.12. Montrer que si, pour un système, P_x et J_z sont des constantes du mouvement, P_y est alors également une constante du mouvement.

Interpréter le résultat obtenu sur la base des propriétés de symétrie du système.

16.13. Montrer que si, pour un système, J_x et J_y sont des constantes du mouvement, J_z et, donc $\mathbf{J}^2$ sont aussi des constantes du mouvement.

Interpréter le résultat obtenu sur la base des propriétés de symétrie du système.

16.14. L'hamiltonien d'une particule de spin $s = 1/2$ est de la forme :

a) $\widehat{H} = \dfrac{\mathbf{p}^2}{2m} + U_0(r) + U_1(r)(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widehat{\mathbf{l}})$;

b) $\widehat{H} = \dfrac{\mathbf{p}^2}{2m} + U_0(r) + U_1(r)\dfrac{(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widehat{\mathbf{r}})}{r}$.

Trouver les constantes du mouvement.

Chercher la dépendance spin-angulaire des fonctions d'onde des états stationnaires du spectre discret.

16.15. Une particule neutre de spin $s = 1/2$ possède un moment magnétique de spin μ_0 (un neutron, par exemple) ; elle est plongée dans un champ magnétique ayant une symétrie axiale de la forme (en coordonnées cylindriques) :

a) $B_\rho = B_\varphi = 0$, $B_z = B(\rho)$;

b) $B_\rho = B_z = 0$, $B_\varphi = B(\rho)$.

Trouver les constantes du mouvement.

16.16. Montrer que, pour une particule plongée dans un champ homogène, l'opérateur

$$\widehat{\mathbf{G}} = \widehat{\mathbf{p}} - \mathbf{F}_0 t$$

($\mathbf{F}_0$ est la force agissant sur la particule) est une constante du mouvement.

Quelle est la signification physique de la valeur moyenne $\langle \mathbf{G} \rangle$? Comparer au résultat de la mécanique classique.

16.3 Conservation du moment et de la parité dans les désintégrations et les collisions. Isospin[3]

16.17. Etablir quelles sont les restrictions que l'on peut mettre sur les nombres quantiques (spin J_{A_0} et parité intrinsèque P_{A_0}) d'une particule neutre A_0 sachant que cette particule peut se désintégrer en deux pions ($J^P_\pi = 0^-$)[4]. Etudier les deux cas suivants :
a) $A_0 \to \pi^+\pi^-$;
b) $A_0 \to 2\pi^0$.

En supposant que la particule A_0 est au repos et se trouve dans un état ayant une projection du spin $J_z = M$ sur l'axe z, chercher la distribution angulaire des produits de désintégration.

16.18. Soit une particule vectorielle V ($J^P = 1^-$) se désintégrant en deux pions : $V \to \pi^+\pi^-$, chercher la forme la plus générale de la distribution angulaire des produits de désintégration dans le système où la particule V est au repos.

L'état de la particule V est décrit par une matrice de densité de polarisation $\rho_{mm'}$, où m est la projection du spin de la particule sur l'axe z.

16.19. Dans la réaction $\pi^- + d \to n + n$, la capture du pion lent π^- ($J_\pi = 0$) s'effectue avec le deutérium dans l'état fondamental et avec conservation de la parité.

En prenant en compte que les parités intrinsèques du proton et du neutron sont les mêmes et que les nombres quantiques du deutéron sont $J^P_d = 1^+$, chercher la parité intrinsèque du pion π^-.

16.20. Quelle est la parité intrinsèque de la particule τ de spin $J_\tau = 0$ si cette dernière se désintègre en trois pions : $\tau \to 3\pi$ (la parité intrinsèque du pion est négative) ? Est-ce que cette particule peut se désintégrer avec conservation de la parité en deux pions ?

16.21. Chercher la distribution angulaire des particules produites lors de la désintégration d'une particule B de spin $J_B = 1/2$: $B \to \pi N$ dans les cas suivants :
a) la parité est conservée lors de la désintégration et la particule B a une parité négative ;
b) la parité est conservée lors de la désintégration et la particule B a une parité positive ;
c) la parité n'est pas conservée lors de la désintégration.

---

3 Dans tous les problèmes de ce paragraphe, sauf précision contraire, on suppose que dans les processus étudiés, on a conservation de l'isospin et de la parité.

4 Toutes les particules appartenant à un même multiplet d'isospin (par exemple, le proton et le neutron, π^+, π^0, π^-, etc.) possèdent le même spin J et la même parité intrinsèque P.

On suppose que l'état de spin du nucléon produit n'est pas fixé.

16.22. Soit A et B des particules ayant les modes de désintégration suivants : $A \to 2\pi$, $B \to \pi N$ où il n'y a pas conservation de la parité.

Peut-on établir directement à partir de l'analyse des distributions angulaires des produits de désintégration la non-conservation de la parité dans ces désintégrations ? On peut utiliser le fait que les particules produites lors de la désintégration peuvent être polarisées, c'est-à-dire que la valeur moyenne de leur spin est différente de zéro.

16.23. Montrer que les polarisations des photons produits lors de la désintégration d'une particule psendo-scalaire ($J^P = 0^-$) en deux photons (par exemple, $\pi \to 2\gamma$) sont orthogonales alors que les polarisations des photons produits lors de la désintégration d'une particule scalaire ($J^P = 0^+$) sont parallèles.

16.24. Lors de la collision d'un pion avec un nucléon au repos, la réaction $\pi + N \to \pi + B$ produit une particule B instable dont le spin est $J_B \gg 1$.

Chercher la distribution angulaire des produits de désintégration de cette particule $B \to \pi N$ (dans son système propre) dans le cas où l'on sélectionne les réactions $\pi N \to \pi B$ pour lesquels l'impulsion de la particule B a la même direction ou la direction opposée que le pion incident.

Conseil. Comme $J_B \gg 1$ on peut dans ce problème négliger le spin du nucléon.

16.25. La charge (en unité de charge du proton e) des particules d'un même multiplet d'isospin peut s'exprimer en fonction de la valeur de la composante de l'isospin T_3 de la façon suivante :

$$q = \frac{Y}{2} + T_3,$$

où Y est appelée hypercharge (pour un nucléon $Y = 1$, pour un pion $Y = 0$, etc.).

Montrer que la conservation de l'isospin entraîne automatiquement la conservation de l'hypercharge.

16.26. Chercher la forme la plus générale de l'opérateur d'interaction pion-nucléon $\widehat{U}$. Comment les opérateurs pour les états avec une valeur déterminée de l'isospin ($T = 1/2, 3/2$), $\widehat{U}(T = 1/2)$ et $\widehat{U}(T = 3/2)$, sont-ils liés à l'opérateur $\widehat{U}$?

Exprimer l'opérateur $\widehat{U}$ en termes de $\widehat{U}(T = 1/2)$ et de $\widehat{U}(T = 3/2)$.

16.27. Même question que dans le problème précédent, mais pour un système composé de deux pions.

Exprimer l'opérateur $\widehat{U}$ en fonction des valeurs prises par cet opérateur pour les états ayant une valeur déterminée de l'isospin ($T = 0, 1, 2$).

16.28. Pour un système de deux pions indiquer la forme dans l'espace d'isospin de l'opérateur interaction coulombienne des pions.

16.29. Même question que dans le problème précédent, mais pour l'interaction coulombienne dans le système πN.

16.30. L'invariance isotopique suppose que les particules appartenant à un même multiplet d'isospin peuvent être vues comme des particules identiques se trouvant dans des états qui se différencient par la valeur de la composante T_3 de l'isospin (et donc de la charge). Dans ce cas, le principe d'indiscernabilité de particules identiques, exigeant une symétrie de la fonction d'onde relativement à la permutation des variables de deux de ces particules, doit être étendu aux particules d'un même multiplet d'isospin.

Etablir quelles restrictions doivent être imposées aux valeurs possibles de l'isospin total d'un système de deux pions avec une valeur déterminée L du moment orbital du mouvement relatif.

16.31. Soit un système composé de deux mésons π^0. Chercher les probabilités $w(T)$ des différentes valeurs T de l'isospin total du système et la valeur moyenne $\overline{\widehat{\mathbf{T}}^2}$.

Conseil. Utiliser les résultats obtenus dans les problèmes 3.37 et 3.39 du Tome I.

16.32. Chercher la probabilité $w(T)$ des différentes valeurs de l'isospin total T du système pion-nucléon et la valeur moyenne $\overline{\widehat{\mathbf{T}}^2}$ pour les états suivants:

$$\pi^+\mathrm{p}, \quad \pi^+\mathrm{n}, \quad \pi^0\mathrm{p}, \quad \pi^0\mathrm{n}, \quad \pi^-\mathrm{p}, \quad \pi^-\mathrm{n}.$$

Conseil. Utiliser le résultat obtenu dans le problème 3.37 du Tome I.

16.33. Une particule neutre f^0 d'isospin $T = 0$ se désintègre en deux pions : $f^0 \to 2\pi$. Les canaux de désintégration sont : $f^0 \to \pi^+\pi^-$ et $f^0 \to 2\pi^0$. Chercher la relation entre les probabilités de désintégration de la particule f^0 suivant ces deux canaux.

16.34. Montrer que la partie isospin d'une fonction d'onde d'un système de trois pions dans un état avec un isospin total $T(3\pi) = 0$ présente une symétrie par rapport à la permutation des variables d'isospins des pions pris deux à deux et établir la nature de cette symétrie.

Sur la base de ce résultat, montrer que la particule neutre ω^0 d'isospin $T = 0$ ne peut pas se désintégrer en trois pions, c'est-à-dire que la désintégration $\omega^0 \to 3\pi$ est interdite.

16.35. La particule Δ d'isospin $T = 3/2$ ayant les états de charge Δ^{++}, Δ^+, Δ^0, Δ^-, correspondant aux valeurs $+3/2$, $+1/2$, $-1/2$, $-3/2$ de la projection T_3 de l'isospin, se désintègre en un pion et un nucléon: $\Delta \to \pi$N.

Indiquer les différents canaux de désintégration autorisés pour les états de charge Δ et chercher la relation entre les probabilités de désintégration suivant ces canaux.

16.36. Même question que dans le problème précédent mais pour la particule N^* d'isospin $T = 1/2$ dont les états de charge sont $N^{*+}(T_3 = 1/2)$, $N^{*0}(T_3 = -1/2)$ et se désintégrant en un pion et un nucléon: $N^* \to \pi N$.

16.37. Montrer que

$$\frac{d\sigma(p + p \to d + \pi^+)}{d\sigma(n + p \to d + \pi^0)} = 2,$$

où $d\sigma$ est la section efficace différentielle des réactions prises pour les mêmes énergies, les mêmes directions de l'impulsion et les mêmes spins.

16.38. Montrer que

$$\frac{d\sigma(p + d \to d + n + \pi^+)}{d\sigma(p + d \to d + p + \pi^0)} = 2,$$

où $d\sigma$ a le même sens que dans le problème précédent.

16.39. En supposant que la diffusion des pions par des nucléons s'effectue essentiellement en passant par l'état intermédiaire πN d'isospin total $T = 3/2$ (dans ce cas l'interaction dans l'état avec $T = 1/2$ est négligeable), chercher les relations entre les sections différentielles des réactions suivantes :
(I) $\pi^+ + p \to \pi^+ + p$,
(II) $\pi^- + p \to \pi^0 + n$,
(III) $\pi^- + p \to \pi^- + p$.

16.40. En s'appuyant sur la symétrie des couplages nucléon-nucléon et pion-nucléon, comparer les sections efficaces différentielles des processus

$$n + p \to p + p + \pi^-, \qquad n + p \to n + n + \pi^+.$$

Solutions

CHAPITRE 9

APPROXIMATION QUASI-CLASSIQUE

9.1. Les niveaux E_n se trouvent grâce à la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p(x)dx = \pi(n+1/2), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{1}$$

où $p(x) = \sqrt{2m(E_n - U(x))}$ et a et b sont les points de rebroussement définis par la condition $p(a) = p(b) = 0$. Pour un oscillateur ($U = kx^2/2$, $b = -a = \sqrt{2E_n/k}$), le premier membre de (1) s'écrit ($t = x\sqrt{k/2E_n}$, $\omega = \sqrt{k/m}$)

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b p dx = \frac{2E_n}{\hbar\omega}\int_{-1}^{1}\sqrt{1-t^2}dt = \frac{\pi E_n}{\hbar\omega},$$

de sorte que

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2), \tag{2}$$

ce qui coïncide avec la valeur exacte, bien que la validité du résultat (2) soit formellement limitée par la condition $n \gg 1$.

9.2. A droite du point de rebroussement b, la fonction d'onde prend la forme quasi-classique habituelle

$$\Psi(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^x |p(x)|dx\right), \qquad x > b. \tag{1}$$

A cette fonction d'onde correspond, dans le domaine $x < b$, une fonction d'onde de la forme

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^b p(x)dx + \frac{\pi}{4}\right), \qquad x < b. \tag{2}$$

Rappelons que la valeur de la phase $\pi/4$ dans l'expression (2) de la fonction d'onde s'obtient par raccordement des solutions quasi-classiques (1) et (2) de l'équation de

Schrödinger au voisinage du point $x = b$ (où ces solutions ne sont plus valables), à l'aide de la solution exacte de l'équation de Schrödinger dans ce domaine, avec l'hypothèse que le potentiel peut être remplacé par un potentiel linéaire [1].

Pour le potentiel considéré, la solution quasi-classique (2) est valable jusqu'au point de rebroussement gauche $x = 0$ et la condition $\Psi(0) = 0$ définit la règle de quantification cherchée

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^b p(x)dx + \frac{\pi}{4} = \pi(n+1), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots,$$

soit

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^b \sqrt{2m[E_n - U(x)]}dx = \pi(n + 3/4), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots, \tag{3}$$

(notons que la condition de quantification (3) peut être également obtenue à partir de la règle de Bohr-Sommerfeld appliquée au potentiel symétrique $\widetilde{U}(x) = U(|x|)$, si l'on utilise le résultat du problème 2.12 du Tome I).

9.3. En utilisant la formule (3) du problème précédent avec $U(x) = mgx$, on obtient

$$E_n = \left(\frac{9\pi^2}{8}\right)^{1/3} (mg^2\hbar^2)^{1/3}(n + 3/4)^{2/3}. \tag{1}$$

L'expression (1), obtenue dans le cadre de l'approximation quasi-classique, est valable pour $n \gg 1$. Cependant, en général, les résultats quasi-classiques pour les niveaux d'énergie ne diffèrent pas trop des valeurs exactes, même pour $n \sim 1$. Par exemple, dans ce problème, la formule (1) pour $n = 0$ donne $E_0 = 1,84(mg^2\hbar^2)^{1/3}$, alors que la valeur exacte de l'énergie de l'état fondamental vaut $1,86(mg^2\hbar^2)^{1/3}$.

9.4. En utilisant la règle de quantification dans le cas quasi-classique

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2m[E_n - U_0(|x/a)^\nu]}dx = \pi(n + 1/2),$$

et après des transformations simples, on obtient

$$E_n = \left(\frac{\pi\hbar(n + 1/2)}{2\sqrt{2m}C_\nu a}\right)^{2\nu/(\nu+2)} U_0^{2/(\nu+2)}, \tag{1}$$

où

$$C_\nu = \int_0^1 \sqrt{1 - t^\nu}dt.$$

En utilisant l'expression (1), on obtient ($n \gg 1$)

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n \approx \frac{\partial E_n}{\partial n} \approx E_n \frac{2\nu}{n(\nu + 2)},$$

et comme $E_n \propto n^{2\nu/(\nu+2)}$, pour $2\nu/(\nu+2) > 1$, c'est-à-dire pour $\nu > 2$, la distance entre les niveaux voisins croît avec n alors que pour $\nu < 2$ cet écartement diminue ; pour $\nu = 2$ (c'est-à-dire pour un oscillateur) les niveaux sont équidistants.

La densité d'états du spectre discret est égale à

$$g(E) = \frac{1}{\Delta E_n} = \frac{n(\nu+2)}{2\nu E_n} \propto E^{(2-\nu)/2\nu}.$$

9.5. Dans la règle quasi-classique de quantification des niveaux

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{a(E)}^{b(E)} \sqrt{E_n - U(x)}\,dx \approx n\pi,$$

on peut assimiler de façon formelle n à une fonction de la variable E. Cette fonction $n(E)$ est égale au nombre d'états du spectre discret avec une énergie inférieure à E et sa dérivée par rapport à l'énergie E donne la densité d'états du spectre discret :

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = \frac{\sqrt{2m}}{2\pi\hbar} \int_{a(E)}^{b(E)} \frac{dx}{\sqrt{E - U(x)}} = \frac{1}{\pi\hbar} \int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \frac{1}{\hbar\omega(E)}, \tag{1}$$

où $\omega(E)$ a une signification simple : $T = 2\pi/\omega$ est la période du mouvement d'une particule classique d'énergie E dans le potentiel considéré. Vu que la densité d'états du spectre discret vaut $g(E) = 1/\Delta E$, où ΔE est l'écartement entre les niveaux voisins, selon (1), $\Delta E = \hbar\omega(E)$.

9.6. La condition de validité de l'approche quasi-classique pour $x \to x_0$ s'écrit :

$$\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| \approx \hbar \left|\frac{d}{dx}\sqrt{\frac{|x-x_0|^\nu}{2m\alpha}}\right| = \frac{\hbar\nu}{2\sqrt{2m\alpha}}|x-x_0|^{(\nu-2)/2} \ll 1. \tag{1}$$

Elle est satisfaite si $\nu > 2$ et ne l'est pas si $\nu < 2$. Pour $\nu = 2$, la solution de l'équation de Schrödinger aux voisinage du point x_0 n'a une forme quasi-classique que si $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$.

9.7. L'équation de Schrödinger avec $E = 0$ pour des états s ($l = 0$) a la forme ($\Psi = \chi(r)/r$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} - \frac{\alpha}{r^\nu}\chi = 0.$$

La condition de validité de l'approche quasi-classique s'écrit

$$\hbar\left|\frac{d}{dr}\frac{1}{p(r)}\right| = \frac{\hbar\nu}{2\sqrt{2m\alpha}} r^{(\nu-2)/2} \ll 1. \tag{1}$$

Pour $\nu > 2$ la condition (1) est satisfaite pour $r \ll (\sqrt{m\alpha}/\nu\hbar)^{2/(\nu-2)}$, autrement dit l'approche quasi-classique n'est valable qu'à de faibles distances ; pour $\nu < 2$, au contraire, elle est valable à de grandes distances $r \gg (\sqrt{m\alpha}/\nu\hbar)^{2/(\nu-2)}$. Pour $\nu = 2$,

si $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$ l'approximation quasi-classique est valable dans tout l'espace ; pour $\sqrt{m\alpha} \lesssim \hbar$ l'approche quasi-classique n'est, en général, pas applicable.

9.8. Ici, l'approche quasi classique ne peut être utilisée que si $\sqrt{m\alpha} \gg \hbar$ (comparer à 9.7). Si cette condition est satisfaite, on peut appliquer l'approximation quasi-classique pour tout $x \geq a$ (pour $x < a$, $\Psi \equiv 0$), à l'exception d'une bande étroite au voisinage du point de rebroussement droit $x = b = \sqrt{\alpha/|E|}$. Les niveaux d'énergie peuvent être déterminés à l'aide de la règle de quantification établie dans le problème 9.2, c'est-à-dire

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m\left[-|E_n| + \frac{\alpha}{x^2}\right]}dx = \pi(n + 3/4), \qquad (E_n = -|E_n| < 0). \tag{1}$$

Après le changement de variable $z = \sqrt{1 - |E_n|x^2/\alpha}$, l'intégrale de cette expression se calcule sans peine, et elle prend la forme

$$\sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\left(-z_0 + \frac{1}{2}\ln\frac{1+z_0}{1-z_0}\right) = \pi(n + 3/4), \tag{2}$$

où

$$z_0 = \sqrt{1 - a^2|E_n|/\alpha}. \tag{3}$$

On ne peut obtenir, à partir des relations (2) et (3), l'expression explicite de $|E_n|$ que pour $|E_n| \ll \alpha/a^2$ et $|E_n| \approx \alpha/a^2$. Dans le premier cas (niveaux élevés du spectre) on obtient après un développement limité ($|E_n|a^2/\alpha \ll 1$) :

$$\sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\left(-1 + \ln 2 + \frac{1}{2}\ln\frac{\alpha}{a^2|E_n|} + O\left(\frac{a^2|E_n|}{\alpha}\right)\right) = \pi(n + 3/4),$$

d'où

$$E_n \approx -\frac{4\alpha}{a^2}\exp\left\{-\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m\alpha}}(n + 3/4) - 2\right\}. \tag{4}$$

Il s'ensuit de l'expression (4) que la distance entre les niveaux élevés du spectre (dont le nombre est infiniment grand) diminue de façon exponentielle avec n, et la densité d'états du spectre discret (comparer à 9.5) pour $|E| \to 0$ croît comme $|E|^{-1}$.

On obtient la forme explicite de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$ en utilisant les expressions générales des fonctions d'onde à droite et à gauche du point de rebroussement droit, établies dans 9.2, et en procédant au changement de variable indiqué plus haut pour le calcul de l'intégrale $\int p(x)dx$.

9.9. Cherchons dans l'approximation quasi-classique la forme de la fonction $\chi(r)$ liée à la fonction d'onde Ψ_{nrlm} par la relation $\chi = r\Psi_{nr00}$. Cette fonction satisfait à l'équation de Schrödinger unidimensionnelle avec le potentiel $U = -\alpha/r$ et la condition limite $\chi(0) = 0$. Les points de rebroussement sont $r = a = 0$ et $r = b = \alpha/|E|$.

La solution quasi-classique à droite du point de rebroussement droit s'écrit

$$\chi_{qc} = \frac{C}{2\sqrt{|p(r)|}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_b^r |p(r)|dr\right), \qquad r > b \qquad \left(p = \sqrt{2m\left(-|E| + \frac{\alpha}{r}\right)}\right).$$

A cette solution correspond, pour $r < b$, la fonction d'onde

$$\chi_{qc} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_r^b p(r)dr + \frac{\pi}{4}\right), \qquad r < b. \tag{1}$$

De plus, pour que cette expression soit valable, il faut que la condition de validité de l'approche quasi-classique soit satisfaite ; mais dans un champ coulombien, à des petites distances ($r \to 0$), cette condition n'est pas remplie (voir, par exemple, 9.6 et 9.7). Pour utiliser la condition limite $\chi(0) = 0$ (qui détermine le spectre d'énergie) il faut raccorder la solution quasi-classique (1) à la solution exacte de l'équation de Schrödinger pour r proche de 0 (si l'on utilise simplement $\chi_{qc}(0) = 0$, le résultat obtenu pour les niveaux d'énergie est moins précis).

Pour $r \ll \alpha/|E|$ l'équation de Schrödinger prend la forme

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\widetilde{\alpha}}{r}\chi = 0, \qquad \widetilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

La solution de cette équation satisfaisant à la condition $\chi(0) = 0$ s'exprime au moyen de la fonction de Bessel (voir, par exemple, [12])

$$\chi(r) = A\sqrt{r}J_1(2\sqrt{\widetilde{\alpha}r}),$$

qui, pour $\sqrt{\widetilde{\alpha}r} \gg 1$, prend la forme asymptotique

$$\chi(r) \approx A\sqrt[4]{\frac{r}{\pi^2\widetilde{\alpha}}} \sin\left(2\sqrt{\widetilde{\alpha}r} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{2}$$

La solution quasi-classique de l'équation de Schrödinger pour $r < b$ peut manifestement être aussi représentée (de même que (1)) sous la forme

$$\chi_{qc} = \frac{\widetilde{C}}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^r p(r)dr + \gamma\right). \tag{3}$$

Pour les valeurs de r dans l'intervalle défini par les conditions

$$r \ll \alpha/|E|, \qquad 1/\sqrt{\widetilde{\alpha}} \ll \sqrt{r}, \tag{4}$$

il vient $|d\chi/dr| \sim (\widetilde{\alpha}r)^{-1/2} \ll 1$, c'est-à-dire que l'approche quasi-classique est valable et la fonction d'onde (3), compte tenu de la relation $p(r) \approx \sqrt{2m\alpha/r} = \hbar\sqrt{\widetilde{\alpha}/r}$ vérifiée dans l'intervalle (4), prend la forme

$$\chi(r)_{qc} = \widetilde{C}\left(\frac{r}{\widetilde{\alpha}\hbar^2}\right)^{1/4} \sin\left(2\sqrt{\widetilde{\alpha}r} + \gamma\right). \tag{5}$$

Dans l'intervalle (4), la solution exacte de l'équation de Schrödinger a la forme (2) et la comparaison des expressions (2) et (5) des fonctions d'onde permet d'obtenir la valeur du paramètre $\gamma = -\pi/4$. Quant à la condition de coïncidence des expressions quasi-classiques (1) et (3) des fonctions d'onde, elle donne la relation

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^r p(r)dr + \gamma + \frac{1}{\hbar}\int_r^b p(r)dr + \frac{\pi}{4} \equiv \frac{1}{\hbar}\int_0^b \sqrt{2m\left(\frac{\alpha}{r} - |E_{n_r}|\right)}dr = \pi(n_r + 1), \quad (6)$$

qui constitue la condition de quantification des niveaux d'énergie des états s des particules dans un champ coulombien en approximation quasi-classique ($n_r = 0, 1, \ldots$ étant le nombre quantique radial).

A partir de la relation (6), on obtient

$$E_{n_r} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n_r + 1)^2}, \quad (7)$$

ce qui coïncide avec la valeur exacte obtenue pour n_r quelconque, bien que la condition formelle de validité de l'expression (7) (existence de l'intervalle (4), utilisé pour le raccordement des solutions exacte et quasi-classique) exige comme d'habitude que $n_r \gg 1$.

9.10. Le problème se résout de façon analogue au précédent. La solution quasi-classique de l'équation de Schrödinger, dans un domaine de mouvement fini d'une particule classique, est de la forme (comparer à l'expression (3) du problème précédent)

$$\chi_{qc} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^r p(r)dr + \gamma\right), \qquad p(r) = \sqrt{2m\left(-|E| + \frac{\alpha}{r^\nu}\right)}. \quad (1)$$

L'équation de Schrödinger aux faibles distances, $r^\nu \ll \alpha/|E|$, prend la forme

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\widetilde{\alpha}}{r^\nu}\chi = 0, \qquad \widetilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

Sa solution, satisfaisant à la condition limite $\chi(0) = 0$,

$$\chi(r) = A\sqrt{r}J_{\frac{1}{2-\nu}}\left(\frac{2}{2-\nu}\sqrt{\widetilde{\alpha}r^{2-\nu}}\right)$$

prend, pour $\sqrt{\widetilde{\alpha}r^{2-\nu}} \gg 1$, la forme asymptotique

$$\chi(r) \approx A\sqrt{\frac{2-\nu}{\pi\sqrt{\widetilde{\alpha}}}}r^{\nu/4}\sin\left(\frac{2}{2-\nu}\sqrt{\widetilde{\alpha}r^{2-\nu}} - \frac{\pi}{2(2-\nu)} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (2)$$

L'intervalle de valeurs de la variable r

$$r^\nu \ll \alpha/|E|, \qquad 1 \ll \sqrt{\widetilde{\alpha}r^{2-\nu}} \quad (3)$$

constitue l'intervalle de "recouvrement" (autrement dit, la région où sont tolérées les valeurs exactes et quasi classiques de la fonction d'onde). La comparaison de la fonction d'onde (1) dans ce domaine

$$\chi_{qc} \approx C \left(\frac{r^\nu}{\widetilde{\alpha}\hbar^2}\right)^{1/4} \sin\left(\frac{2}{2-\nu}\sqrt{\widetilde{\alpha} r^{2-\nu}} + \gamma\right)$$

à la fonction d'onde exacte (2) permet de trouver $\gamma = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi}{2(2-\nu)}$ et d'obtenir ainsi la condition de quantification des niveaux d'énergie (comparer à la formule (6) du problème précédent):

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^b \sqrt{2m\left(-|E_{n_r}| + \frac{\alpha}{r^\nu}\right)}dr = \pi\left(n_r + \frac{1}{2} + \frac{1}{2(2-\nu)}\right). \tag{4}$$

Il s'ensuit de la relation (4) que

$$E_{n_r} = -\left\{\frac{\sqrt{2m}C_\nu \alpha^{1/\nu}}{\pi\hbar[n_r + 1/2 + 1/2(2-\nu)]}\right\}^{\frac{2\nu}{2-\nu}}, \tag{5}$$

où

$$C_\nu = \int_0^1 \sqrt{x^{-\nu} - 1}dx.$$

La condition de validité de l'expression (5) est $n_r \gg 1$.

9.11. Le problème se résout de façon analogue au problème 9.9. Le problème principal est le raccordement des solutions exacte et quasi-classique à des petites distances. Partons de l'équation pour la fonction χ (liée à la fonction d'onde Ψ par : $\Psi_{n_r lm} = Y_{lm}\chi_{n,l}/r$) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\chi - \frac{\alpha}{r}\chi = E\chi.$$

Pour des r petits, on peut négliger le terme $E\chi$ dans cette équation, qui prend alors la forme

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{\widetilde{\alpha}}{r}\chi - \frac{l(l+1)}{r^2}\chi = 0, \qquad \widetilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2.$$

La solution de cette équation satisfaisant à la condition $\chi(0) = 0$ (voir [12]),

$$\chi(r) = A\sqrt{r}J_{2l+1}(2\sqrt{\widetilde{\alpha} r})$$

pour $\sqrt{\widetilde{\alpha} r} \gg 2l+1$ a un comportement asymptotique

$$\chi(r) \approx A\left(\frac{r}{\pi^2\widetilde{\alpha}}\right)^{1/4} \sin\left(2\sqrt{\widetilde{\alpha} r} - \pi l - \frac{\pi}{4}\right). \tag{1}$$

Dans l'intervalle de la variable r défini par

$$r \ll \alpha/|E| \text{ et } 2l+1 \ll \sqrt{\tilde{\alpha} r}, \tag{2}$$

à la fois la solution exacte (1) et la représentation quasi-classique de la fonction d'onde

$$\chi_{qc} = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_a^r p(r')dr' + \gamma\right), \tag{3}$$

sont valables (a est le point de rebroussement à gauche). Dans l'expression de $p(r)$ on peut négliger la dépendance en E et on trouve alors

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^r p dr' \approx \frac{1}{\hbar}\int_a^r \sqrt{2m\left(\frac{\alpha}{r'} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr'^2}\right)}dr' \approx 2\sqrt{\tilde{\alpha} r} - \pi\sqrt{l(l+1)}. \tag{4}$$

L'expression (4) permet de trouver, d'après (1) et (3), la valeur du paramètre $\gamma = -\pi l - \frac{\pi}{4} + \pi\sqrt{l(l+1)}$ et d'obtenir la condition de quantification des niveaux ayant un moment l dans le cadre de l'approximation quasi-classique (comparer à 9.9) :

$$\frac{1}{\hbar}\int_a^b \sqrt{2m\left[-|E_{n_r l}| + \frac{\alpha}{r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]}dr = \pi(n_r+1) - \gamma - \frac{\pi}{4}. \tag{5}$$

Compte tenu de la valeur de l'intégrale

$$\int_a^b \frac{1}{r}\sqrt{(b-r)(r-a)}dr = \frac{\pi}{2}(a+b-2\sqrt{ab}),$$

l'expression (5) conduit à

$$E_{n_r l} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2(n_r+l+1)^2}, \tag{6}$$

qui coïncide avec la valeur exacte pour des n_r et l quelconques, bien que l'approximation quasi-classique utilisée pour obtenir la formule (6) ne soit formellement valable que pour $n_r \gg 1$.

A propos de la règle de quantification (5) obtenue ici, il faut remarquer que cette règle diffère de la formule classique de Bohr-Sommerfeld (selon cette dernière on devrait avoir $\pi(n_r + 1/2)$ à droite du signe = dans (5)). Cela est dû au fait que pour r petit ($0 < r \lesssim a$), l'énergie potentielle efficace est dominée par le potentiel centrifuge $\hbar^2 l(l+1)/2mr^2$; or, comme on l'a vu dans 9.6, l'approche quasi-classique n'est valable dans ce cas que pour $\sqrt{l(l+1)} \gg 1$. Pour $l \sim 1$, l'approche quasi-classique n'est plus valable, et c'est justement pour cette raison qu'il a fallu rechercher la solution exacte de l'équation de Schrödinger pour r petit.

Cependant, dans le cas où $l \gg 1$, l'approche quasi-classique est valable et on aurait pu recourir à la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld. En effet, dans ce cas, on a $\sqrt{l(l+1)} \approx l + 1/2$ dans l'expression de γ, et (5) prend la forme de la formule de Bohr-Sommerfeld.

9.12. A une remarque près (voir plus bas), pour résoudre ce problème, on peut utiliser la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{\tilde{a}}^{\tilde{b}}\sqrt{E_n - U(x)}dx = \pi(n+1/2), \tag{1}$$

où $n = N-1$ (N est le numéro d'ordre du niveau, le niveau fondamental correspondant à $n = 0$) et faire tendre E_{N-1} vers zéro. Compte tenu de la forme explicite de $U(x)$, on obtient alors les valeurs cherchées des paramètres du potentiel :

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = \left(N - \frac{1}{2}\right)^2. \tag{2}$$

Pour obtenir (1) on a supposé que l'on peut utiliser l'approximation quasi-classique partout sauf au voisinage des points de rebroussement. Or, dans ce problème, les points de rebroussement pour $E_n \to 0$ s'éloignent à l'infini ($\tilde{a} \to -\infty$, $\tilde{b} \to +\infty$), tandis la condition de validité de l'approximation quasi-classique n'est satisfaite que pour des valeurs finies de x. Ici, cette condition, $|d\lambda/dx| \leq 1$, prend pour $E = 0$ la forme

$$|x/a| \ll \sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} \equiv \xi. \tag{3}$$

Les changements dans les conditions de raccordement des solutions exacte et quasi-classique, comparées à celles utilisées dans (1), reviennent à substituer dans (1) $(n+1/2)$ par $(n+\gamma)$ où γ est un paramètre de l'ordre de 1 qui dépend de la forme du potentiel (voir les problèmes 9.2, 9.9, 9.10, 9.11).

Ayant à l'esprit ce qui vient d'être dit, précisons le résultat (2) (vu que l'approche quasi-classique suppose que $n \gg 1$, cette précision peut sembler inutile ; cependant le résultat quasi-classique est d'une grande précision même pour $n \sim 1$). Souvenons-nous qu'à l'apparition d'un nouvel état lié avec l'approfondissement du puits de potentiel correspond l'existence d'une solution de l'équation de Schrödinger pour $E = 0$ qui ne croît pas quand $x \to \pm\infty$ (voir 2.18 du Tome I). Pour obtenir la solution de l'équation de Schrödinger procédons ainsi : pour les $|x|$ grands, on obtient la solution exacte, pour les $|x|$ finis, la solution quasi-classique, et on raccorde les solutions.

A de grandes distances, $|x| \gg a$, l'équation de Schrödinger prend la forme

$$\Psi'' + \frac{\alpha}{x^4}\Psi = 0, \qquad \alpha = 2mU_0a^4/\hbar^2 = \xi^2a^2,$$

et sa solution décroissante pour $x \to \pm\infty$ (voir, par exemple, [11]) est

$$\Psi = A_\pm\sqrt{|x|}J_{1/2}(2\sqrt{\alpha}/|x|),$$

ou

$$\Psi = A_\pm x\sqrt{\frac{2}{\pi\sqrt{\alpha}}}\sin\frac{\sqrt{\alpha}}{x} = A_\pm x\sqrt{\frac{2}{\pi\sqrt{\alpha}}}\sin\frac{\xi a}{x}. \tag{4}$$

Pour $\xi \gg 1$ (c'est justement dans ce cas que l'on peut utiliser l'approche quasi-classique) dans l'intervalle $a \ll x \ll a\xi$ on peut utiliser aussi bien la solution exacte (4) que la solution quasi-classique que l'on écrit sous la forme

$$\begin{aligned}\Psi_{q.c} &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^\infty p(x)dx + \gamma_1\right) \\ &= \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{\pi\xi}{2} - \xi \operatorname{atan}\frac{x}{a} + \gamma_1\right) \approx \frac{Cx}{\sqrt[4]{2mU_0a^4}} \sin(\xi a/x + \gamma_1) \qquad (5)\end{aligned}$$

La comparaison de (4) et (5) donne $\gamma_1 = 0$.

La solution quasi-classique peut également être écrite sous la forme

$$\Psi_{q.c} = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^x p(x)dx + \gamma_2\right) \qquad (6)$$

que l'on raccorde à la solution exacte dans l'intervalle $a \ll (-x) \ll a\xi$; il est clair que l'on trouve $\gamma_2 = 0$.

La condition pour que les solutions (5) et (6) représentent une même fonction est évidemment l'égalité

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^\infty p(x)dx = \pi N \quad \text{ou} \quad \xi = N, \qquad (7)$$

qui est la condition cherchée pour l'apparition d'un $N^{\text{ème}}$ niveau du spectre discret.

De l'expression (7) il s'ensuit que

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = N^2. \qquad (8)$$

Il est nécessaire d'indiquer que ce problème admet une solution exacte :

$$\frac{2mU_0a^2}{\hbar^2} = N^2 - 1. \qquad (9)$$

La comparaison de (2), (8), (9) montre que la condition (8) s'accorde mieux avec la condition exacte que la condition (2). C'est ainsi que pour $N = 10$, la différence entre les seconds membres dans (8) et (9) est de 1%, tandis que la différence entre (2) et (9) est de 10%. Notons également que même pour $N = 2$, quand l'approche quasi-classique est formellement interdite, la différence entre (8) et (9) n'est que de 25% (pour $N = 1$, rappelons que, d'après le problème 2.13 (Tome I), dans ce potentiel il existe toujours au moins un état lié quelque soit la valeur des paramètres).

9.13. Le problème se résout de la même façon que le précédent. La condition d'apparition d'un $N^{\text{ème}}$ niveau du spectre discret a la forme

$$\frac{\sqrt{2mU_0a^4}}{\hbar}\int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{\sqrt{x^4 + a^4}} = \pi N,$$

c'est-à-dire

$$U_0 a^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2 N^2}{C^2}, \qquad \text{où} \qquad C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{\sqrt{1+z^4}} = 3,72.$$

9.14. Le problème se résout de façon analogue au problème 9.12. A de grandes distances, l'approche quasi-classique n'est pas valable. La solution quasi-classique ($E = 0$)

$$\Psi_{\text{qc}} = \frac{C}{\sqrt[4]{-2mU(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar}\int_x^{\infty} \sqrt{-2mU(x)}dx + \gamma_1\right\}, \tag{1}$$

doit être raccordée aux grandes distances à la solution exacte lorsque $x \to \pm\infty$. L'équation de Schrödinger à de grandes distances ($U(x) \approx -\alpha x^{-\nu}$)

$$\chi'' + \frac{\widetilde{\alpha}}{x^{\nu}}\chi = 0 \qquad (\widetilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2)$$

possède une solution décroissante pour $x \to \infty$ (voir, par exemple, [12])

$$\chi = A\sqrt{x}J_{\frac{1}{\nu-2}}\left(\frac{2\sqrt{\widetilde{\alpha}}}{\nu-2}x^{(2-\nu)/2}\right). \tag{2}$$

Pour

$$x^{(\nu-2)/2} \ll \sqrt{\widetilde{\alpha}}/(\nu-2) \tag{3}$$

la fonction (2) prend la forme

$$\Psi \approx Ax^{\nu/4}\sqrt{\frac{(\nu-2)}{\pi\sqrt{\widetilde{\alpha}}}} \sin\left(\frac{2\sqrt{\widetilde{\alpha}}}{\nu-2}x^{(2-\nu)/2} - \frac{\pi}{2(\nu-2)} + \frac{\pi}{4}\right) \tag{4}$$

et, pour x satisfaisant à l'inégalité (3), le potentiel a déjà son comportement asymptotique $U(x) \approx -\alpha x^{-\nu}$; dans cet intervalle, on peut écrire également la solution quasi-classique (1) qui dans ce cas prend la forme

$$\Psi_{\text{qc}} = \frac{C}{\sqrt[4]{2m\alpha}}x^{\nu/4} \sin\left(\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}\frac{2}{\nu-2}x^{(2-\nu)/2} + \gamma_1\right). \tag{5}$$

La comparaison de (4) et (5) donne

$$\gamma_1 = -\frac{\pi}{2(\nu-2)} + \frac{\pi}{4}.$$

En écrivant la solution quasi-classique sous la forme

$$\Psi_{\text{qc}} = \frac{\widetilde{C}}{\sqrt[4]{-2mU(x)}} \sin\left\{\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{x} \sqrt{-2mU(x)}dx + \gamma_2\right\},$$

on obtient $\gamma_1 = \gamma_2$ et l'on aboutit à la condition cherchée (comparer à la solution du problème 9.12):

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{-2mU(x)}dx = \pi N + \frac{\pi}{\nu-2} - \frac{\pi}{2}, \tag{6}$$

qui définit les valeurs des paramètres du potentiel $U(x)$ correspondant à l'apparition du $N^{\text{ème}}$ état du spectre discret.

9.15. Développons le potentiel au voisinage du point de rebroussement droit x_0 en nous limitant au premier ordre

$$U(x) \approx U(x_0) + \nu U(x_0)\frac{(x-x_0)}{x_0}, \qquad U(x_0) = E. \tag{1}$$

Ce développement est valable dans le domaine : $|x - x_0| \ll x_0$. Pour qu'on puisse utiliser les formules standard de raccordement des solutions quasi-classiques à droite et à gauche du point de rebroussement, de même que la règle de Bohr-Sommerfeld, il est nécessaire qu'à la frontière de l'intervalle $|x - x_0| \ll x_0$ où le développement (1) est encore valable, la condition de validité de l'approche quasi-classique, $|d\lambda\!\!\!^{-}/dx| \ll 1$, soit déjà satisfaite. En posant $(x - x_0) \equiv y$, $|y| \ll 1$, on obtient sans peine

$$\left|\frac{d\lambda\!\!\!^{-}}{dx}\right| \sim \frac{\hbar\sqrt{x_0}}{\sqrt{8mU_0\nu}}|y|^{-3/2}\left(\frac{x_0}{a}\right)^{-\nu/2}. \tag{2}$$

Etant donné que pour des niveaux fortement excités ($E_n \to \infty$), on a $x_0 \to \infty$, on voit à partir de (2) que dans le cas considéré, $\nu > 0$, les conditions de raccordement des fonctions d'onde quasi-classiques sont remplies.

9.16. Désignons par $E_n^{(0)}$ et $E_n = E_n^{(0)} + \delta E_n$ les niveaux d'énergie en approximation quasi-classique dans les potentiels $U_0(x)$ et $U(x) = U_0(x) + \delta U(x)$ respectivement. Ils se déterminent à partir de la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld. En particulier,

$$\int_{a+\delta a}^{b+\delta b}\sqrt{2m[E_n^{(0)} + \delta E_n - U_0(x) - \delta U(x)]}dx = \pi\hbar(n + 1/2). \tag{1}$$

En développant la fonction sous l'intégrale dans (1), on obtient le déplacement cherché du niveau[1] :

$$\delta E_n \approx \frac{1}{\tau}\int_a^b \frac{\delta U(x)}{v(x)}dx, \qquad v(x) = \sqrt{\frac{2}{m}[E_n^{(0)} - U_0(x)]}, \qquad \tau = \int_a^b \frac{dx}{v(x)}. \tag{2}$$

Le résultat obtenu est en accord avec la formule du premier ordre du calcul des perturbations, $\delta E_n \approx E_n^{(1)} = V_{nn} \equiv (\delta U)_{nn}$, si, pour le calcul de l'élément matriciel,

1 La variation de (1) due à la modification des positions des points de rebroussement est égale à zéro.

on utilise la fonction d'onde obtenue dans l'approximation quasi-classique. De plus, il faut savoir que la contribution dominante à l'élément matriciel $(\delta U)_{nn}$ et à l'intégrale de normalisation $\int |\Psi_n^{(0)}(x)|^2 dx = 1$, est due à l'intervalle se trouvant entre les points de rebroussement[2] (intervalle fini du mouvement d'une particule classique), et on peut se limiter à la fonction d'onde approchée :

$$\Psi_n^{(0)}(x) \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\tau v(x)}} \sin\left[\frac{m}{h}\int_a^x v(x)dx + \frac{\pi}{4}\right], & a < x < b, \\ 0, & x < a, x > b, \end{cases}$$

(à cause de l'oscillation rapide de la fonction $\sin[\ldots]$, la grandeur $\sin^2[\ldots]$, dans les expressions sous le signe d'intégration de l'intégrale de normalisation et de l'élément matriciel $(\delta U)_{nn}$, peut être remplacée par sa valeur moyenne égale à $1/2$).

9.17. Etudions une particule dans le potentiel $U(x) = \alpha|x|^\nu$ (pour $\nu > 0$ on a $\alpha > 0$, pour $\nu < 0$, au contraire, $\alpha < 0$; s'il n'en est pas ainsi, les états du spectre discret sont toujours absents dans ce potentiel). Pour démontrer le théorème du viriel (voir 7.6 du Tome I) directement dans le cadre de l'approximation quasi-classique, cherchons U_{nn} et T_{nn} et comparons-les.

En calculant la valeur moyenne de U_{nn} pour le $n^{\text{ème}}$ état dans le cas quasi-classique ($n \gg 1$), il faut tenir compte du fait que la contribution dominante dans l'élément matriciel U_{nn}, comme dans l'intégrale de normalisation, est due à l'intervalle des valeurs de x situées entre les points de rebroussement ; aussi, peut-on se limiter à la forme approchée de la fonction d'onde $\Psi_n(x)$, donnée dans le problème précédent, et dans l'intégrale qu'on obtient ainsi, il faut remplacer le facteur à oscillations rapides $\sin^2[\ldots]$ par sa valeur moyenne égale à $1/2$ (comparer à 9.16). Ainsi,

$$U_{nn} \approx \frac{1}{\tau}\int_a^b U(x)\frac{dx}{v(x)} = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}\tau}\int_a^b \frac{U(x)dx}{\sqrt{E_n - U(x)}} \tag{1}$$

(τ et $v(x)$ sont donnés dans 9.16).

Compte tenu de la symétrie du potentiel (de sorte que $a = -b$ et $\int_{-b}^{b} \ldots = 2\int_0^b \ldots$) et de sa forme concrète, faisons dans (1) les transformations suivantes :

$$\int_0^b \frac{\alpha x^\nu dx}{\sqrt{E_n - \alpha x^\nu}} = -\int \frac{2x}{\nu} d\sqrt{E_n - \alpha x^\nu} = \left[-\frac{2x}{\nu}\sqrt{E_n - \alpha x^\nu}\right]_{x=0}^{x=b} + \\ + \frac{2}{\nu}\int_0^b \sqrt{E_n - \alpha x^\nu}dx = \frac{2}{\nu\sqrt{2m}}\int_0^b p(x)dx \tag{2}$$

(le terme intégré vaut zéro, car $x = b$ est le point de rebroussement, et pour $x = 0$, on suppose que $\nu > -2$, car autrement il y aurait chute de particules en $x = 0$; de plus, une étude spéciale s'impose pour $\nu \leq -1$, de sorte que le potentiel considéré n'est "bon" que pour $\nu > -1$).

2 Mais si $\delta U(x)$ n'est différent de zéro qu'en dehors du domaine du mouvement classique de la particule d'énergie $E_n^{(0)}$, alors, selon (2), $\delta E_n = 0$. Evidemment, il y a également déplacement du niveau dans ce cas ; toutefois son calcul exige une étude spéciale.

Compte tenu de (2) et de la règle de Bohr-Sommerfeld, on obtient

$$U_{nn} = \frac{\pi\hbar}{\nu\tau}(n + 1/2). \tag{3}$$

De façon analogue, en utilisant l'identité $T_{nn} = (E_n - U(x))_{nn}$, on obtient sans peine

$$T_{nn} = \frac{\sqrt{m}}{\tau\sqrt{2}} \int_{-b}^{b} \frac{E_n - U(x)}{\sqrt{E_n - U(x)}} dx = \frac{1}{\tau} \int_{-b}^{b} p(x)dx = \frac{\pi\hbar}{2\tau}(n + 1/2). \tag{4}$$

La comparaison de (3) et (4) donne $2T_{nn} = \nu U_{nn}$, ce qui est le théorème du viriel.

Notons, en conclusion, que pour le potentiel considéré la règle de Bohr-Sommerfeld permet d'obtenir aisément le spectre d'énergie de la particule (voir 9.4).

9.18. Comme $n \gg 1$, alors, en général, l'approximation quasi-classique est applicable, et la valeur moyenne de l'énergie cinétique de la particule peut être écrite sous la forme (voir formule (4) du problème précédent)

$$\overline{T} \equiv T_{nn} = \frac{\pi\hbar}{2\tau}(n + \gamma), \qquad \tau = m \int_a^b \frac{dx}{p(x)} = m \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{2m(E_n - U(x))}} \tag{1}$$

(le facteur $(n + 1/2)$ est ici remplacé par $(n + \gamma)$, ce qui permet de généraliser ce résultat aux cas où les conditions de raccordement standard ne sont pas entièrement remplies ; voir, par exemple, 9.2, 9.9 et autres).

En notant que

$$\tau = \frac{\partial}{\partial E_n} \int_a^b \sqrt{2m(E_n - U(x))}dx = \pi\hbar \frac{\partial n}{\partial E_n},$$

avec (1) on obtient la moyenne cherchée :

$$\overline{T} = T_{nn} = \frac{1}{2}(n + \gamma)\frac{dE_n}{dn}.$$

9.19. La contribution dominante à l'élément matriciel est due à l'intervalle entre les points de rebroussement, et l'on peut utiliser la forme approchée des fonctions d'onde donnée dans 9.16. De plus, vu le voisinage des états m et n, les valeurs des points de rebroussement et des grandeurs τ peuvent être considérées comme identiques. On peut alors écrire

$$F_{mn} = \int \Psi_m^* \widehat{F} \Psi_n dx \approx \frac{1}{\tau} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x (p_m - p_n)dx'\right] dx - \\ - \frac{1}{\tau} \int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_a^x (p_m + p_n)dx' + \frac{\pi}{2}\right] dx. \tag{1}$$

La fonction sous l'intégrale dans le second terme de (1) oscille rapidement, et sa valeur est donc beaucoup plus petite que celle du premier terme et on peut la négliger. En

nous servant du fait que, dans l'approche quasi-classique, la différence entre les énergies des niveaux voisins vaut $\hbar\omega$ (voir, par exemple, 9.5), avec $\omega = \pi/\tau$, représentons E_m sous la forme $E_m \approx E_n + \hbar\omega(m-n)$. En développant en série

$$p_m = \sqrt{2m[E_n + \hbar\omega(m-n) - U(x)]} \approx p_n + \frac{\hbar\omega(m-n)}{v(x)}$$

et compte tenu de ce qui a été dit plus haut, on peut écrire l'expression (1) sous la forme

$$F_{mn} = \frac{1}{\tau}\int_a^b \frac{F(x)}{v(x)} \cos\left[\omega(m-n)\int_a^x \frac{dx'}{v(x')}\right] dx. \qquad (2)$$

Effectuons le changement de variable $x = x(t)$, où $x(t)$ est la fonction donnant la coordonnée d'une particule classique, d'énergie $E_m \approx E_n$, en fonction du temps avec $x(0) = a$. Alors, $x(T/2) = b$, où $T = 2\tau$ est la période du mouvement fini de la particule classique. L'expression (2) prend la forme

$$F_{mn} = \frac{2}{T}\int_0^{T/2} F(x(t))\cos[\omega(m-n)t]dt = \frac{1}{T}\int_0^T F(x(t))\mathrm{e}^{-i\omega(m-n)t}dt$$

La variation de t de 0 à T correspond à celle de x de a à b. On a donc l'égalité $F_{mn} = \widetilde{F}_{s=m-n}$. Pour un oscillateur $x = A\cos\omega t$, et les seules composantes de Fourier non nulles sont $\widetilde{x}_1 = \widetilde{x}_{-1} = A/2$. Vu que l'énergie de l'oscillateur classique est $E_{\mathrm{cl}} = kA^2/2$, les éléments matriciels non nuls de la coordonnée de l'oscillateur valent dans l'approximation quasi-classique [3] $(x)_{n+1,n} = (x)_{n,n+1} = \sqrt{\dfrac{\hbar\omega(n+1)}{2k}}$ (comparer à 8.3 du Tome I).

9.20. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Il faut tenir compte du fait que sous l'action de l'opérateur $\hat{p}$ sur la fonction quasi-classique, il ne faut dériver par rapport à la variable x que dans l'argument du sinus. Un calcul simple donne

$$(p^k)_{mn} = \frac{2}{T}\int_0^{T/2} dt p^k(t) \cdot \begin{cases} \cos[\omega(m-n)t], & \text{pour } k \text{ pair}, \\ -i\sin[\omega(m-n)t], & \text{pour } k \text{ impair}. \end{cases} \qquad (1)$$

Vu que les signes de l'impulsion pour $0 < t < T/2$ et $T/2 < t < T$ sont opposés, les deux expressions (1) peuvent être ramenées à une seule :

$$(p^k)_{mn} = \frac{1}{T}\int_0^T p^k(t)\mathrm{e}^{-i\omega(m-n)t}dt,$$

et, l'on a

$$(F)_{mn} = \left(\sum_k C_k p^k\right)_{mn} = \frac{1}{T}\int_0^T F(p(t))\mathrm{e}^{-i\omega(m-n)t}dt.$$

3 On a pris dans ce cas $E_{\mathrm{cl}} = (E_n + E_m)/2$, en tenant compte de ce que $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$.

9.21. En raison de la symétrie du potentiel $U(x)$, les états stationnaires de la particule possèdent une parité déterminée, de sorte que, sous la barrière séparant les puits, les fonctions d'onde dans l'approximation quasi-classique ont la forme

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \left\{ \exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x)|dx\right) \pm \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x)|dx\right)\right\}.$$

Ces fonctions peuvent être récrites sous la forme

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{C}{\sqrt{|p|}} \left\{ R\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^x |p(x)|dx\right) \pm R^{-1}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^x |p(x)|dx\right)\right\}. \qquad (1)$$

où

$$R = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^0 |\sqrt{2m(E^{(\pm)} - U(x))}|dx\right\}$$

($-b$ étant le point de rebroussement droit du premier puits ; strictement parlant, les indices "$\pm$" se rapportant aux solutions paires et impaires devraient aussi être affectés à $p(x)$ et aux points de rebroussement, mais on ne le fait pas pour ne pas surcharger les formules).

A la fonction d'onde (1), entre les points de rebroussement $-a$ et $-b$, correspondent les fonctions d'onde quasi classiques de la forme

$$\begin{aligned}\Psi_{qc}^{(\pm)} &= \frac{\widetilde{C}}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(-\frac{1}{\hbar}\int_x^{-b} pdx + \frac{\pi}{4} + \gamma_\pm\right) \\ &= \frac{\widetilde{C}}{\sqrt{p(x)}} \left\{\cos\gamma_\pm \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{-b} pdx + \frac{\pi}{4}\right) + \sin\gamma_\pm \cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{-b} pdx + \frac{\pi}{4}\right)\right\}. \qquad (2)\end{aligned}$$

C'est la forme la plus générale de la solution quasi-classique ; de plus, les constantes $\widetilde{C}$, $\gamma_\pm$ et $E^{(\pm)}$ ($E^{(\pm)}$ entrant dans l'expression de $p(x)$) se déterminent à partir des conditions de raccordement de cette solution à la solution de (1) sous la barrière séparant les puits et à la solution décroissante pour $x \to -\infty$ dans l'intervalle classiquement interdit à gauche du point de rebroussement gauche (comme la fonction d'onde est soit paire soit impaire, les conditions de raccordement des solutions dans le puits droit seront alors automatiquement remplies). La dernière conditions de raccordement au point de rebroussement gauche donne, comme on le sait, la solution quasi-classique de la forme

$$\Psi_{qc} = \frac{C'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^x pdx + \frac{\pi}{4}\right), \qquad (3)$$

tandis qu'à partir de l'égalité des solutions (2) et (3) on trouve la condition de quantification

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^x pdx + \frac{\pi}{4} + \frac{1}{\hbar}\int_x^{-b} pdx + \frac{\pi}{4} + \gamma_\pm = \pi(n+1),$$

soit

$$\frac{1}{\hbar}\int_{-a}^{-b} p\,dx = \pi\left(n+\frac{1}{2}\right) - \gamma_{\pm}. \tag{4}$$

Pour déterminer $\gamma_{\pm}$ il faut raccorder les solutions (1) et (2). Pour cela, étudions deux solutions particulières au sein d'un puits $(-a < x < -b)$ de la forme

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{p}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{-b} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right),$$

$$\psi^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x}^{-b} p\,dx + \frac{\pi}{4}\right). \tag{5}$$

A la première de ces deux solutions correspond, comme on le sait, sous la barrière $(x > -b)$ la solution quasi-classique décroissante

$$\psi^{(1)} = \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{x}|p|dx\right). \tag{6}$$

La solution croissante au sein de la barrière correspond à la solution particulière $\psi^{(2)}$:

$$\psi^{(2)} = \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(\frac{1}{\hbar}\int_{-b}^{x}|p|dx\right), \qquad x > -b, \tag{7}$$

(une analyse plus détaillée de la forme de la fonction d'onde $\psi^{(2)}$ sous la barrière est laissée au soin d'un lecteur préparé).

Compte tenu du fait que $\psi^{(1,2)}$ sont les solutions de la même équation de Schrödinger

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + U(x)\psi = E\psi,$$

on obtient sans peine que pour ces dernières

$$W = \psi^{(1)'}\psi^{(2)} - \psi^{(1)}\psi^{(2)'} = \text{cte}. \tag{8}$$

En calculant (8) pour $x < -b$ (c'est-à-dire en utilisant la fonction (5)), on obtient $W = -1/h$; pour $x > -b$ (compte tenu de (6) et (7)) $W = -C_2/h$, de sorte que

$$C_2 = 1 \tag{9}$$

(en calculant W, il ne faut dériver par rapport à la variable x que dans les arguments du sinus, du cosinus et de l'exponentielle, dont les variations sont plus rapides que celles de $|p|^{-1/2}$).

Etant donné que les fonctions d'onde (1) et (2) décrivent la même solution de l'équation de Schrödinger (pour différents intervalles de x), elles constituent une même combinaison linéaire des fonctions d'onde $\psi^{(1,2)}$, et, compte tenu des formules de "raccordement" (5) (7), (9) obtenues plus haut, on trouve sans peine les relations

$$\widetilde{C}\cos\gamma_{\pm} = \pm 2CR^{-1}, \qquad \widetilde{C}\sin\gamma_{\pm} = CR,$$

d'où

$$\tan \gamma_{\pm} = \pm \frac{1}{2} R^2. \tag{10}$$

Pour une barrière complètement impénétrable $R = 0$ et selon (10) $\gamma_{\pm} = 0$. De (4), il s'ensuit que $E_n^{(+)} = E_n^{(-)} = E_n^{(0)}$ c'est-à-dire que les énergies des niveaux pairs et impairs sont les mêmes et valent $E_n^{(0)}$ au sein d'un puits. Pour une perméabilité finie $R \ll 1$, les déplacements des niveaux pairs et impairs $\Delta E_n^{(\pm)} = E_n^{(\pm)} - E_n^{(0)}$ s'obtiennent facilement à partir des relations (4) et (10) si, dans le premier membre de (4), on procède à un développement limité du terme sous l'intégrale :

$$\int p dx = \int \sqrt{2m[E_n^{(0)} - U(x) + \Delta E_n^{(\pm)}]} dx \approx \int \sqrt{2m[E_n^{(0)} - U]} dx + \\ + \int \frac{\Delta E_n^{(\pm)} dx}{\sqrt{\frac{2}{m}[E_n^{(0)} - U]}} = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{T \Delta E_n^{(\pm)}}{2}$$

où

$$T = 2 \int_{-a}^{-b} \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m}[E_n^{(0)} - U(x)]}}$$

est la période du mouvement dans un puits d'une particule classique d'énergie $E_n^{(0)}$, et si dans l'expression $\gamma_{\pm} \approx \tan \gamma_{\pm}$ on prend la valeur non déplacée $E_n^{(0)}$ du niveau. Ainsi, on obtient

$$\Delta E_n^{(\pm)} = \mp \frac{\hbar}{T} R^2 = \mp \frac{\hbar \omega_0}{2\pi} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-b}^{b} |p(x)| dx \right) \tag{11}$$

où $\omega_0 = 2\pi/T$ et $|p(x)| = \sqrt{2m[E_n^{(0)} - U(x)]}$; comme il fallait s'y attendre, le niveau pair est en dessous du niveau impair correspondant. La séparation cherchée du niveau vaut $\delta E_n = E_n^{(-)} - E_n^{(+)}$. Notons que le facteur exponentiel dans (11) peut être lié au coefficient de transmission de la barrière séparant les puits pour les particules d'énergie $E_n^{(0)}$ (voir problèmes du paragraphe 2 de ce chapitre).

9.22. Les harmoniques sphériques sont des fonctions propres des opérateurs $\hat{l}_z$ et $\hat{\mathbf{l}}^2$ et peuvent s'écrire sous la forme[4]

$$\tilde{Y}_{Lm} = f_{Lm}(\theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \tag{1}$$

(on a tenu compte dans (1) de la solution du problème aux fonctions propres et aux valeurs propres de l'opérateur $\hat{l}_z$ ne présentant aucune difficulté). Dans ce cas

4 On obtiendra d'abord, en approximation quasi-classique, la solution du problème aux fonctions propres et aux valeurs propres, ensuite, on liera $\tilde{Y}_{Lm}$ à l'expression asymptotique des harmoniques sphériques Y_{lm} obtenues de façon standard.

l'équation $\hat{\mathbf{l}}^2 \widetilde{Y}_{Lm} = L^2 \widetilde{Y}_{Lm}$ prend la forme

$$\frac{d^2 f}{d\theta^2} + \cot\theta \frac{df}{d\theta} + \left[L^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right] f = 0. \tag{2}$$

En passant à la nouvelle fonction $\chi = \sqrt{\sin\theta} f$, on obtient à partir de (2)

$$\chi'' + \left[L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2\theta} \right] \chi = 0. \tag{3}$$

On trouve alors la forme de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle avec une particule de masse $\mu = 1/2$, avec $\hbar = 1$; dans ce cas $L^2 + 1/4$ joue le rôle de l'énergie E, tandis que $U(\theta) = (m^2 - 1/4)/\sin^2\theta$ remplit celui de l'énergie potentielle ; la coordonnée de la particule est θ avec $0 \leq \theta \leq \pi$. Aux points $\theta = 0, \pi$, la fonction d'onde χ satisfait aux conditions aux limites $\chi(0) = \chi(\pi) = 0$.

On remarque aisément qu'avec $m^2 \gg 1$ (et L^2 pas trop proche de m^2), pour résoudre (3) on peut recourir à l'approximation quasi-classique (la condition $m^2 \gg 1$ est nécessaire, voir le problème 9.6), ce qui permet, pour la définition de L^2, de se servir de la règle de Bohr-Sommerfeld qui dans ce cas prend la forme

$$\int_a^b \sqrt{L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2\theta}} d\theta = \pi(n + 1/2), \qquad n = 0, 1, \ldots ; \tag{4}$$

a, b étant les points de rebroussement pour lesquels l'expression sous le radical s'annule. Comme $L^2 \gg 1$ et $m^2 \gg 1$, on voit aussitôt que les deux termes "1/4" dans l'expression sous le radical de (4) peuvent être négligés (leur contribution à l'intégrale est de l'ordre de $1/L$, car $\sqrt{L^2 + 1/4} \approx L + 1/8L$, etc.) et en utilisant la valeur de la primitive

$$\int \sqrt{L^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}} d\theta = L \operatorname{atan} \frac{\sqrt{(L^2 - m^2)\tan^2\theta - m^2}}{L} - \\ - m \operatorname{atan} \frac{\sqrt{(L^2 - m^2)\tan^2\theta - m^2}}{m} \tag{5}$$

(l'intégrale s'obtient sans peine en effectuant le changement $z = \tan^2\theta$), on obtient

$$(L - |m|) = (n + 1/2) \tag{6}$$

(notons que les points de rebroussement pour lesquels $\sin^2\theta = m^2/L^2$ sont symétriques par rapport au point $\theta = \pi/2$).

Le résultat (6) obtenu peut être récrit sous la forme

$$L^2 = (n + |m| + 1/2)^2 \equiv (l + 1/2)^2, \qquad l = 0, 1, \ldots ; \qquad l \geq |m|. \tag{7}$$

Bien que l'étude menée suppose $L^2 \gg 1$ (et donc $l \gg 1$), on indique également dans l'expression (7) les valeurs de $l = 0, 1, \ldots$, car l'entier l sert à la numération des valeurs propres L^2 dans l'ordre croissant[5]. C'est pourquoi on peut comparer la valeur quasi-classique $L^2 = (l + 1/2)^2$ directement à la valeur exacte $l(l + 1)$.

5 Le sens de l peut être justifié en comparant le nombre de zéros de la fonction f_{Lm}, égal à $l - |m|$ pour la solution exacte et à n pour la solution quasi-classique.

En utilisant les formules générales de l'approximation quasi classique, on peut également obtenir la forme explicite de la fonction χ et avec cette dernière celle de

$$f_{Lm} = \frac{C}{(L^2 \sin^2\theta - m^2)^{1/4}} \sin\left\{\int_\theta^b \sqrt{L^2 - \frac{m^2}{\sin^2\theta}}\,d\theta + \frac{\pi}{4}\right\} \tag{8}$$

(la valeur de l'intégrale dans (8) est donnée par (5) ; l'intégrale est calculée sur l'intervalle le plus important, celui entre les points de rebroussement).

Comme, pour la normalisation de la fonction d'onde dans l'approximation quasi-classique, on peut se limiter à la contribution de l'intervalle entre les points de rebroussement, on peut trouver la valeur de C dans (8) à partir de la condition de normalisation ($\int |\widetilde{Y}_{Lm}|^2 d\Omega = 1$) :

$$\int_0^\pi |f_{Lm}|^2 \sin\theta d\theta \approx |C|^2 \int_a^b (L^2\sin^2\theta - m^2)^{-1/2} \sin^2\{\dots\} \sin\theta d\theta = \\ = \frac{|C|^2}{2} \int \frac{dz}{\sqrt{L^2 - m^2 - L^2 z^2}} = \frac{\pi |C|^2}{2L} = 1, \tag{9}$$

c'est-à-dire

$$|C|^2 = 2L/\pi = (2l+1)/\pi$$

(on a remplacé dans (9) le facteur oscillant rapidement $\sin^2\{\dots\}$ par sa valeur moyenne $1/2$ et effectué le changement de variable $z = \cos\theta$).

On invite le lecteur à rechercher par lui-même le facteur de phase de $C = e^{i\alpha}|C| = e^{i\alpha}((2l+1)/\pi)^{1/2}$, pour pouvoir identifier les expressions obtenues à l'expression asymptotique des harmoniques sphériques définies de façon standard, et à étudier les cas limites $l - |m| \ll |m|$ et $l \gg m^2$, pour lesquels on peut trouver des expressions beaucoup plus simples.

9.23. Le début de la résolution de ce problème est identique à celui du problème précédent (jusqu'à la formule (3) comprise). Toutefois, dans le cas présent, pour résoudre l'équation (3), il n'est manifestement plus possible de recourir à l'approche quasi-classique ($n \sim 1$).

Pour résoudre cette équation dans le cas considéré ($m^2 \gg 1$, $L - |m| \sim 1$), notons que l'énergie potentielle $U(\theta)$ possède un minimum profond pour $\theta = \pi/2$ et que les fonctions d'onde des "niveaux" profonds se localisent près de ce point. En développant $U(\theta)$ en série

$$U(\theta) = \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2\theta} \approx \frac{m^2}{\sin^2\theta} \approx m^2\left[1 + \left(\theta - \frac{\pi}{2}\right)^2\right]$$

et en effectuant le changement de variable $x = \theta - \pi/2$, on transforme l'équation étudiée en

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} + [L^2 - m^2 - m^2x^2]\chi = 0,$$

qui est l'équation de Schrödinger d'un oscillateur. Compte tenu de la forme connue des fonctions propres et des valeurs propres de l'hamiltonien de l'oscillateur, on obtient

$$\chi_n = C\frac{(|m|/\pi)^{1/4}}{\sqrt{2^n n!}}\exp\left[-\frac{|m|(\theta-\pi/2)^2}{2}\right]H_n\left(\sqrt{|m|}\left(\theta-\frac{\pi}{2}\right)\right), \tag{1}$$

$$L^2 - m^2 = 2|m|(n+1/2), \quad \text{ou} \quad L^2 \approx (|m|+n+1/2)^2$$

$$(n^2 \ll |m|), \quad n = 0, 1, \ldots$$

et on retrouve la règle de quantification du moment obtenue dans le problème précédent.

Pour l'identification de la fonction ($L = l + 1/2 = |m| + n + 1/2$)

$$\widetilde{Y}_{Lm} = \frac{\chi_n}{\sqrt{\sin\theta}}\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}$$

avec le comportement asymptotique de l'harmonique sphérique Y_{lm}, le facteur de phase C dans (1) doit être choisi égal à

$$C = i^l(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}.$$

Notons, en conclusion, que pour $1 \ll n^2 \ll m^2$, l'étude menée dans ce problème et celle du problème précédent sont toutes deux valables (voir également le problème 9.24).

9.24. Le début de la résolution du problème est identique à celle de 9.22 (jusqu'à la formule (3) comprise). Toutefois, dans le cas présent (pour $m^2 \sim 1$), même avec $L \gg 1$, l'approche quasi-classique n'est pas valable pour $\theta L \ll 1$ et $(\pi - \theta)L \ll 1$. Pour résoudre ce problème, procédons de la façon suivante : cherchons à trouver la solution approchée en dehors des intervalles indiqués, et ensuite, raccordons-la à la solution exacte dans l'intervalle des valeurs de θ proches de $\theta = 0$ et $\theta = \pi$.

Dans l'équation

$$\chi'' + \left[L^2 + \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2\theta}\right]\chi = 0 \tag{1}$$

pour $L \gg 1$ et $m^2 \sim 1$, dans tout l'intervalle de la variable θ, excepté les domaines étroits de $\theta L \lesssim 1$ et $(\pi-\theta)L \lesssim 1$, on peut négliger le terme $[1/4 - (m^2 - 1/4)/\sin^2\theta]\chi$ et on obtient la solution sous la forme

$$\chi = \sqrt{\sin\theta}\, f \approx A\sin(L\theta + \gamma). \tag{2}$$

Les valeurs L et γ se trouvent grâce à la condition de raccordement de (2) avec la solution exacte de l'équation (1) au voisinage des points $\theta = 0$ et $\theta = \pi$, remplissant les conditions aux limites ($\chi(0) = \chi(\pi) = 0$).

Pour $\theta \ll 1$ l'équation (1) prend, pour la fonction $f = \chi/\sqrt{\sin\theta}$, la forme (voir 9.22)

$$f'' + \frac{1}{\theta}f' + \left[L^2 - \frac{m^2}{\theta^2}\right]f = 0,$$

et la solution qui ne croît pas pour $\theta \to 0$ est

$$f = \frac{\chi}{\sqrt{\sin\theta}} = CJ_m(L\theta) \tag{3}$$

($J_m(x)$ est une fonction de Bessel) avec, pour $L\theta \gg 1$, le comportement asymptotique suivant :

$$f \approx C\sqrt{\frac{2}{\pi L\theta}} \sin\left(L\theta - \frac{\pi|m|}{2} + \frac{\pi}{4}\right). \tag{4}$$

Dans l'intervalle $1/L \ll \theta \ll 1$, les deux solutions ((2) et (4)) sont valables, donc,

$$A = C\sqrt{\frac{2}{\pi L}} \qquad \gamma = \frac{\pi}{4} - \frac{\pi|m|}{2}. \tag{5}$$

Au lieu de raccorder la solution (2) à la solution exacte aux alentours du point $\theta = \pi$, il est plus simple de procéder autrement : la symétrie de l'équation (1), par rapport au changement de variable $\theta \to \theta' = \pi - \theta$, donne la relation

$$\chi(\pi - \theta) = \pm\chi(\theta). \tag{6}$$

Selon (2), (5), (6) on établit la règle de quantification du moment

$$L^2 = (l + 1/2)^2, \qquad l = 0, 1, \ldots ; \qquad l \geq |m| \tag{7}$$

(les signes "+" et "-" dans (6) correspondent respectivement aux valeurs paires et impaires de la grandeur $(l - |m|)$).

L'étude effectuée suppose que $L \gg 1$ (et, par conséquent, $l \gg 1$). Cependant, comme dans les problèmes précédents, nous indiquons dans (7) également les valeurs $l = 0, 1, \ldots$, car l'entier l sert à la numérotation des valeurs propres de L^2 dans l'ordre croissant.

Pour déterminer A (ou C) à partir de la condition de normalisation

$$\int_0^\pi |f|^2 \sin\theta d\theta = \int_0^\pi |\chi|^2 d\theta = 1, \tag{8}$$

notons que la contribution dominante dans l'intégrale (8) vient de l'intervalle pour lequel la représentation (2) est valable, et l'on obtient

$$|A|^2 = 2/\pi, \qquad |C|^2 = L = (2l + 1)/2. \tag{9}$$

Pour identifier les expressions obtenues aux harmoniques sphériques il faut choisir

$$C = i^l(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\sqrt{\frac{2l+1}{2}}.$$

9.25. La solution exacte de l'équation de Schrödinger de l'oscillateur

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\Psi_n + \frac{x^2}{2}\Psi_n = E_n\Psi_n \tag{1}$$

(on utilise le système d'unités $\hbar = m = k = 1$; k étant l'élasticité de l'oscillateur ; avec $\omega = 1$) donne $E_n = (n + 1/2)$ et les fonctions d'onde normées

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \mathrm{e}^{-x^2/2} H_n(x). \tag{2}$$

La solution de l'équation (1) dans le cadre de l'approximation quasi-classique (dans le domaine où $U = x^2/2 < E_n$) a la forme

$$\Psi_{n,\mathrm{qc}} = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \cos\left(\int_0^x p(x)dx + \alpha\right), \tag{3}$$

où

$$p(x) = \sqrt{2\left(E_n - \frac{x^2}{2}\right)} = \sqrt{2n + 1 - x^2}$$

(on a tenu compte du fait que le résultat obtenu dans le cadre de l'approximation quasi-classique pour E_n est identique au résultat exact, voir 9.1).

Vu que les fonctions propres possèdent une parité déterminée valant $(-1)^n$, la grandeur α dans (3) peut être choisie : $\alpha = -\pi n/2$.

Pour normer la fonction d'onde, la valeur de C dans (3) doit être prise égale à $C = \sqrt{2/\pi}$ (dans ce calcul, il faut voir que la contribution dominante à l'intégrale de normalisation $\int |\Psi_n|^2 dx = 1$ vient de l'intervalle correspondant au mouvement fini d'une particule classique et que compte tenu de la rapide oscillation du facteur $\cos^2(\ldots)$, on peut lui substituer sa valeur moyenne $1/2$; comparer à 9.16).

Compte tenu de ce qui vient d'être dit, écrivons (3) sons la forme

$$\Psi_{n,\mathrm{qc}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi\sqrt{2n + 1 - x^2}}} \cos\left(\int_0^x \sqrt{2n + 1 - x^2}dx - \frac{\pi n}{2}\right). \tag{4}$$

La comparaison de (2) et (4) donne

$$H_n(x) \approx \widetilde{C} \frac{\sqrt{2^{n+1} n!}}{[\pi(2n + 1 - x^2)]^{1/4}} \mathrm{e}^{x^2/2} \cos\left(\int_0^x \sqrt{2n + 1 - x^2}dx - \frac{\pi n}{2}\right), \tag{5}$$

où $\widetilde{C} = \pm 1$ est encore à définir.

L'expression (5), valable pour $n \gg 1$ (et pour $|x| < \sqrt{2n + 1}$, x ne devant pas se rapprocher trop près des points de rebroussement $\pm\sqrt{2n + 1}$), constitue l'expression asymptotique des polynômes d'Hermite. Si x est fixé et $n \to \infty$, alors (5) peut être simplifié en négligeant x^2 dans les expressions sous la racine et on obtient

$$H_n(x) \approx \frac{\widetilde{C}\sqrt{2^{n+1} n!}}{[2\pi n]^{1/4}} \mathrm{e}^{x^2/2} \cos\left(\sqrt{2n + 1}x - \frac{\pi n}{2}\right) \tag{6}$$

pour $n \to \infty$.

Enfin, compte tenu de la formule de Stirling ($n \to \infty$)

$$n! \approx \sqrt{2\pi} n^{n+1/2} \mathrm{e}^{-n}, \tag{7}$$

on obtient l'expression asymptotique cherchée :

$$H_n(x) \approx 2^{\frac{n+1}{2}} n^{\frac{n}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{n}{2}} \mathrm{e}^{x^2/2} \cos\left(\sqrt{2n+1}x - \frac{\pi n}{2}\right). \tag{8}$$

On a posé $\widetilde{C} = +1$, par comparaison de (6), pour $x \to 0$, avec les valeurs connues de $H_n(0)$ et $H_n'(0)$.

9.26. Une intégration élémentaire dans l'expression bien connue du coefficient de transmission dans l'approximation quasi-classique donne

$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} |p| dx\right] = \exp\left[-\frac{2}{\hbar a}\sqrt{2mU_0}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{x_0^2 - x^2}dx\right] =$$

$$= \exp\left[-\frac{\pi a}{\hbar}\sqrt{\frac{2m}{U_0}}(U_0 - E)\right], \qquad x_0 = a\sqrt{1 - E/U_0} \tag{1}$$

($x_2 = -x_1 \equiv x_0$ étant les coordonnées des points de rebroussement). Pour que le résultat (1) obtenu soit valable il faut respecter les conditions :

1) $|d\chi(x)/dx| \ll 1$ dans tout l'intervalle de la variable x, à l'exception des intervalles étroits autour des points de rebroussement ;
2) près des points de rebroussement, il existe un intervalle dans lequel l'approximation quasi-classique est valable et où l'on peut faire un développement au premier ordre du potentiel

$$U(x) \approx U(x_{1,2}) + U'(x_{1,2})\Delta x_{1,2} \tag{2}$$

où $\Delta x_{1,2} \equiv (x - x_{1,2})$.

Le recouvrement des intervalles décrits en 1) et 2) est non nul de part et d'autre des points de rebroussement.

Dans ce problème, pour $|x| > a$ on a $|d\chi(x)/dx| \equiv 0 \ll 1$. Pour $|x| < a$

$$\left|\frac{d\chi(x)}{dx}\right| = \frac{\hbar U_0 |x|}{\sqrt{2m}a^2 |E - U(x)|^{3/2}} = \frac{\hbar |x| a}{\sqrt{2mU_0}|x^2 - x_0^2|^{3/2}} \tag{3}$$

et dans le cas où

$$\sqrt{mU_0 a^2/\hbar^2} \gg 1, \tag{4}$$

l'expression (3) est beaucoup plus petite que l'unité pour toutes les valeurs de x sauf au voisinage des points de rebroussement ; la largeur de l'intervalle où l'approche quasi-classique n'est plus valable est donnée par

$$\Delta x = |x - x_{1,2}| \sim \frac{\hbar^{2/3} a^{1/3}}{m^{1/3}} \frac{1}{U_0^{1/6}(U_0 - E)^{1/6}} \tag{5}$$

(pour obtenir cette estimation de Δx dans l'expression (3) il faut poser $|x| \approx x_0$ et $|x^2 - x_0^2| \equiv |x^2 - x_{1,2}^2| = |(x - x_{1,2})(x + x_{1,2})| \approx 2x_0\Delta x$). La validité de l'approche quasi-classique exige

$$\Delta x \ll x_0 \quad \text{ou} \quad \frac{(U_0 - E)a\sqrt{m}}{\hbar\sqrt{U_0}} \gg 1 \tag{6}$$

(dans le cas contraire, dans l'intervalle entre les points de rebroussement, $|x| < x_0$, les conditions de validité de l'approche quasi-classique ne sont pas remplies, quelles que soient les valeurs de x). La condition (6) donne, selon (1), $D \ll 1$, ce qui, comme on le sait, est la condition nécessaire (mais non pas suffisante) de validité de l'approche quasi-classique.

La condition (6) constitue la première des conditions de validité de l'approche quasi-classique. On se convainc sans peine que dans ce problème elle est presque équivalente (voir plus bas) à la seconde condition relative au comportement du potentiel au voisinage des points de rebroussement. Les deux conditions peuvent ne pas être équivalentes pour des particules lentes, quand les points de rebroussement se rapprochent des valeurs $\pm a$. Le développement (2) du potentiel n'est immédiat que pour $|x| \leq a$ (pour $|x| \geq a$, $U(x) \equiv 0$), de sorte que $|\Delta x_{1,2}| \leq a - x_0$. Comme la grandeur $(a - x_0)$ doit être beaucoup plus grande que l'intervalle où l'approche quasi classique n'est pas valable (5) (troisième condition), on a

$$\Delta x \ll a - x_0 \quad \text{ou} \quad E \gg \frac{\hbar^{2/3}U_0^{2/3}}{m^{1/3}a^{2/3}}. \tag{7}$$

Les conditions (4), (6), (7) définissent les domaines de validité de l'expression (1).

Notons que la non-validité du résultat quasi-classique (1) pour $D(E)$ se manifeste dans ce problème pour $E \to 0$ car, selon (1), $D(E = 0)$ prend une valeur non nulle, bien que petite, alors que pour une barrière de forme arbitraire on a l'égalité *exacte* $D(E = 0) = 0$.

9.27. La formule standard pour le coefficient de transmission de la barrière dans l'approximation quasi-classique

$$D \approx \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}|p|dx\right] = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_0^{x_0}\sqrt{2m(U_0 - E - U_0x/a)}dx\right] \tag{1}$$

n'est pas applicable directement dans ce problème, car au voisinage du point de rebroussement gauche $x = 0$ les conditions de raccordement des solutions quasi-classiques utilisées pour établir (1) ne sont pas remplies (ces conditions sont données dans le problème précédent). Néanmoins la formule (1) peut être utilisée pour *estimer* le coefficient de transmission. Une intégration élémentaire donne

$$D \sim \exp\left[-\frac{4a\sqrt{2m}}{3U_0\hbar}(U_0 - E)^{3/2}\right]. \tag{2}$$

L'expression (2) ne donne que l'ordre de grandeur du coefficient de transmission (à un facteur près qui, pour $E \sim U_0$, est une grandeur de l'ordre de l'unité et qui s'annule

pour $E \to 0$, voir 9.32). Mais lorsque le facteur dans l'exponentielle est grand et négatif, l'expression donne le bon comportement du coefficient de transmission.

9.28. A partir de la formule du coefficient de transmission de la barrière et après des intégrations élémentaires, il vient

$$D \sim \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}|p|dx\right] = \exp\left\{-\frac{4a}{\hbar}\sqrt{2mE}\left[\sqrt{\frac{U_0}{E}-1} - \operatorname{atan}\sqrt{\frac{U_0}{E}-1}\right]\right\}.$$

9.29. Dans l'expression

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}|p|dx\right] = \exp\left\{-\frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{-x_0}^{x_0}\sqrt{\frac{U_0}{E\operatorname{ch}^2(x/a)}-1}\,dx\right\}, \qquad (1)$$

après le changement de variable

$$\operatorname{sh}(x/a) = \kappa \sin t, \qquad \kappa = \sqrt{U_0/E - 1},$$

l'intégrale s'écrit sous la forme

$$2a\kappa^2\int_0^{\pi/2}\frac{\cos^2 t\,dt}{1+\kappa^2\sin^2 t} = \pi a(\sqrt{1+\kappa^2}-1) = \pi a\left(\sqrt{\frac{U_0}{E}}-1\right),$$

et le coefficient de transmission s'avère égal à

$$D(E) \approx \exp\left\{-\frac{2\pi a}{\hbar}\sqrt{2m}(\sqrt{U_0}-\sqrt{E})\right\}. \qquad (2)$$

La condition de validité de l'expression (2) suppose que $D \ll 1$ (plus précisément, il faut que le module de l'argument de l'exponentielle soit grand), c'est-à-dire

$$\frac{2\pi a}{\hbar}\sqrt{2m}(\sqrt{U_0}-\sqrt{E}) \gg 1. \qquad (3)$$

De plus, il y a aussi une restriction sur l'énergie de la particule E, car pour $E \to 0$, au voisinage des points de rebroussement, les conditions de raccordement des solutions quasi-classiques ne sont plus remplies, en particulier, l'approximation linéaire du potentiel (comparer à 9.26). Un lecteur consciencieux obtiendra sans peine que la condition est de la forme

$$\sqrt{E} \gg \sqrt{\hbar^2/ma^2}. \qquad (4)$$

On remarque que lorsque les conditions (3) et (4) sont remplies, l'expression quasi-classique (2) du coefficient de transmission coïncide avec la valeur exacte trouvée dans 2.52.

9.30. L'intégrale dans l'argument de l'exponentielle de l'expression de $D(E)$ donne après le changement de variable $x = a \operatorname{sh} t$ ($\operatorname{sh} t_0 = \sqrt{U_0/E-1} \equiv b^{-1}$)

$$\int_{x_1}^{x_2}|p|dx = 2a\sqrt{2m(U_0-E)}\int_0^{t_0}\sqrt{1-\frac{E}{U_0-E}\operatorname{sh}^2 t}\,dt. \qquad (1)$$

L'intégrale dans l'expression (1) est une intégrale elliptique du second ordre. Pour $E \ll U_0$, cette intégrale se calcule sans peine de façon approchée si l'on tient compte que dans ce cas l'expression sous la racine est proche de l'unité en dehors de la limite supérieure d'intégration, pour laquelle $\mathrm{sh}\ t \gg 1$, et l'on peut poser $\mathrm{sh}^2 t \approx \mathrm{e}^{2t}/4$ (et ceci dans tout l'intervalle d'intégration !), de sorte que l'intégrale prend la forme

$$\int_0^{t_0} \sqrt{1 - b^2 \mathrm{sh}^2 t}\, dt \approx \int_0^{t_0} \sqrt{1 - \frac{b^2}{4}\mathrm{e}^{2t}}\, dt \tag{2}$$

Après le changement de variable $(b/2)\mathrm{e}^t = \sin z$, l'intégrale (2) donne $(b \ll 1)$

$$-1 + \ln[4\sqrt{U_0/E}]. \tag{3}$$

Donc,

$$D(E) \approx \left(\frac{E}{16U_0}\right)^{\frac{2}{\hbar}a\sqrt{2mU_0}} \exp\left(\frac{4}{\hbar}a\sqrt{2mU_0}\right). \tag{4}$$

Les conditions de validité du résultat obtenu sont

$$\frac{a}{\hbar}\sqrt{2mU_0} \gg 1, \qquad E \ll \frac{\hbar}{a}\sqrt{\frac{U_0}{m}}. \tag{5}$$

La première garantit l'application de l'approche quasi classique et la seconde remplace la condition $E \ll U_0$ utilisée pour le calcul de l'intégrale de l'expression (1). Cette substitution vient du fait que dans le calcul approché d'une grandeur f de la forme $f = \mathrm{e}^A$, quand A est calculé de façon approximative, pour satisfaire à la condition $f_{\mathrm{ex}}/f_{\mathrm{app}} \approx 1$, il faut que $|A_{\mathrm{ex}} - A_{\mathrm{app}}| \ll 1$ (et non simplement $A_{\mathrm{ex}}/A_{\mathrm{app}} \approx 1$, et cette particularité doit être prise en compte lorsque $|A| \gg 1$). Un lecteur attentif peut se convaincre sans peine que c'est la seconde des conditions (5) (et non pas la condition $E \ll U_0$) qui est nécessaire pour appliquer (4).

9.31. Le problème peut être résolu de façon analogue à celle qui a permis d'obtenir la formule du coefficient de transmission dans l'approximation quasi-classique

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int |p|dx\right].$$

En supposant que les particules arrivent sur la barrière de la gauche vers la droite, représentons la fonction d'onde à droite du point de rebroussement b sous la forme $(\widetilde{U}(x) < E)$

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_b^x p dx - \frac{i\pi}{4}\right). \tag{1}$$

La fonction d'onde correspondant à (1) au sein de la barrière $0 \leq x < b$ $(\widetilde{U}(x) > E)$ est de la forme

$$\Psi(x) = -\frac{iC}{\sqrt{|p|}} \exp\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^b |p|dx\right] \tag{2}$$

(dans l'expression (2) on a négligé, comme d'habitude, le terme qui diminue exponentiellement avec la profondeur dans le domaine $x < b$). Soulignons que la fonction d'onde au sein de la barrière dans les conditions du problème concerné est de la forme (2) jusqu'à $x = 0$ compris (point de rebroussement gauche).

Pour $x < 0$ la fonction d'onde est de la forme ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$)

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k}}(e^{ikx} + Ae^{-ikx}) \tag{3}$$

(de sorte que le coefficient de transmission vaut $D = |C|^2$).

En raccordant les fonctions d'onde (2) et (3) au point $x = 0$ (en utilisant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée), on obtient

$$\frac{1}{\sqrt{\hbar k}}(1 + A) = -\frac{iC}{\sqrt{|p(0)|}}D_0^{-1/2}, \qquad \frac{ik}{\sqrt{\hbar k}}(1 - A) \approx iC\sqrt{|p(0)|}\frac{1}{\hbar}D_0^{-1/2}, \tag{4}$$

où

$$|p(0)| = \sqrt{2m(\widetilde{U}(0) - E)} \equiv \sqrt{2m(U_0 - E)}, \qquad D_0 = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_0^b |p|dx\right).$$

Selon (4), on obtient sans peine la valeur de C :

$$C = \frac{2\sqrt{|p(0)|\hbar k}}{|p(0)| - i\hbar k}D_0^{1/2},$$

et celle du coefficient de transmission de la barrière :

$$D = 4\frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0}D_0 = 4\frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0}\exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_0^b |p|dx\right).$$

Le facteur devant l'exponentielle dans cette expression est de l'ordre de l'unité (pour $E \sim U_0$), mais pour $E \to 0$ il devient nul.

9.32. En s'appuyant sur les résultats des problèmes 9.27 et 9.31 (Tome I), on peut considérer que le coefficient de transmission de la barrière dans l'approximation quasi-classique est égal à

$$D = 4\frac{\sqrt{E(U_0 - E)}}{U_0}\exp\left[-\frac{4a\sqrt{2m}}{3\hbar U_0}(U_0 - E)^{3/2}\right]. \tag{1}$$

La condition de validité de l'expression (1) est donnée par

$$\frac{4a\sqrt{2m}}{3\hbar U_0}(U_0 - E)^{3/2} \gg 1. \tag{2}$$

On remarque que la valeur exacte du coefficient de transmission de la barrière considérée, trouvée dans le problème 2.53 (Tome I), coïncide, lorsque la condition (2) est remplie, avec l'expression quasi-classique (1).

9.33. On se convainc aisément (de la même façon que pour la résolution du problème 9.15) que pour $\nu < 2$ et $E \to 0$, à de grandes distances x, où le potentiel a un comportement asymptotique $U \sim |x|^{-\nu}$, les conditions de validité de l'approche quasi-classique sont remplies ; de plus, pour le raccordement des fonctions d'onde au voisinage des points de rebroussement on peut se limiter à l'approximation linéaire du potentiel. D'autre part, si les conditions de validité de l'approche quasi-classique sont également remplies pour les valeurs finies de x, alors pour $\nu < 2$ et $E \to 0$ le coefficient de transmission de la barrière est défini au moyen de l'expression quasi-classique

$$D = \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[U(x)-E]}dx\right].$$

L'intégrale dans cette expression diverge pour $E \to 0$ à de grandes distances $|x|$. La partie divergente de cette intégrale se calcule aisément. C'est ainsi qu'à la limite supérieure d'intégration (au voisinage du point de rebroussement droit), on a

$$\begin{aligned}\int_0^{x_2(E)}\sqrt{2m[\alpha_1/x^\nu - E]}dx &= \sqrt{2m}\alpha_1^{1/\nu}E^{-(2-\nu)/2\nu}\int_{a\to 0}^{1} t^{-\nu/2}\sqrt{1-t^\nu}dt \\ &\equiv \sqrt{2m}\alpha_1^{1/\nu}E^{-(2-\nu)/2\nu}C_\nu\end{aligned}$$

(a étant la distance à partir de laquelle le potentiel a déjà une forme asymptotique pour $|x| \to \infty$; en calculant l'intégrale, on a procédé au changement de variable $t = x/x_2(E) \equiv x\cdot(E/\alpha_1)^{1/\nu}$). La partie divergente à la limite inférieure d'intégration $\int_{x_1}^{-a}|p|dx$ se calcule de la même façon.

La contribution de l'intervalle d'intégration $-a < x < a$ pour $E \to 0$ est finie. Donc,

$$\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}|p|dx \approx \frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}C_\nu E^{-(2-\nu)/2\nu}(\alpha_1^{1/\nu}+\alpha_2^{1/\nu})$$

et, respectivement, (pour $E \to 0$)

$$D(E) \propto \exp\left[-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m}C_\nu E^{-(2-\nu)/2\nu}(\alpha_1^{1/\nu}+\alpha_2^{1/\nu})\right] \to 0$$

(voir la remarque concernant la précision d'une expression de la forme e^A, dans le calcul approché de la grandeur A, faite lors de la résolution du problème 9.30).

Pour $\nu > 2$ l'expression quasi-classique de $D(E)$ avec $E \to 0$ n'est plus applicable, car lors du raccordement des solutions quasi-classiques au voisinage des points de rebroussement on ne peut plus se limiter au développement linéaire du potentiel. L'approche quasi-classique donne une valeur du coefficient de transmission $D(E=0)$ non nulle, tandis que sa valeur exacte est égale à zéro.

Dans le cas de $\nu = 2$ l'expression quasi-classique de $D(E)$ pour $E \to 0$ ne s'applique que si $m\alpha_{1,2}/\hbar^2 \gg 1$. La dépendance en énergie du coefficient de transmission est alors fixée par le résultat du problème 9.30.

9.34. Le problème peut être résolu de la façon suivante : les fonctions d'onde quasi-classiques à droite et à gauche du point de rebroussement x_0 sont raccordées à l'aide de la solution exacte de l'équation de Schrödinger au voisinage de ce point.

En supposant que les particules arrivent sur la barrière de la gauche vers la droite, on a dans l'approche quasi-classique la fonction d'onde pour $x > x_0$ de la forme

$$\Psi(x) = \frac{C}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p dx'\right). \tag{1}$$

Pour $x < x_0$, cette fonction est de la forme

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{p}}\left\{\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p dx'\right) + B\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{x_0}^{x} p dx'\right)\right\} \tag{2}$$

(de sorte que le coefficient de transmission vaut $D = |C|^2$; $R = |B|^2$).

La solution de l'équation de Schrödinger au voisinage du point x_0

$$\Psi'' + \alpha(x - x_0)^2\Psi = 0, \qquad \alpha = -mU''(x_0)/\hbar^2 > 0, \tag{3}$$

est donnée par (voir [11])

$$\Psi(x) = \sqrt{x - x_0}\left\{C_1 H^{(1)}_{1/4}\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2\right) + C_2 H^{(2)}_{1/4}\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2\right)\right\}, \tag{4}$$

où $H^{(1,2)}$ est la fonction de Hankel. Compte tenu du comportement asymptotique de ces fonctions

$$H^{(1,2)}_{1/4}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\exp\left\{\pm i\left(z - \frac{3\pi}{8}\right)\right\}, \qquad z \gg 1, \tag{5}$$

on note que dans l'intervalle où $z = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2 \gg 1$, les solutions exacte (4) et quasi-classique (1) sont toutes les deux valables (on admet dans ce cas qu'il existe des valeurs de $z \gg 1$ pour lesquelles le potentiel est encore de la forme $U \approx U_0 + \frac{U''(x_0)}{2}(x - x_0)^2$, et cette condition définit la validité du résultat obtenu plus bas pour D). Comme on a dans ce cas $p = \hbar\sqrt{\alpha}|x - x_0|$, la comparaison de (1), (4), (5) donne $C_2 = 0$, $C_1 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\hbar}}e^{3\pi i/8}C$, et la solution exacte (4) de l'équation de Schrödinger (3) prend la forme

$$\Psi(x) = C_1\sqrt{x - x_0}H^{(1)}_{1/4}\left(\frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2\right). \tag{6}$$

En utilisant la solution de l'équation (3) sous la forme (6) (ou (4)), il faut être attentif au passage des valeurs $(x - x_0) > 0$ aux valeurs $(x - x_0) < 0$, car pour la fonction de Hankel $H^{(1,2)}_{1/4}$ le point $z = 0$ est un point singulier, le point de branchement. Dans le problème considéré pour $(x - x_0) < 0$ la phase de l'argument $z = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2$ de la fonction de Hankel dans l'expression (6) vaut 2π (la phase de $(x - x_0) < 0$ vaut π) et, sous cette forme, l'analyse de la solution (6) est incommode. On doit l'exprimer sous forme des fonctions cylindriques correspondantes de la variable à phase nulle. On y aboutit sans peine en écrivant (6) avec les fonctions de Bessel :

$$\Psi = C_1\sqrt{x - x_0}\left\{(1 + i)J_{1/4}(z) - \sqrt{2}iJ_{-1/4}(z)\right\}. \tag{7}$$

Comme les fonctions de Bessel $J_\nu(z)$ sont de la forme (8)

$$J_\nu(z) = z^\nu f(z^2), \tag{8}$$

où $f(z^2)$ n'est pas singulière en $z = 0$, alors, selon (8), on obtient

$$J_{1/4}(e^{2\pi i}|z|) = iJ_{1/4}(|z|), \qquad J_{-1/4}(e^{2\pi i}|z|) = -iJ_{-1/4}(|z|)$$

($|z|$ a par définition une phase nulle).

Ainsi la solution (6) de l'équation de Schrödinger pour $(x - x_0) < 0$ doit être écrite sous la forme (dans ce cas $\sqrt{x - x_0} = i\sqrt{|x - x_0|}$)

$$\Psi = C_1\sqrt{|x - x_0|}\left\{-(1 + i)J_{1/4}(|z|) - \sqrt{2}iJ_{-1/4}(|z|)\right\}. \tag{9}$$

Grâce au comportement asymptotique de la fonction de Bessel ($|\arg z| < \pi$)

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\sin\left(z - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4}\right),$$

écrivons (9) pour $|z| \gg 1$ sous la forme

$$\Psi = C_1\frac{\sqrt{2|x - x_0|}}{\sqrt{\pi|z|}}\left\{-e^{\frac{i\pi}{8}+i|z|} + (1 - i)e^{-\frac{i\pi}{8}-i|z|}\right\}. \tag{10}$$

D'autre part, pour $(x - x_0) < 0$ et $z = \frac{\sqrt{\alpha}}{2}(x - x_0)^2 \gg 1$, la solution quasi-classique (2) est de la forme (on suppose que dans ce cas il est possible de se limiter au développement $U(x) \approx U(x_0) + \frac{U''(x_0)}{2}(x - x_0)^2$ de sorte que $p = \hbar\sqrt{\alpha}(x - x_0)$)

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left\{\exp\left[-\frac{i\sqrt{\alpha}(x - x_0)^2}{2}\right] + B\exp\left[\frac{i\sqrt{\alpha}(x - x_0)^2}{2}\right]\right\}. \tag{11}$$

L'intervalle considéré ici correspond au domaine de recouvrement des solutions exacte (10) et quasi-classique (11), ce qui permet d'obtenir la valeur $B = -i/\sqrt{2}$ et celle du coefficient de réflexion $R = |B|^2 = 1/2$. Donc, dans les conditions du problème étudié,

$$D(E_0 = U(x_0)) = R(E_0) = 1/2.$$

Chapitre 10

Particules identiques

10.1. Soient χ_{s_z} les fonctions de spin normées ayant une valeur donnée s_z ; $s_z = -s, -s+1, \ldots, s$. Les fonctions de spin du système (non symétrisées) sont de la forme $X = \chi^{(1)}_{s_z}\chi^{(2)}_{s'_z}$. Les combinaisons suivantes de ces fonctions :

a) $X^{(+)}_{s_z s_z} = \chi^{(1)}_{s_z}\chi^{(2)}_{s_z}$, (1)

b) $X^{(+)}_{s_z s'_z} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\chi^{(1)}_{s_z}\chi^{(2)}_{s'_z} + \chi^{(1)}_{s'_z}\chi^{(2)}_{s_z}\right\}, \qquad s_z \neq s'_z$ (2)

c) $X^{(-)}_{s_z s'_z} = \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left\{\chi^{(1)}_{s_z}\chi^{(2)}_{s'_z} - \chi^{(1)}_{s'_z}\chi^{(2)}_{s_z}\right\}, \qquad s_z \neq s'_z$ (3)

normées à l'unité, ont une symétrie déterminée par rapport à la permutation des variables de spin ($X^{(+)}$ – fonctions symétriques, $X^{(-)}$ – fonctions antisymétriques). Le nombre de fonctions indépendantes du type a) est égal à $(2s+1)$ et il est égal à

$$C^2_{2s+1} = \frac{(2s+1)2s}{2!} = s(2s+1)$$

pour les fonctions de type b) et c). Le nombre total d'états symétriques est $(s+1)(2s+1)$ et le nombre total d'états antisymétriques est $s(2s+1)$ (le nombre total de tous les états vaut bien $(2s+1)^2$).

Les fonctions (1)–(3) ne correspondent pas, en général, à une valeur déterminée S du spin total des particules. Toutefois, en se basant sur le résultat obtenu dans le problème 3.39 du Tome I, on peut affirmer que les états avec $S = 2s, 2s-2, 2s-4, \ldots$ sont symétriques et que les états avec $S = 2s-1, 2s-3, \ldots$ sont antisymétriques par rapport à la permutation des spins.

10.2. Pour $f_1 = f_2 = f$, la partie spatiale de la fonction d'onde du système $\Phi = \varphi_f(\mathbf{r}_1)\varphi_f(\mathbf{r}_2)$ est symétrique par rapport à la permutation des coordonnées $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ des particules. Compte tenu de la nature de la symétrie de la fonction d'onde par rapport à la permutation des variables (d'espace et de spin) de deux particules identiques, la partie correspondant au spin de la fonction d'onde doit être symétrique pour les bosons et antisymétrique pour les fermions. Ces fonctions de spin ont été définies dans le problème précédent. Les fonctions d'onde d'états (indépendants) sont

donc de la forme

$$\Psi_{2\text{bos}} = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) X^{(+)}_{s_z s'_z}, \qquad \Psi_{2\text{ferm}} = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) X^{(-)}_{s_z s'_z},$$

quant à leur nombre, il est égal à $(s+1)(2s+1)$ pour les bosons (s étant un entier) et $s(2s+1)$ pour les fermions (s étant un demi entier) ; voir 10.1.

Pour $f_1 \neq f_2$, les fonctions d'onde spatiales de la forme

$$\Phi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\varphi_{f_1}(\mathbf{r}_1)\varphi_{f_2}(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_{f_2}(\mathbf{r}_1)\varphi_{f_1}(\mathbf{r}_2)\},$$

présentent une symétrie par rapport à la permutation des coordonnées des particules (la fonction d'onde avec l'indice " + " est symétrique et celle avec l'indice " − " est antisymétrique) et leur combinaison avec les fonctions de spin $X^{(\pm)}$ donne les fonctions d'onde d'états cherchés :

$$\Psi_{2\text{bos},1} = \Phi^{(+)} X^{(+)}_{s_z s'_z}, \qquad \Psi_{2\text{bos},2} = \Phi^{(-)} X^{(-)}_{s_z s'_z},$$
$$\Psi_{2\text{ferm},1} = \Phi^{(+)} X^{(-)}_{s_z s'_z}, \qquad \Psi_{2\text{ferm},2} = \Phi^{(-)} X^{(+)}_{s_z s'_z},$$

dont le nombre est $(2s+1)^2$ (aussi bien pour les bosons que pour les fermions).

Notons que les fonctions d'onde d'états d'un système de deux particules identiques peuvent être trouvées autrement (et de manière plus générale), ce qui sera fait dans le problème suivant.

10.3. Les fonctions d'onde d'états à une particule ont la forme $\psi_{f_i, s_{z,i}} = \psi_{f_i}(\mathbf{r}) \chi_{s_{z,i}}$, où χ_{s_z} est la fonction de spin de la particule correspondant à une projection déterminée du spin s_z (l'indice i de $s_{z,i}$ souligne que pour chaque état la projection du spin présente une valeur déterminée). Le choix des n valeurs $s_{z,i}$ définit de façon univoque n états à une particule différents

$$\psi_{f_1, s_{z,1}}, \ \psi_{f_2, s_{z,2}}, \ \ldots, \ \psi_{f_n, s_{z,n}} \tag{1}$$

(ces états sont différents, car les f_i le sont).

Pour un nouvel ensemble de valeurs $s'_{z,i}$, on obtient un nouvel ensemble d'états à une particule

$$\psi_{f_1, s'_{z,1}}, \ \psi_{f_2, s'_{z,2}}, \ \ldots, \ \psi_{f_n, s'_{z,n}} \tag{2}$$

et donc un nouvel état du système (il est important de noter qu'ici tous les f_i sont différents ; si, par exemple, $f_1 = f_2$, alors, en changeant les valeurs de $s_{z,i}$ pour effectuer la permutation de $s_{z,1}$ et $s_{z,2}$ on n'aboutirait pas à un nouvel ensemble d'états à une particule). Etant donné que chaque $s_{z,i}$ prend $2s+1$ valeurs, le nombre total d'ensemble d'états à une particule (du type (1), (2)) et donc le nombre d'états à n particules vaut $(2s+1)^n$.

La forme des fonctions d'onde d'états du système s'obtient d'une façon standard : par symétrisation du produit des fonctions d'onde à une particule (1) pour les bosons et par antisymétrisation pour les fermions.

10.4. La forme des fonctions d'onde est déterminée par le fait que les différent états à une particule sont les mêmes ou pas. Il faut donc distinguer trois cas.

a) Les trois particules se trouvent dans un même état : $f_1 = f_2 = f_3 = f$. La fonction Ψ du système, normée à l'unité, est de la forme

$$\Psi = \psi_f(\xi_1)\psi_f(\xi_2)\psi_f(\xi_3).$$

b) Deux des trois états occupés sont les mêmes (par exemple, $f_1 \neq f_2 = f_3$). Alors,

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\psi_{f_1}(\xi_1)\psi_{f_2}(\xi_2)\psi_{f_2}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1)\psi_{f_1}(\xi_2)\psi_{f_2}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1)\psi_{f_2}(\xi_2)\psi_{f_1}(\xi_3)\}. \quad (1)$$

La forme de l'expression entre accolades s'obtient en symétrisant la fonction d'onde par rapport aux variables des particules. Le coefficient numérique $\frac{1}{\sqrt{3}}$ est choisi pour normer Ψ à l'unité : $\int |\Psi|^2 d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3 = 1$. Lors du calcul de l'intégrale de normalisation, des neuf termes de $|\Psi|^2$, seuls trois termes sont non nuls, à cause de la condition d'orthogonalité des fonctions d'onde à une particule :

$$\int \psi^*_{f_i}(\xi)\psi_{f_k}(\xi)d\xi = \delta_{ik}.$$

c) Les trois états occupés sont différents : $f_1 \neq f_2 \neq f_3 \neq f_1$. Dans ce cas

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{6}}\{\psi_{f_1}(\xi_1)\psi_{f_2}(\xi_2)\psi_{f_3}(\xi_3) + \psi_{f_1}(\xi_1)\psi_{f_3}(\xi_2)\psi_{f_2}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1)\psi_{f_1}(\xi_2)\psi_{f_3}(\xi_3) + \psi_{f_2}(\xi_1)\psi_{f_3}(\xi_2)\psi_{f_1}(\xi_3) + \psi_{f_3}(\xi_1)\psi_{f_2}(\xi_2)\psi_{f_1}(\xi_3) + \psi_{f_3}(\xi_1)\psi_{f_1}(\xi_2)\psi_{f_2}(\xi_3)\}. \quad (2)$$

La forme de la fonction d'onde (2) se trouve de la même façon que dans le cas précédent.

10.5. Les états à une particule sont donnés par les fonctions d'onde de la forme $\psi_{s_z} = \varphi(\mathbf{r})\chi_{s_z}$, où χ_{s_z} est une fonction de spin correspondant à une valeur déterminée $s_z = 0, \pm 1$ de la projection du spin. Si les bosons n'étaient pas identiques, les états indépendants du système seraient décrits par les fonctions d'onde

$$\Psi = \varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)\varphi(\mathbf{r}_3)\chi^{(1)}_{s_{z,1}}\chi^{(2)}_{s_{z,2}}\chi^{(3)}_{s_{z,3}} \quad (1)$$

dont le nombre est $3 \times 3 \times 3 = 27$.

Les fonctions d'onde d'un système de bosons identiques sont des combinaisons des fonctions d'onde (1), symétriques par rapport à la permutation des variables de deux particules quelconques (dans ce problème il s'agit en fait de la permutation des variables de spin, vu que la partie spatiale des fonctions d'onde est symétrique). En fixant les valeurs s_z dans (1) et en effectuant la symétrisation de la fonction d'onde,

on obtient la forme des fonctions d'onde indépendantes du système considéré. Ainsi pour l'ensemble de valeurs $s_{z,1} = s_{z,2} = s_{z,3} = 1$ on obtient

$$\Psi_{1,1,1} = \varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)\varphi(\mathbf{r}_3)\chi_1^{(1)}\chi_1^{(2)}\chi_1^{(3)} \ ;$$

et pour l'ensemble $s_{z,1} = s_{z,2} = 1$, $s_{z,3} = 0$

$$\Psi_{1,1,0} = \varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)\varphi(\mathbf{r}_3)\frac{1}{\sqrt{3}}\{\chi_1^{(1)}\chi_1^{(2)}\chi_0^{(3)} + \chi_1^{(1)}\chi_0^{(2)}\chi_1^{(3)} + \chi_0^{(1)}\chi_1^{(2)}\chi_1^{(3)}\}.$$

Ecrivons de même tous les autres ensembles de valeurs $(s_{z,1}, s_{z,2}, s_{z,3})$ engendrant les états indépendants du système : $(1,1,-1)$, $(1,0,0)$, $(1,0,-1)$, $(1,-1,-1)$ $(0,0,0)$, $(0,0,-1)$, $(0,-1,-1)$, $(-1,-1,-1)$ (les ensembles de valeurs $(s_{z,1}, s_{z,2}, s_{z,3})$ que ne diffèrent que par une permutation des nombres $s_{z,\alpha}$, n'engendrent pas de nouveaux états du système). Le nombre total d'états indépendants du système vaut 10. Notons que parmi ces 10 états du système 7 états correspondent à la valeur $S = 3$ du spin total du système, tandis que les 3 autres correspondent à $S = 1$ (voir 10.7).

10.6. Ce problème est analogue au précédent. Les états à une particule sont décrits par les fonctions d'onde $\psi = f(r)Y_{1m}(\mathbf{n})$ (Y_{1m} sont des harmoniques sphériques). Si les bosons n'étaient pas identiques, les états indépendants du système auraient été décrits par les fonctions d'onde ($m_a = 0, \pm 1$)

$$\Psi = f(r_1)f(r_2)f(r_3)Y_{1m_1}(\mathbf{n}_1)Y_{1m_2}(\mathbf{n}_2)Y_{1m_3}(\mathbf{n}_3) \qquad (1)$$

dont le nombre est $3 \times 3 \times 3 = 27$.

Pour obtenir les fonctions d'onde d'un système de bosons identiques, il faut procéder à la symétrisation de cette expression. Le nombre d'états différents du système est égal dans ce cas au nombre d'ensembles différents (m_1, m_2, m_3) qui ne se ramènent pas l'un à l'autre par une permutation.

Ces ensembles sont de la forme : $(1,1,1)$, $(1,1,0)$, $(1,1,-1)$, $(1,0,0)$, $(1,0,-1)$, $(1,-1,-1)$, $(0,0,0)$, $(0,0,-1)$, $(0,-1,-1)$, $(-1,-1,-1)$; le nombre d'états indépendants du système vaut 10.

10.7. Donnons deux démonstrations.

a) Etudions les valeurs possibles L du moment total ($L \leq 3$). L'état avec $m_1 = m_2 = m_3 = 1$ correspond à $L_z = 3$, et, donc, la valeur $L = 3$ est une valeur possible du moment du système. D'après le problème précédent, il n'y a qu'un seul état du système avec $L_z = 2$ qui correspond à l'ensemble $(1,1,0)$. Cet état correspond à la valeur $L = 3$ (pour $L = 3$ on a un état avec $L_z = 2$). Donc il n'y a pas dans le système d'états à $L = 2$. Les états ayant $L_z = 1$ sont au nombre de deux : $(1,1,-1)$, $(1,0,0)$. L'un des états avec $L_z = 1$ correspond à $L = 3$. L'apparition d'un second état indépendant avec $L_z = 1$ ne peut s'expliquer que par l'existence d'états ayant $L = 1$. Sept états indépendants avec $L = 3$ et trois avec $L = 1$ épuisent les dix états du système, de sorte que les états avec $L = 0$ n'existent pas.

b) Une démonstration plus élégante qui s'appuie sur le formalisme tensoriel a été formulée dans les problèmes de la section 4 du chapitre 3 du Tome I.

Les fonctions d'onde des trois états indépendants d'une particule avec $l = 1$ peuvent être choisies sous la forme (x_i étant les composantes de $\mathbf{r}$)

$$\psi_i = x_i f(r).$$

Pour un système de trois particules avec $l = 1$ on peut écrire les fonctions d'onde des états indépendants sous la forme

$$\Psi_{ikl} = x_{1i} x_{2k} x_{3l} f(r_1) f(r_2) f(r_3) \tag{1}$$

La fonction d'onde d'état avec $L = 0$ est un scalaire (qui ne varie pas dans une rotation). A partir de la fonction d'onde (1) on ne peut former qu'une seule fonction scalaire (pour être plus précis, une fonction pseudo-scalaire)

$$\Psi_{L=0} = (\mathbf{r}_1 \cdot [\mathbf{r}_2 \wedge \mathbf{r}_3]) f(r_1) f(r_2) f(r_3) \tag{2}$$

Cette fonction change de signe au cours de la permutation des coordonnées de deux particules et, donc, ne peut décrire l'état d'un système de trois bosons identiques sans spin.

10.8. Si les particules étaient discernables, l'expression

$$dw = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2$$

déterminerait la probabilité de présence de la première particule dans le volume dV_1 et de la seconde dans le volume dV_2. Mais compte tenu de l'indiscernabilité des particules, on ne peut parler que de la probabilité de présence d'une particule (de la première ou de la seconde) au sein de dV_1 et de l'autre dans le volume dV_2, de sorte que la probabilité cherchée est

$$dw = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 + |\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)|^2 dV_1 dV_2 = 2|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 \tag{1}$$

Pour une fonction d'onde normée

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = 1 \tag{2}$$

(l'intégration par rapport aux coordonnées $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ s'effectue dans tout l'espace) la distribution des probabilités (1) est également normée à l'unité. En effet, l'expression (1) doit être intégrée par rapport aux coordonnées $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ dans tout l'espace et le résultat obtenu doit être multiplié par $1/2$, ce qui coïncide avec (2). En calculant la probabilité totale, la sommation (l'intégration) doit s'effectuer suivant tous les événements indépendants. Le facteur $1/2$, mentionné plus haut, tient compte du fait que la permutation de position des volumes dV_1 et dV_2 n'engendre pas de nouvel événement.

On obtient donc les expressions définissant les probabilités de présence des deux particules au sein d'un même volume:

$$w_1 = \int_V \int_V |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2,$$

et d'une particule dans le volume V et de l'autre en dehors de ce volume :

$$w_2 = 2 \int_V \int_{\text{en dehors de } V} |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2.$$

10.9. La fonction d'onde normée est donnée par

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)\} \tag{1}$$

(on a tenu compte de l'orthogonalité des fonctions ψ_1 et ψ_2).

La distribution en coordonnées de la première particule, lorsque la position de l'autre est quelconque, est de la forme

$$dw = \left\{ \int |\Psi(\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}, \mathbf{r}_2)|^2 dV_2 \right\} dV = \frac{1}{2} \{|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2\} dV \tag{2}$$

En vertu de la symétrie de la fonction d'onde, la distribution en coordonnées de la seconde particule est identique ; quant à la distribution en coordonnées d'une des deux particules identiques, elle est égale à la demi-somme.

En se servant des relations

$$\int_{z \geq 0} |\psi_{1,2}(\mathbf{r})|^2 dV = \frac{1}{2} \int |\psi_{1,2}(\mathbf{r})|^2 dV = \frac{1}{2}, \tag{3}$$

on voit sans peine, à l'aide de (2), que la probabilité de présence d'une particule dans le demi-espace $z \geq 0$ est $W_1(z \geq 0) = 1/2$ (dans ce cas la position de la seconde particule n'est pas fixée), tandis que la probabilité de présence dans le domaine $z \geq 0$ des deux particules est

$$W_2(z_{1,2} \geq 0) = \int_{z_1 \geq 0} \int_{z_2 \geq 0} |\Psi_{1,2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = \frac{1}{4} \{1 + 4|S|^2\}, \tag{4}$$

$$S = \int_{z \geq 0} \psi_1^*(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r}) dV, \tag{5}$$

qui diffère de la valeur $1/4$ pour des particules discernables (dans ce dernier cas il n'y a pas lieu de procéder à la symétrisation de la fonction d'onde sous la forme (1)). Le résultat (4) montre l'existence d'interférences entre les particules différentes (mais identiques !). De façon qualitative cette interférence peut être caractérisée, pour des bosons, par une attraction réciproque ($W_2 > W_{\text{disc}} = 1/4$).

10.10. Le problème se résout de façon analogue à (10.9). La fonction d'onde est de la forme (α et β sont les variables de spin de la 1^e et de la 2^e particule) :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2)\} \chi_\alpha \chi_\beta. \tag{1}$$

La distribution en coordonnées d'une particule, la position de l'autre étant quelconque, est d'une forme absolument analogue à celle du problème précédent (voir formule (2) ; ici la sommation doit aussi s'effectuer par rapport aux variables de spin). La probabilité de présence d'une particule, dans le domaine $z \geq 0$, vaut également $1/2$, et la probabilité de présence, dans le domaine $z \geq 0$, des deux particules est donnée par l'expression

$$W_2(z_{1,2} \geq 0) = \frac{1}{4}\{1 - 4|S|^2\} \tag{2}$$

(comparer aux formules (4), (5) du problème 10.9).

Le résultat (2), comme dans le problème précédent, est une illustration de l'existence d'interférences entre les particules identiques. Toutefois, dans le cas des fermions la nature de l'interférence est opposée à celle obtenue avec les bosons, et peut être décrite par une répulsion réciproque.

10.11. Passons des variables $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ aux variables $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ et $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Alors

$$dW = |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 dV_1 dV_2 = \left|\Psi(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2})\right|^2 d\mathbf{R}d\mathbf{r}. \tag{1}$$

L'expression (1) décrit la distribution en coordonnées du centre de masse et de la position relative entre les particules. Après avoir effectué l'intégration par rapport à R on aboutit à la distribution de la position relative des particules :

$$dw = f(\mathbf{r})d^3r, \qquad f(\mathbf{r}) = \int \left|\Psi\left(\mathbf{R} + \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R} - \frac{\mathbf{r}}{2}\right)\right|^2 d\mathbf{R}. \tag{2}$$

Les distributions (1) et (2), lors du changement de $\mathbf{r}$ par $-\mathbf{r}$ qui correspond à une permutation des coordonnées des particules, ne se modifient pas.

Compte tenu de (2), on remarque que l'expression donnée dans l'énoncé correspond à $f(\mathbf{r} = 0)$, c'est-à-dire à la densité de probabilité de présence des particules en un même point de l'espace.

10.12. Dans le problème à deux corps, les variables du centre de masse $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/(m_1 + m_2)$ et du mouvement relatif $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ sont séparables et la fonction d'onde du système peut s'écrire sous la forme

$$\Psi_{\alpha\beta} = \psi(\mathbf{R}, t)\psi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) \tag{1}$$

(ou, dans le cas général, sous la forme d'une superposition de ces fonctions), α, β étant les variables de spin des particules.

Pour des particules identiques $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$. Avec la permutation des particules R ne varie pas et la symétrie (ou l'antisymétrie) de la fonction d'onde (1) n'impose aucune restriction à la fonction d'onde $\psi(\mathbf{R}, t)$ décrivant le mouvement libre du centre de masse. La symétrie de la fonction d'onde du système est complètement portée par la fonction d'onde $\psi_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t)$ décrivant le mouvement relatif.

10.13. Lors de la permutation des coordonnées spatiales des deux particules, le rayon vecteur $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ du mouvement relatif change de signe. Cette transformation équivaut à l'inversion des coordonnées (par rapport au centre de masse). Compte tenu de la parité connue $(-1)^L$ des harmoniques sphériques Y_{LM}, on voit que, dans l'état de moment relatif L, la permutation des coordonnées $\mathbf{r}_{1,2}$ conduit à la multiplication de la fonction d'onde du système par $(-1)^L$. Dans ce cas, la condition de symétrie des fonctions d'onde d'un système de bosons identiques exige que la permutation des variables de spin ne modifie pas les fonctions d'onde dans les états orbitaux pairs et qu'elle en change le signe dans les états orbitaux impairs. En utilisant le résultat du problème 3.39, on trouve que :

a) pour $L = 0, 2, 4, \ldots$ les valeurs possibles de S sont $2s, 2s-2, \ldots, 0$;

b) pour $L = 1, 3, 5, \ldots$ les valeurs possibles de S sont $2s-1, 2s-3, \ldots, 1$.

En particulier, pour $s = 0$, seules les valeurs paires de L sont possibles. Un corollaire de ce résultat est, par exemple, l'interdiction des désintégrations d'une particule neutre de spin $S = 1$ (méson vectoriel) en deux mésons π^0, car $s_\pi = 0$.

10.14. Pour les valeurs paires de L, les valeurs possibles de S sont également paires : $2s-1, 2s-3, \ldots, 0$. Pour les L impairs, S ne peut prendre que des valeurs impaires : $2s, 2s-2, \ldots, 1$.

10.15. L'équation de Schrödinger du mouvement relatif (le mouvement libre du centre de masse n'est d'aucun intérêt) est celle de l'oscillateur sphérique qui a été résolue dans le problème 4.23. Selon ce problème ($\mu = m/2$ étant la masse réduite), on trouve

$$E_N = \hbar\omega(N + 3/2), \qquad N = n_1 + n_2 + n_3 \quad (\omega = \sqrt{k/\mu}), \tag{1}$$

$$\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \psi^{\mathrm{osc}}_{n_1}(x)\psi^{\mathrm{osc}}_{n_2}(y)\psi^{\mathrm{osc}}_{n_3}(z), \qquad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \tag{2}$$

Cette solution ne tient pas compte de la condition d'identité des particules qui exige la symétrie de la fonction d'onde de deux bosons identiques sans spin par rapport à la permutation des coordonnées des particules. Dans cette permutation, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ change de signe, tandis que les fonctions d'onde (2) sont multipliées par $(-1)^{n_1+n_2+n_3} = (-1)^N$, comme on le voit facilement, en utilisant la parité connue des fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur. Ainsi, les seules solutions (1), (2) de l'équation de Schrödinger pour un système de bosons identiques correspondent aux valeurs pairs de N, tandis que les valeurs impairs de N sont interdites. Le spectre d'énergie dans le système du centre d'inertie se détermine par l'expression (1) avec $N = 0, 2, 4 \ldots$

10.16. Notons $\widehat{P}_{13}$ l'opérateur permutation des coordonnées de la 1e et de la 3e particule. Etant donné que dans le système du centre d'inertie $\mathbf{r}_3 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, on a $\widehat{P}_{13}\mathbf{r}_1 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, $\widehat{P}_{13}\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_2$ et, donc, $\widehat{P}_{13}(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{r}_2$. De façon analogue, $\widehat{P}_{23}(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) = -\mathbf{r}_1 \cdot (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$. La symétrisation de la grandeur $(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)$ donne l'expression

$$-\frac{1}{3}(\mathbf{r}_1^2 + \mathbf{r}_2^2 + \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2).$$

10.17. La fonction d'onde avec $L = 0$ ne varie pas dans une rotation du système de coordonnées ; c'est une fonction scalaire (ou pseudo-scalaire, suivant la parité de l'état). Dans le système du centre d'inertie de trois particules, les rayons vecteurs de deux des particules $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ sont indépendants (alors $\mathbf{r}_3 = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$). Avec les vecteurs $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ on peut former les grandeurs scalaires suivantes : $\mathbf{r}_1^2$, $\mathbf{r}_2^2$, $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$ qui sont des vrais scalaires (et non pas des pseudo-scalaires !). La fonction d'onde $\Psi_{L=0}$ est donc une fonction de la forme

$$\Psi_{L=0} = f(\mathbf{r}_1^2, \mathbf{r}_2^2, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2).$$

Dans l'inversion $\mathbf{r}_{1,2} \to -\mathbf{r}_{1,2}$, cette fonction ne varie pas : $\widehat{R}\Psi_{L=0} = \Psi_{L=0}$. L'état $L = 0$ a donc une parité positive (pour éviter tout malentendu, soulignons qu'il s'agit de la parité orbitale).

10.18. Représentons l'opérateur a sous la forme

$$a = \frac{a + a^\dagger}{2} + i\frac{a - a^\dagger}{2i}.$$

On obtient la relation de commutation des parties hermitienne $A = \frac{1}{2}(a + a^\dagger)$ et antihermitienne $i\widehat{B} = \frac{1}{2}(a - a^\dagger)$: $[\widehat{A}, \widehat{B}] = i/2$ (on a utilisé $[a, a^\dagger] = 1$).

10.19. Comme les commutateurs $[\widehat{p}, \widehat{x}] = \hbar/i$ et $[a, a^\dagger] = 1$ sont des grandeurs constantes, on peut prendre des combinaisons linéaires $a = \alpha\widehat{x} + \beta\widehat{p}$, $a^\dagger = \alpha^*\widehat{x} + \beta^*\widehat{p}$ et choisir de façon appropriée les paramètres α et β

$$[a, a^\dagger] = i\hbar(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta) = 1.$$

Le choix de α et β n'est pas univoque. On peut, par exemple, prendre $\alpha = 1/\sqrt{2}L$ et $\beta = iL/\sqrt{2}\hbar$ (L est un paramètre réel ayant la dimension d'une longueur ; les opérateurs a, $a^\dagger$, à la différence de $\widehat{x}$ et $\widehat{p}$, sont sans dimension). Dans ce cas l'état vide de particules fictives se trouve à partir de l'équation

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \qquad \text{ou} \qquad \left(\frac{x}{L} + L\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi_0(x) = 0,$$

d'où

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi L^2}} e^{-x^2/2L^2} \qquad (\langle 0|0\rangle = 1).$$

10.20. Les opérateurs $\hat{a}$ et $\hat{a}^\dagger$ agissent sur des états $|\Psi\rangle$ de la forme

$$|\Psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle + \ldots = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle. \tag{1}$$

où le symbole $|n\rangle$ signifie état à n particules. Dans ce cas $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Pour les fermions, les états $n \geq 2$ n'existent pas (de sorte que dans l'expression (1) seuls les états vide $|0\rangle$ et à une particule $|1\rangle$ doivent être gardés).

Pour les bosons, les fonctions propres et les valeurs propres de l'opérateur $\hat{a}$ se trouvent à partir de la solution de l'équation $\hat{a}|\Psi\rangle = \alpha|\Psi\rangle$. Comme

$$\hat{a}|\Psi\rangle = \hat{a}\sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{n}|n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1}\sqrt{n+1}|n\rangle,$$

les coefficients c_n doivent vérifier la relation

$$\sum_{n=0}^{\infty}(c_{n+1}\sqrt{n+1} - \alpha c_n)|n\rangle = 0,$$

d'où il vient

$$c_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}}c_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}}\frac{\alpha}{\sqrt{n}}c_{n-1} = \ldots = \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}c_0,$$

(on a utilisé le fait que les états $|n\rangle$ sont indépendants). La condition de normalisation

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}|c_n|^2 = 1$$

donne

$$|c_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} = 1, \qquad |c_0|^2 = e^{-|\alpha|^2}.$$

Les résultats obtenus plus haut signifient que la valeur propre de l'opérateur $\hat{a}$ est un nombre complexe quelconque α, la fonction propre correspondante pouvant être normée à 1. La distribution du nombre de particules est

$$w_n = |c_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2}.$$

C'est une distribution de Poisson. Ces états sont appelés états cohérents.

L'équation aux fonctions propres et aux valeurs propres de l'opérateur $\hat{a}^\dagger$ n'a pas de solution.

Pour les fermions, les opérateurs $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ ont chacun une fonction propre : $|0\rangle$ pour la fonction propre de $\hat{a}$ et $|1\rangle$ pour la fonction propre de $\hat{a}^\dagger$; les valeurs propres correspondantes sont toutes les deux égales à 0.

10.21. Compte tenu des relations $\hat{b}^2 = 0$, $\hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} = 1$, on obtient

$$\hat{n}^2 = (\hat{b}^\dagger\hat{b})^2 = \hat{b}^\dagger\hat{b}(1 - \hat{b}\hat{b}^\dagger) = \hat{b}^\dagger\hat{b} = \hat{n}.$$

Comme $\hat{n}^2 = \hat{n}$, les valeurs propres vérifient aussi la relation $n^2 = n$, d'où $n = 0$ ou $n = 1$.

10.22. Les relations algébriques vérifiées par les opérateurs (y compris la commutativité et l'anticommutativité) conservent leur forme dans une transformation unitaire

(voir 1.61 du Tome I). Pour les fermions $\hat{a}^2 = 0$, or $\hat{a}'^2 = (\hat{a} + \alpha)^2 = 2\alpha\hat{a} + \alpha^2 \neq 0$, et donc cette transformation n'est pas unitaire (les opérateurs $\hat{a}'$, $\hat{a}'^\dagger$ ne sont pas des opérateurs d'annihilation et de création).

Pour les bosons $[a', a'^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, et cette transformation est unitaire (on pourra rechercher la forme explicite de l'opérateur unitaire $\widehat{U}$ opérant cette transformation $\hat{a}' = \widehat{U}\hat{a}\widehat{U}^\dagger$).

L'état vide de "nouvelles" particules $|0'\rangle$ peut s'écrire à l'aide des états initiaux sous la forme

$$|0'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle,$$

où $|n\rangle$ décrit l'état à n particules initiales.

L'équation qui détermine l'état vide $\hat{a}'|0'\rangle = 0$ peut être écrite comme $a|0'\rangle = -\alpha|0'\rangle$. Sous cette forme elle peut être assimilée de façon formelle à une équation aux fonctions propres et aux valeurs propres de l'opérateur $\hat{a}$ ($-\alpha$ étant les valeurs propres, $|0'\rangle$ les fonctions propres). Cette équation a été résolue dans le problème 10.20 auquel nous renvoyons le lecteur. $|0'\rangle$ est donc un état cohérent et sa distribution en nombre de particules initiales est

$$w_n = |c_n|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \mathrm{e}^{-|\alpha|^2}.$$

10.23. *Pour les fermions, la transformation est unitaire à condition que* $\hat{a}'^2 = (\alpha\hat{a} + \beta\hat{a}^\dagger)^2 = \alpha\beta = 0$ et $[\hat{a}', a'^\dagger]_+ = \alpha^2 + \beta^2 = 1$, soit seulement dans le cas trivial $\alpha = \pm 1$, $\beta = 0$ (ou $\alpha = 0$, $\beta = \pm 1$; voir problème suivant).

Pour les bosons, cette transformation est unitaire si l'on satisfait la condition suivante : $\alpha^2 - \beta^2 = 1$ (alors, $\beta^2/\alpha^2 < 1$ et $\alpha^2 \geq 1$) et on peut écrire l'état $|0'\rangle$ sous la forme

$$|0'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle.$$

Compte tenu des relations $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$, $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, écrivons l'équation définissant l'état $|0'\rangle$ ($\hat{a}'|0'\rangle = 0$) sous la forme

$$a'|0'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha c_n \sqrt{n}|n-1\rangle + \beta c_n \sqrt{n+1}|n+1\rangle) =$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha\sqrt{n+1}c_{n+1} + \beta\sqrt{n}c_{n-1})|n\rangle = 0 \qquad (c_{-1} \equiv 0).$$

D'où

$$c_{n+1} = -\frac{\beta}{\alpha}\frac{\sqrt{n}}{\sqrt{n+1}} c_{n-1}. \tag{1}$$

Selon (1), pour les n impairs $c_n = 0$; pour les n pairs $n = 2k$, on obtient

$$c_{2k} = -\frac{\beta}{\alpha}\frac{\sqrt{2k-1}}{\sqrt{2k}} c_{2k-2} = \ldots = \left(-\frac{\beta}{\alpha}\right)^k \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{2^k k!}} c_0.$$

En définissant c_0 à partir de la condition de normalisation

$$\langle 0'|0'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |c_{2k}|^2 = |c_0|^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k-1)!!}{2^k k!} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^{2k} =$$

$$= |c_0|^2 \frac{1}{\sqrt{1-(\beta/\alpha)^2}} = |\alpha||c_0|^2 = 1,$$

on obtient la distribution du nombre de particules initiales dans l'état vide de "nouvelles" particules sous la forme

$$w_n = |c_n|^2 = \begin{cases} \dfrac{(n-1)!!}{n!!} \left(\dfrac{\beta}{\alpha}\right)^n \frac{1}{|\alpha|}, & \text{pour } n \text{ pair} \\ 0, & \text{pour } n \text{ impair} \end{cases}$$

10.24. Pour les fermions, cette transformation est unitaire car leurs propriétés essentielles se conservent : $(\hat{a}')^2 = (\hat{a}'^{\dagger})^2 = 0$, $[\hat{a}', \hat{a}'^{\dagger}]_+ = 1$. L'état vide de "nouvelles" particules $|0'\rangle$ est un état à une particule initiale $|1\rangle$ et, inversement, à l'état à une particule "nouvelle" $|1'\rangle$, correspond l'état vide $|0\rangle$ des particules initiales. Ces "nouvelles" particules peuvent être assimilées à des trous.

Pour les bosons, cette transformation n'est pas unitaire, car $[a', a'^{\dagger}] = -1$ (à la différence de $[a, a^{\dagger}] = 1$) et les opérateurs $\hat{a}'$, $\hat{a}'^{\dagger}$ ne peuvent être considérés comme des opérateurs d'annihilation et de création.

10.25. La relation $|1\rangle = \sum_f C_f \hat{a}_f^{\dagger}|0\rangle$ est équivalente à la représentation de la fonction d'onde Ψ sous forme d'une superposition de fonctions d'onde Ψ_f d'états à valeurs déterminées des nombres quantiques f : $\Psi = \sum_f C_f \Psi_f$. Ainsi C_f est une fonction d'onde de cet état en représentation f.

Etant donné que l'opérateur $\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ produit une particule au point $\mathbf{r}$, $\varphi(\mathbf{r})$ est une fonction d'onde en représentation $\mathbf{r}$ ($f \equiv \mathbf{r}$).

10.26. Les opérateurs $a_{f_i}^{\dagger}$ et $a_{g_k}^{\dagger}$ (et, respectivement, $\hat{a}_{f_i}$ et $\hat{a}_{g_k}$) sont liés par les relations linéaires

$$a_{f_i}^{\dagger} = \sum_k C(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}^{\dagger}, \qquad \hat{a}_{f_i} = \sum_k C^*(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}. \tag{1}$$

Pour définir $C(f_i, g_k)$, appliquons l'égalité (1) à l'état vide

$$\hat{a}_{f_i}^{\dagger}|0\rangle = \sum_k C(f_i, g_k) \hat{a}_{g_k}^{\dagger}|0\rangle.$$

Cette égalité est équivalente à la relation entre les fonctions d'onde (voir problème précédent)

$$\Psi_{f_i} = \sum_k C(f_i, g_k) \Psi_{g_k}, \tag{2}$$

où $\Psi_{f_i(g_k)}$ sont les fonctions propres des opérateurs dont les valeurs propres constituent les ensembles complets de f et g. Selon (2), on obtient

$$C(f_i, g_k) = \int \Psi^*_{g_k} \Psi_{f_i} d\tau.$$

Notons que $C(f_i, g_k)$ sont les fonctions propres Ψ_{f_i} en représentation g. De façon analogue, on obtient les relations

$$a^\dagger_{g_k} = \sum_k C^*(f_i, g_k) a^\dagger_{f_i}, \qquad \hat{a}_{g_k} = \sum_k C(f_i, g_k) a_{f_i}. \tag{3}$$

10.27. Si $f_1 \neq f_2$ le vecteur d'état $|2\rangle = \hat{a}^\dagger_{f_1} a^\dagger_{f_2} |0\rangle$, indiqué dans l'énoncé, est normé à l'unité. En effet

$$\langle 2|2\rangle = \langle 0|\hat{a}_2 \hat{a}_1 a^\dagger_1 a^\dagger_2 |0\rangle = \langle 0|a_2(1 \pm \hat{a}^\dagger_1 \hat{a}_1) \hat{a}^\dagger_2 |0\rangle =$$
$$= \langle 0|1 \pm \hat{a}^\dagger_2 a_2 \pm a_2 a^\dagger_1 (\pm \hat{a}^\dagger_2 \hat{a}_1)|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$$

(pour abréger, on a écrit $\hat{a}_1$ au lieu de $\hat{a}_{f_1}$, etc. ; les signes " + " et " − " se rapportent respectivement aux bosons et aux fermions).

Dans le cas où $f_1 = f_2 \equiv f$, l'état normé de deux bosons peut être écrit sous la forme $|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^\dagger_f)^2 |0\rangle$; pour les fermions, l'état correspondant n'existe pas.

En notant $\psi_{f_i}(\xi)$ ($\xi = \mathbf{r}, \alpha$; α étant la variable de spin) les fonctions d'onde normées à l'unité des états à une particule, on est en mesure d'écrire les fonctions d'onde normées des états à deux particules sous la forme $\Psi(\xi_1, \xi_2) = \langle \xi_1, \xi_2 | 2 \rangle$, avec

$$|\xi_1, \xi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{ij} \psi^*_{f_i}(\xi_1) \psi^*_{f_j}(\xi_2) a^\dagger_{f_i} a^\dagger_{f_j} |0\rangle$$

et donc

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{ij} \psi_{f_i}(\xi_1) \psi_{f_j}(\xi_2) \langle 0| a_{f_j} a_{f_i} a^\dagger_{f_1} a^\dagger_{f_2} |0\rangle.$$

Pour $f_1 \neq f_2$, en utilisant les relations de commutation ou d'anticommutation vérifiées par les opérateurs de création et d'annihilation, on obtient

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{f_1}(\xi_1) \psi_{f_2}(\xi_2) \pm \psi_{f_2}(\xi_1) \psi_{f_1}(\xi_2) \}.$$

De même pour les bosons avec $f_1 = f_2 \equiv f$, on trouve

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \psi_f(\xi_1) \psi_f(\xi_2).$$

On voit que la forme des fonctions d'onde vient directement de la représentation en nombre d'occupation, qui tient compte de l'indiscernabilité des particules.

10.28. Pour les ensembles de nombres quantiques f_1, f_2, f_3 différents, l'état à trois particules est normé : $\langle 3|3\rangle = 1$ (aussi bien pour les bosons que pour les fermions ;

comparer à 10.27). La fonction d'onde du système en représentation $\mathbf{r}$ s'exprime au moyen d'un produit symétrisé (ou antisymétrisé) des fonctions d'onde $\psi_f(\xi)$ d'états à une particule. Pour les bosons, la forme explicite de cette fonction est donnée dans la solution du problème 10.4 (formule (2)).

Pour les fermions, la fonction d'onde s'obtient à partir de sa représentation sous forme de déterminant (déterminant de Slatter)

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_{f_1}(\xi_1) & \psi_{f_1}(\xi_2) & \psi_{f_1}(\xi_3) \\ \psi_{f_2}(\xi_1) & \psi_{f_2}(\xi_2) & \psi_{f_2}(\xi_3) \\ \psi_{f_3}(\xi_1) & \psi_{f_3}(\xi_2) & \psi_{f_3}(\xi_3) \end{vmatrix}.$$

10.29. Pour un système de N particules, les opérateurs considérés sont de la forme

$$\widehat{H} = \sum_a \frac{\widehat{\mathbf{p}}_a^2}{2m}, \qquad \widehat{\mathbf{P}} = \sum_a \widehat{\mathbf{p}}_a, \qquad \widehat{\mathbf{R}}_{c.i.} = \frac{1}{N} \sum_a \widehat{\mathbf{r}}_a = \frac{1}{N} \sum_a \mathbf{r}_a, \tag{1}$$

où les sommes sont effectuées sur toutes les particules du système. Ces opérateurs agissent dans l'espace des fonctions d'onde $\Psi(\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$ ($\xi = \mathbf{r}$, α ; α étant la variable de spin).

Les opérateurs (1) s'expriment au moyen de la somme d'opérateurs à une particule, c'est-à-dire qu'ils sont de la forme $\sum_a \widehat{f}(\xi_a)$. Suivant la règle générale (voir, par exemple, [1]) la forme de ces opérateurs en seconde quantification, $\widehat{F}$, est donnée par l'expression

$$\widehat{F} = \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi) \widehat{f} \widehat{\Psi}(\xi) d\xi \tag{2}$$

où $\widehat{\Psi}(\xi)$ est l'opérateur de champ (ou opérateur Ψ) qui est l'opérateur d'annihilation de la particule au point $\mathbf{r}$ et dans l'état de spin correspondant (l'opérateur $\widehat{\Psi}^\dagger(\xi)$ crée la particule).

L'opérateur (2) peut également être exprimé au moyen des opérateurs de création et d'annihilation $\hat{a}_i^\dagger$ et $\hat{a}_i$ d'une particule dans des états $\psi_{g_i}(\xi)$ définis par les nombres quantiques g_i d'un ensemble complet (arbitraire)

$$\widehat{F} = \sum_{i,k} f_{ik} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k, \tag{3}$$

où les éléments matriciels

$$f_{ik} = \int \psi_{g_i}^*(\xi) \widehat{f} \psi_{g_k}(\xi) d\xi$$

sont ceux de l'opérateur à une particule (la matrice) $\widehat{f}$ en représentation g. En ce sens, l'expression (2) est un cas particulier de (3) correspondant à l'utilisation dans (3) de la représentation $\mathbf{r}$ (dans ce cas le rôle de a_{g_i} est joué par les opérateurs $\hat{a}_{\mathbf{r},\alpha} \equiv \widehat{\Psi}(\xi)$. Mais si, dans l'expression (3), on utilise la représentation $\mathbf{p}$ l'opérateur $\widehat{F}$ prend alors la forme (σ caractérise l'état de spin ; par exemple, $\sigma \equiv s_z$)

$$\widehat{F} = \sum_{\mathbf{p},\sigma,\mathbf{p}',\sigma'} (f)_{\mathbf{p},\sigma}^{\mathbf{p}',\sigma'} \hat{a}_{\mathbf{p}',\sigma'}^\dagger a_{\mathbf{p},\sigma}. \tag{4}$$

En utilisant la forme explicite de l'opérateur impulsion $\widehat{\mathbf{p}}$, on obtient d'après les formules (1), (2), (4) les opérateurs cherchés :

a) $\widehat{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\Delta\widehat{\Psi}(\xi)d\xi = \sum\limits_{\mathbf{p},\sigma} \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}\sigma}\hat{a}_{\mathbf{p}\sigma}$;

b) $\widehat{\mathbf{P}} = -i\hbar\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\boldsymbol{\nabla}\widehat{\Psi}(\xi)d\xi = \sum\limits_{\mathbf{p}\sigma} \mathbf{p}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{p}\sigma}\hat{a}_{\mathbf{p},\sigma}$;

c) $\widehat{\mathbf{R}}_{\text{c.i.}} = \dfrac{1}{N}\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\mathbf{r}\widehat{\Psi}(\xi)d\xi$.

10.30. L'étude de l'évolution temporelle d'un système physique dans le cadre de la seconde quantification peut être menée en utilisant diverses représentations : celle de Schrödinger, de Heisenberg ou la représentation interaction. En représentation de Schrödinger, les opérateurs ne dépendent pas du temps, alors que la fonction d'onde d'état du système[1] (ses arguments sont les nombres d'occupation des différents états et le temps) satisfait à l'équation de Schrödinger $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi = \widehat{H}\Phi$, où $\widehat{H}$ est l'hamiltonien du système. La forme explicite de l'opérateur $\widehat{F}$ (dans le cas où $\widehat{F}$ ne dépend pas explicitement du temps) est donnée par le commutateur $\dot{\widehat{F}} = \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{F}]$.

Dans ce problème

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\Delta\widehat{\Psi}(\xi)d\xi, \qquad \widehat{\mathbf{R}}_{\text{c.i.}} = \frac{1}{N}\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\mathbf{r}'\widehat{\Psi}(\xi')d\xi',$$

de sorte que

$$\widehat{\mathbf{V}}_{\text{c.i.}} = \dot{\widehat{\mathbf{R}}}_{\text{c.i.}} = -\frac{i\hbar}{2mN}\left\{\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\Delta\widehat{\Psi}(\xi)\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi')\mathbf{r}'\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi' - \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\mathbf{r}'\widehat{\Psi}(\xi')\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi)\Delta\widehat{\Psi}(\xi)d\xi d\xi'\right\}. \tag{1}$$

En utilisant les relations

$$\widehat{\Psi}(\xi)\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi') = \delta(\xi - \xi') \pm \dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi')\widehat{\Psi}(\xi)$$

("+" pour les bosons et "–" pour les fermions), écrivons (1) sous la forme

$$\widehat{\mathbf{V}}_{\text{c.i.}} = -\frac{i\hbar}{2mN}\left\{\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\Delta\delta(\xi - \xi')\mathbf{r}'\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi' - \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\mathbf{r}'\delta(\xi - \xi')\Delta\widehat{\Psi}(\xi)d\xi d\xi'\right\} \mp \frac{i\hbar}{2mN}\left\{\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi')\Delta\mathbf{r}'\widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi' - \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi)\mathbf{r}'\Delta\widehat{\Psi}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi)d\xi d\xi'\right\}. \tag{2}$$

Comme $\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi) = \pm\dot{\widehat{\Psi}}^\dagger(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')$, $\widehat{\Psi}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi) = \pm\widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi')$ et $\Delta\mathbf{r}' = \mathbf{r}'\Delta$, on voit que les deux derniers termes dans (2) s'annulent et l'expression (2) s'écrit

$$\widehat{\mathbf{V}}_{\text{c.i.}} = -\frac{i\hbar}{2mN}\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)(\Delta\mathbf{r} - \mathbf{r}\Delta)\widehat{\Psi}(\xi)d\xi. \tag{3}$$

1 Ne pas confondre la fonction d'onde Φ avec les opérateurs $\widehat{\Psi}$, $\widehat{\Psi}^\dagger$!

En utilisant l'égalité

$$\Delta \mathbf{r} - \mathbf{r}\Delta = [\Delta, \mathbf{r}] = 2\boldsymbol{\nabla},$$

on peut réécrire (3) sous la forme

$$mN\widehat{\mathbf{V}}_{\text{cm}} = -i\hbar \int \widehat{\Psi}^{\dagger}(\xi)\boldsymbol{\nabla}\widehat{\Psi}(\xi)d\xi = \widehat{\mathbf{P}} \tag{4}$$

($\widehat{\mathbf{P}}$ étant l'opérateur impulsion du système en seconde quantification).

10.31. En physique classique, la densité du nombre de particules au point $\mathbf{r}$ de l'espace vaut

$$n(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \tag{1}$$

c'est donc une grandeur physique ne dépendant que des coordonnées $\mathbf{r}_a$ des particules (mais non de leurs impulsions !) et de $\mathbf{r}$.

La généralisation quantique de l'expression (1) est l'opérateur densité du nombre de particules, dont la forme en représentation $\mathbf{r}$ est

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a), \tag{2}$$

(comparer à l'opérateur énergie potentielle $\widehat{U}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})$).

L'opérateur (2) est une somme d'opérateurs à une particule $\hat{f}_a = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$, et sa forme est donnée par (voir la solution du problème 10.29) :

$$n(\mathbf{r}) = \int \widehat{\Psi}^{\dagger}(\xi')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\widehat{\Psi}(\xi')d\xi' = \sum_{s_z} \widehat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, s_z)\widehat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z) \tag{3}$$

(rappelons que $\int d\xi$ représente l'intégration par rapport aux coordonnées d'espace et de spin). Les termes dans la somme (3) : $n(\mathbf{r}, s_z) = \widehat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, s_z)\widehat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z)$ sont des opérateurs densité du nombre de particules ayant une projection déterminée du spin s_z.

Les opérateurs $\hat{N}(v)$ et $\hat{N}(v, s_z)$ sont respectivement les opérateurs du nombre de particules et du nombre de particules avec une projection déterminée du spin s_z, dans le volume v. Ils ont la forme

$$\hat{N}(v) = \sum_{s_z} \hat{N}(v, s_z), \qquad \hat{N}(v, s_z) = \int_v \widehat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}, s_z)\widehat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z)d^3r. \tag{4}$$

En intégrant dans (4) sur tout l'espace, on obtient les opérateurs du nombre total de particules du système.

10.32. L'opérateur $\widehat{\mathbf{P}}$ a la forme (voir, par exemple, 10.29)

$$\widehat{\mathbf{P}} = -i\hbar \int \widehat{\Psi}^{\dagger}(\xi')\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\widehat{\Psi}(\xi')d\xi'.$$

En utilisant les relations de commutation pour les bosons,

$$[\widehat{\Psi}(\xi),\widehat{\Psi}(\xi')]_- = 0, \qquad [\widehat{\Psi}^\dagger(\xi),\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')]_- = 0, \qquad [\widehat{\Psi}(\xi),\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')]_- = \delta(\xi-\xi'),$$

on obtient sans peine

$$\begin{aligned}
[\widehat{\mathbf{P}},\widehat{\Psi}(\xi)]_- &= \widehat{\mathbf{P}}\widehat{\Psi}(\xi) - \widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\mathbf{P}} \\
&= -i\hbar\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\widehat{\Psi}(\xi')d\xi'\widehat{\Psi}(\xi) + i\hbar\widehat{\Psi}(\xi)\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\widehat{\Psi}(\xi')d\xi' \\
&= -i\hbar\int \left\{\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\widehat{\Psi}(\xi) - \widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\right\}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\widehat{\Psi}(\xi')d\xi' \\
&= i\hbar\int \delta(\xi-\xi')\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\widehat{\Psi}(\xi')d\xi' = i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\widehat{\Psi}(\xi). \qquad (1)
\end{aligned}$$

De façon analogue on obtient

$$\begin{aligned}
[\widehat{\mathbf{P}},\widehat{\Psi}^\dagger(\xi)]_- &= -i\hbar\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'}\delta(\xi-\xi')d\xi' \\
&= i\hbar\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\delta(\xi-\xi')d\xi' = i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\widehat{\Psi}^\dagger(\xi). \qquad (2)
\end{aligned}$$

Compte tenu des relations d'anticommutativité des opérateurs de champ des fermions

$$[\widehat{\Psi}(\xi),\widehat{\Psi}(\xi')]_+ = [\widehat{\Psi}^\dagger(\xi),\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')]_+ = 0,$$
$$[\widehat{\Psi}(\xi),\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')]_+ = \delta(\xi-\xi'),$$

on se convainc aisément que les relations (1) et (2) sont aussi valables pour les fermions.

10.33.

a) La résolution entreprise par ce procédé se base sur l'égalité $\widehat{F^2} = \widehat{F}^2 = \widehat{F}\widehat{F}$. Comme $\widehat{F} = \sum\limits_a \widehat{f}(\xi_a)$, en appliquant la règle générale donnée dans la solution du problème 10.29, on a

$$\widehat{F^2} = \left\{\int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{f}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi)d\xi\right\}^2. \qquad (1)$$

b) L'opérateur $\hat{A} = \sum\limits_a \widehat{f}^2(\xi_a)$ est l'opérateur d'une grandeur additive (ne pas le confondre avec $\widehat{F^2}$) ; en seconde quantification, il a la forme

$$\hat{A} = \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{f}(\xi)\widehat{f}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi)d\xi.$$

On peut l'écrire également sous la forme

$$\hat{A} = \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{f}(\xi)\delta(\xi-\xi')\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi'. \qquad (2)$$

L'opérateur $\widehat{B} = \sum_{a \neq b} \widehat{f}(\xi_a)\widehat{f}(\xi_b)$ est un opérateur symétrique à deux particules, et selon les règles générales (voir, par exemple, [1]) il a la forme

$$\widehat{B} = \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\widehat{f}(\xi)\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi)d\xi d\xi'. \tag{3}$$

Vu que $\widehat{\Psi}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi) = \pm\widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi')$ (" + " pour les bosons, " − " pour les fermions), on peut écrire (3) sous la forme

$$\widehat{B} = \pm \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\widehat{f}(\xi)\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi'. \tag{4}$$

Compte tenu de la commutativité des opérateurs : $\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi) = \widehat{\Psi}(\xi)\widehat{f}(\xi')$ ($\widehat{f}(\xi')$ est un opérateur qui agit sur les variables ξ', mais pas sur ξ), récrivons (4) de la façon suivante :

$$\widehat{B} = \pm \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{f}(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\widehat{\Psi}(\xi)\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi'.$$

Enfin, en utilisant la relation $\pm\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\widehat{\Psi}(\xi) = \widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi') - \delta(\xi - \xi')$, on obtient

$$\widehat{B} = \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{f}(\xi)\widehat{\Psi}(\xi)\widehat{\Psi}^\dagger(\xi')\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi' - \\ - \int \widehat{\Psi}^\dagger(\xi)\widehat{f}(\xi)\delta(\xi - \xi')\widehat{f}(\xi')\widehat{\Psi}(\xi')d\xi d\xi'. \tag{5}$$

Vu que $\widehat{F^2} = \widehat{A} + \widehat{B}$, alors, en utilisant (2) et (5), on aboutit à l'expression (1) de $\widehat{F^2}$ obtenue plus haut par une autre méthode.

10.34. Vu que les opérateurs densité du nombre de particules

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{s_z} \widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}, s_z)\widehat{\Psi}(\mathbf{r}, s_z)$$

(voir 10.31) commutent entre eux en différents points de l'espace : $[n(\mathbf{r}_1), n(\mathbf{r}_2)] = 0$ (on laisse au lecteur le soin de s'en convaincre par lui-même) l'opérateur cherché est donné par le produit

$$n(\mathbf{r}_1)n(\mathbf{r}_2) = \sum_{s'_z, s''_z} \widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_1, s'_z)\widehat{\Psi}(\mathbf{r}_1, s'_z)\widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2, s''_z)\widehat{\Psi}(\mathbf{r}_2, s''_z). \tag{1}$$

L'opérateur (1) est, comme il se doit, hermitien.

10.35. Dans l'expression de l'opérateur densité du nombre de particules $n(\mathbf{r}) = \widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})\widehat{\Psi}(\mathbf{r})$ (voir 10.31), exprimons les opérateurs $\widehat{\Psi}$ au moyen des opérateurs d'annihilation $a_\mathbf{k}$ et de création $a^\dagger_\mathbf{k}$ ($\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ est l'impulsion de la particule) :

$$\widehat{\Psi}(\mathbf{r}) = \sum_\mathbf{k} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_\mathbf{k}, \qquad \widehat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_\mathbf{k} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a^\dagger_\mathbf{k}$$

de sorte que

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \mathrm{e}^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)\cdot \mathbf{r}} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2}. \tag{1}$$

La densité moyenne du nombre de particules, $\overline{n(\mathbf{r})}$, s'obtient par le calcul de la valeur moyenne de l'opérateur (1) dans l'état fondamental du gaz de Bose $|\Psi_0\rangle = |N_{\mathbf{k}=0}, 0_{\mathbf{k}\neq 0}\rangle$ (dans l'état fondamental, toutes les particules possèdent une impulsion nulle, de sorte que les nombres d'occupation des états excités sont nuls, $n_{\mathbf{k}\neq 0} = 0$). On a manifestement

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} | \Psi_0 \rangle = \begin{cases} N, & \mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 = 0, \\ 0, & \text{dans les autres cas,} \end{cases}$$

et pour $\overline{n}$ on a un résultat naturel : $\overline{n} = N/V$.

Le nombre moyen de particules dans le volume v s'obtient par le calcul de la valeur moyenne de l'opérateur correspondant

$$\hat{N}(v) = \int_v \hat{n}(\mathbf{r}) d^3 r$$

qui donne :

$$\overline{N(v)} \equiv \langle \Psi_0 | \hat{N}(v) | \Psi_0 \rangle = \int_v \langle \Psi_0 | \hat{n}(\mathbf{r}) | \Psi_0 \rangle d^3 r = \frac{Nv}{V}. \tag{2}$$

Pour le calcul de la fluctuation du nombre de particules, il faut calculer la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{N}^2(v)$ dans l'état $|\Psi_0\rangle$. On a

$$\begin{aligned} N^2(v) &= N(v) N(v) \\ &= \frac{1}{V^2} \int_v \int_v \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\cdot \mathbf{r}} \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)\cdot \mathbf{r}'} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} d^3 r d^3 r'. \end{aligned} \tag{3}$$

Pour calculer $\langle \Psi_0 | \hat{N}^2(v) | \Psi_0 \rangle$, cherchons d'abord

$$\langle \Psi_0 | \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1} \hat{a}_{\mathbf{k}_2} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_3} \hat{a}_{\mathbf{k}_4} | \Psi_0 \rangle. \tag{4}$$

En utilisant la forme explicite de $|\Psi_0\rangle$ on se convainc sans peine que les grandeurs (4) ne sont différentes de zéro que si $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4 = 0$ et $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$; de plus, elles sont égales à N^2 pour $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 = 0$ et à N pour $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 \neq 0$. La valeur de $\overline{N^2(v)}$ a la forme

$$\overline{N^2(v)} = \frac{1}{V^2} \int_v \int_v \left\{ N^2 + N \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \right\} d^3 r d^3 r'. \tag{5}$$

Vu que

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}\neq 0} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} = \frac{1}{V} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} - 1 \right\} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{V}. \tag{6}$$

(on a tenu compte dans (6) du fait que le système de fonctions $\Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ est complet), l'intégrale de l'expression (5) se calcule facilement

$$\overline{N^2(v)} = \frac{N^2 v^2}{V^2} + \frac{Nv}{V} - \frac{Nv^2}{V^2}, \tag{7}$$

et donc

$$\overline{(\Delta N(v))^2} = \overline{N^2(v)} - \overline{N(v)}^2 = \frac{Nv}{V}\left(1 - \frac{v}{V}\right). \tag{8}$$

Pour $v = V$ on a $\overline{(\Delta N(V))^2} = 0$, résultat évident, car le nombre total de particules dans le système vaut N et ne fluctue pas. Si $v \ll V$, on a, selon (8), $\overline{(\Delta N(v))^2} \approx Nv/V = \overline{N(v)}$.

Notons que, pour un système de N particules classiques sans interaction se trouvant dans un volume V, la distribution du nombre de particules N_v dans le volume v est donnée par la distribution binomiale

$$W(N_v) = \frac{N!}{N_v!(N - N_v)!}\left(\frac{v}{V}\right)^{N_v}\left(1 - \frac{v}{V}\right)^{N - N_v}. \tag{9}$$

Le calcul des valeurs moyennes $\overline{N_v}$, $\overline{N_v^2}$, $\overline{(\Delta N_v)^2}$ aboutit dans ce cas aux mêmes résultats que ceux obtenus plus haut (2), (7), (8) (voir le problème suivant).

10.36. La solution de ce problème s'obtient de la même façon que dans le problème 10.35 pour le calcul de $\overline{N^2(v)}$. L'opérateur de la grandeur $n_1 n_2$ a la forme (voir 10.34)

$$n_1 n_2 = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \frac{1}{V^2} e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}_1 + i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{r}_2} a^\dagger_{\mathbf{k}_1} a_{\mathbf{k}_2} a^\dagger_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4},$$

et sa valeur moyenne

$$\overline{n_1 n_2} = \langle\Psi_0|n_1 n_2|\Psi_0\rangle = \frac{1}{V^2}\left\{N^2 + N\sum_{\mathbf{k}\neq 0} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}\right\} \tag{1}$$

vient directement de la valeur trouvée dans le problème précédent pour l'élément matriciel (4).

La sommation dans (1) se fait aisément à l'aide de la formule (6) du problème précédent (dans ce cas le terme avec δ s'annule, car $\mathbf{r}_1 \neq \mathbf{r}_2$) et on a

$$\overline{n_1 n_2} = \frac{N^2}{V^2} - \frac{N}{V^2}\ ; \tag{2}$$

quant à la fonction de corrélation, elle est égale à

$$\nu = -\frac{N}{\overline{n}V^2} = -\frac{1}{V} = -\frac{\overline{n}}{N}. \tag{3}$$

Pour mieux comprendre les résultats (2) et (3), on peut étudier le cas de particules classiques n'interagissant pas entre elles. Prenons à cette fin la grandeur $\overline{n_1 dV_1 n_2 dV_2}$

où dV_1 et dV_2 sont des volumes infiniment petits au voisinage des points $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$. Vu que ndV est le nombre de particules dans le volume dV, la grandeur considérée est la valeur moyenne du produit des nombres de particules dans les volumes dV_1 et dV_2. Comme dV_1 et dV_2 sont petits, on peut négliger les probabilités de présence de plus d'une particule dans ces volumes (dans la grande majorité des cas il est peu probable que les particules soient présentes dans de si petits volumes), de sorte que

$$\overline{n_1 dV_1 n_2 dV_2} = \sum_{N_1,N_2} N_1 N_2 W(N_1, N_2) \approx W(1,1), \tag{4}$$

où $W(N_1, N_2)$ est la probabilité de présence de N_1 particules dans le volume dV_1 et de N_2 particules dans le volume dV_2. Pour calculer $W(1,1)$, notons que la probabilité de présence d'une particule dans le volume dV_1 est égale à NdV_1/V ; en multipliant cette grandeur par la probabilité qu'une des $(N-1)$ autres particules occupe le volume dV_2 donnée par $(N-1)dV_2/V$, on obtient

$$W(1,1) = \frac{N(N-1)}{V^2} dV_1 dV_2. \tag{5}$$

Il s'ensuit de (4) et (5) que $\overline{n_1 n_2} = \dfrac{N^2}{V^2} - \dfrac{N}{V^2}$, expression coïncidant avec (2).

Pour des particules classiques, on trouve donc une valeur de $\overline{n_1 n_2}$ différente de $\overline{n}^2$: lors du calcul de la densité du nombre de particules en deux points différents, en chacun de ces points, la densité est en moyenne inférieure à $\overline{n}$, car une partie des particules est près de l'autre point. Pour des systèmes macroscopiques, la valeur de N est énorme, de sorte que le second terme dans le deuxième membre de (2) est négligeable et la fonction de corrélation ν est nulle.

Les caractéristiques du gaz de bosons dans l'état fondamental, étudiées dans ce problème et les problèmes précédents, se sont avérées identiques à celles d'un gaz de particules classiques. Le fait n'est pas fortuit. En effet, la fonction d'onde de l'état fondamental est de la forme

$$\Psi = \psi_0(\mathbf{r}_1)\psi_0(\mathbf{r}_2)\ldots\psi_0(\mathbf{r}_N), \qquad \psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}, \tag{6}$$

c'est-à-dire égale au produit des fonctions d'onde des différentes particules comme pour des particules discernables. Ces particules n'interfèrent pas l'une avec l'autre et pour chacune d'entre elles $|\psi_0|^2 = 1/V$.

10.37. Le problème se résout de façon analogue à 10.35. L'opérateur $n(\mathbf{r})$ a la forme

$$\hat{n}(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \widehat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r},\sigma)\widehat{\Psi}(\mathbf{r},\sigma) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\sigma} \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}} a^{\dagger}_{\mathbf{k}_1\sigma} a_{\mathbf{k}_2\sigma}. \tag{1}$$

($\sigma \equiv s_z$). L'état fondamental du gaz de fermions est défini par les nombres d'occupation $n_{\mathbf{k}_a\sigma} = 1$ pour $|\mathbf{k}_a| < k_F$ et $n_{\mathbf{k}_a\sigma} = 0$ pour $|\mathbf{k}_a| > k_F$, donc

$$|\widehat{\Psi}_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}_a|<k_F,\sigma} \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}_a\sigma}|0\rangle,$$

où k_F s'obtient à partir de la condition

$$\sum_{|\mathbf{k}_a|<k_F,\sigma} 1 = (2s+1)\int_{|\mathbf{k}_a|<k_F} \frac{Vd^3k}{(2\pi)^3} = \frac{(2s+1)Vk_F^3}{6\pi^2} = N, \tag{2}$$

où $k_F = \left[\frac{6\pi^2 N}{(2s+1)V}\right]^{1/3}$. L'élément matriciel $\langle\Psi_0|\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma}\hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}|\Psi_0\rangle$ est non nul (et vaut 1) dans le cas où $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2 \equiv \mathbf{k}$, $|\mathbf{k}| \leq k_F$. Compte tenu de cette circonstance et des relations (1) et (2), on obtient sans peine

$$\overline{n(\mathbf{r})} = \langle\Psi_0|\hat{n}(\mathbf{r})|\Psi_0\rangle = N/V.$$

Le nombre moyen de particules dans le volume v vaut $\overline{N(v)} = Nv/V$.

10.38. L'opérateur densité de particules ayant une projection déterminée du spin sur l'axe z au point $\mathbf{r}$ a la forme ($\sigma \equiv s_z$)

$$n(\mathbf{r},\sigma) = \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r},\sigma)\hat{\Psi}(\mathbf{r},\sigma) = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma}a_{\mathbf{k}_2\sigma}.$$

L'opérateur $\hat{n}(\mathbf{r}_1,\sigma_1)n(\mathbf{r}_2,\sigma_2)$ prend donc la forme (voir 10.34)

$$\hat{n}(\mathbf{r}_1,\sigma_1)\hat{n}(\mathbf{r}_2,\sigma_2) = \frac{1}{V^2}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{r}_1+i(\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{r}_2}a^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_1}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_3\sigma_2}a_{\mathbf{k}_4\sigma_2}. \tag{1}$$

Considérons l'élément matriciel

$$\langle\Psi_0|a^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma_1}a_{\mathbf{k}_2\sigma_1}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_3\sigma_2}\hat{a}_{\mathbf{k}_4\sigma_2}|\Psi_0\rangle, \tag{2}$$

où $|\Psi_0\rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental du gaz de Fermi décrite dans le problème précédent. On comprend aussitôt que dans le cas où $\sigma_1 \neq \sigma_2$ la grandeur (2) n'est différente de zéro (et vaut alors 1) que si $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, $|\mathbf{k}_1| \leq k_F$; $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4$, $|\mathbf{k}_3| \leq k_F$. On a alors pour $\sigma_1 \neq \sigma_2$

$$\langle\Psi_0|\hat{n}(\mathbf{r}_1,\sigma_1)\hat{n}(\mathbf{r}_2,\sigma_2)|\Psi_0\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{\substack{|\mathbf{k}_1|\leq k_F\\|\mathbf{k}_3|\leq k_F}} 1$$

$$= \frac{1}{V^2}\int_{|\mathbf{k}_1|\leq k_F}\frac{Vd^3k_1}{(2\pi)^3}\int_{|\mathbf{k}_3|\leq k_F}\frac{Vd^3k_3}{(2\pi)^3} = \frac{N^2}{(2s+1)^2V^2} = \frac{\overline{n}^2}{(2s+1)^2}, \tag{3}$$

(comparer au problème précédent) ; comme $\overline{n(\mathbf{r},\sigma)} = \overline{n}/(2s+1)$, le résultat (3) signifie que $\overline{n(\mathbf{r}_1,\sigma_1)n(\mathbf{r}_2,\sigma_2)} = \overline{n(\mathbf{r}_1,\sigma_1)}\cdot\overline{n(\mathbf{r}_2,\sigma_2)}$, c'est-à-dire que dans le cas où $\sigma_1 \neq \sigma_2$ il n'existe pas de corrélation entre les densités de particules en différents points.

Dans le cas où $\sigma_1 = \sigma_2$, la situation est différente. L'élément matriciel (2) n'est non nul (il est alors égal à 1) que dans les cas suivants :
a) $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, $|\mathbf{k}_2| \leq k_F$; $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_4$, $|\mathbf{k}_4| \leq k_F$;
b) $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4$, $|\mathbf{k}_4| \leq k_F$; $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3$, $|\mathbf{k}_3| > k_F$.

Ainsi on obtient

$$\overline{n(\mathbf{r}_1,\sigma)n(\mathbf{r}_2,\sigma)} = \frac{1}{V^2}\sum_{\substack{|\mathbf{k}_1|\le k_F\\ |\mathbf{k}_2|\le k_F}} 1 + \frac{1}{V^2}\sum_{|\mathbf{k}_1|\le k_F}\sum_{|\mathbf{k}_2|>k_F} e^{i\mathbf{k}_1\cdot(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)+i\mathbf{k}_2\cdot(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)}. \tag{4}$$

En utilisant la relation

$$\frac{1}{V}\sum_{|\mathbf{k}|>k_F} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{V}\left\{\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \sum_{|\mathbf{k}|\le k_F} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right\} = \delta(\mathbf{r}) - \frac{1}{V}\sum_{|\mathbf{k}|\le k_F} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{5}$$

(on a utilisé dans (5) le fait que le système de fonctions $\Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ est complet) et après avoir calculé l'intégrale

$$\sum_{|\mathbf{k}|\le k_F} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{V}{(2\pi)^3}\int_{|\mathbf{k}|\le k_F} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{r^2}\left\{\frac{\sin k_F r}{r} - k_F\cos k_F r\right\}$$

(qui se calcule de façon élémentaire en coordonnées sphériques avec l'axe polaire dirigé suivant $\mathbf{r}$), l'expression (4) s'écrit ($\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, $\overline{n(\sigma)} = \overline{n}/(2s+1)$)

$$\overline{n(\mathbf{r}_1,\sigma_1)n(\mathbf{r}_2,\sigma_2)} = \overline{n(\sigma)}^2 - \frac{1}{4\pi^4 r^4}\left\{\frac{\sin k_F r}{r} - k_F\cos k_F r\right\}^2. \tag{6}$$

A l'aide de (6), on obtient la fonction de corrélation correspondante:

$$\nu(r,\sigma) = \frac{1}{\overline{n(\sigma)}}\{\overline{n(\mathbf{r}_1,\sigma)n(\mathbf{r}_2,\sigma)} - \overline{n(\sigma)}^2\} = -\frac{[\sin k_F r - k_F r\cos k_F r]^2}{4\pi^4 r^6\overline{n(\sigma)}}. \tag{7}$$

Notons que pour $r = |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \to \infty$, cette fonction s'annule, c'est-à-dire que la corrélation disparaît.

Les particules identiques ayant des projections du spin différentes se comportent comme des particules discernables, et l'absence de corrélations constatée plus haut est dans ce cas tout à fait naturelle (comparer au cas de particules classiques discuté dans 10.36). Si les projections du spin sont identiques, la fonction de corrélation $\nu(r,\sigma) < 0$ est également un résultat naturel qui reflète la nature "répulsive" de l'interaction d'échange entre les fermions (comparer au résultat du problème 10.10).

On remarque sans peine que la fonction de corrélation $\nu(r)$ de la densité du nombre de particules est identique, en général, (quelle que soit la projection du spin) à $\nu(r,\sigma)$.

10.39. L'opérateur interaction entre les particules en seconde quantification a la forme

$$\hat{U} = \frac{1}{2}\int \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}_2)U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1)d^3r_1 d^3r_2. \tag{1}$$

En utilisant le développement de l'opérateur $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ en ondes planes (voir, par exemple, 10.35), on peut écrire (1) sous la forme

$$\hat{U} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} U^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_3}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_4}\hat{a}_{\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\mathbf{k}_1}. \tag{2}$$

où

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2}\int_V\int_V U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{r}_1+i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}_2}d^3r_1d^3r_2. \tag{3}$$

En assimilant l'interaction entre les particules à une perturbation et, compte tenu de la valeur $E_0^{(0)}=0$ de l'énergie de l'état fondamental en l'absence de perturbation, on aboutit, suivant une formule connue du calcul des perturbations, à

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \langle\Psi_0|\hat{U}|\Psi_0\rangle, \tag{4}$$

où $|\Psi_0\rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental du système de particules sans interaction. Comme dans l'état $|\Psi_0\rangle$, toutes les particules possèdent l'impulsion $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}=0$, l'élément matriciel

$$\langle\Psi_0|\hat{a}_{\mathbf{k}_3}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}_4}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\mathbf{k}_1}|\Psi_0\rangle,$$

n'est manifestement non nul que si tous les $\mathbf{k}_a=0$, et est égal dans ce cas à $N(N-1)\approx N^2$ $(N\gg 1)$. On obtient alors, selon (2) et (4),

$$E_0 \approx \frac{1}{2}U_{00}^{00}N^2.$$

Comme le rayon R du potentiel $U(r)$ est supposé de dimension microscopique, de sorte que $R\ll L\sim V^{1/3}$, en calculant l'intégrale

$$\int_V U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)d^3r_2 \approx \iiint_{-\infty}^{\infty} U(\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1)d^3r_2 = \int U(r)d^3r,$$

on peut intégrer sur tout l'espace, et cette intégrale devient indépendante de $\mathbf{r}_1$. On déduit donc de (3)

$$U_{00}^{00} = \frac{1}{V^2}\int_V\int_V U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 = \frac{1}{V}\int U(r)d^3r,$$

et, finalement, l'expression de E_0 est

$$E_0 \approx \frac{1}{2}\frac{\tilde{U}(0)N^2}{V} \qquad \left(\tilde{U}(0)=\int U(r)d^3r\right).$$

Indiquons qu'une étude plus détaillée de ce problème se trouve dans l'ouvrage [8].

10.40. Le problème se résout de façon analogue au précédent. L'opérateur interaction a pour l'expression ($\sigma=s_z$)

$$\hat{U} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4\\ \sigma_1\sigma_2}} U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}\hat{a}_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger a_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger\hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}a_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, \tag{1}$$

où

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2}\int_V\int_V U(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{r}_1+i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}_2}d^3r_1d^3r_2. \tag{2}$$

La correction au premier ordre de l'énergie $E_0^{(0)}$ de l'état fondamental du gaz de Fermi a la forme

$$E_0^{(1)} = \langle \Psi_0 | \widehat{U} | \Psi_0 \rangle, \tag{3}$$

où $|\Psi_0\rangle$ est la fonction d'onde de l'état fondamental du système de fermions n'interagissant pas entre eux.

Compte tenu des valeurs des nombres d'occupation de l'état fondamental du gaz de Fermi parfait : $n_{\mathbf{k}\sigma} = 1$ pour $|\mathbf{k}| \leq k_F$ et $n_{\mathbf{k}\sigma} = 0$ pour $|\mathbf{k}| > k_F$, on note qu'en remplaçant dans (3) l'opérateur $\widehat{U}$ par son expression (1) tous les termes pour lesquels au moins un des $|\mathbf{k}_a|$ est plus grand que k_F sont nuls. Dans l'expression (3) entrent les grandeurs $U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4}$ pour lesquels $|\mathbf{k}_a| \leq k_F$. En introduisant les nouvelles variables $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ dans la formule (2), celle-ci s'écrit sous la forme

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} = \frac{1}{V^2} \int_V U(r) \mathrm{e}^{\frac{i}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}} d^3r \int_V \mathrm{e}^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{R}} d^3R. \tag{4}$$

Compte tenu de la dimension microscopique de R_0, le rayon d'action du potentiel $U(r)$, de sorte que $R_0 \ll L \sim V^{1/3}$, l'intégration par rapport à $\mathbf{r}$ peut s'effectuer sur tout l'espace (comparer à 10.39) ; or, comme $k_F R_0 \ll 1$, on peut remplacer dans l'intégrale en $\mathbf{r}$ l'exponentielle par l'unité, et l'expression (4) s'écrit alors

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2}^{\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4} \approx \frac{1}{V} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \int_V U(r) d^3r.$$

(le facteur $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$ correspond à la conservation de l'impulsion lors des collisions des particules du gaz).

Compte tenu de ce qui a été dit plus haut, l'expression (3) devient

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \frac{\tilde{U}(0)}{2V} \langle \Psi_0 | \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3\mathbf{k}_4 \\ \sigma_1\sigma_2}} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} \hat{a}_{\mathbf{k}_3\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_4\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} | \Psi_0 \rangle, \\ \tilde{U}(0) &= \int U(r) d^3r. \end{aligned} \tag{5}$$

En se basant sur la forme explicite de la fonction d'onde $|\Psi_0\rangle$, on voit que les seuls termes non nuls, dans (5), sont ceux pour lesquels soit $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_2$, soit $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2$, de sorte que (5) peut être écrit sous la forme

$$E_0^{(1)} = \frac{\tilde{U}(0)}{2V} \langle \Psi_0 | \sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2, \sigma_1\sigma_2} (\hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} + \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_1}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_2}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}) | \Psi_0 \rangle. \tag{6}$$

De plus, on remarque que, pour $\sigma_1 = \sigma_2$,

$$a_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma} a_{\mathbf{k}_1\sigma} + \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma} = [a_{\mathbf{k}_1\sigma}^\dagger, \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma}^\dagger]_+ \hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma} \hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma} = 0$$

de sorte qu'en fait, dans (6), $\sigma_1 \neq \sigma_2$.

En utilisant les propriétés des opérateurs de Fermi $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$, la première partie de la somme dans (6) peut être écrite sous la forme

$$\sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 \\ \sigma_1\neq\sigma_2}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\hat{a}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\hat{a}_{\mathbf{k}_1\sigma_1} = \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 \\ \sigma_1\neq\sigma_2}} \hat{n}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\hat{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1},$$

où $n_{\mathbf{k}\sigma}$ sont des opérateurs nombre d'occupation. Etant donné que $n(\sigma) = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}$ est l'opérateur nombre de particules dans l'état de spin σ et que, dans l'état fondamental $|\Psi_0\rangle$, ce nombre a une valeur déterminée $N(\sigma = 1/2) = N(\sigma = -1/2) = N/2$, et on a

$$\langle\Psi_0|\sum_{\substack{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 \\ \sigma_1\neq\sigma_2}} \hat{n}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\hat{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}|\Psi_0\rangle = \sum_{\sigma_1\neq\sigma_2}\langle\Psi_0|\hat{n}(\sigma_2)n(\sigma_1)|\Psi_0\rangle = 2\left(\frac{N}{2}\right)^2 = \frac{N^2}{2}. \qquad (7)$$

Pour $\sigma_1 \neq \sigma_2$, les termes dans la seconde partie de la somme (6) ne sont non nuls que pour $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2$, et leur contribution est égale à

$$\langle\Psi_0|\sum_{\mathbf{k},\sigma_1\neq\sigma_2} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma_2}n_{\mathbf{k}\sigma_1}|\Psi_0\rangle = 2\frac{N}{2} = N,$$

et est négligeable ($N \gg 1$) comparée à (7). Donc, $E_0^{(1)} = \dfrac{\tilde{U}(0)N^2}{4V}$ et l'énergie de l'état fondamental, compte tenu de l'interaction entre les particules, a la forme

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \frac{3}{10}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{m}N + \frac{\tilde{U}(0)N^2}{4V}$$

($E_0^{(0)}$ étant l'énergie de l'état fondamental du gaz de Fermi parfait).

Une étude plus détaillée de ce problème est menée dans le livre [8].

10.41. L'énergie d'une particule, d'impulsion $\mathbf{p}$ et de projection s_z du spin sur l'axe z dirigé le long du champ magnétique, vaut

$$\varepsilon_{\mathbf{p}s_z} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - 2\mu_0 B s_z.$$

Notons $N_\pm$ les nombres de particules dans l'état fondamental du gaz de Fermi avec $s_z = \pm 1/2$. Comme dans l'état fondamental l'énergie possède une valeur minimale, il lui correspond les nombres d'occupation suivants : $n_{\mathbf{p}\pm} = 1$ pour $|\mathbf{p}| \leq p_{F,\pm}$, et $n_{\mathbf{p}\pm} = 0$ pour $|\mathbf{p}| > p_{F,\pm}$, où les $p_{F,\pm}$, sont liés par la relation

$$\frac{p_{F,+}^2}{2m} - \mu_0 B = \frac{p_{F,-}^2}{2m} + \mu_0 B, \qquad (1)$$

qui garantit une énergie minimale à tout le système (comparer au cas du gaz parfait de Fermi "libre").

En exprimant de façon habituelle $p_{F,\pm}$ au moyen de $N_\pm$:

$$N_\pm = \sum_{\mathbf{p}} n_{\mathbf{p},\pm} = \int_{|\mathbf{p}|\leq p_{F,\pm}} \frac{V d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{V p_{F,\pm}^3}{6\pi^2\hbar^3}, \qquad p_{F,\pm} = \left(\frac{6\pi^2\hbar^3 N_\pm}{V}\right)^{1/3},$$

on obtient à l'aide de (1) les équations permettant de déterminer $N_\pm$:

$$(N_+)^{2/3} - (N_-)^{2/3} = 4m\mu_0 B \left(\frac{V}{6\pi^2\hbar^3}\right)^{2/3}, \qquad N_+ + N_- = N, \tag{2}$$

à partir desquelles on peut exprimer le moment magnétique du gaz :

$$M_z = \mu_0 N_+ - \mu_0 N_- = \mu_0(N_+ - N_-), \qquad M_x = M_y = 0, \tag{3}$$

Pour $B = 0$, on voit, d'après (2), que $N_+ = N_- = N/2$. Pour un champ suffisamment faible (voir plus bas), les valeurs de $N_\pm$ diffèrent peu de $N/2$. En les représentant sous la forme $N_\pm = N/2 \pm n$ et en effectuant, après cette substitution dans (2), un développement en (n/N), $(N/2 \pm n)^{2/3} \approx (N/2)^{2/3}(1 \pm 4n/3N))$, on obtient

$$n = \frac{N_+ - N_-}{2} = \frac{3}{2} m\mu_0 B N \left(\frac{V}{3\pi^2\hbar^3 N}\right)^{2/3}, \tag{4}$$

(dans ce cas $n \ll N$ impose la condition de champ B faible).

Selon (3) et (4), pour un champ faible on a

$$\mathbf{M} = 3m\mu_0^2 N \left(\frac{V}{3\pi^2\hbar^3 N}\right)^{2/3} \mathbf{B}, \tag{5}$$

et la susceptibilité magnétique est égale à

$$\chi = \frac{3m\mu_0^2}{(3\pi^2\hbar^3)^{2/3}} \left(\frac{N}{V}\right)^{1/3},$$

(rappelons que χ est le coefficient de proportionnalité entre $\mathbf{B}$ et le moment magnétique $\mathbf{M}$ par unité de volume de la matière, c'est-à-dire que $\mathbf{m} = \mathbf{M}/V = \chi\mathbf{B}$).

Comme $\chi > 0$, le gaz de Fermi étudié est paramagnétique (à l'opposé du diamagnétique pour lequel $\chi < 0$).

Avec l'accroissement du champ, comme on le voit à partir de (2), la valeur $|N_+ - N_-|$ s'accroît de façon monotone et pour $B \geq B_{cr}$, où

$$B_{cr} = \frac{1}{4m|\mu_0|} \left(\frac{6\pi^2\hbar^3 N}{V}\right)^{2/3},$$

devient égale à N : les spins de toutes les particules s'alignent suivant la même direction (suivant la direction de $\mathbf{B}$ ou suivant la direction opposée en fonction du signe de μ_0. Dans ce cas, les moments magnétiques de toutes les particules s'orientent le long du champ (c'est le phénomène de saturation).

CHAPITRE 11

ATOMES ET MOLÉCULES

11.1. La fonction de Hamilton d'une particule chargée dans un champ électrostatique est donnée en théorie classique relativiste par la formule ($-e$ étant la charge de la particule, $p \ll mc$)

$$\mathcal{H} = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} - e\varphi(\mathbf{r}) - mc^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} - e\varphi(\mathbf{r})$$

et conduit à une correction relativiste qui vaut $-p^4/8m^3c^2$. La généralisation quantique de cette correction se présente sous forme d'un terme complémentaire[1] $\hat{H}' = -\hat{p}^4/8m^3c^2$, assimilé à un opérateur perturbateur de l'hamiltonien. Vu que l'opérateur $\hat{H}'$, commute avec les opérateurs $\hat{\mathbf{l}}^2$ et $\hat{l}_z$, les fonctions propres $\Psi^{(0)}_{n_r lm}$ de l'hamiltonien non perturbé constituent des fonctions correctes adaptées à la perturbation, de sorte que la correction au premier ordre sur les niveaux d'énergie se définit par l'élément matriciel ($-e\varphi = -Ze^2/r$) :

$$\begin{aligned} E^{(1)}_{n_r l} &= \int \Psi^{(0)*}_{n_r lm} \hat{H}' \Psi^{(0)}_{n_r lm} dV \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\langle n_r lm|\frac{\mathbf{p}^4}{4m^2}|n_r lm\rangle \equiv -\frac{1}{2mc^2}\langle n_r lm|\left(\hat{H}_0 + \frac{Ze^2}{r}\right)^2|n_r lm\rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2}\langle n_r lm|\hat{H}_0^2 + \hat{H}_0\frac{Zc^2}{r} + \frac{Ze^2}{r}\hat{H}_0 + \left(\frac{Ze^2}{r}\right)^2|n_r lm\rangle \end{aligned} \tag{1}$$

($\hat{H}_0$ est l'hamiltonien non perturbé de l'atome hydrogénoïde). Compte tenu des relations ($n = n_r + l + 1$)

$$\begin{aligned} &H_0|n_r lm\rangle = E^{(0)}_n|n_r lm\rangle, \quad \langle n_r lm|\hat{H}_0 = E^{(0)}_n\langle n_r lm|, \quad E^{(0)}_n = -\frac{m(Zc^2)^2}{2\hbar^2 n^2}, \\ &\langle n_r lm|\frac{Ze^2}{r}|n_r lm\rangle = -2E^{(0)}_n, \quad \langle n_r lm|\frac{1}{r^2}|n_r lm\rangle = -\frac{4mE^{(0)}_n}{(2l+1)\hbar^2 n} \end{aligned} \tag{2}$$

1 Comparer au résultat du problème 15.15.

(la première des relations (2) résulte du théorème du viriel, la seconde s'obtient sur la base de 1.28 du Tome I par dérivation par rapport au paramètre l de l'opérateur

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}, \tag{3}$$

dont les valeurs propres $E_{n_r l} = -\dfrac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2}$, pour des valeurs entières de l, déterminent le spectre d'énergie de l'atome hydrogénoïde ; notons également que par dérivation par rapport au paramètre Ze^2 on est en mesure d'obtenir une démonstration simple du théorème du viriel dans le cas d'un champ coulombien), l'expression (1) se transforme aisément sous la forme

$$E_n^{(1)} = \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \left\{-\frac{3}{4n^2} + \frac{2}{(2l+1)n}\right\} E_n^{(0)}. \tag{4}$$

D'après l'expression obtenue, la prise en compte de la correction relativiste lève complètement la dégénérescence accidentelle des niveaux du champ coulombien (rappelons que l'étude menée ne se rapporte qu'aux particules sans spin) : le niveau de n donné se sépare en n sous-niveaux ($l = 0, 1, \ldots, n-1$).

La largeur de l'intervalle de structure fine (la différence entre les énergies des composantes extrêmes correspondant aux valeurs $l = 0$ et $l_{\max} = n - 1$) pour les niveaux avec cette valeur de n est, selon (4), égale à

$$\Delta E_{\text{FS}} = 4\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{n-1}{n(2n-1)}|E_n^{(0)}|. \tag{5}$$

Ainsi, pour $n = 2$, on obtient[2] $\Delta E_{\text{FS}} \approx 1{,}21 \cdot 10^{-4} Z^4$ eV.

Selon (4) on a pour les niveaux les plus bas ($n \sim 1$) l'estimation suivante :

$$|E_{n_r l}^{(1)}/E_n^{(0)}| \sim \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \approx \frac{Z^2}{(137)^2} \sim 10^{-4} Z^2, \tag{6}$$

de sorte que pour le cas de $Z \sim 100$, l'électron dans l'atome ne peut plus être considéré comme non relativiste (c'est un résultat naturel vu que la vitesse caractéristique de l'électron dans un atome hydrogénoïde vaut $v \sim Ze^2/\hbar = Z\frac{e^2}{\hbar c}c \approx \frac{Z}{137}c$).

11.2. L'énergie potentielle $U(r) = -e\varphi(r)$ dans l'équation de Schrödinger, compte tenu de l'expression bien connue du potentiel $\varphi(r)$ d'une sphère uniformément chargée,

2 Notons qu'avec la prise en compte du spin de l'électron, la structure fine de l'atome hydrogénoïde avec un noyau ponctuel présente, selon l'équation de Dirac, la singularité caractéristique suivante. Un niveau avec un nombre quantique principal donné n, dont la multiplicité selon la théorie non relativiste est $2n^2$ (vu le spin de l'électron), avec la prise en compte des corrections relativistes, se scinde (comme au cas de particule sans spin) en n composantes dont chacune correspond à une valeur déterminée j du moment total de l'électron ($j = 1/2, 3/2, \ldots, n - 1/2$). Dans ce cas, la dégénérescence accidentelle n'est pas levée complètement, car il reste des niveaux dégénérés avec la même valeur de j mais avec différents $l = j \pm 1/2$. Ainsi pour $n = 2$, le niveau se sépare en deux composantes dont l'une représente les états $2p_{3/2}$ et l'autre, les états (dégénérés) $2p_{1/2}$ et $2s_{1/2}$; de plus, l'intervalle de structure fine vaut $\Delta E_{\text{FS}} \approx 4{,}5 \cdot 10^{-5} Z^2$ eV.

(la charge de la sphère est Ze, le rayon R) vaut

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r}, & r > R, \\ -\frac{Ze^2}{2R}\left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right), & r < R. \end{cases} \tag{1}$$

En représentant l'hamiltonien sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + V$, où

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{Ze^2}{r}$$

(l'hamiltonien d'un atome hydrogénoïde), on assimile V à une perturbation. Il est clair que

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > R, \\ \frac{Ze^2}{r} - \frac{Ze^2}{2R}\left(3 - \frac{r^2}{R^2}\right), & r < R. \end{cases} \tag{2}$$

Les fonctions propres de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$ sont bien connues. En particulier, la fonction d'onde de l'état fondamental est de la forme ($a_0 = \hbar^2/m_e e^2 \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ cm)

$$\Psi_0(r) = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-Zr/a_0}, \qquad E_0^{(0)} = -\frac{m_e(Ze^2)^2}{2\hbar^2}.$$

Le déplacement du niveau d'énergie de l'état fondamental du fait de la taille finie du noyau (autrement dit, sous l'action de la perturbation $V(r)$) vaut

$$\begin{aligned} \Delta E_0 &= E_0^{(1)} = \int V(r)|\Psi_0(r)|^2 d^3r = Ze^2|\Psi_0(0)|^2 \int_0^R \left(\frac{1}{r} - \frac{3}{2R} + \frac{r^2}{2R^3}\right) 4\pi r^2 dr \\ &= \frac{2\pi}{5} Ze^2 R^2 |\Psi_0(0)|^2 = \frac{2}{5} Z^4 \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \frac{e^2}{a_0} \end{aligned}$$

(lors du calcul de l'intégrale, on a tenu compte du fait que la fonction d'onde $\Psi_0(r)$ demeure, au sein du noyau $r \leq R \sim (10^{-12} - 10^{-13})$ cm, presque constante, et c'est pour cette raison que l'on a sorti la grandeur $|\Psi_0(r)|^2 \approx |\Psi_0(0)|^2$ en dehors de l'intégrale).

La valeur numérique du rapport

$$\left|\frac{E_0^{(1)}}{E_0^{(0)}}\right| = \frac{4}{5} Z^2 \left(\frac{R}{a_0}\right)^2 \approx 8 \cdot 10^{-10} Z^{8/3}$$

($R \approx 1,5 Z^{1/3} \cdot 10^{-13}$ cm, voir problème suivant) avec $Z = 1$ est une grandeur de l'ordre de 10^{-9}, ce qui est sensiblement plus petit que le rapport analogue pour la correction relativiste : $\sim 10^{-4}$ (voir problème précédent).

Dans le cas d'un atome mésique (mésoatome), l'effet de la taille finie du noyau se manifeste plus fortement. Une estimation du type (2), avec la valeur $m_\mu \approx 207 m_e$, aboutit manifestement à $|E_0^{(1)}/E_0^{(0)}| \approx 3 \cdot 10^{-5} Z^{8/3} \approx 0,2$ (pour $Z = 27$), c'est-à-dire que pour de grandes valeurs de Z, la taille finie du noyau agit de façon sensible sur le spectre du mésoatome (voir problème suivant).

11.3. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes se déterminent à partir de la solution de l'équation de Schrödinger avec l'énergie potentielle $U(r)$ donnée dans le problème précédent. La solution de l'équation de Schrödinger pour un R quelconque est assez rébarbative. Cependant, les cas limites permettent d'obtenir une solution approchée simple.

Dans le cas de valeurs suffisamment petites de Z, la taille finie du noyau est négligeable et les niveaux d'énergie comme les fonctions d'onde présentent une forme hydrogénoïde banale bien connue (avec substitution de la masse de l'électron par celle du muon). Le noyau peut être considéré comme ponctuel si $R = 1,2A^{1/3} \cdot 10^{-13}$ cm $\approx 1,5Z^{1/3} \cdot 10^{-13}$ cm est beaucoup plus petit que le rayon $a_0 = \hbar^2/\mu Ze^2$ de la première orbite de Bohr du méson de masse $m_\mu \approx 207m_e$ dans le champ d'un noyau ponctuel de charge Ze ; la condition $R \ll a_0$ donne $Z \ll 45$.

Dans le cas contraire de R grands (ou Z, voir plus bas), les fonctions d'onde des niveaux les plus bas se localisent au sein du noyau, et les niveaux d'énergie, comme les fonctions d'onde, se déterminent d'après l'énergie potentielle du méson au sein du noyau

$$U(r) = -\frac{3Ze^2}{2R} + \frac{Ze^2 r^2}{2R^3}$$

qui, à une constante près, est celle d'un oscillateur harmonique. Le spectre d'énergie et les fonctions d'onde des états stationnaires s'obtiennent sans peine sur la base du résultat du problème 4.25 du Tome I (voir de même 4.5). Ainsi, les niveaux d'énergie du muon sont donnés par l'expression

$$E_N = -\frac{3Ze^2}{2R} + \hbar\omega_0(N + 3/2) \; ; \qquad N = 0, 1, \ldots , \qquad \omega_0 = \sqrt{\frac{Ze^2}{\mu R^3}}. \tag{1}$$

Les fonctions d'onde se rapportant au niveau (1) se localisent à une distance de l'ordre de a définie par la condition

$$a^2 \frac{Ze^2}{2R^3} = \hbar\omega_0(N + 3/2), \text{ c'est-à-dire } a = \sqrt[4]{\frac{(2N+3)^2\hbar^2 R^3}{Ze^2\mu}}.$$

L'inégalité $R \gg a$ ou $Z > 250$ (pour $N = 0$) est la condition de validité de cette étude.

Notons que la grandeur ω_0 dans la formule (1) ne dépend pas de Z (car $R \propto Z^{1/3}$) ; de plus, $\hbar\omega_0 \approx 12$ MeV, ce qui justifie la validité de l'approximation non relativiste.

Pour les noyaux réels, les caractéristiques du cas limite étudié ($Z > 250$) commencent à se manifester, mais seulement sous forme d'une approximation grossière, pour les noyaux les plus lourds avec $Z = 80 - 100$. La solution numérique du problème pour ces noyaux conduit à une séparation des niveaux des états $2p$ et $1s$ d'environ 6 MeV (comparer à $\hbar\omega_0 = 12$ MeV et à $\hbar\omega_0 \approx 20$ MeV pour un noyau *ponctuel* d'uranium) ; dans ce cas le méson dans l'état fondamental a une probabilité d'environ 0,5 de se trouver au sein du noyau.

11.4. Selon l'électrodynamique classique, l'interaction de l'électron (particule chargée ayant un moment magnétique propre) avec le champ magnétique du noyau (le dipôle

magnétique) se définit par l'expression

$$V = -\boldsymbol{\mu}_{\text{él}} \cdot \mathbf{B}_{\text{noy}}(\mathbf{r}) \tag{1}$$

où

$$\boldsymbol{\mu}_{\text{él}} = \boldsymbol{\mu}_{\text{orb}} + \boldsymbol{\mu}_{\text{prop}} = -\frac{e\mathbf{L}}{2mc} + \boldsymbol{\mu}_{\text{prop}},$$
$$\mathbf{B}_{\text{noy}} = \text{rot } \mathbf{A} = \text{rot } \frac{\boldsymbol{\mu}_{\text{noy}} \wedge \mathbf{r}}{r^3} \equiv \left\{(\boldsymbol{\mu}_{\text{noy}} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{\nabla} - \boldsymbol{\mu}_{\text{noy}}\Delta\right\} \frac{1}{r}.$$

La généralisation quantique de l'expression (1) est l'opérateur interaction $\widehat{V}$ que l'on obtient par substitution aux grandeurs classiques des opérateurs adéquats :

$$\mathbf{L} \to \hbar\widehat{\mathbf{I}}, \qquad \boldsymbol{\mu}_{\text{prop}} \to 2\mu_e\widehat{\mathbf{s}} = -\frac{e\hbar}{mc}\widehat{\mathbf{s}}, \qquad \boldsymbol{\mu}_{\text{noy}} \to \frac{\mu_0\widehat{\mathbf{I}}}{I}.$$

L'opérateur $\widehat{V}$ se transforme aisément en la forme ($\widehat{V}$ étant un opérateur hermitien)

$$\widehat{V} = \frac{e\hbar\mu_0}{2mcI}\widehat{I}_i(\widehat{l}_k + 2\widehat{s}_k)\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_k} - \delta_{ik}\Delta\right)\frac{1}{r}.$$

Calculons la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{V}$ avec la fonction d'onde $\Psi_0(r)$ du mouvement spatial de l'électron dans l'état $1s$ fondamental. L'intégrale apparaissant dans ce calcul peut manifestement être représentée par[2]

$$\int |\Psi_0(r)|^2 \left(\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_k} - \delta_{ik}\Delta\right)\frac{1}{r}dV = C\delta_{ik}.$$

Pour déterminer la constante C, effectuons dans cette relation une convolution des indices i et k (autrement dit, posons $i = k$ et sommons en i) ; compte tenu des égalités $\delta_{ii} = 3$ et

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{1}{r} = \Delta\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}),$$

on obtient $C = \frac{8\pi}{3}|\Psi_0(0)|^2$. Finalement, après le calcul, il vient

$$\overline{\widehat{V}} = \frac{8\pi e\hbar\mu_0}{3mcI}|\Psi_0(0)|^2(\widehat{\mathbf{I}} \cdot \widehat{\mathbf{s}}) \qquad \left(|\Psi_0(0)|^2 = \frac{Z^3}{\pi a_0^3} = \frac{Z^3 m^3 e^6}{\pi\hbar^6}\right)$$

$\overline{\widehat{V}}$ est un opérateur dans l'espace des variables de spin de l'électron et du noyau.

---

2 De fait

$$\widehat{V} \propto \int \Psi_0^*(r)(\widehat{l}_k + 2\widehat{s}_k)\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_k} - \delta_{ik}\Delta\right)\frac{1}{r}\right]\Psi_0(r)d^3r.$$

Toutefois, l'intégrale comprenant l'opérateur $\widehat{l}_k$ est nulle, vu que $\widehat{l}_k\Psi_0(r) = 0$ et du fait de l'hermiticité de $\widehat{l}_k$ (permettant de "transférer" son action sur la fonction $\Psi_0^*(r)$)).

Les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{\overline{V}}$ définissent les déplacements énergétiques du niveau fondamental sous l'influence de l'interaction étudiée :

$$E_{\text{HFS}} = \frac{4\pi e\hbar\mu_0}{3mcI}|\Psi_0(0)|^2 \cdot \begin{cases} I, & \text{pour } J = I + 1/2, \\ -(I+1), & \text{pour } J = I - 1/2 \end{cases}$$

(J est le moment total du système "noyau + électron", voir 3.34 du Tome I), autrement dit, le niveau initial se décompose en deux, en accord avec les valeurs possibles de $J = I \pm 1/2$ du moment total. La valeur de la décomposition hyperfine est

$$\Delta E_{\text{HFS}} = E_{\text{HFS}}(J = I + 1/2) - E_{\text{HFS}}(J = I - 1/2) = \frac{4\pi e\hbar\mu_0(2I+1)}{3mcI}|\Psi_0(0)|^2. \quad (2)$$

Pour l'atome d'hydrogène on trouve une valeur numérique de la grandeur (2) : $\Delta\nu_{\text{HFS}} \equiv \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar \approx 1420$ MHz en accord avec la valeur expérimentale.

La comparaison de la grandeur (2) avec la séparation de structure fine pour $n \sim 1$ (voir 11.1 du Tome I) donne $|\Delta E_{\text{HFS}}/\Delta E_{\text{FS}}| \sim m/m_{\text{p}} \sim 10^{-3}$, autrement dit, la décomposition hyperfine est beaucoup plus petite que celle de la structure fine.

11.5. En négligeant l'interaction entre les électrons $V = 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ (on utilise le système d'unités atomiques) la fonction d'onde de l'état fondamental de l'ion héliogénoïde est de la forme $\Psi_0^{(0)} = \Psi_0(r_1)\Psi_0(r_2)\dfrac{Z^3}{\pi}\mathrm{e}^{-Z(r_1+r_2)}$. Elle correspond au niveau d'énergie $E_0^{(0)} = -Z^2$. La correction du premier ordre à l'énergie du niveau vaut

$$E_0^{(1)} = \int \frac{|\Psi_0^{(0)}|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}dV_1dV_2 = \frac{Z^6}{\pi^2}\int \mathrm{e}^{-2Z(r_1+r_2)}\frac{r_1^2r_2^2dr_1dr_2d\Omega_1d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2}} \quad (1)$$

Les intégrales de la forme

$$\int f(r_1)g(r_2)\frac{dr_1dr_2d\Omega_1d\Omega_2r_1^2r_2^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2}} \quad (2)$$

se calculent sans peine de la façon suivante : pour un $\mathbf{r}_1$ fixé, intégrons par rapport aux variables angulaires $\mathbf{r}_2$ en choisissant la direction du vecteur $\mathbf{r}_1$ comme axe polaire ; alors,

$$\int \frac{d\Omega_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \int \frac{\sin\theta d\theta d\varphi}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta}} = \begin{cases} 4\pi/r_1, & r_1 > r_2, \\ 4\pi/r_2, & r_2 > r_1, \end{cases}$$

et l'expression (2) prend la forme

$$16\pi^2\left\{\int_0^\infty f(r_1)r_1\int_0^{r_1} g(r_2)r_2^2dr_2dr_1 + \int_0^\infty g(r_2)r_2\int_0^{r_2} f(r_1)r_1^2dr_1dr_2\right\}.$$

Compte tenu de ce qui a été dit, on trouve de façon assez simple

$$\int \frac{\mathrm{e}^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}dV_1dV_2 = 16\pi^2\frac{2\alpha^2 + 2\beta^2 + 6\alpha\beta}{\alpha^2\beta^2(\alpha+\beta)^3}. \quad (3)$$

L'énergie de l'état fondamental au premier ordre du calcul des perturbations vaut

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -Z^2 + 5Z/8, \tag{4}$$

et le potentiel d'ionisation constituant la différence entre les énergies de l'état fondamental de l'ion hydrogénoïde $-Z^2/2$ et de l'ion héliogénoïde E_0 (4) étudié se détermine par l'expression

$$I = (Z^2/2 - 5Z/8)\text{u.a.}$$

Les valeurs numériques de I pour quelques ions sont données sous forme de tableau (rappelons que 1 u.a. d'énergie est égale approximativement à 27,2 eV).

Tableau 11.1 : Potentiels d'ionisation I, en eV, des systèmes à deux électrons

	He	Li^+	Be^{++}	C^{4+}
D'après le problème 11.5	20,4	71,4	150	388
D'après le problème 11.7	23,1	74,0	152	390
Valeur expérimentale	24,6	75,6	154	392

11.6. La fonction d'onde de l'état fondamental d'un système avec hamiltonien $\widehat{H}_0$ est de la forme $\Psi_0 = \dfrac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi}\exp[-Z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)]$ et correspond à l'énergie $E_0^{(0)} = -Z_{\text{eff}}^2$. La perturbation $\widehat{V}$ est manifestement

$$\widehat{V} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - (Z - Z_{\text{eff}})\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right).$$

Compte tenu des valeurs des intégrales

$$\int \frac{1}{r}e^{-2\alpha r}dV = \frac{\pi}{\alpha^2}, \qquad \int e^{-2\alpha(r_1+r_2)}\frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} == \frac{5\pi^2}{8\alpha^5}.$$

(le calcul de la seconde intégrale a été effectué dans le problème précédent), on obtient sans peine la correction au premier ordre sur le niveau d'énergie :

$$E_0^{(1)} = Z_{\text{eff}}(2Z_{\text{eff}} - 2Z + 5/8).$$

Après avoir choisi Z_{eff} à partir de la condition $E_0^{(1)} = 0$, c'est-à-dire $Z_{\text{eff}} = Z - 5/16$, on obtient l'énergie de l'état fondamental de l'ion à deux électrons sous la forme (comparer cette valeur aux résultats des problèmes précédent et suivant)

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -(Z - 5/16)^2. \tag{1}$$

11.7. La valeur moyenne de l'hamiltonien d'un ion héliogénoïde

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

dans l'état décrit par une fonction d'onde de la forme $\Psi_0 = \frac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi} \exp[-Z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)]$ s'obtient aisément si l'on tient compte de la relation

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{\alpha}{r}\right) \mathrm{e}^{-\alpha r} = -\frac{\alpha^2}{2} \mathrm{e}^{-\alpha r}.$$

On écrit l'hamiltonien sous la forme

$$\widehat{H} = \left(-\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_1}\right) + \left(-\frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_1}\right) - (Z - Z_{\text{eff}})\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$$

et on utilise les valeurs des intégrales données dans le problème précédent :

$$\overline{E}(Z_{\text{eff}}) = Z_{\text{eff}}(Z_{\text{eff}} - 2Z + 5/8).$$

En minimisant cette expression par rapport à Z_{eff}, on obtient la valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental de l'ion héliogénoïde

$$E_0 \approx \min \overline{E}(Z_{\text{eff}}) = \overline{E}(Z_{\text{eff}} = Z - 5/16) = -(Z - 5/16)^2. \tag{1}$$

ainsi que du potentiel d'ionisation du système

$$I = -Z^2/2 - E_0 \approx Z^2/2 - 5Z/8 + 25/256. \tag{2}$$

Les valeurs numériques de I, pour quelques ions, calculées suivant la formule (2), sont données dans le tableau du problème 11.5.

Pour l'ion H^- (système "proton + deux électrons") on a, selon (1), $E_0 = -0,47$. Cette valeur est supérieure à l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, égale à $-0,5$. Ainsi d'après ce problème, on ne peut pas conclure si un ion stable H^- existe ou pas (voir sur cette question le problème suivant).

11.8. Un calcul simple mais un peu volumineux donne

$$\overline{E}(\alpha, \beta) = 2C^2 \left\{ -Z(\alpha + \beta) + \frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} + \frac{\alpha\beta}{\alpha + \beta} \right.$$
$$\left. + \frac{\alpha^2\beta^2}{(\alpha + \beta)^3} + \frac{20\alpha^3\beta^3}{(\alpha + \beta)^5} + 64\alpha^3\beta^3 \frac{\alpha\beta - Z(\alpha + \beta)}{(\alpha + \beta)^6} \right\}, \tag{1}$$

où, à partir de la condition de normalisation de la fonction d'onde à l'unité,

$$2C^2 = \left[1 + \frac{64\alpha^3\beta^3}{(\alpha + \beta)^6}\right]^{-1}. \tag{2}$$

Le calcul de

$$\overline{E} = \int \Psi(r_1, r_2) \widehat{H} \Psi(r_1, r_2) dV_1 dV_2,$$

pour la fonction d'onde indiquée, se réduit au calcul d'intégrales simples (il est vrai qu'elles sont nombreuses et c'est pour cette raison que le calcul devient volumineux). Toutes les intégrales rencontrées se réduisent à quatre :

$$\int \mathrm{e}^{-\gamma r} dV = 4\pi \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\gamma r} r^2 dr = \frac{8\pi}{\gamma^3},$$

$$\int \mathrm{e}^{-\alpha r} \Delta \mathrm{e}^{-\beta r} dV = -\int (\boldsymbol{\nabla} \mathrm{e}^{-\alpha r}) \cdot (\boldsymbol{\nabla} \mathrm{e}^{-\beta r}) dV = -\alpha\beta \int \mathrm{e}^{-(\alpha+\beta)r} dV = -\frac{8\pi\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^3},$$

$$\int \frac{1}{r} \mathrm{e}^{-\gamma r} dV = 4\pi \int_0^\infty \mathrm{e}^{-\gamma r} r dr = \frac{4\pi}{\gamma^2},$$

$$\int \frac{\mathrm{e}^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = 16\pi^2 \frac{2\alpha^2 + 2\beta^2 + 6\alpha\beta}{\alpha^2\beta^2(\alpha+\beta)^2}$$

(pour le calcul de la dernière intégrale voir 11.5).

L'expression (1) peut être utilisée pour un calcul plus précis que dans le problème précédent de l'énergie de l'état fondamental de l'ion héliogénoïde par la méthode variationnelle.

Pour l'ion H^- ($Z = 1$), la valeur (1) de $\overline{E}$ avec $\alpha = 1$, $\beta = 1/4$ est $\overline{E} = -0,512$, ce qui est inférieur à l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, égale à $-0,50$; ceci démontre l'existence de l'ion H^- stable. La valeur expérimentale de l'énergie de cet ion est $E_0 = -0,528$ u.a. (inférieure à la valeur variationnelle de $\overline{E}$, comme il fallait s'y attendre).

11.9. Le rayon de Bohr du mésoatome hydrogénoïde est $m_\mu/m_e \approx 207$ fois inférieur au rayon de l'atome électronique, de sorte que pour l'électron la présence du muon dans l'atome se ramène à l'écrantage de la charge du noyau d'une unité. Le choix suivant de l'hamiltonien non perturbé du système considéré s'avère donc évident :

$$\widehat{H}_0 = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{m_\mu}\Delta_\mu + \Delta_e\right) - \frac{Z}{r_\mu} - \frac{Z-1}{r_e} \tag{1}$$

(en écrivant (1), on a supposé le noyau infiniment lourd ; la masse finie du noyau peut être prise en compte de façon approchée en remplaçant dans (1) la masse du muon par la masse réduite adéquate $\mu = m_\mu M/(m_\mu + M)$, M étant la masse du noyau ; dans cette approximation le centre de masse du système considéré coïncide avec celui du système "noyau + muon").

Les valeurs propres de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$ correspondant au spectre discret sont

$$E_{Nn} = -\frac{m_\mu Z^2}{2N^2} - \frac{(Z-1)^2}{2n^2} \tag{2}$$

(N et n sont les nombres quantiques principaux du muon et de l'électron). Il faut toutefois avoir en vue que pour $N \geq 2$ les niveaux (2) ne sont pas de vrais niveaux d'énergie du spectre discret du système étudié "noyau + électron + muon", car en raison de l'interaction du muon avec l'électron, le système peut s'ioniser (le muon passe sur l'état fondamental $N = 1$, tandis que l'électron est éjecté de l'atome : c'est l'effet Auger. Ainsi l'expression (2) n'est une valeur approchée de l'énergie des états

stationnaires du système que pour $N = 1$. La forme des fonctions d'onde adéquates s'avère évidente.

11.10. Le problème se résout de façon analogue à 11.4. L'opérateur interaction des électrons avec le champ magnétique du noyau se présente sous la forme de la somme de deux termes : $\widehat{V} = \widehat{V}_1 + \widehat{V}_2$, où $\widehat{V}_{1(2)}$ décrivent l'interaction de chacun des deux électrons avec le noyau (voir 11.4).

En calculant la valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{V}$ avec la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ du mouvement spatial des électrons dans l'état 2^3S de l'atome d'hélium, on obtient

$$\overline{\widehat{V}} = \frac{8\pi e\hbar\mu}{3mcI} C\,(\widehat{\mathbf{I}} \cdot \widehat{\mathbf{S}}),$$

où $\widehat{\mathbf{S}} = \widehat{\mathbf{s}}_1 + \widehat{\mathbf{s}}_2$ est l'opérateur du spin total de deux électrons,

$$C = \int |\Psi(0, \mathbf{r}_2)|^2 dV_2 = \int |\Psi(\mathbf{r}_1, 0)|^2 dV_1.$$

Les valeurs propres de l'opérateur $\overline{\widehat{V}}$ définissent les déplacements d'énergie du niveau (la structure hyperfine). Dans ce problème, $S = 1$, $I = 1/2$; alors

$$E_{\text{HFS}} = \frac{8\pi e\hbar\mu C}{3mcI} \cdot \begin{cases} 1/2, & \text{pour } J = 3/2, \\ -1, & \text{pour } J = 1/2 \end{cases}$$

(J est le moment total du système "noyau ^{3}He + deux électrons"). La décomposition par la structure hyperfine est :

$$\Delta E_{\text{HFS}} = |E_{\text{HFS}}(J = 3/2) - E_{\text{HFS}}(J = 1/2)| = \frac{4\pi e\hbar|\mu|C}{mc}. \tag{1}$$

En utilisant pour la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ une fonction approchée de la forme

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2) - \Psi_2(r_1)\Psi_1(r_2)\},$$

où $\Psi_{1,2}(r)$ sont les fonctions d'onde d'un atome hydrogénoïde avec $Z = 2$ pour les états $1s$ et $2s$, il vient

$$C = \frac{1}{2}(|\Psi_1(0)|^2 + |\Psi_2(0)|^2) = \frac{9}{2\pi a_0^3} \tag{2}$$

(a_0 étant le rayon de Bohr).

La valeur numérique de la décomposition de structure hyperfine, selon (1) et (2), s'avère égale à

$$\nu_{\text{HFS}} = \Delta E_{\text{HFS}}/2\pi\hbar \approx 7300 \text{ MHz}. \tag{3}$$

11.11. Dans les états ortho (para) d'atomes héliogénoïdes, le moment du mouvement relatif des électrons ne peut prendre que des valeurs impaires (paires).

11.12. Dans l'approximation considérée, l'énergie de l'état nL d'un atome héliogénoïde est la somme de l'énergie $\varepsilon_0 = -Z^2/2$ de l'état fondamental de l'atome hydrogénoïde de charge nucléaire Z et de

$$\varepsilon_n = -(Z-1)^2/2n^2,$$

celle de l'état de nombre quantique principal n dans le champ d'une charge écrantée $(Z-1)$, c'est-à-dire que

$$E_n = -Z^2/2 - (Z-1)^2/2n^2 \tag{1}$$

(dans l'approximation concernée, la valeur de l'énergie (1) se rapporte aux états ortho et para de l'atome) ; quant au potentiel d'ionisation, il vaut $I_n = (Z-1)^2/2n^2$.

Pour les états $2L$ de l'hélium, la valeur approchée du potentiel d'ionisation $I_2 = 0,125$ u.a. doit être comparée aux valeurs expérimentales.

Tableau 11.2 : Les valeurs expérimentales du potentiel d'ionisation I en eV

	2^3S	2^1S	2^3P	2^1P
I_{exper}	0,175	0,146	0,133	0,124

Les valeurs expérimentales des potentiels d'ionisation de différents états $3L$ de l'hélium sont données dans le Tableau 11.3, tandis qu'avec l'approximation considérée, $I_3 = 556 \cdot 10^{-4}$ u.a.

Tableau 11.3 : Les valeurs expérimentales du potentiel d'ionisation I (en eV) des différents états $3L$ de l'hélium

	3^3S	3^1S	3^3P	3^1P	3^3D	3^1D
$I_{\text{exper}} \cdot 10^4$	685	612	580	550	560	555

L'approximation effectuée ici se base sur la possibilité de négliger le "recouvrement" des fonctions d'onde des électrons $1s$ et nl $(l \equiv L)$.

Pour $n \gg 1$, ce fait est assuré par la grande dimension de l'orbite de l'électron nl et la faible probabilité de sa présence dans le domaine de localisation de l'électron $1s$ (pour n donné, cette probabilité est d'autant plus faible que la valeur du moment de l'électron l est grande ; ainsi, même pour $n = 2$ et 3 et $l \neq 0$, les valeurs approchées de E_n et I_n du problème concordent bien avec les données expérimentales).

11.13. Les fonctions correctes à l'ordre zéro (adaptées à la perturbation) du mouvement spatial des électrons sont de la forme (compte tenu de l'antisymétrie de la fonction d'onde complète des deux électrons)

$$\Psi_{\pm}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2) \pm \Psi_2(r_1)\Psi_1(r_2)\},$$
$$E_{\pm}^{(0)} = -Z^2/2 - Z^2/8 = -5Z^2/8,$$

où les signes "+" et "-" correspondent aux états para et ortho respectivement ; $\Psi_{1,2}(r)$ sont les fonctions d'onde des états $1s$ et $2s$ de l'atome hydrogénoïde de charge nucléaire Z :

$$\Psi_1(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr}, \qquad \Psi_2(r) = \sqrt{\frac{Z^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{Zr}{2}\right) e^{-Zr/2}.$$

La correction au premier ordre sur les niveaux d'énergie, due à l'interaction des électrons, peut être écrite sous la forme

$$E_{\pm}^{(1)} = \int \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\Psi_{\pm}^{(0)}|^2 dV_1 dV_2 \equiv K \pm J,$$

où les intégrales de Coulomb K et d'échange J sont égales à

$$K = \int \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\Psi_1(r_1)|^2 |\Psi_2(r_2)|^2 dV_1 dV_2,$$
$$J = \int \Psi_1^*(r_1)\Psi_2^*(r_2) \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Psi_1(r_2)\Psi_2(r_1) dV_1 dV_2.$$

Compte tenu de la forme explicite des fonctions $\Psi_{1,2}(r)$, on remarque aussitôt que le calcul de K et J se ramène à celui de plusieurs intégrales de la forme

$$I_{k,n} = \int \frac{r_1^k r_2^n}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} dV_1 dV_2$$

(k, n étant des entiers). Ces intégrales se calculent facilement, car on a la relation

$$I_{k,n} = (-1)^{k+n} \frac{\partial}{\partial \alpha^k} \frac{\partial}{\partial \beta^n} \int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 \equiv (-1)^{k+n} \frac{\partial}{\partial \alpha^k} \frac{\partial}{\partial \beta^n} I_{0,0}$$

où l'intégrale $I_{0,0}$ a été calculée dans 11.5 et vaut

$$I_{0,0} = \int \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = 32\pi^2 \left[\frac{1}{\alpha^2\beta^2(\alpha+\beta)} + \frac{1}{\alpha\beta(\alpha+\beta)^3}\right].$$

Un calcul simple mais long donne

$$K = \frac{17}{81}Z, \qquad J = \frac{16}{729}Z.$$

Au premier ordre du calcul des perturbations, les valeurs des niveaux d'énergie et des potentiels d'ionisation des états 2^3S et 2^1S des atomes héliogénoïdes sont égaux à

$$E(2^3S) = -\frac{5}{8}Z^2 + \frac{137}{729}Z, \qquad E(2^1S) = -\frac{5}{8}Z^2 + \frac{169}{729}Z,$$
$$I(2^3S) = \frac{Z^2}{8} - \frac{137}{729}Z, \qquad I(2^1S) = \frac{Z^2}{8} - \frac{169}{729}Z. \tag{1}$$

Les valeurs numériques de I pour l'atome d'hélium et l'ion lithium Li^+, sont selon (1),

$$I_{He}(2^3S) \approx 0,125 \text{ u.a.} \approx 3,40 \text{ eV},$$
$$I_{He}(2^1S) \approx 0,037 \text{ u.a.} \approx 1,00 \text{ eV},$$
$$I_{Li^+}(2^3S) \approx 0,56 \text{ u.a.} \approx 15,2 \text{ eV},$$
$$I_{Li^+}(2^1S) \approx 0,43 \text{ u.a.} \approx 11,7 \text{ eV}.$$

L'importante différence entre les valeurs calculée et expérimentale de I (surtout pour l'atome d'hélium) témoigne d'une malencontreuse séparation de l'hamiltonien en partie non perturbée $\widehat{H}_0$ et en perturbation $\widehat{V}$. On le saisit aussitôt si l'on tient compte du fait que dans les états excités d'un atome héliogénoïde, un des électrons ($1s$) se situe, en moyenne, beaucoup plus près du noyau que le second (dans un état excité) et écrante partiellement la charge du noyau (comparer au résultat du problème précédent). Dans le cas d'un noyau de charge suffisamment petite Z, cet écrantage de sa charge par l'électron $1s$, se manifeste fortement sur le mouvement de l'électron dans l'état excité.

11.14. La partie spatiale normée de la fonction d'onde de l'état 2^3S du système dans les conditions du problème est de la forme

$$\Psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2) - \Psi_2(r_1)\Psi_1(r_2)\right\}, \tag{1}$$

où $\Psi_{1,2}(r)$ représentent les fonctions d'onde des états $1s$ et $2s$ d'un atome hydrogénoïde de charge nucléaire Z_{eff} :

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi}}\mathrm{e}^{-Z_{\text{eff}}r}, \qquad \Psi_2 = \sqrt{\frac{Z_{\text{eff}}^3}{8\pi}}\left(1 - \frac{Z_{\text{eff}}r}{2}\right)\mathrm{e}^{-Z_{\text{eff}}r/2}. \tag{2}$$

Pour le calcul de la valeur moyenne de l'énergie d'état décrit par la fonction d'onde (1) il est commode d'écrire l'hamiltonien du système sous la forme

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \left\{-\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_1} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_2}\right\} \\ &\quad -(Z - Z_{\text{eff}})\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \equiv \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2 + \widehat{H}_3.\end{aligned} \tag{3}$$

Vu que la fonction d'onde (1) est fonction propre de l'hamiltonien $\widehat{H}_1$, on a

$$\overline{\widehat{H}_1} = \overline{-\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_1} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_2}} = -\frac{5}{8}Z_{\text{eff}}^2. \tag{4}$$

La valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{H}_2$, selon le théorème du viriel, vaut

$$\overline{\widehat{H}}_2 = \frac{Z - Z_{\text{eff}}}{Z_{\text{eff}}} \overline{\left(-\frac{Z_{\text{eff}}}{r_1} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_2} \right)} = -\frac{5}{4} Z_{\text{eff}} (Z - Z_{\text{eff}}). \tag{5}$$

La valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{H}_3$ peut être écrite sous la forme

$$\overline{\widehat{H}}_3 = \overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}} \equiv K - J, \tag{6}$$

où

$$K = \int \Psi_1^2(r_1) \Psi_2^2(r_2) \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \tag{7}$$

$$J = \int \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_1) \Psi_1(r_2) \Psi_2(r_2) \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \tag{8}$$

Compte tenu de la forme explicite des fonctions d'onde $\Psi_{1,2}$ on peut calculer sans peine les intégrales dans (7), (8) (voir le problème 11.13) :

$$K = \frac{17}{81} Z_{\text{eff}}, \qquad J = \frac{16}{729} Z_{\text{eff}}. \tag{9}$$

Donc,

$$\overline{E} = \overline{\widehat{H}}_1 + \overline{\widehat{H}}_2 + \overline{\widehat{H}}_3 = \frac{5}{8} Z_{\text{eff}}^2 - \frac{5}{4} Z Z_{\text{eff}} + \frac{137}{729} Z_{\text{eff}},$$

et en minimisant cette valeur de $\overline{E}$ par rapport au paramètre Z_{eff}, on obtient sans peine la valeur variationnelle de l'énergie de l'état 2^3S de l'atome héliogénoïde

$$E(2^3S) = \min \overline{E} = -\frac{5}{8} \left(Z - \frac{1096}{7290} \right)^2 \approx -\frac{5}{8} (Z - 0,150)^2,$$

(c'est-à-dire que $Z_{\text{eff}} \approx Z - 0,150$) et le potentiel d'ionisation de l'état 2^3S

$$I(2^3S) = \frac{5}{8} (Z - 0,150)^2 - \frac{Z^2}{2}. \tag{10}$$

Selon (10), on a $I = 0,139$ u.a. pour l'atome d'hélium et $I = 0,576$ u.a. pour l'ion Li^+ ; ces valeurs doivent être comparées aux valeurs expérimentales, respectivement égales à 0,175 et 0,605.

11.15. Pour que l'état de l'atome héliogénoïde correspondant à la configuration électronique $n'l'$, nl soit stable par rapport à l'ionisation de l'atome, son énergie $E(n'l', nl)$ doit être inférieure à l'énergie $E_0 = -Z^2/2$ de l'état fondamental de l'atome hydrogénoïde correspondant.

On remarque aussitôt qu'en négligeant l'interaction entre les électrons, l'énergie

$$E(n', n) = -\frac{1}{2} Z^2 \left(\frac{1}{n'^2} + \frac{1}{n^2} \right) \tag{1}$$

de l'état dans lequel les deux électrons sont excités $(n', n \geq 2)$ ne satisfait pas à la condition de stabilité du système. Il s'avère évident que la prise en compte de l'interaction entre les électrons, s'exprimant sous forme de répulsion, ne fait qu'accroître l'énergie du système et par suite, la conclusion sur l'instabilité des états du système héliogénoïde correspondant à une configuration électronique avec deux électrons excités se confirme.

La démonstration formelle du fait que la prise en compte de l'interaction entre les électrons conduit à une élévation des niveaux d'énergie du système s'obtient aisément de la façon suivante. Soit l'hamiltonien

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{\beta}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|},$$

dont les valeurs propres $E(\beta)$, correspondant au spectre discret, représentent pour $\beta = 1$ les niveaux d'énergie d'un atome héliogénoïde réel, et pour $\beta = 0$ sont données par l'expression (1). En utilisant le résultat du problème 1.28 du Tome I, il vient

$$\frac{\partial E}{\partial \beta} = \overline{\frac{\partial \hat{H}}{\partial \beta}} = \overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}} > 0,$$

ce qu'il fallait démontrer.

11.16. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Pour que l'état de l'atome lithiogénoïde correspondant à la configuration électronique $n_1 l_1$, $n_2 l_2$, $n_3 l_3$ soit stable son énergie doit être inférieure à l'énergie E_0 de l'état fondamental de l'atome héliogénoïde correspondant : $E(n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3) < E_0$. En négligeant l'interaction des électrons, on a

$$E(n_1, n_2, n_3) = -\frac{1}{2} Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} + \frac{1}{n_3^2} \right). \tag{1}$$

La valeur minimale de l'énergie (1) des états dans lesquels seul un électron se trouve dans l'état fondamental (et les deux autres dans un état excité) est $E_{\min} = -3Z^2/4$ (ce qui correspond aux nombres quantiques $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 2$). On se convainc sans peine que pour $Z \geq 3$, on a l'inégalité $E_{\min} > -(Z - 5/16)^2 > E_0$ (on s'est servi du résultat obtenu dans le problème 11.7) d'où il s'ensuit une instabilité des états des atomes lithiogénoïdes dont deux électrons sont excités qui ne permet pas l'ionisation du système (pour la prise en compte de l'interaction des électrons voir le problème précédent).

11.17. L'énergie de l'état d'un atome lithiogénoïde avec une configuration électronique $(1s)^2 nl$ peut être représentée, de façon approchée, sous la forme d'une somme de deux termes : E_0, l'énergie de l'état fondamental de l'atome héliogénoïde correspondant avec deux électrons dans l'état $1s$ et l'énergie de l'électron nl dans le champ coulombien d'un noyau dont la charge est écrantée par deux électrons, c'est-à-dire

$$E_n = E_0 - (Z - 2)^2 / 2n^2.$$

Avec cette approximation, le potentiel d'ionisation est égal à $I_n = (Z-2)^2/2n^2$. Ses valeurs numériques pour les états S et P les plus bas (en énergie) de l'atome de lithium sont identiques et valent $I_2 = 1/8 = 0,125$ u.a. $\approx 3,40$ eV, tandis que les valeurs expérimentales sont $I(S) = 5,37$ eV et $I(P) = 3,52$ eV. Il est utile de comparer la solution de ce problème à celle du problème 11.12.

11.18. L'hamiltonien d'un atome à trois électrons s'écrit :

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^{3} \left(-\frac{1}{2}\Delta_a - \frac{Z}{r_a} \right) + \sum_{a<b} \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} \tag{1}$$

tandis que la configuration électronique de l'état fondamental est $(1s)^2 2s$.

En accord avec les conditions du problème, on choisit les fonctions d'onde à un électron $1s$ et $2s$ sous la forme

$$\psi_0 = \sqrt{\frac{Z_{\text{eff}}^3}{\pi}} \exp\{-Z_{\text{eff}}\, r\}\,,$$
$$\psi_1 = \sqrt{\frac{Z_{\text{eff}}^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{Z_{\text{eff}} r}{2}\right) \exp\{-Z_{\text{eff}}\, r/2\}\,. \tag{2}$$

a) Cherchons $\overline{E}(Z_{\text{eff}})$ pour l'état décrit par la fonction d'onde

$$\Psi = \psi_0(r_1)\psi_0(r_2)\psi_1(r_3)\chi, \tag{3}$$

où χ est la partie de spin de la fonction d'onde, en minimisant la valeur obtenue par rapport au paramètre Z_{eff} ; on aboutit à une valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental de l'atome par la méthode variationnelle : $E_0 \approx \min \overline{E}(Z_{\text{eff}})$.

Avant de passer aux calculs, notons plusieurs faits importants.

Strictement parlant, la fonction d'onde (3) ne décrit aucun état physiquement réalisable d'un système à trois électrons, car pour tout choix de la fonction de spin χ, cette fonction d'onde ne satisfait manifestement pas à la condition d'antisymétrie vis-à-vis de la permutation des variables de deux fermions (électrons) quelconques identiques. Il est aisé d'obtenir la fonction d'onde du système, avec la symétrie exigée, en choisissant par exemple χ sous la forme

$$\chi = \chi^{(1)}_{1/2,1/2}\chi^{(2)}_{1/2,-1/2}\chi^{(3)}_{1/2,1/2} \tag{4}$$

($\chi^{(a)}_{1/2,1/2}$ est la fonction d'onde de spin de l'$a^{\text{ème}}$ particule avec une valeur déterminée $s_z = +1/2$, etc.) et en effectuant l'antisymétrisation standard de la fonction d'onde (voir plus loin). Or, bien que l'obtention de la fonction d'onde "correcte" ne présente pas en elle-même de difficultés, les calculs avec une telle fonction d'onde deviennent plus difficiles. En ce sens, le calcul de la grandeur E_0, avec l'utilisation de la fonction d'onde (3) de forme "plus simple", s'appuie sur l'hypothèse suivant laquelle on peut négliger l'antisymétrisation de la fonction d'onde (et, par conséquent, l'étude successive des effets d'échange dans

l'approximation choisie). En ce sens, il faut souligner que l'utilisation de la fonction d'onde (3) non antisymétrisée ne signifie aucunement que l'on néglige complètement les effets d'échange liés à l'identité des particules : son choix, en guise de fonction d'onde de l'état fondamental du système de trois électrons, traduit déjà efficacement le fait que les électrons sont des fermions identiques. En effet, la fonction d'onde (3) tient déjà compte du principe de Pauli, car le niveau uniparticulaire inférieur $1s$ n'est occupé que par deux des trois électrons. Dans cette situation, pour un atome hypothétique comprenant, à la place des électrons, des particules sans spin (bosons), il aurait fallu prendre comme fonction d'onde de l'état fondamental

$$\Psi = \psi_0(r_1)\psi_0(r_2)\psi_0(r_3).$$

Les calculs menés avec cette fonction d'onde n'ont manifestement aucun rapport avec les atomes électroniques habituels.

Passons au calcul de $\overline{E}$. Pour cela, écrivons l'hamiltonien sous la forme

$$\hat{H} = \sum_a \left(-\frac{\Delta_a}{2} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_a}\right) + \frac{Z - Z_{\text{eff}}}{Z_{\text{eff}}} \sum_a \left(-\frac{Z_{\text{eff}}}{r_a}\right) + \sum_{a<b} \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}. \tag{5}$$

Vu que

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r}\right)\psi_{0,1} = \varepsilon_{0,1}\psi_{0,1}, \qquad \varepsilon_0 = -\frac{Z_{\text{eff}}^2}{2}, \qquad \varepsilon_1 = -\frac{Z_{\text{eff}}^2}{8}, \tag{6}$$

on a

$$\overline{\sum_a \left(-\frac{\Delta_a}{2} - \frac{Z_{\text{eff}}}{r_a}\right)} = 2\varepsilon_0 + \varepsilon_1 = -\frac{9}{8}Z_{\text{eff}}^2. \tag{7}$$

Ensuite, la valeur moyenne

$$\overline{\frac{Z - Z_{\text{eff}}}{Z_{\text{eff}}} \sum_a \left(-\frac{Z_{\text{eff}}}{r_a}\right)} = \frac{Z - Z_{\text{eff}}}{Z_{\text{eff}}} 2(2\varepsilon_0 + \varepsilon_1) = -\frac{9}{4} Z_{\text{eff}}(Z - Z_{\text{eff}}) \tag{8}$$

se déduit directement du théorème du viriel.

Enfin, la valeur moyenne de la dernière somme de l'expression (5) est égale à

$$\overline{\sum_{a<b} \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}} = K_1 + 2K_2,$$

où (l'intégrale K_1 a été calculée dans 11.5, et K_2 dans 11.13) :

$$\begin{aligned} K_1 &= \int |\psi_0(r_1)|^2 |\psi_0(r_2)|^2 \frac{dV_1 dV_2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{Z_{\text{eff}}^6}{\pi^2} \int \frac{\mathrm{e}^{-2Z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2 = \frac{5}{8} Z_{\text{eff}}, \\ K_2 &= \int |\psi_0(r_1)|^2 |\psi_1(r_3)|^2 \frac{dV_1 dV_3}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} = \frac{17}{81} Z_{\text{eff}}. \end{aligned} \tag{9}$$

En définitive on obtient

$$\overline{E}(Z_{\text{eff}}) = \frac{9}{8}\left[Z_{\text{eff}}^2 - 2\left(Z - \frac{677}{1458}\right)Z_{\text{eff}}\right].$$

En minimisant par rapport au paramètre Z_{eff}, on obtient la valeur variationnelle cherchée de l'énergie de l'état fondamental :

$$E_{0,\text{var}} = \min \overline{E}(Z_{\text{eff}}) = -\frac{9}{8}\left(Z - \frac{677}{1458}\right)^2 = -\frac{9}{8}(Z - 0,4643)^2. \tag{10}$$

La valeur numérique de (10) pour l'atome de lithium ($Z = 3$) est

$$E_{0,\text{var}} \approx -7,235 \text{ u.a.}$$

b) La fonction d'onde d'un système à trois électrons, obtenue par antisymétrisation standard de la fonction d'onde (3) avec χ sous la forme (4), s'établit d'après le déterminant connu

$$\widetilde{\Psi} = \frac{1}{\sqrt{3!}}\begin{vmatrix} \psi_0(r_1)\alpha(1) & \psi_0(r_2)\alpha(2) & \psi_0(r_3)\alpha(3) \\ \psi_0(r_1)\beta(1) & \psi_0(r_2)\beta(2) & \psi_0(r_3)\beta(3) \\ \psi_1(r_1)\alpha(1) & \psi_1(r_2)\alpha(2) & \psi_1(r_3)\alpha(3) \end{vmatrix}, \tag{11}$$

où $\alpha = \chi_{1/2,1/2}$, $\beta = \chi_{1/2,-1/2}$ sont les fonctions d'onde de spin. La fonction d'onde (11) décrit un état de l'atome de spin total $S = 1/2$ et $S_z = +1/2$; il est manifeste, de même, que $L = 0$ (le terme fondamental est ^2S).

Pour calculer la valeur moyenne de l'hamiltonien (5) dans l'état décrit par la fonction d'onde $\widetilde{\Psi}$ (11), notons que les valeurs moyennes de la première et de la seconde somme de (5) sont identiques à celles obtenues sans antisymétrisation de la fonction d'onde, autrement dit, elles sont données par les expressions (7) et (8). Pour le calcul de l'énergie moyenne d'interaction entre les électrons, il suffit donc de trouver

$$\overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}$$

et de multiplier cette valeur par 3.

Ecrivons la forme explicite de la fonction d'onde (11) :

$$\begin{aligned} \widetilde{\Psi} &= \frac{1}{\sqrt{6}}\{\psi_0(1)\alpha(1)\psi_0(2)\beta(2)\psi_1(3)\alpha(3) + \psi_0(1)\beta(1)\psi_1(2)\alpha(2)\psi_0(3)\alpha(3) \\ &\quad + \psi_1(1)\alpha(1)\psi_0(2)\alpha(2)\psi_0(3)\beta(3) - \psi_1(1)\alpha(1)\psi_0(2)\beta(2)\psi_0(3)\alpha(3) \\ &\quad - \psi_0(1)\alpha(1)\psi_1(2)\alpha(2)\psi_0(3)\beta(3) - \psi_0(1)\beta(1)\psi_0(2)\alpha(2)\psi_1(3)\alpha(3)\} \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{6}}\{|1\rangle + |2\rangle + |3\rangle - |4\rangle - |5\rangle - |6\rangle\}. \end{aligned}$$

La détermination de

$$\overline{\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}} = \int \widetilde{\Psi}^* \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\widetilde{\Psi} d\tau$$

implique le calcul de $6 \times 6 = 36$ intégrales. Mais vu l'orthogonalité des fonctions ψ_0 et ψ_1, α et β, on remarque aussitôt que de nombreuses intégrales sont nulles, tandis que les intégrales différentes de zéro sont égales à

$$\langle 1|\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}|1\rangle = \langle 6|\ldots|6\rangle = \int |\psi_0(r_1)|^2|\psi_0(r_2)|^2\frac{dV_1dV_2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} = K_1,$$

$$\langle 2|\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}|2\rangle = \langle 3|\ldots|3\rangle = \langle 4|\ldots|4\rangle = \langle 5|\ldots|5\rangle$$

$$= \int |\psi_0(r_1)|^2|\psi_1(r_2)|^2\frac{dV_1dV_2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} = K_2,$$

$$\langle 5|\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}|3\rangle = \langle 3|\ldots|5\rangle$$

$$= -\int \psi_0^*(r_1)\psi_1^*(r_2)\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\psi_0(r_2)\psi_1(r_1)dV_1dV_2 = -J,$$

où K_1, K_2 se déterminent d'après les expressions (9), et l'intégrale d'échange $J = \dfrac{16}{729}Z_{\text{eff}}$ a été calculée dans 11.13.

L'expression définitive de l'énergie potentielle moyenne d'interaction entre les électrons est de la forme

$$\overline{\sum_{a<b}\frac{1}{|\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b|}} = 3\cdot\frac{1}{6}(2K_1+4K_2-2J) = \frac{5965}{5832}Z_{\text{eff}},$$

et la valeur moyenne de $\overline{E}$ est égale à

$$\overline{E}(Z_{\text{eff}}) = \frac{9}{8}\left[Z_{\text{eff}}^2 - 2\left(Z-\frac{5965}{13\ 122}\right)Z_{\text{eff}}\right].$$

En mininimisant $\overline{E}$ par rapport au paramètre Z_{eff}, on obtient la valeur variationnelle de l'énergie de l'état fondamental :

$$E_{0,\text{var}} = -\frac{9}{8}\left(Z-\frac{5965}{13\ 122}\right)^2 = -\frac{9}{8}(Z-0,4622)^2. \tag{12}$$

La valeur numérique de (12) pour l'atome de lithium est

$$E_{0,\text{var}} \approx -7,245 \text{ u.a.} \tag{13}$$

Les résultats (12) et (13) diffèrent de peu de ceux établis au point a) avec une fonction d'onde plus simple.

11.19.

a) ${}^1P_1$; ${}^3P_{0,1,2}$;

b) ${}^1S_0$; ${}^1P_1$; ${}^1D_2$; ${}^3S_1$; ${}^3P_{0,1,2}$; ${}^3D_{1,2,3}$;

c) ${}^1P_1$; ${}^1D_2$; ${}^1F_3$; ${}^3P_{0,1,2}$; ${}^3D_{1,2,3}$; ${}^3F_{2,3,4}$.

11.20.
a) ${}^1S_0$; ${}^1D_2$; ${}^3P_{0,1,2}$;
b) ${}^2P_{1/2,3/2}$; ${}^2D_{3/2,5/2}$; ${}^4S_{3/2}$;
c) ${}^1S_0$; ${}^1D_2$; ${}^3P_{0,1,2}$;
d) ${}^1S_0$; ${}^1D_2$; ${}^1G_4$; ${}^3P_{0,1,2}$; ${}^3F_{2,3,4}$.

Dans les cas a) d), les termes fondamentaux sont ${}^3P_0$, ${}^4S_{3/2}$, ${}^3P_2$, ${}^3F_2$.

11.21. La configuration électronique fondamentale de l'atome d'azote est de la forme $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$ et le terme fondamental (voir problème précédent) ${}^4S_{3/2}$. Dans le cas de l'atome de chlore, on a : $(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^5$ et ${}^2P_{3/2}$.

Les configurations électroniques des ions des éléments étudiés, qui se rapportent aux groupes principaux sont identiques à celles des atomes des éléments précédents (C et S), c'est-à-dire
$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ et le terme fondamental ${}^3P_0$ pour l'ion N^+,
$(1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^2(3p)^4$, ${}^3P_2$ pour l'ion Cl^+.

11.22. Vu que la parité de l'état d'une particule de moment cinétique l est $(-1)^l$ et que la parité est une grandeur multiplicative (la parité du système est égale au produit des parités de ses sous-systèmes et c'est pourquoi la parité des systèmes d'électrons formant une couche remplie est positive), il est manifeste que la parité I vaut :
a) $I = +1$;
b) $I = (-1)^k$;
c) $I = +1$;
d) $I = (-1)^k$.

11.23. La fonction d'onde de deux électrons doit être antisymétrique par rapport à la permutation des variables de spin et d'espace des deux particules. Compte tenu de ce que la dépendance radiale des fonctions d'onde de deux électrons équivalents est symétrique par rapport à la permutation des variables r_1 et r_2, et que le caractère de symétrie de la partie de spin de la fonction d'onde dépend de la valeur S du spin total (pour $S = 0$ la fonction d'onde de spin est antisymétrique, tandis que pour $S = 1$ elle est symétrique par rapport à la permutation des variables de spin), tandis que le caractère de symétrie de la dépendance angulaire de la fonction d'onde est régi par la valeur L du moment cinétique total (voir 3.39), on trouve sans peine les valeurs S et L des termes atomiques possibles de la configuration $(nl)^2$:

$$S = 0, \qquad L = 2l, 2l-2, 2l-4, \ldots, 0 \qquad \text{(termes singulets)},$$
$$S = 1, \qquad L = 2l-1, 2l-3, \ldots, 1 \qquad \text{(termes triplets, } l \neq 0).$$

11.24. La valeur maximale possible de la projection S_z du spin total du système d'électrons étudiés et la valeur maximale possible de la projection L_z du moment orbital total se déterminent d'après la répartition des électrons suivant les états suivants avec les valeurs fixées des grandeurs l_z, s_z :

$$l, 1/2 \; ; \; l-1, 1/2 \; ; \; l-2, 1/2 \; ; \ldots \; ; \; l-k+1, 1/2$$

(on pose pour l'instant que $k \leq 2l+1$, c'est-à-dire que la couche est remplie, au plus, à moitié ; voir plus loin). Il est évident que

$$S_{\max} = (S_z)_{\max} = k/2$$

et

$$L_{\max} = (L_z)_{\max} = \sum_{n=0}^{k-1}(l-n) = \frac{k(2l+1-k)}{2}.$$

Les valeurs obtenues de $S_{\max}$, $L_{\max}$ définissent les nombres quantiques S, L du terme fondamental ; alors la valeur du moment total vaut $J = |L-S| = |L_{\max} - S_{\max}|$ (couche à moitié pleine).

Pour $k > 2l+1$ (la couche est plus qu'à moitié pleine) les valeurs S, L du terme fondamental s'obtiennent à l'aide des expressions établies plus haut pour $k \leq 2l+1$ et où k doit être remplacé par $[2(2l+1)-k]$; alors, la valeur du moment total de l'atome vaut $J = L+S$.

11.25. Dans les conditions du problème, le nombre d'états électroniques individuels différents indépendants (de la couche nl) est $2(2l+1)$. Le nombre de procédés permettant de placer dans ces états k électrons, compte tenu du principe de Pauli, vaut

$$C^k_{2(2l+1)} = \frac{[2(2l+1)]!}{k![2(2l+1)-k]!}$$

et représente le nombre cherché d'états différents de l'atome avec la configuration électronique $(nl)^k$.

11.26. La partie de spin de la fonction d'onde d'état de trois électrons avec le spin total $S = 3/2$ est symétrique par rapport à la permutation des variables de spin de tout couple de deux particules (voir 5.32 du Tome I). En vertu de l'équivalence des électrons, la dépendance radiale de la fonction d'onde est également symétrique, c'est-à-dire que la fonction d'onde ne varie pas avec la permutation des variables radiales r_a des électrons. Aussi, en accord avec le principe de Pauli, la dépendance angulaire de la fonction d'onde doit-elle être antisymétrique par rapport à la permutation des variables angulaires de toute paire d'électrons. La dépendance angulaire de la fonction d'onde se détermine de façon univoque lorsque les nombres quantiques m_1, m_2, m_3, qui sont les projections des moments orbitaux d'électrons individuels sont donnés, tandis que le caractère antisymétrique de cette dépendance exige que ces nombres m_a soient différents. Compte tenu des valeurs possibles des grandeurs m_a, on saisit aussitôt que le nombre d'états différents dans l'espace des variables angulaires vaut

$$C^3_{2l+1} = \frac{(2l+1)!}{3!(2l-2)!}, \tag{1}$$

tandis que le nombre cherché d'états de l'atome s'obtient par multiplication de (1) par 4 (nombre d'états de spin différents).

11.27. La partie spatiale de la fonction d'onde des états stationnaires de l'atome est de la forme

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{\Psi_1(r_1)\Psi_2(r_2) \pm \Psi_2(r_1)\Psi_1(r_2)\}, \tag{1}$$

où les signes "+" et "-" correspondent respectivement aux états singulets et triplets de l'atome, $\Psi_1(r)$ et $\Psi_2(r)$ représentant les fonctions d'onde des électrons ns et $n'l$ (strictement parlant, l'expression (1) constitue la partie de la fonction d'onde liée aux électrons se trouvant en dehors des couches pleines ; quant aux électrons des couches pleines, ils ne sont pas explicitement étudiés, mais leur présence se manifeste effectivement dans la forme concrète des fonctions d'onde $\Psi_{1,2}(r)$ définie par le champ self-consistant).

Quand on néglige l'interaction des électrons ns et $n'l$, les fonctions d'onde (1) correspondent à la même énergie dont la variation, du fait de l'interaction des électrons, vaut

$$E_{\pm} = K \pm J. \tag{2}$$

L'intégrale d'échange

$$J = \int \Psi_1^*(r_1)\Psi_2^*(r_1)\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\Psi_1(r_2)\Psi_2(r_2)dV_1 dV_2. \tag{3}$$

détermine la séparation en énergie des termes singulet et triplet.

Montrons que $J > 0$. Notons que, sans restreindre la généralité, on peut considérer la fonction d'onde Ψ_1 comme réelle et représenter Ψ_2 sous la forme $\Psi_2 = \chi_1 + i\chi_2$, $\chi_{1,2}$ étant des fonctions réelles ; récrivons alors l'expression (3) sous la forme

$$J = \int \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\Psi_1(r_1)\Psi_1(r_2)\{\chi_1(\mathbf{r}_1)\chi_1(\mathbf{r}_2) + \chi_2(\mathbf{r}_1)\chi_2(\mathbf{r}_2)\}dV_1 dV_2. \tag{4}$$

La nature positive de l'expression (4) découle des formules connues d'électrostatique de l'énergie du champ électrostatique créé par une répartition de charge de densité volumique $\rho(\mathbf{r})$:

$$W = \frac{1}{8\pi}\int \mathbf{E}^2(\mathbf{r})dV = \frac{1}{2}\int \varphi(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r})dV = \frac{1}{2}\iint \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')dV dV' > 0.$$

Ainsi, $J > 0$ et de (2) résulte l'assertion du problème.

11.28. La fonction d'onde normée d'un électron particulier est de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}(\mathbf{a}\cdot\mathbf{n})\varphi(r) \ ; \qquad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \qquad |\mathbf{a}|^2 = 1.$$

La partie spatiale de la fonction d'onde d'un système de deux électrons np avec une valeur fixée L du moment orbital total peut se représenter sous la forme

$$\Psi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = a_{ik}(L)n_{1i}n_{2k}\varphi(r_1)\varphi(r_2), \tag{1}$$

où les propriétés du tenseur $a_{ik}(L)$ dépendent de la valeur L :

$$a_{ik} = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{16\pi^2}}\delta_{ik} & L=0 \quad \text{(terme } S\text{)}, \\ \sqrt{\frac{9}{32\pi^2}}\varepsilon_{ikl}b_l \quad |\mathbf{b}|^2=1 & L=1 \quad \text{(terme } P\text{)}, \\ a_{ki}\ ; \quad a_{ii}=0, \quad a_{ik}a_{ik}^* = \frac{9}{16\pi^2} & L=2 \quad \text{(terme } D\text{)} \end{cases} \tag{2}$$

(notons que selon (1) et (2) les fonctions d'onde des termes S et D sont symétriques par rapport à la permutation des variables spatiales des électrons, et, par conséquent, ces termes sont des singulets, le terme P étant un triplet).

Si l'on néglige l'interaction des électrons, tous les termes sont doués de la même énergie dont la variation due à l'interaction

$$E_L^{(1)} = \int |\Psi_L(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} dV_1 dV_2$$

peut s'écrire sous la forme

$$E_L^{(1)} = 2a_{ik}a_{lm}^* \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1)\varphi^2(r_2) \iint \frac{n_{1i}n_{2k}n_{1l}n_{2m}d\Omega_1 d\Omega_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2}}. \tag{3}$$

Effectuons dans (3) l'intégration par rapport aux variables angulaires du premier électron. En représentant l'intégrale qui y figure sous la forme

$$\int \frac{n_{1i}n_{1l}d\Omega_1}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2}} = A\delta_{il} + Bn_{2i}n_{2l} \tag{4}$$

puis en procédant à la convolution de l'expression (4) vis-à-vis des indices i et l et, ensuite, en multipliant les deux membres de cette relation par $n_{2i}n_{2l}$ on obtient respectivement

$$\begin{aligned} 3A + B &= \int_{-1}^{1} \frac{2\pi dz}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2z}} = \frac{4\pi}{r_2} \qquad \text{(rappelons que } r_2 \geq r_1\text{)}, \\ A + B &= \int_{-1}^{1} \frac{2\pi z^2 dz}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2z}} = \frac{\pi}{3r_2^3}\left(4r_2^2 + \frac{8}{5}r_1^2\right) \end{aligned} \tag{5}$$

(en calculant les intégrales par rapport à θ_1 et φ_1, il est commode de placer l'axe polaire suivant le vecteur $\mathbf{n}_2$).

Ensuite, effectuons l'intégration par rapport aux variables angulaires du second électron compte tenu des relations connues

$$\int n_i n_k d\Omega = \frac{4\pi}{3}\delta_{ik} \qquad \int n_i n_k n_l n_m d\Omega = \frac{4\pi}{15}(\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}).$$

Finalement, l'expression (3) prend la forme

$$\begin{aligned} E_L^{(1)} \quad = \quad & 2a_{ik}(L)a_{lm}^*(L) \int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2^2 \varphi^2(r_1)\varphi^2(r_2) \\ & \times \left[\frac{4\pi}{3}\delta_{il}\delta_{km}A + \frac{4\pi}{15}(\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl})B\right]. \end{aligned} \tag{6}$$

Compte tenu de l'expression explicite (2) des composantes du tenseur a_{ik} pour les états avec une valeur fixée L et des valeurs A, B, on est en mesure de représenter, selon (5), la formule (6) sous la forme

$$E_L^{(1)} = 2\int_0^\infty dr_2 \int_0^{r_2} dr_1 r_1^2 r_2 \varphi^2(r_1)\varphi^2(r_2)\left[1 + \frac{8}{5} b_L \frac{r_1^2}{r_2^2}\right], \tag{7}$$

où

$$b_L = \begin{cases} 1/4 & L = 0, \\ -1/8 & L = 1, \\ 1/40 & L = 2. \end{cases} \tag{8}$$

Selon (7) et (8) les énergies des termes satisfont à la condition

$$E^{(1)}(^3P) < E^{(1)}(^1D) < E^{(1)}(^1S),$$

et le terme fondamental est ^3P en accord à la règle de Hund.

Notons que d'après (7) et (8), on a la relation

$$\frac{E(^1D) - E(^3P)}{E(^1S) - E(^1D)} = \frac{2}{3} \approx 0,67 \tag{9}$$

entre les niveaux d'énergie des termes liés à la configuration $(np)^2$, qui est intéressante du fait qu'elle ne dépend pas de la forme concrète de la fonction d'onde de l'électron np au sein de l'atome, aussi peut-elle être utilisée en guise de critère du degré de précision de l'approximation étudiée. Concernant ce rapport, indiquons que pour l'atome ^{32}Ge possédant la configuration électronique $(4p)^2$ en plus des couches pleines, la valeur expérimentale de la relation (9) est 0,77.

11.29. Comme on le sait, dans le modèle de Thomas-Fermi, la distribution spatiale des électrons dans un atome neutre est décrite par une densité volumique $n(r)$ de la forme

$$n(r) = \frac{32Z^2}{9\pi^3}\left[\frac{\chi(x)}{x}\right]^{3/2}, \qquad x = \frac{rZ^{1/3}}{b},$$

où Z est la charge du noyau, $b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \approx 0,885$ et $\chi(x)$ est la fonction universelle du modèle. La fonction $n(r)$ est normée sur le nombre total d'électrons, égal à Z, c'est-à-dire $\int n(r)dV = Z$, ainsi la fonction

$$w(r) = \frac{1}{Z} n(r) \tag{1}$$

représente la fonction de distribution des coordonnées d'un électron individuel. Ce fait pris en compte, on obtient sans peine

$$\overline{r^n} = \int r^n w(r) dV = \frac{4\pi}{Z}\int n(r) r^{n+2} dr = C_n Z^{-n/3} \tag{2}$$

où

$$C_n = b^n \int_0^\infty x^{n+2} \left[\frac{\chi(x)}{x}\right]^{3/2} dx. \tag{3}$$

En particulier, $\bar{r} \propto Z^{-1/3}$, c'est-à-dire les électrons se trouvent en moyenne à la distance du noyau qui décroît lorsque Z augmente comme $Z^{-1/3}$.

La fonction $\chi(x)$, pour $x \to \infty$, est de la forme $\chi \propto x^{-3}$, et à partir de (3) il s'ensuit que pour $n \geq 3$ on a $\overline{r^n} = \infty$. Ce résultat est une caractéristique du modèle aboutissant à une décroissance trop lente de $n(r)$ aux grandes distances, où, comme on le sait, il n'est plus applicable (dans les atomes réels la densité électronique diminue de façon exponentielle aux grandes distances).

11.30. Comme on le sait, dans le modèle de Thomas-Fermi, la valeur maximale $p_0(r)$ de l'impulsion des électrons au point r est liée à la densité volumique des électrons $n(r)$ par la relation

$$\frac{p_0^3(r)}{3\pi^2} = n(r) = \frac{32Z^2}{9\pi^3}\left[\frac{\chi(x)}{x}\right]^{3/2}, \qquad x = \frac{rZ^{1/3}}{b},$$

où $\chi(x)$ est la fonction universelle du modèle. En récrivant cette relation sous la forme

$$f(x) = \frac{\chi(x)}{x} = \left(\frac{3\pi p_0^3(r)}{32Z^2}\right)^{2/3} \equiv y, \tag{1}$$

introduisons la fonction $g(y)$, inverse de la fonction $y = f(x)$:

$$x = f^{-1}(y) = g(y). \tag{2}$$

Vu que $\chi(x)/x$, comme d'ailleurs $\chi(x)$, est une fonction de la variable x décroissant de façon monotone, la fonction $g(y)$ est parfaitement définie et monotone (notons que $g(0) = \infty$, $g(\infty) = 0$).

Dans le modèle de Thomas-Fermi, le mouvement des électrons dans un champ self-consistant s'étudie par une approche quasi classique, tous les nombres d'occupation des états du spectre discret valant 1. Comme le nombre d'états est égal à

$$\Delta N = \frac{2\Delta\Gamma}{(2\pi)^3} = \frac{2\Delta V_q \Delta V_p}{(2\pi)^3} \qquad (\hbar = 1)$$

où $\Delta V_p \equiv d^3p$ et ΔV_q est le volume au sein duquel les électrons peuvent posséder l'impulsion p, la grandeur ΔN représente le nombre d'électrons dont les impulsions se disposent dans l'intervalle adéquat d^3p. La valeur ΔV_q s'obtient aisément à partir des relations (1), (2) :

$$\Delta V_q = \frac{4\pi}{3} r^3(p) = \frac{4\pi b^3}{3Z} x^3(p) = \frac{4\pi b^3}{3Z}\left\{g\left[\left(\frac{3\pi p^3}{32Z^2}\right)^{2/3}\right]\right\}^3,$$

et l'expression finale de la distribution des impulsions des électrons dans le modèle de Thomas-Fermi prend la forme ($b = (3\pi/4)^{2/3}/2$)

$$dn(p) = \frac{3}{128Z}\left\{g\left[\left(\frac{3\pi p^3}{32Z^2}\right)^{2/3}\right]\right\}^3 d^3p, \tag{3}$$

Par construction, la distribution (3) est normée sur le nombre total d'électrons $\int dn(p) = Z$ (cela peut être démontré directement). Aussi l'expression $dw = \frac{1}{Z}dn$ constitue-t-elle la fonction de distribution des impulsions des électrons individuels. On trouve sans peine

$$\overline{p^n} = \int p^n dw = \widetilde{C}_n Z^{2n/3} \tag{4}$$

où

$$\widetilde{C}_n = \frac{1}{3}\left(\frac{32}{3\pi}\right)^{n/3}\int_0^\infty x^{n/3}g^3(x^{2/3})dx. \tag{5}$$

Selon la formule (4), la valeur moyenne de l'impulsion de l'électron croît avec Z comme $Z^{2/3}$. Ce résultat aurait pu être obtenu plus simplement (sans passer par l'étude de la distribution des impulsions des électrons) en recourant au théorème du viriel et en tenant compte de ce que d'après le problème précédent les distances moyennes sont proportionnelles à $Z^{-1/3}$. On invite le lecteur à effectuer par lui-même les estimations adéquates.

11.31. Compte tenu de ce que les distances caractéristiques dans l'atome décroissent avec Z comme $Z^{-1/3}$ et les impulsions des électrons croissent proportionnellement à $Z^{2/3}$ (voir les deux problèmes précédents), on trouve sans peine :

a) $l_{\text{car}} \sim r_{\text{car}}\tilde{p}_{\text{car}} \propto Z^{-1/3}Z^{2/3} = Z^{1/3}$;

b) l'énergie d'interaction des électrons avec le noyau $U_{\text{e noy}} \sim -Z\dfrac{Z}{r_{\text{car}}} \propto -Z^{7/3}$; l'énergie d'interaction de deux électrons est une grandeur de l'ordre de $1/r_{\text{car}} \propto Z^{1/3}$, mais l'énergie totale d'interaction de tous les électrons $U_{\text{e e}} \sim Z^2Z^{1/3} = Z^{7/3}$ (le nombre de paires d'électrons est $Z(Z-1)/2$, tandis que $Z \gg 1$) ; l'énergie cinétique de tous les électrons est proportionnelle à $T_{\text{e}} \sim Zp_{\text{car}}^2 \propto Z^{7/3}$. Donc, l'énergie totale de l'atome et celle d'ionisation totale, qui lui est égale en grandeur mais de signe opposé, présentent dans le modèle de Thomas-Fermi une dépendance en Z de la forme $E_{\text{ion tot}} \propto Z^{7/3}$.

11.32. Les niveaux d'énergie des électrons s se déterminent par la règle quasi classique de quantification ($U = -\varphi(r)$)

$$\int_0^{r_0}\sqrt{2[E_n + \varphi(r)]}dr = \pi(n+\gamma). \tag{1}$$

D'après la distribution de Thomas-Fermi (un électron par état), le nombre d'électrons s est égal au double (spin compris) du nombre de valeurs $(n+\gamma)$ pour lesquelles $E_n \leq E_{\max}$, où $E_{\max}$ est la valeur maximale de l'énergie totale de l'électron de Thomas-Fermi. Pour un atome neutre cette valeur est nulle, de sorte que $r_0 = \infty$. Aussi la valeur maximale $n_{\max}$ se détermine-t-elle à partir de l'égalité

$$n_{\max} \approx \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \sqrt{2\varphi(r)}dr \tag{2}$$

(on a négligé la grandeur $\gamma \sim 1$ dans l'expression (1), vu que l'étude suppose $n \gg 1$). En passant aux unités de Thomas-Fermi :

$$r = \frac{xb}{Z^{1/3}}, \qquad b = 0,885, \qquad \varphi(r) = \frac{Z^{4/3}}{b}\frac{\chi(x)}{x},$$

on obtient la solution du problème

$$n(l=0) \approx 2n_{\max} = \frac{2}{\pi}\sqrt{2b}Z^{1/3}\int_0^\infty \sqrt{\frac{\chi(x)}{x}}dx \sim Z^{1/3}.$$

11.33. Dans le modèle de Thomas-Fermi, l'énergie cinétique maximale des électrons au point r est

$$T_{\max} = \frac{1}{2}[3\pi^2 n(r)]^{2/3},$$

et comme l'énergie cinétique moyenne est égale à $\overline{T} = \frac{3}{5}T_{\max}$ l'énergie cinétique de tous les électrons de l'atome est

$$T = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}\int n^{5/3}(r)dV. \tag{1}$$

Le potentiel $\varphi_e(0)$ créé par les électrons à l'origine des coordonnées $r = 0$, où se trouve le noyau, ainsi que l'énergie de leur interaction avec le noyau valent

$$U_{e\ noy} = Z\varphi_e(0) = -Z\int \frac{n(r)}{r}dV. \tag{2}$$

L'énergie d'interaction des électrons se détermine à partir de l'expression connue en électrostatique

$$U_{e\ e} = \frac{1}{2}\int \rho_e\varphi_e dV = \frac{Z}{2}\int \frac{n(r)}{r}dV - \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{4}\int n^{5/3}(r)dV \tag{3}$$

dans laquelle on a tenu compte de ce que $\rho_e = -n(r)$, $\varphi_e = \varphi - \frac{Z}{r} = \frac{1}{2}(3\pi^2 n)^{2/3} - \frac{Z}{r}$.

On déduit de façon élémentaire de (1)–(3) la relation

$$5T + 6U_{e\ e} + 3U_{e\ noy} = 0, \tag{4}$$

et compte tenu du théorème du viriel

$$E = T + U_{e\,e} + U_{e\,noy} = -T \tag{5}$$

(notons que les grandeurs T, $U_{e\,e}$, $U_{e\,noy}$ représentent des moyennes quantiques dans l'approximation quasi classique), on obtient sans peine

$$E = -E_{ion\ tot} = \frac{3}{7}U_{e\,noy} = \frac{3Z}{7}\varphi_e(0),$$
$$T = -\frac{3}{7}U_{e\,noy}, \qquad U_{e\,e} = -\frac{1}{7}U_{e\,noy}.$$

Compte tenu de la valeur $\varphi_e(0) = -1,80Z^{4/3}$, on aboutit à l'énergie d'ionisation totale de l'atome neutre dans le modèle de Thomas-Fermi : $E_{ion\ tot} = 0,77Z^{7/3}$ u.a. $\approx 21,0Z^{7/3}$ eV.

11.34. Cherchons l'expression de l'énergie de l'atome avec une charge nucléaire Z dans l'approximation quasi classique en termes de la densité volumique des électrons $n(r)$ (qui doit être déterminée !). L'énergie d'interaction des électrons $U_{e\,e}$ entre eux et avec le noyau $U_{e\,noy}$ se détermine sur la base des formules bien connues de l'électrostatique

$$U_{e\,noy} = -Z\int \frac{n(r)}{r}dV,$$
$$U_{e\,e} = \frac{1}{2}\iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dVdV' = \frac{1}{2}\iint \frac{n(r)n(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dVdV'. \tag{1}$$

L'énergie cinétique des électrons se détermine à partir de leur distribution, avec les nombres d'occupation $n_k = 1$, suivant les états d'énergie les plus bas, au sein d'un champ électrostatique self-consistant (qui doit également être déterminé !) et vaut

$$T = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}\int n^{5/3}(r)dV \tag{2}$$

(cette expression de T est le corollaire direct de la formule quasi classique du nombre d'états de l'électron $\Delta N = \dfrac{2\Delta\Gamma}{(2\pi)^3} = \dfrac{2\Delta V_q \Delta V_p}{(2\pi)^3}$, qui, pour $\Delta V_q = 1$ et $\Delta V_p = 4\pi p_{max}^3/3$, lie la densité du nombre de particules $n = \Delta N$ à p_{max} ; $\overline{p^2} = (3/5)p_{max}^2$).

Bref, l'énergie de l'atome (ou de l'ion) prend la forme

$$E[n(r)] = \frac{3(3\pi^2)^{2/3}}{10}\int n^{5/3}(r)dV - Z\int \frac{n(r)}{r}dV + \frac{1}{2}\iint \frac{n(r)n(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dVdV'. \tag{3}$$

La variation de la fonctionnelle $E[n(r)]$ est

$$\delta E = \int \delta n(r)\left\{\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2}n^{2/3}(r) - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}dV'\right\}dV,$$

et la condition de son extremum (et, évidemment, de son minimum) $\delta E = 0$,

$$\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r) - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' = 0, \tag{4}$$

s'exprime par une équation intégrale permettant de déterminer la fonction $n(r)$ qui minimise l'énergie de l'atome.

En faisant agir l'opérateur Δ sur les deux membres de l'équation (4) et compte tenu de la relation connue $\Delta \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -4\pi\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, on obtient la forme différentielle de cette équation

$$\Delta \left[\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r) \right] = -4\pi[Z\delta(\mathbf{r}) - n(r)]. \tag{5}$$

Etant donné que l'expression dans le second membre de cette équation est la densité volumique de charge avec le facteur -4π, la grandeur $\frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r)$ représente le potentiel électrostatique de cette distribution de charge. On peut donc récrire (5) sous la forme ($r \neq 0$)

$$\Delta\varphi = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi^{3/2}, \qquad \varphi = \frac{(3\pi^2)^{2/3}}{2} n^{2/3}(r),$$

qui coïncide avec l'équation de Thomas-Fermi.

Notons que l'étude menée plus haut confirme la stabilité de l'atome neutre du modèle de Thomas-Fermi, vu que la solution de l'équation (5) est automatiquement normée sur Z : $\int n(r) dV = Z$, et correspond à la valeur minimale de l'énergie (3) du système. Cela signifie en même temps que le modèle statistique ne peut expliquer l'existence d'ions stables négativement chargés. En effet, en normalisant $n(r)$ sur une valeur supérieure à Z, correspondant aux ions chargés négativement, on obtient pour le système une énergie plus grande que pour l'atome neutre, établissant ainsi l'instabilité de ce système (les électrons "de trop" dans un tel ion ont, du point de vue énergétique, plus de chance de le quitter).

Le calcul élémentaire des intégrales de l'expression (3), avec la fonction n_{essai} donnée dans le problème[2], donne

$$E(\alpha) = \frac{81}{5000} (3\pi)^{2/3} Z^{5/3} \alpha^2 - \frac{11}{32} Z^2 \alpha$$

(pour le calcul de l'intégrale $U_{e\,e}$ voir 11.5). En minimisant cette expression, on obtient aisément la valeur variationnelle approchée de l'énergie de l'atome dans le modèle de Thomas-Fermi :

$$E_{\text{var}} = \min E(\alpha) = -\frac{625 \cdot 121}{512 \cdot 81} (3\pi)^{-2/3} Z^{7/3} \approx -0,41 Z^{7/3} \text{ u.a.}, \tag{6}$$

2 Rappel :

$$n = \frac{32Z^2}{9\pi^3} \left[\frac{\chi(x)}{x} \right]^{3/2} \qquad x = 2 \left(\frac{4}{3\pi} \right)^{2/3} Z^{1/3} r.$$

qu'il est utile de comparer à la valeur exacte $-0,77Z^{7/3}$ du problème précédent. Notons que la différence assez sensible entre la valeur variationnelle approchée (6) et la valeur exacte s'explique par le fait que la fonction n_{essai} utilisée dans le calcul, aussi bien pour $r \to 0$ que pour $r \to \infty$, diffère sensiblement de la fonction exacte $n(r)$, et résulte donc d'un choix malheureux de la fonction d'essai.

11.35. Désignons par $n_0(r)$ la vraie densité volumique des électrons dans le modèle de Thomas-Fermi d'un atome neutre. Dans ce cas, l'énergie de l'atome E_0 se définit par la formule (3) du problème précédent, la valeur $E_0 = E[n_0(r)]$ étant la valeur minimale de la fonctionnelle $E[n(r)]$.

La modification de la valeur de la fonctionnelle $E[n_0(r)]$ par la substitution d'une fonction de la forme $n(r) = (1 + \lambda)n_0(r)$ avec $|\lambda| \ll 1$ à $n_0(r)$ est

$$\delta E = E[n(r)] - E[n_0(r)] \approx \left(\frac{5}{3}T + 2U_{e\,e} + U_{e\,\text{noy}}\right)\lambda.$$

où T, $U_{e\,e}$, $U_{e\,\text{noy}}$ sont l'énergie cinétique des électrons, l'énergie d'interaction de ces derniers et l'énergie d'interaction avec le noyau dans le modèle de Thomas-Fermi. La condition d'extremum de la fonctionnelle $E[n(r)]$, $\delta E = 0$, conduit à (comparer à la solution du problème 11.33)

$$5T + 6U_{e\,e} + 3U_{e\,\text{noy}} = 0. \tag{1}$$

De façon analogue, après avoir étudié une transformation de la forme $n(r) = n_0[(1 + \lambda)r]$ avec $|\lambda| \ll 1$, on passe sans peine à la relation

$$3T + 5U_{e\,e} + 2U_{e\,\text{noy}} = 0. \tag{2}$$

Des relations (1) et (2), on déduit de façon élémentaire la démonstration des assertions du problème.

11.36. Pour un terme de l'ion moléculaire d'hydrogène H_2^+ de nombre quantique Λ, la projection du moment orbital de l'électron sur la direction de l'axe passant par les noyaux-protons, ne peut prendre que les valeurs $m = \pm\Lambda$, et c'est pourquoi les fonctions d'onde de ce terme peuvent être représentées sous la forme

$$\Psi_m(r, \theta, \varphi) = \sum_{L \geq \Lambda} R_{L\Lambda}(r) Y_{Lm}(\theta, \varphi) = R(r, \theta) e^{im\varphi}, \tag{1}$$

où r, θ, φ sont les coordonnées sphériques avec un axe polaire dirigé suivant l'axe de symétrie de l'ion et l'origine des coordonnées située au milieu du segment réunissant les noyaux.

Dans le cas de termes Σ ($m = \Lambda = 0$), la fonction d'onde (1) reste inchangée dans la réflexion des coordonnées de l'électron sur un plan passant par l'axe de symétrie de l'ion (dans cette transformation, les valeurs des coordonnées r, θ ne varient pas), c'est-à-dire que les états Σ constituent des termes Σ^+ (H_2^+ n'a pas de termes Σ^-).

La fonction d'onde (1) du terme doit être une fonction propre de l'opérateur inversion des coordonnées de l'électron par rapport au point $r = 0$, qui commute avec l'hamiltonien du système. Vu que dans cette transformation des coordonnées, $\widehat{R}Y_{Lm} = (-1)^L Y_{Lm}$, pour les termes associés aux nombres quantiques Λ_g (termes pairs), la somme dans (1) ne contient que des valeurs paires de L alors que pour les termes impairs Λ_u, seules les valeurs impaires de L, moment orbital de l'électron, interviennent.

La multiplicité des termes est manifestement égale à deux, et les termes possibles sont:
$$^2\Sigma_g^+,\ ^2\Sigma_u^+,\ ^2\Pi_g,\ ^2\Pi_u,\ ^2\Delta_g,\ ^2\Delta_u,\ \ldots$$

11.37. Les parties spatiales des quatre fonctions d'onde ne varient pas dans une rotation du système d'électrons autour de l'axe parallèle au vecteur[3] $\mathbf{n}_0$ et passant par le point $r = 0$, aussi ces fonctions d'onde décrivent-elles des états à projection nulle du moment orbital total des électrons sur l'axe mentionné, $m = 0$, c'est-à-dire des états Σ.

Les fonctions d'onde mentionnées possèdent une parité déterminée dans l'inversion des coordonnées des électrons par rapport au point $r = 0$: les fonctions d'onde a) et c) sont paires (c'est-à-dire décrivent des états Σ_g), tandis que les fonctions d'onde b) et d) décrivent des états Σ_u.

Dans l'inversion des coordonnées des électrons sur un plan passant par l'axe mentionné plus haut, les fonction d'onde a) et b) ne varient pas, autrement dit elles décrivent des états Σ^+, tandis que les fonction d'onde c) et d) changent de signe et correspondent à des états Σ^-.

Compte tenu de ce qui vient d'être dit, on a la classification suivante des états étudiés :
a) Σ_g^+ ;
b) Σ_u^+ ;
c) Σ_g^- ;
d) Σ_u^-.

La multiplicité des états dépend de la nature de la symétrie de la fonction d'onde de spin $\chi_{\alpha\beta}$. Si $\chi_{\alpha\beta} = \chi_{\beta\alpha}$, le système d'électrons possède un spin total $S = 1$, la multiplicité vaut $2S + 1 = 3$ (la partie spatiale de la fonction d'onde, selon le principe de Pauli, doit dans ce cas être antisymétrique par rapport à la permutation des variables spatiales des deux électrons). Dans le cas où $\chi_{\alpha\beta} = -\chi_{\beta\alpha}$ on a $S = 0$ et la multiplicité vaut 1.

11.38. Les termes possibles : $2\ ^2\Sigma_g^+$, $2\ ^2\Sigma_u^+$, $^2\Pi_g$, $^2\Pi_u$, (le chiffre 2 devant le symbole des termes Σ signifie qu'il y a deux termes distincts avec des nombres quantiques adéquats).

11.39. Les termes possibles sont :
1) N_2 $^{1,5}\Sigma_g^+$, $^{3,7}\Sigma_u^+$;

3 Dans les molécules à deux atomes l'analogue de $\mathbf{n}_0$ est le vecteur unitaire de l'axe passant par les noyaux.

2) LiH $^{1,3}\Sigma^+$;
3) HCl $^{1,3}\Sigma^+$; $^{1,3}\Pi$;
4) NO $^{2,4,6}\Sigma^+$; $^{2,4,6}\Pi$
(en résolvant le problème il faut tenir compte de ce que les termes principaux des atomes N, Li, H, Cl, O sont respectivement ^4S_u, ^2S_g, ^2S_g, ^2P_u, ^3P_g).

11.40. L'énergie totale de deux atomes d'hydrogène vaut

$$E = E_1 + E_2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}\right).$$

Si les deux atomes sont excités, $E \geq -1/4$, c'est-à-dire que leur énergie est supérieure à celle que peut avoir un système composé d'un atome d'hydrogène dans son état fondamental, d'un proton et d'un électron libres. Ainsi, la séparation adiabatique des noyaux à partir des termes de la molécule H_2 ne permet pas d'obtenir deux atomes d'hydrogène, tous les deux dans un état excité.

11.41. L'énergie nécessaire à l'excitation d'un atome d'hydrogène, $E_{\text{excit}} \geq 0,375$ u.a., est supérieure à l'énergie de liaison de l'électron dans l'atome de lithium ; aussi, sous l'effet d'une séparation adiabatique des noyaux, ne peut-on obtenir, à partir des termes de la molécule LiH, un atome d'hydrogène dans un état excité (le système créé est instable par rapport au processus de transition de l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental avec ionisation simultanée de l'atome de lithium).

11.42. Un fait physique essentiel dans le traitement quantique d'une molécule est la petitesse de la grandeur m/M, où m et M sont les masses de l'électron et des noyaux. C'est l'existence de ce petit paramètre (de l'ordre de $10^{-4} \div 10^{-3}$) qui détermine justement les grandes différences entre les valeurs des grandeurs énumérées dans l'énoncé.

a) Notons a_{at} l'ordre de grandeur des dimensions linéaires du domaine de localisation des électrons de valence (extérieurs) dans l'atome. Ce même ordre de grandeur caractérise manifestement les dimensions linéaires de la molécule a_{mol} et les distances entre les noyaux au sein de la molécule $a_{\text{noy noy}}$:

$$a_{\text{at}} \sim a_{\text{mol}} \sim a_{\text{noy noy}} \sim a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Les valeurs caractéristiques des énergies des électrons de valence dans l'atome et dans la molécule (comme d'ailleurs la différence d'énergie entre niveaux électroniques voisins) sont égales en ordre de grandeur à $E_{\text{él}} \sim \hbar^2/ma_0^2$. Les valeurs caractéristiques des intervalles séparant les niveaux de vibration et de rotation de la molécule sont de l'ordre de grandeur suivant :

$$E_{\text{vib}} \sim \hbar\omega_{\text{vib}} \sim \frac{\hbar^2}{ma_0^2}\sqrt{\frac{m}{M}} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}E_{\text{él}},$$

$$E_{\text{rot}} \sim \frac{\hbar^2}{I} \sim \frac{\hbar^2}{Ma_0^2} \sim \sqrt{\frac{m}{M}}E_{\text{vib}} \sim \frac{m}{M}E_{\text{él}}.$$

(les niveaux de vibration de la molécule sont les niveaux d'un oscillateur de masse égale à la masse réduite des noyaux $M_{red} \sim M$, et de coefficient de raideur k dont l'ordre de grandeur se définit par la relation $ka_0^2 \sim \dfrac{\hbar^2}{ma_0^2} \sim E_{\text{él}}$; les niveaux de rotation de la molécule sont les niveaux du rotateur avec un moment d'inertie $I \sim Ma_0^2$). Ainsi, $E_{\text{rot}} \ll E_{\text{vib}} \ll E_{\text{él}}$.

b) L'estimation de la grandeur $a_{\text{vib}} \sim (m/M)^{1/4} a_0$, amplitude des vibrations de point zéro des noyaux, s'obtient à partir de la relation $E_{\text{vib}} \sim ka_{\text{vib}}^2$.

c) L'estimation des vitesses caractéristiques v et des périodes T des mouvements électroniques et nucléaires découle des relations :

$$mv_{\text{él}}^2 \sim E_{\text{él}}, \quad \text{c'est-à-dire } v_{\text{él}} \sim \frac{\hbar}{ma_0}, \quad T_{\text{él}} \sim \frac{a_0}{v_{\text{él}}} \sim \frac{ma_0^2}{\hbar},$$

$$v_{\text{noy vib}} \sim \omega_{\text{vib}} a_{\text{vib}} \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{3/4} \frac{\hbar}{ma_0} \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{3/4} v_{\text{él}},$$

$$v_{\text{noy rot}} \sim \sqrt{\frac{E_{\text{rot}}}{M}} \sim \left(\frac{m}{M}\right) \frac{\hbar}{ma_0} \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4} v_{\text{noy vib}} \sim \frac{m}{M} v_{\text{él}},$$

$$T_{\text{vib}} \sim \omega_{\text{vib}}^{-1} \sim \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} \frac{ma_0^2}{\hbar} \sim \left(\frac{M}{m}\right)^{1/2} T_{\text{él}},$$

$$T_{\text{rot}} \sim \frac{a_0}{v_{\text{rot}}} \sim \frac{Ma_0^2}{\hbar} \sim \sqrt{\frac{M}{m}} T_{\text{vib}} \sim \frac{M}{m} T_{\text{él}}.$$

Les différents ordres de grandeur des temps caractéristiques des mouvements électronique, nucléaire vibratoire et nucléaire rotationnel, au sein de la molécule, déterminent la validité de l'approximation adiabatique selon laquelle les niveaux d'énergie de la molécule se présentent sous la forme $E = E_{\text{él}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}}$.

11.43. L'énergie de l'état fondamental de la molécule est égale à

$$E_0 = E_{\text{él},0} + E_{\text{vib},0} = E_0(R_0) + \hbar\omega_{\text{vib}}/2, \tag{1}$$

où $E_0(R)$ est l'énergie du terme fondamental, R_0 la distance entre les noyaux en position d'équilibre, $\omega_{\text{vib}} = \omega_e = \sqrt{E''(R_0)/M}$, $M = \dfrac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ la masse réduite des noyaux.

La constante rotationnelle de la molécule vaut $B_e = \hbar^2/(2MR_0^2)$.

Vu, qu'avec la substitution des noyaux de la molécule par leurs isotopes, la fonction $E_0(R)$ demeure inchangée, on obtient sans peine, en tenant compte de la relation $m_d \approx 2m_p$, $(\hbar\omega_e)_{\text{HD}} \approx \dfrac{\sqrt{3}}{2}(\hbar\omega_e)_{\text{H}_2} = 0{,}46$ eV, $(\hbar\omega_e)_{\text{D}_2} \approx \frac{1}{\sqrt{2}}(\hbar\omega_e)_{\text{H}_2} = 0{,}38$ eV ; $(B_e)_{\text{HD}} = \frac{3}{4}(B_e)_{\text{H}_2}$, $(B_e)_{\text{D}_2} = \frac{1}{2}(B_e)_{\text{H}_2}$.

L'énergie de dissociation de la molécule se définit par la relation

$$I_0 = E_1^{(0)} + E_2^{(0)} - E_0, \tag{2}$$

où $E_{1,2}^{(0)}$ sont les énergies des états fondamentaux des atomes respectifs. Compte tenu de la valeur de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène (avec correction apportée par la valeur finie de la masse du noyau M_{noy}, au premier ordre en $m_e/M_{\text{noy}} = m_e/M_{\text{p}} \approx 1/1840 \approx 5 \cdot 10^{-4}$),

$$E^{(0)} = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\left(1 - \frac{m_e}{M_{\text{noy}}}\right) = -13,60\left(1 - \frac{m_e}{M_{\text{noy}}}\right) \text{ eV}, \tag{3}$$

et des paramètres numériques donnés dans l'énoncé, on obtient en appliquant les formules (1)–(3)

$$(I_0)_{\text{HD}} \approx 4,50 \text{ eV}, \qquad (I_0)_{\text{D}_2} \approx 4,54 \text{ eV}.$$

On voit que l'effet du déplacement isotopique des niveaux dans l'atome d'hydrogène est de l'ordre de $(\Delta E/E)_{\text{at}} \sim m_e/M_{\text{p}} \sim 10^{-3}$, tandis que dans la molécule d'hydrogène il est de l'ordre de $(\Delta E/E)_{\text{mol}} \sim \sqrt{m_e/M_{\text{p}}} \sim 1/40$. L'effet isotopique dans la molécule se manifeste surtout dans la variation de ω_{vib}.

11.44. Les restrictions aux valeurs possibles du moment orbital K de la molécule pour une valeur fixée du spin nucléaire total sont dues au fait que la fonction d'onde du système de particules identiques (dans le cas concerné du sous-système nucléaire de molécules H_2 et D_2) doit posséder une symétrie déterminée par rapport à la permutation des variables (de spin et d'espace) des deux particules. Compte tenu de ce que la fonction d'onde de spin d'un système de deux spins de grandeur s est symétrique par rapport à la permutation des variables de spin pour un spin total $S = 2s, 2s-2, \ldots$ et antisymétrique pour $S = 2s-1, 2s-3, \ldots$ (voir 3.39 du Tome I), et du fait que les protons sont des fermions et les deutérons des bosons, on conclut que lors de la permutation des variables d'espace des noyaux, les fonctions d'onde de la molécule H_2 avec un spin nucléaire total $S = 0$ et de la molécule D_2 pour $S = 0$ et 2 ne varient pas alors que, pour $S = 1$, elles changent de signe. Etablissons les restrictions aux valeurs K qu'implique ce fait.

Dans le cas d'une molécule diatomique avec $\Lambda = 0$, la fonction d'onde rotationnelle ne se définit que par le mouvement des noyaux. Cela signifie que la partie spatiale de la fonction d'onde de la molécule dans l'état, défini par la valeur du moment orbital total K des noyaux et des électrons et de sa projection M sur la direction de l'axe fixé z, est de la forme

$$\Psi = \Psi_{n,\Lambda=0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{R})\Psi_{\text{vib}}(|\mathbf{R}|)Y_{KM}(\theta, \varphi), \tag{1}$$

où Y_{KM} est une harmonique sphérique, θ, φ les angles polaire et azimutal par rapport au rayon vecteur des noyaux $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$; $\Psi_{n,\Lambda=0}$ la fonction d'onde du terme électronique Σ, $\Psi_{\text{vib}}(|\mathbf{R}|)$ la fonction d'onde décrivant le mouvement vibratoire des noyaux.

Etablissons le comportement de la fonction d'onde (1) pour une permutation des variables d'espace des noyaux, c'est-à-dire lors de la transformation $\mathbf{R} \to -\mathbf{R}$. Il est manifeste que, dans cette transformation, la partie vibratoire de la fonction d'onde ne varie pas, tandis que la fonction sphérique est multipliée par $(-1)^K$. Le problème

de la transformation de la fonction d'onde du terme $\Psi_{n,\Lambda=0}$ est plus délicat. Cette fonction d'onde est un scalaire (ou un pseudo-scalaire suivant les nombres quantiques du terme) qui dépend des vecteurs $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{R}$. Cette dépendance, sous sa forme la plus générale, est la suivante :

$$\Psi_{n,\Lambda=0} = \Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{R}). \tag{2}$$

Etudions la transformation de la fonction d'onde (2) dans la réflexion des coordonnées des électrons sur le plan passant par le vecteur $\mathbf{R}$. Alors,

$$\begin{aligned} \widehat{P}_1 \Psi_{n,\Lambda=0} &\equiv \Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2, -[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{R}) \\ &= \sigma_1 \Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{R}), \end{aligned} \tag{3}$$

où σ_1 vaut $+1$ et -1, respectivement, pour les termes Σ^+ positifs et Σ^- négatifs.

De façon analogue, avec l'inversion des coordonnées des électrons par rapport au centre du segment joignant les noyaux, on a

$$\begin{aligned} \widehat{P}_2 \Psi_{n,\Lambda=0} &\equiv \Psi(r_1, r_2, R, -\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R}, -\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{R}) \\ &= \sigma_2 \Psi(r_1, r_2, R, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{R}, \mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2, [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{R}), \end{aligned} \tag{4}$$

où σ_2 vaut $+1$ pour les termes Σ_g paires et -1 pour les Σ_u impairs.

En tenant compte de (2)–(4), on remarque aussitôt que la transformation $\mathbf{R} \to -\mathbf{R}$ est équivalente au produit des transformations effectuées dans les expressions (3) et (4), c'est-à-dire que $\widehat{P}(\mathbf{R} \to -\mathbf{R}) = \widehat{P}_1 \widehat{P}_2$ de sorte que $\widehat{P} \Psi_{n,\Lambda=0} = \sigma_1 \sigma_2 \Psi_{n,\Lambda=0}$, et comme le terme fondamental de la molécule d'hydrogène est Σ_g^+, la fonction d'onde (1) est multipliée par $(-1)^K$ lors de la permutation des noyaux.

Compte tenu de ce qui vient d'être dit, on conclut que dans la molécule H_2 avec le spin nucléaire total $S = 0$ et, dans la molécule D_2 pour $S = 0$ et 2, seules sont possibles les valeurs paires du moment orbital $K = 0, 2, 4, \ldots$, alors que, pour $S = 1$, ces molécules ne peuvent avoir que des valeurs impaires de K.

Les valeurs possibles du moment $K = 0, 1, 2, \ldots$ de la molécule HD ne dépendent pas du spin nucléaire total.

Soulignons que le moment orbital des noyaux ne coïncide pas avec la valeur K du moment de la molécule (il n'a même pas de valeur déterminée, comme d'ailleurs le moment orbital des électrons !), toutefois il peut avoir des valeurs de parité identiques à celles de K, c'est-à-dire $K, K \pm 2, K \pm 4, \ldots$ [4].

11.45. Pour fixer les idées, cherchons le moment dipolaire $\mathbf{d}$ du terme par rapport au point constituant le centre du segment joignant les noyaux (pour un système neutre $\mathbf{d}$ ne dépend pas du point par rapport auquel on le détermine).

Dans le cas d'une molécule dont les noyaux ont la même charge (c'est-à-dire sont des isotopes identiques ou distincts d'un même élément), la valeur moyenne $\overline{\mathbf{d}}$ du système

4 Rappelons que ce résultat a été obtenu pour des molécules dont le terme électronique est Σ_g^+. On remarque facilement qu'il se conserve également pour le terme Σ_u^-. Dans le cas des termes Σ_u^+ et Σ_g^-, la relation entre les valeurs possibles du moment orbital des noyaux et du moment orbital de la molécule K est différente : $K \pm 1, K \pm 3, \ldots$

est nulle. La démonstration de cette assertion est analogue à celle utilisée dans la résolution du problème 1.21 du Tome I, compte tenu de ce que la fonction d'onde du terme électronique est douée d'une parité déterminée.

Dans le cas d'une molécule dont les noyaux possèdent des charges différentes, la valeur moyenne $\overline{\mathbf{d}}$ dans l'état d'un terme électronique, ayant une valeur déterminée de la projection du moment orbital des électrons sur l'axe de symétrie, est différente de zéro ; le vecteur $\overline{\mathbf{d}}$ est dirigé dans ce cas suivant l'axe de symétrie et sa valeur est indépendante du signe de la projection du moment orbital des électrons $m = \pm\Lambda$. Toutefois, dans les états stationnaires de la molécule de parité déterminée, la valeur moyenne du moment dipolaire est nulle.

11.46. La valeur moyenne de l'hamiltonien

$$\hat{H}_{\text{él}} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}/2|} - \frac{1}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}/2|} + \frac{1}{R},$$

dans un état décrit par la fonction d'onde $\Psi_{\text{essai}}(r)$ vaut

$$E(R, \alpha) = \overline{\hat{H}_{\text{él}}} = \frac{\alpha^2}{2R^2} - \frac{1}{R}[3 - 2(2 + \alpha)e^{-\alpha}] \tag{1}$$

(compte tenu de ce que la fonction d'essai a la forme d'une fonction d'onde "d'hydrogène", on peut utiliser pour les moyennes $\overline{T}$ et $\overline{\frac{1}{|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|}}$ des valeurs bien connues ; en particulier, $-\overline{\frac{1}{|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|}}$ se détermine à l'aide de la formule (5) du problème 4.29 du Tome I si l'on pose $r = R/2$, $a = R/\alpha$, $e = 1$ et si l'on soustrait le terme $2/R$ décrivant le potentiel du noyau, de sorte que

$$-\overline{\frac{1}{|\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|}} = -[2 - (2 + \alpha)e^{-\alpha}]/R.$$

L'expression (1), en accord avec l'idée générale de la méthode variationnelle, peut être assimilée à une certaine approximation de la valeur de la vraie énergie $E_0(R)$ du terme fondamental, la meilleure approximation étant obtenue avec un choix du paramètre α tel que cette expression prenne une valeur minimale (comme fonction de la variable α, la valeur de $\alpha(R)$ se détermine par la condition $\partial E_0(R)/\partial\alpha = 0$ et constitue une fonction de la variable R). En se limitant à la valeur $\alpha = 1,9$ donnée dans l'énoncé, on a, selon (1), une expression approchée de l'énergie du terme principal de l'ion H_2^+ de la forme

$$E_(R) = \frac{1,80}{R^2} - \frac{1,83}{R} \tag{2}$$

A l'aide de (2), on trouve les caractéristiques cherchées du terme : $R_0 = 1,97$ u.a. (à partir de la condition $\partial E_0(R_0)/\partial R_0 = 0$), $E_0 \equiv E_0(R_0) = -0,47$ u.a., $E_{\text{vib},0} = \frac{\omega_e}{2} = \frac{1}{2}\sqrt{E_0''(R_0)(2m_e/m_p)} = 0,008$ u.a.

Dans l'approximation envisagée, la valeur $E_0 = -0,47$ u.a. est supérieure à celle de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène égale à $-0,50$ u.a. et l'on ne peut conclure à l'existence d'un ion stable. Le grand écart, entre les valeurs de l'énergie calculée et expérimentale des vibrations de point zéro des protons, s'explique sans peine par le fait que dans les calculs on n'a pas fait varier le paramètre α ; aussi la courbe de dépendance $E_0(R_0)$ de l'expression (2), près du point minimum R_0, monte plus brusquement vers le haut que la courbe plus précise, obtenue à partir de (1), en faisant varier α. Il en résulte une surestimation de la valeur de la grandeur $E_0''(R_0)$ et donc de celle de l'énergie des vibrations de point zéro.

11.47. Les conditions $l_1 = 1$ et $\Lambda = 0$ définissent de façon univoque la dépendance de la fonction d'onde vis-à-vis des variables angulaires de la première particule sous la forme

$$\Psi \propto (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) \qquad (\mathbf{n}_1 = \mathbf{r}_1/r_1, \quad \mathbf{n}_2 = \mathbf{r}_2/r_2) \tag{1}$$

(il faut avoir en vue que la projection du moment total sur la direction du rayon vecteur de la seconde particule ne se détermine qu'à l'aide de la projection du moment de la première des particules, car $\widehat{\mathbf{l}}_2 \cdot \mathbf{n}_2 \equiv 0$).

La fonction d'onde (1) est un scalaire, aussi détermine-t-elle la fonction d'onde d'un état de moment (total) valant zéro, de sorte que $\Psi_{000} = \text{cte}\ (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)$.

La fonction d'onde de l'état avec le moment $J = 1$ est une combinaison linéaire des composantes du vecteur ne dépendant que des vecteurs $\mathbf{n}_1$ et $\mathbf{n}_2$. Vu que la dépendance de la fonction d'onde vis-à-vis du vecteur $\mathbf{n}_1$ ne se définit que par le facteur figurant dans l'expression (1), le vecteur recherché ne peut être obtenu que d'une seule façon:

$$\mathbf{v} = (\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)\mathbf{n}_2. \tag{2}$$

En faisant, à partir des composantes du vecteur (2), des combinaisons linéaires correspondant aux états avec des valeurs déterminées des grandeurs $J = 1$, J_z, on obtient, en vertu des principes généraux (voir problèmes du paragraphe 4, Chapitre 3, Tome I), les fonctions d'onde cherchées :

$$\Psi_{1J_z0} = A(\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)Y_{1J_z}(\theta_2, \varphi_2) \tag{3}$$

(Y_{lm} étant une harmonique sphérique).

La généralisation au cas de valeurs l_1, J, J_z arbitraires a pour expression

$$\Psi_{JJ_z0} = AP_{l_1}(\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2)Y_{JJ_z}(\theta_2, \varphi_2), \tag{4}$$

où $P_l(z)$ est le polynôme de Legendre.

11.48. Etudions la fonction d'onde $\Psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, c'est-à-dire $|S = 1/2, S_z = 1/2\rangle$. Il est clair que dans cet état le moment total J et sa projection possèdent des valeurs déterminées $J = 1/2$ et $J_z = 1/2$ (vu que $l = 0$). Faisons agir l'opérateur

$\widehat{P}_+ = \frac{1}{2}(1 + \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})$ où $\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ est la matrice de Pauli, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, sur la fonction ci-dessus. L'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}$ est l'opérateur d'une grandeur pseudo-scalaire ; de plus, l'opérateur $\widehat{P}_+$, commute avec les opérateurs $\widehat{\mathbf{J}}^2$ et $\widehat{J}_z$. Le corollaire de cette commutativité est le fait que la fonction

$$\Psi_{1/2,1/2,1/2} \equiv \widehat{P}_+ \Psi_0 = \frac{1}{2}(1 + \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\Psi_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 + \cos\theta \\ \sin\theta e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

comme d'ailleurs la fonction Ψ_0, décrit un état avec des valeurs déterminées $J = 1/2$ et $J_z = 1/2$; en outre, la fonction d'onde (1) est fonction propre de l'opérateur $\frac{1}{2}\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \equiv \widehat{\lambda}$, projection du spin de la particule sur la direction de son rayon vecteur pour la valeur propre $\lambda = +1/2$. Ainsi, la fonction d'onde (1) est une des fonctions cherchées. De façon analogue, en utilisant l'opérateur $\widehat{P}_- = \frac{1}{2}(1 - \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})$, on est en mesure de trouver la fonction d'onde $\Psi_{1/2,1/2,-1/2}$, et en prenant en compte la relation entre la fonction Ψ et la fonction $\widetilde{\Psi}_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |S = 1/2, S_z = -1/2\rangle$, on obtient les fonctions d'onde cherchées avec $J_z = -1/2$.

Les fonctions d'onde $\Psi_{1/2,J_z,\lambda}$ correspondent à des états ne se caractérisant pas par une parité déterminée (le moment orbital dans ces états peut prendre deux valeurs : $l = 0$ et $l = 1$). On voit aussitôt, qu'avec l'action de l'opérateur inversion des coordonnées $\widehat{I}$ ces fonctions se transforment de la façon suivante : $\widehat{I}\Psi_{1/2,J_z,\lambda} = \Psi_{1/2,J_z,-\lambda}$.

11.49. Compte tenu des considérations connues relatives aux propriétés des fonctions propres de l'hamiltonien d'une toupie asymétrique :

a) la nature de leur symétrie par rapport à la réflexion sur le plan passant par l'axe ζ (l'axe ζ est le troisième axe du système de coordonnées rigidement lié à la toupie ; la projection k du moment de la toupie sur cet axe entre dans le jeu complet des grandeurs J, J_z, k, déterminant la fonction d'onde de la toupie $\Psi_{J,J_z,k}$) ; dans cette transformation J, J_z ne varient pas, tandis que la grandeur k change de signe ;

b) le fait que dans les superpositions des fonctions d'onde $\Psi_{J,J_z,k}$ représentant les fonctions propres de l'hamiltonien, $\Psi_E = \sum\limits_k c_k \Psi_{J,J_z,k}$, figurent des fonctions d'onde avec les valeurs k correspondant à une parité déterminée (tous les k sont soit pairs soit impairs) ;

c) le fait que les fonctions propres de l'hamiltonien peuvent être choisies comme fonctions propres de l'opérateur projection du moment sur l'axe z, les valeurs propres de l'hamiltonien ne dépendant pas de J_z,

on peut conclure que pour $J = 1$ les fonctions propres sont de la forme

$$\Psi^{(1)}_{E_1 J_z} = \Psi_{1 J_z 0}, \qquad \Psi^{(2)}_{E_2 J_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{1 J_z 1} + \Psi_{1 J_z,-1}),$$

$$\Psi^{(3)}_{E_3 J_z} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{1 J_z 1} - \Psi_{1 J_z,-1}). \tag{1}$$

Les valeurs propres de l'hamiltonien de la toupie

$$\widehat{H} = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{\widehat{J}_\xi^2}{I_1} + \frac{\widehat{J}_\eta^2}{I_2} + \frac{\widehat{J}_\zeta^2}{I_3}\right),$$

correspondant aux fonctions propres (1), s'obtiennent aisément si l'on utilise les valeurs connues des éléments matriciels non nuls des opérateurs $\widehat{J}_\xi$ et $\widehat{J}_\eta$

$$\begin{aligned}
&\langle J, J_z, k+1|\widehat{J}_\xi|J, J_z, k\rangle = \langle J, J_z, k|\widehat{J}_\xi|J, J_z, k+1\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(J-k)(J+k+1)},\\
&\langle J, J_z, k+1|\widehat{J}_\eta|J, J_z, k\rangle = -\langle J, J_z, k|\widehat{J}_\eta|J, J_z, k+1\rangle = \frac{i}{2}\sqrt{(J-k)(J+k+1)}.
\end{aligned} \tag{2}$$

Le corollaire des relations (2) pour $J = 1$ sont les égalités

$$\begin{aligned}
&\widehat{J}_\xi^2\Psi^{(1)} = \widehat{J}_\eta^2\Psi^{(1)} = \Psi^{(1)}, \qquad \widehat{J}_\xi^2\Psi^{(2)} = \Psi^{(2)}\\
&\widehat{J}_\xi^2\Psi^{(3)} = 0, \qquad \widehat{J}_\eta^2\Psi^{(2)} = 0, \quad \widehat{J}_\eta^2\Psi^{(3)} = \Psi^{(3)}.
\end{aligned} \tag{3}$$

En utilisant les égalités (3), on obtient sans peine trois valeurs propres de l'hamiltonien E_a $(a = 1, 2, 3)$ correspondant aux fonctions propres $\Psi^{(a)}_{E_a J_z}$:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2}\right), \qquad E_2 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_3}\right), \qquad E_3 = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{I_2} + \frac{1}{I_3}\right)$$

(chacune de ces valeurs propres est triplement dégénérée vis-à-vis de la grandeur J_z, car $J_z = 0, \pm 1$).

La forme de la fonction propre de l'hamiltonien en représentation J_z, J_ξ est immédiate.

11.50. Représentons l'hamiltonien de la toupie sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}$, où

$$\widehat{H}_0 = \frac{\hbar^2\widehat{J}_\zeta^2}{2I_3}, \qquad \widehat{V} = \frac{\hbar^2\widehat{J}_\xi^2}{2I_1} + \frac{\hbar^2\widehat{J}_\eta^2}{2I_2}$$

Les valeurs propres et les fonctions propres de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$ décrivant une toupie symétrique avec $I_1 = I_2 = \infty$ sont bien connues :

$$E_k^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2I_3}, \qquad \Psi_k^{(0)} = \Psi_{JJ_z\pm k}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots J,$$

le niveau fondamental $(k = 0)$ n'est pas dégénéré[5], tandis que tous les niveaux excités sont doublement dégénérés. Compte tenu de ce que les fonctions propres correctes à l'approximation zéro sont les combinaisons

$$\Psi^{(0)}_{JJ_zk,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{JJ_zk} + \Psi_{JJ_z-k}), \qquad \Psi^{(0)}_{JJ_zk,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{JJ_zk} - \Psi_{JJ_z-k}),$$

5 On fait abstraction de la dégénérescence $(2J+1)$ des niveaux de la toupie par rapport à J_z.

(voir problème précédent : propriété b) des fonctions propres de l'hamiltonien de la toupie), on peut calculer les déplacements des niveaux d'énergie d'après les formules du calcul des perturbations sans dégénérescence. Un calcul simple, compte tenu des valeurs connues des éléments matriciels des opérateurs $\widehat{J}_\xi$ et $\widehat{J}_\eta$ (elles sont données dans le problème précédent), donne

$$
\begin{aligned}
&E_{k,1}^{(1)} = E_{k,2}^{(1)} = 0 \text{ pour } k \geq 2,\\
&E_0^{(1)} = \frac{\hbar^2}{4}\left(\frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2}\right),\\
&E_{1,1}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{8}\left[\frac{3J(J+1)-2}{I_1} + \frac{J(J+1)-2}{I_2}\right],\\
&E_{1,2}^{(1)} = \frac{\hbar^2}{8}\left[\frac{J(J+1)-2}{I_1} + \frac{3J(J+1)-2}{I_2}\right],
\end{aligned}
$$

autrement dit, au premier ordre du calcul des perturbations, il y a déplacement du niveau fondamental et du premier niveau excité de la toupie ; le niveau excité doublement dégénéré se sépare en deux sous-niveaux (la dégénérescence est levée pour $I_1 \neq I_2$). Un lecteur attentif verra aussitôt que le déplacement et la séparation (pour $I_1 \neq I_2$) du niveau $E_k^{(0)}$ avec $k \neq 0$ se produisent au $k^{\text{ème}}$ ordre du calcul des perturbations et, par conséquent, plus k est grand, moins grande est la grandeur de la séparation. Ce fait éclaire la nature du spectre d'énergie d'une toupie asymétrique dans le cas où $I_1 \sim I_2 \gg I_3$.

11.51. Représentons l'hamiltonien de la toupie sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}$, où

$$
\widehat{H}_0 = a(\widehat{J}_\xi^2 + \widehat{J}_\eta^2) + b\widehat{J}_\zeta^2, \qquad \widehat{V} = c(\widehat{J}_\xi^2 - \widehat{J}_\eta^2),
$$
$$
a = \frac{\hbar^2(I_1+I_2)}{4I_1I_2}, \qquad c = \frac{\hbar^2(I_2-I_1)}{4I_1I_2}, \qquad b = \frac{\hbar^2}{2I_3}, \qquad a \sim b \gg |c|
$$

et l'on obtient sans peine la solution du problème en s'inspirant de l'exemple précédent. Donnons le résultat :

$$
\begin{aligned}
&E_k^{(0)} = aJ(J+1) + (b-a)k^2, \qquad k = 0, 1, \ldots, J,\\
&E_0^{(1)} = 0 \ ;\\
&E_{k,1}^{(1)} = E_{k,2}^{(1)} = 0 \text{ pour } k \geq 2,\\
&E_{1,1}^{(1)} = \frac{cJ(J+1)}{2},\\
&E_{1,2}^{(1)} = -\frac{cJ(J+1)}{2},
\end{aligned}
$$

(la forme des fonctions propres de l'hamiltonien à l'ordre zéro et la nature du spectre d'énergie de la toupie sont identiques à celles du problème précédent).

11.52. La limite indiquée à la valeur de β_0 résulte de la suite des relations suivantes :

$$\sum_{\substack{k \\ k\neq 0}} \frac{|\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2}{E_k - E_0} < \frac{1}{E_1 - E_0}\sum_{\substack{k \\ k\neq 0}} |\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2$$

$$\equiv \frac{1}{E_1 - E_0}\left\{\sum_k |\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2 - |\langle 0|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2\right\}$$

$$= \frac{1}{E_1 - E_0}\sum_k \langle 0|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|k\rangle\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle = \frac{\langle 0|(\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0)^2|0\rangle}{E_1 - E_0} \tag{1}$$

(on a utilisé la condition de fermeture $\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{I}$ et on a tenu compte de ce que $\langle 0|\hat{d}_i|0\rangle = 0$), puis en prenant en considération la relation

$$\langle 0|\hat{d}_i\hat{d}_k|0\rangle \equiv e^2\sum_{a,b}\langle 0|x_{ai}x_{bk}|0\rangle = C\delta_{ik}, \tag{2}$$

où la valeur de la grandeur (2)

$$C = \frac{e^2}{3}\sum_{a,b}\langle 0|\mathbf{r}_a\cdot\mathbf{r}_b|0\rangle \tag{3}$$

s'obtient par convolution des indices i et k.

Une limite inférieure à la grandeur β_0 peut être obtenue si l'on ne garde dans l'expression de β_0 que le seul terme de la somme correspondant au premier état excité :

$$\beta_0 > \frac{2}{E_1 - E_0}|\langle 1|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2.$$

Soulignons que par premier état excité on entend non pas le premier état excité du système mais le premier état excité pour lequel $\langle 1|\hat{d}_i|0\rangle \neq 0$. Etant donné que dans l'état fondamental $J = 0$, on peut conclure, en tenant compte des valeurs connues des éléments matriciels des vecteurs, que pour cet état, on a $J = 1$ avec une parité opposée à celle de l'état fondamental (E_1 est l'énergie du niveau le plus bas avec ces nombres quantiques). Ensuite, si l'on choisit comme axe z la direction du vecteur $\mathbf{n}_0$, alors dans l'élément matriciel $\langle 1|\hat{d}_i|0\rangle$ l'état $|1\rangle$ doit correspondre à une projection déterminée du moment : $J_z = 0$ (pour $J_z = \pm 1$ ces éléments matriciels sont nuls).

Dans le cas d'un atome d'hydrogène, les restrictions établies à la grandeur β_0 prennent la forme

$$\frac{2e^2|\langle 210|z|100\rangle|^2}{E_{n=2} - E_{n=1}} < \beta_0 < \frac{2e^2\langle 100|r^2|100\rangle}{3(E_{n=2} - E_{n=1})}. \tag{4}$$

Compte tenu de la forme connue des fonctions d'onde des états $|nlm\rangle$ de l'atome d'hydrogène, on obtient en définitive par une intégration élémentaire

$$\langle 100|r^2|100\rangle = 3a_0^2, \qquad |\langle 210|z|100\rangle| = 4\sqrt{2}(2/3)^5 a_0,$$

et les inégalités (3) s'écrivent

$$2,96a_0^3 = \frac{8}{3}\left(\frac{256}{243}\right)^2 a_0^3 < \beta_0 < \frac{16}{3}a_0^3 = 5,33a_0^3. \tag{5}$$

11.53. L'affinement de la borne inférieure de la grandeur β_0, peut être effectué en conservant deux termes dans la somme définissant β_0. Compte tenu des restrictions sur les nombres quantiques des états $|k\rangle$ dans cette somme, exposées au problème précédent, on voit que, dans le cas d'un atome d'hydrogène, l'état $|n=3, l=1, m=0\rangle$ figure dans le second terme non nul et donc

$$\beta_0 > \frac{2e^2|\langle 210|z|100\rangle|^2}{E_{n=2}-E_{n=1}} + \frac{2e^2|\langle 310|z|100\rangle|^2}{E_{n=3}-E_{n=1}}. \tag{1}$$

La limite supérieure peut être précisée en effectuant les transformations suivantes dans la somme définissant β_0 :

$$\sum_{\substack{k\\k\neq 0}} \frac{|\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2}{E_k - E_0} < \frac{|\langle 1|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2}{E_1-E_0} + \frac{1}{E_2-E_0}\sum_{\substack{k\\k\neq 0,1}} |\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2 \tag{2}$$

et en effectuant la sommation dans le second membre de cette inégalité par un procédé analogue à celui utilisé dans le problème précédent :

$$\begin{aligned}\sum_{\substack{k\\k\neq 0,1}} |\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2 &= \sum_k |\langle k|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2 - |\langle 1|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2 \\ &= \frac{\langle 0|\hat{\mathbf{d}}^2|0\rangle}{3} - |\langle 1|\hat{\mathbf{d}}\cdot\mathbf{n}_0|0\rangle|^2. \end{aligned}\tag{3}$$

Compte tenu des relations (2) et (3), on obtient la borne supérieure qui, pour l'atome d'hydrogène, prend la forme

$$\beta_0 < \frac{2e^2\langle 100|r^2|100\rangle}{3(E_{n=3}-E_{n=1})} + \left(\frac{2}{E_{n=2}-E_{n=1}} - \frac{2}{E_{n=3}-E_{n=1}}\right)|\langle 210|ez|100\rangle|^2. \tag{4}$$

Une intégration élémentaire donne $|\langle 310|z|100\rangle| = \frac{a_0}{\sqrt{2}}(3/4)^3$. En tenant également compte de la valeur des autres éléments matriciels mentionnés dans le problème précédent, selon (1) et (4), on obtient $3,36a_0^3 < \beta_0 < 4,96a_0^3$.

11.54.

a) Récrivons la fonction d'onde d'essai sous la forme $\Psi_{\text{essai}} = C(\Psi_0 + \gamma\mathcal{E}_0\Psi_1)$, où la fonction d'onde

$$\Psi_1 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \cdot \frac{2}{\sqrt{3}} r e^{-r}$$

est normée à l'unité comme la fonction d'onde Ψ_0 ; γ est le paramètre variationnel (on se sert des unités atomiques). La normalisation de la fonction d'onde

Ψ_{essai}, compte tenu de l'orthogonalité des fonctions Ψ_0 et Ψ_1 aboutit à la valeur $C^2 = (1+\gamma^2\mathcal{E}_0^2)^{-1} \approx 1 - \gamma^2\mathcal{E}_0^2$.

La valeur moyenne de l'hamiltonien du système

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + \mathcal{E}_0 z \equiv \widehat{H}_0 + \mathcal{E}_0 r\cos\theta \tag{1}$$

dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ_{essai} s'obtient sans peine si l'on utilise les relations évidentes

$$\langle\Psi_0|\widehat{H}_0|\Psi_0\rangle = -\frac{1}{2},$$
$$\langle\Psi_1|\widehat{H}_0|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\widehat{H}_0|\Psi_1\rangle = -\frac{1}{2}\langle\Psi_1|\Psi_0\rangle = 0.$$

Notons que la fonction d'onde Ψ_1 est la fonction d'onde d'état, avec les nombres quantiques $n=2$, $l=1$, $m=0$, d'un atome hydrogénoïde de charge nucléaire $Z=2$ et, par suite, elle satisfait à l'équation

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{2}{r}\right)\Psi_1 = -\frac{Z^2}{2n^2}\Psi_1 = -\frac{1}{2}\Psi_1.$$

On a respectivement :

$$\langle\Psi_1|\widehat{H}_0|\Psi_1\rangle = \langle\Psi_1|-\frac{1}{2}\Delta - \frac{2}{r} + \frac{1}{r}|\Psi_1\rangle = -\frac{1}{2} + \langle\Psi_1|\frac{1}{r}|\Psi_1\rangle = 0$$

(la valeur $\langle\Psi_1|\frac{1}{r}|\Psi_1\rangle = -\frac{1}{2}\langle\Psi_1|-\frac{2}{r}|\Psi_1\rangle = \frac{1}{2}$ découle directement du théorème du viriel). Compte tenu également des relations

$$\langle\Psi_1|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|z|\Psi_1\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi^2}}\frac{2}{\sqrt{3}}\int \mathrm{e}^{-2r}r^2\cos^2\theta r^2 dr d\Omega = 1,$$
$$\langle\Psi_0|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_1|z|\Psi_1\rangle = 0,$$

on obtient

$$\overline{E}(\gamma) = \overline{\widehat{H}} = C^2\langle\Psi_0|\widehat{H}_0|\Psi_0\rangle - 2\mathcal{E}_0^2\gamma C^2\langle\Psi_1|z|\Psi_0\rangle \approx -1/2 + \gamma^2\mathcal{E}_0^2/2 + 2\gamma\mathcal{E}_0^2 \tag{2}$$

(compte tenu de l'hypothèse d'un champ électrique faible, on ne maintient dans l'expression (2) que les termes de plus bas degré en $\mathcal{E}_0$).

En minimisant $\overline{E}(\gamma)$ par rapport au paramètre γ, on obtient sans peine

$$E_{0\text{var}} = \min\overline{E}(\gamma) = \overline{E}(\gamma_0) = -1/2 - 2\mathcal{E}_0^2 \qquad (\gamma_0 = -2). \tag{3}$$

L'expression (3) est la valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène placé dans un champ électrique faible. Sa comparaison avec la valeur exacte, égale à $-\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\beta_0\mathcal{E}_0^2$, où β_0 est la polarisabilité de l'état fondamental, permet de trouver la valeur approchée (variationnelle) de cette grandeur $\beta_{\text{var}} = 4$.

b) Compte tenu de l'orthogonalité des fonctions d'onde Ψ_0 et Ψ_1, on obtient par la condition de normalisation de la fonction d'onde Ψ_{essai}, la valeur $C^2 = (1 + \alpha^2\mathcal{E}_0^2)^{-1} \approx 1 - \alpha^2\mathcal{E}_0^2$. En utilisant les valeurs des éléments matriciels suivants

$$\langle\Psi_0|\widehat{H}_0|\Psi_0\rangle = -1/2, \quad \langle\Psi_1|\widehat{H}_0|\Psi_0\rangle = -1/8,$$
$$\langle\Psi_1|\widehat{H}_0|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|\widehat{H}_0|\Psi_1\rangle = 0,$$
$$\langle\Psi_0|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_1|z|\Psi_1\rangle = 0,$$
$$\langle\Psi_1|z|\Psi_0\rangle = \langle\Psi_0|z|\Psi_1\rangle = \sqrt{\frac{3}{4\pi^2}}\frac{1}{2\sqrt{6}}\int \mathrm{e}^{-3r/2}r^2\cos^2\theta r^2 dr d\Omega$$
$$= 4\sqrt{2}\left(\frac{2}{3}\right)^5 = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{256}{243},$$

on obtient sans peine

$$\overline{E}(\alpha) = \overline{\widehat{H}} \approx -\frac{1}{2} + \frac{3}{8}\alpha^2\mathcal{E}_0^2 + \sqrt{2}\frac{256}{243}\alpha\mathcal{E}_0^2. \tag{4}$$

En minimisant cette expression, on obtient

$$E_{0\text{var}} = \min \overline{E}(\alpha) = -\frac{1}{2} - \frac{4}{3}\left(\frac{256}{243}\right)^2\mathcal{E}_0^2, \tag{5}$$

d'où la valeur approchée cherchée de la polarisabilité de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène $\beta_{\text{var}} \approx \frac{8}{3}\left(\frac{256}{243}\right)^2 \approx 2,96$.

En utilisant des formes variées des fonction d'onde d'essai, on a obtenu deux valeurs différentes de la polarisabilité. Vu que, dans les deux cas, la valeur variationnelle de l'énergie de l'état fondamental pour $\mathcal{E}_0 \to 0$ est égale à $E_0 = -1/2 - 1/2\beta_{\text{var}}\mathcal{E}_0^2$, on peut affirmer, compte tenu du fait que la valeur variationnelle E_0 n'est pas inférieure à la valeur exacte et que l'énergie de l'état fondamental vaut $E_0 = -1/2 - 1/2\beta_0\mathcal{E}_0^2$, que les valeurs obtenues β_{var} sont plus petites que la valeur exacte. Ainsi, même en ne connaissant pas la valeur exacte $\beta_0 = 9/2$, on peut au préalable affirmer que la première valeur $\beta_{\text{var}} = 4$ est plus proche de la valeur exacte.

11.55. Un calcul simple, analogue à celui utilisé au point a) du problème précédent, donne

$$\overline{E} = -\frac{1}{2} + \frac{1 - \gamma + \gamma^2}{2}\alpha^2\mathcal{E}_0^2 + \frac{64\gamma^{5/2}}{(1+\gamma)^5}\alpha\mathcal{E}_0^2,$$

(il faut tenir compte de ce que la fonction d'onde Ψ_1 est la fonction propre de l'hamiltonien d'un atome hydrogénoïde de charge nucléaire $Z = 2\gamma$, décrivant l'état avec $n = 2$, $l = 1$, $m = 0$).

En minimisant cette valeur de $\overline{E}$ vis-à-vis des paramètres α et γ, on peut obtenir une valeur variationnelle plus précise (pour la classe donnée des fonctions d'onde Ψ_{essai}) correspondant à l'énergie de l'état fondamental : $E_{0\text{var}} = \min \overline{E}$. En minimisant par

rapport au paramètre α (la valeur correspondante α_0 s'obtient à partir de la condition $\partial\overline{E}/\partial\alpha = 0$), on obtient

$$\overline{E} = -\frac{1}{2} - \frac{2^{11}\gamma^5}{(1+\gamma)^{10}(1-\gamma+\gamma^2)}\mathcal{E}_0^2.$$

En minimisant cette valeur par rapport au paramètre γ, on obtient $E_{0\text{var}}$, et, avec ce dernier, la valeur variationnelle cherchée β_{var} de la polarisabilité :

$$\beta_{\text{var}} = \frac{2^{12}\gamma_0^5}{(1+\gamma_0)^{10}(1-\gamma_0+\gamma_0^2)}.$$

La valeur optimale γ_0 s'obtient à partir de la condition $\partial\overline{E}/\partial\gamma = 0$ qui conduit à une équation algébrique du troisième degré par rapport au paramètre γ ; cela donne $\gamma_0 \approx 0,8$ (les deux autres racines sont complexes).

Bref, on trouve $\beta_{\text{var}} = 4,475$ u.a., c'est-à-dire une valeur différant de la valeur exacte de 0,6%.

11.56. Numérotons les fonctions propres de l'hamiltonien Ψ_{nkm} avec $n = 2$ de la façon suivante :

$$\Psi_1 = \Psi_{200}, \quad \Psi_2 = \Psi_{210}, \quad \Psi_3 = \Psi_{211}, \quad \Psi_4 = \Psi_{21,-1}, \quad \Psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm},$$
$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2a_0^3}}\mathrm{e}^{-r/2a_0}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right), \qquad R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24a_0^5}}r\mathrm{e}^{-r/2a_0},$$
$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_{1,\pm1} = \pm i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm i\varphi}.$$

Les valeurs des corrections au premier ordre du niveau non perturbé 4 fois dégénéré (en négligeant le spin de l'électron) de l'atome d'hydrogène avec $n = 2$ sous l'effet de la perturbation $\widehat{V} = ez\mathcal{E}_0 = er\cos\theta\mathcal{E}_0$, se déterminent à partir de la solution de l'équation séculaire $|V_{ik} - E_2^{(1)}\delta_{ik}| = 0$. On remarque aussitôt que les éléments matriciels non nuls de la perturbation sont les suivants :

$$V_{12} = -V_{21} = i\frac{e\mathcal{E}_0}{16\pi a_0^4}\int \mathrm{e}^{-r/a_0}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)r^2\cos^2\theta r^2 dr d\Omega = -3iea_0\mathcal{E}_0,$$

aussi l'équation séculaire et sa solution prennent-elles la forme suivante

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & -3iea_0\mathcal{E}_0 & 0 & 0 \\ 3iea_0\mathcal{E}_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = E_2^{(1)2}(E_2^{(1)2} - 9e^2a_0^2\mathcal{E}_0^2) = 0,$$
$$E_{2,1}^{(1)} = 3ea_0\mathcal{E}_0, \quad E_{2,2}^{(1)} = -3ea_0\mathcal{E}_0, \quad E_{2,3}^{(1)} = E_{2,4}^{(1)} = 0, \qquad (1)$$

c'est-à-dire que le niveau se scinde en trois sous-niveaux, deux simples et un doublement dégénéré (compte tenu du spin de l'électron ces multiplicités sont doublées).

Les conditions de validité des résultats (1) sont de la forme

$$5 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \ll 6ea_0\mathcal{E}_0 \ll 3 \text{ eV}, \text{ ou } 2 \cdot 10^3 \text{ V/cm} \ll \mathcal{E}_0 \ll 10^8 \text{ V/cm}$$

(la décomposition Stark doit être beaucoup plus grande que l'intervalle de structure fine, mais beaucoup plus petite que l'écartement des niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène non perturbé).

11.57. Dans le cas de l'atome d'hydrogène placé dans un champ électrique homogène l'hamiltonien et l'énergie de l'état fondamental sont de la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + e\mathcal{E}z, \qquad E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(2)} \qquad (E_0^{(1)} = 0)$$

où $E_0^{(0)}$ est l'énergie de l'atome non perturbé, $E_0^{(2)} = -\frac{1}{2}\beta_0\mathcal{E}^2$ la correction au second ordre du calcul des perturbations en champ "faible" $\mathcal{E}$ déterminant la polarisabilité de l'atome d'hydrogène $\beta_0 = \frac{9}{2}(\hbar^2/me^2)^3$.

Pour l'hamiltonien (un atome hydrogénoïde dans un champ électrique)

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} + e\mathcal{E}z, \tag{1}$$

l'énergie du niveau fondamental peut être obtenue, sur la base des expressions données plus haut, par substitution formelle $e \to \sqrt{Z}e$, $\mathcal{E} \to \mathcal{E}/\sqrt{Z}$; en particulier,

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{9}{2} \left(\frac{\hbar^2}{Zme^2} \right)^3 \frac{\mathcal{E}^2}{Z} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{9a_0^3}{2Z^4} \mathcal{E}^2,$$

autrement dit la polarisabilité d'un tel atome est $\beta_0 = 9a_0^3/2Z^4$.

L'hamiltonien d'un atome héliogénoïde de charge nucléaire Z placé dans un champ électrique, en négligeant l'interaction des électrons, vaut $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2$, où $\widehat{H}_{1,2}$ sont des hamiltoniens d'électrons individuels de la forme (1). L'énergie et la polarisabilité de l'état fondamental de ce système s'obtiennent manifestement par multiplication par 2 des grandeurs adéquates de l'atome hydrogénoïde de même charge nucléaire Z. Donc,

$$\beta_{\text{He}} = \frac{9a_0^3}{Z^4} = \frac{9}{Z^4} \text{ u.a.} \tag{2}$$

Pour $Z = 2$ et $Z = 27/16$, correspondant aux approximations a) et b) données dans l'énoncé, on trouve, selon (2), les valeurs suivantes de la polarisabilité de l'atome d'hélium :
a) $\beta = 0,56a_0^3 = 0,56$ u.a. ;
b) $\beta = 1,11$ u.a.

La permittivité de l'hélium (gaz monoatomique) dans les conditions normales vaut $\varepsilon_0 = 1 + 4\pi\beta n_0$, où $n_0 = 2,69 \cdot 10^{19}$ cm^{-3}; comme $a_0^3 = 1,49 \cdot 10^{-25}$ cm^3, $\varepsilon_0 = 1 + 5,0 \cdot 10^{-5}\beta$ (β en u.a.). Donc, finalement :
a) $\varepsilon_0 = 1,000028$;
b) $\varepsilon_0 = 1,000056$.

11.58. Pour estimer la polarisabilité des électrons Thomas-Fermi (T-F) $\beta_{\text{T-F}}$, définissant leur moment dipolaire induit $\mathbf{d} = \beta_{\text{T-F}}\mathbf{E}$, remarquons, que bien que la relation mentionnée ne soit rigoureusement juste que pour des valeurs suffisamment petites de $\mathcal{E}$, elle fournit néanmoins aussi un ordre de grandeur correct de d dans le cas des champs intenses. Mais pour $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_{\text{T-F}}$ ($\mathcal{E}_{\text{T-F}}$ est la valeur caractéristique de l'intensité du champ au lieu où se localisent, en général, les électrons Thomas-Fermi; il est clair que $\mathcal{E}_{\text{T-F}} \sim Ze/r_{\text{T-F}}^2$), les déplacements des électrons sous l'action du champ, définissant le moment dipolaire, seront de l'ordre de $r_{\text{T-F}}$, de sorte que $d \sim Zer_{\text{T-F}}$. Ainsi, pour $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_{\text{T-F}}$, on déduit de la relation $d \sim \beta\mathcal{E}$ ($r_{\text{T-F}} \sim a_0 Z^{-1/3}$) que

$$\beta_{\text{T-F}} \sim \frac{d}{\mathcal{E}} \sim \frac{Zer_{\text{T-F}}}{Ze/r_{\text{T-F}}^2} = r_{\text{T-F}}^3 \sim Z^{-1}a_0^3 = Z^{-1} \text{ u.a.},$$

c'est-à-dire que la polarisabilité est égale en ordre de grandeur au cube du rayon Thomas-Fermi de l'atome.

L'estimation est absolument analogue pour les électrons de valence se trouvant à la périphérie de l'atome ($r \sim a_0$), où la valeur caractéristique du champ $\mathcal{E} \sim e/a_0^2$ donne $\beta_{\text{val}} \sim a_0^3 = 1$ u.a. Donc (vu que $Z \gg 1$), la polarisabilité de l'atome est définie par les électrons de valence et non pas par ceux de Thomas-Fermi.

11.59.

a) La polarisabilité est déterminée par les électrons de valence, et a pour ordre de grandeur $\beta = 1$ u.a., valeur déduite sur la base de raisonnements analogues à ceux utilisés dans le problème précédent.

b) Dans le système de coordonnées rigidement lié à l'axe de la molécule $\mathbf{d} \neq 0$ ($d \sim 1$ u.a. et le vecteur $\mathbf{d}$ est manifestement dirigé suivant l'axe de la molécule). Mais dans les états stationnaires de la molécule, son moment dipolaire moyen est nul, vu que par suite de la rotation de la molécule, il se définit par le calcul de la valeur moyenne de $\mathbf{d}$ pour toutes les directions de l'axe de la molécule qui sont équiprobables (avec $K = 0$). En superposant un champ, on obtient $\mathbf{d}_{\text{ind}} = \beta\mathbf{E}$, et pour estimer β, on note que la condition $d_{\text{ind}} \sim ea_0$ ne se réalise que pour une orientation préférentielle de l'axe de la molécule (et, par conséquent, du vecteur $\mathbf{d}$) le long du champ $\mathbf{E}$; mais pour cela il faut que l'énergie d'interaction du dipôle avec le champ électrique (grandeur de l'ordre de $d\mathcal{E}$) soit comparable à celle de rotation de la molécule, dont l'ordre de grandeur est $\hbar^2/Ma_0^2$ ($M \sim 10^3 \div 10^4 m_e$ est la masse réduite des noyaux), c'est-à-dire $\mathcal{E} \sim \dfrac{\hbar^2}{Ma_0^2 d}$. Ainsi

$$\beta_{\text{ind}} \sim \frac{d_{\text{ind}}}{\mathcal{E}} \sim \frac{(ea_0)^2 Ma_0^2}{\hbar^2} = \frac{M}{m_e}a_0^3 = \frac{M}{m_e} \text{ u.a.},$$

c'est-à-dire que la polarisabilité des molécules ayant un moment dipolaire est beaucoup plus grande que la celle des atomes, ainsi que celle des molécules sans moment dipolaire.

Les estimations de la polarisabilité mentionnées plus haut peuvent être obtenues de façon stricte par analyse de la formule exacte déterminant la grandeur β. On laisse au lecteur le soin de s'en convaincre par lui-même.

11.60. Les états stationnaires de la molécule en l'absence de champ sont définis par les nombres quantiques n, Λ ($\Lambda = 0$), S ($S = 0$), v, K, M (n est l'ensemble des nombres quantiques déterminant la fonction d'onde du terme électronique à l'exception de Λ et S). Les fonctions d'onde de ces états sont de la forme

$$\Psi_{nvKM} = \Psi_n^{\text{él}}(\mathbf{R}\,; \xi_1, \xi_2, \ldots)\Psi_v^{\text{vib}}(R)\Psi_{KM}^{\text{rot}}(\theta, \varphi) \qquad (\Lambda = S = 0), \tag{1}$$

tandis que l'énergie correspondante vaut $E = E_{n,\Lambda,S}^{\text{él}} + \hbar\omega_{\text{vib}}(v + 1/2) + B_e K(K+1)$, de sorte que les états ne se différenciant que par la valeur de M sont dégénérés (ξ_a sont les variables d'espace et de spin des électrons).

Il est préférable de calculer les éléments matriciels de la perturbation $\widehat{V} = -\widehat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}$, où $\widehat{\mathbf{d}}$ est l'opérateur moment dipolaire de la molécule, en deux étapes : d'abord en intégrant par rapport aux coordonnées des électrons et à la distance relative R séparant les noyaux (mais pour une orientation fixée de l'axe de la molécule), puis par rapport aux variables θ, φ déterminant la direction de l'axe de la molécule. Pour les éléments matriciels diagonaux vis-à-vis des nombres quantiques n, v la première intégration donne

$$\int (\Psi_n^{\text{él}}\Psi_v^{\text{vib}})^* \widehat{\mathbf{d}} \Psi_n^{\text{él}}\Psi_v^{\text{vib}} d\tau = \mathbf{d} = d\mathbf{n}_0 \qquad (\mathbf{n}_0 = \mathbf{R}/R) \tag{2}$$

(le fait que le vecteur $\mathbf{d}$ soit dirigé suivant l'axe de la molécule est évident en vertu de considérations de symétrie). En dirigeant l'axe z le long du champ $\mathbf{E}$ et compte tenu du fait que la fonction d'onde Ψ_{KM}^{rot} (avec $\Lambda = 0$) est une harmonique sphérique $Y_{KM}(\theta, \varphi)$, on trouve que les éléments matriciels de la perturbation entre les fonctions d'onde (1) correspondant au niveau considéré de la molécule (c'est-à-dire ne différant que par la valeur de M) sont nuls, vu que

$$\int Y_{KM}^* Y_{KM} \cos\theta d\Omega = 0.$$

Au premier ordre du calcul des perturbations les niveaux de la molécule ne s'écartent pas et ne se scindent pas. Vu qu'en présence d'un champ homogène la projection du moment sur la direction du champ est un "bon" nombre quantique, les fonctions d'onde (1) constituent des fonctions correctes à l'approximation zéro, et on peut utiliser les formules standard du calcul des perturbations se rapportant aux états non dégénérés. La correction du second ordre est de la forme

$$E_k^{(2)} = \sum_{\substack{k' \\ k' \neq k}} \frac{|\langle k'|\widehat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}|k\rangle|^2}{E_k - E_{k'}} \tag{3}$$

(pour abréger, on ne se sert que de l'indice k dans la description des différents états de la molécule, $k = \{n, \Lambda, S, v, K, M\}$).

On note sans peine que, dans la formule (3), il est possible de se limiter aux états $|k'\rangle$ pour lesquels $n' = n$, $\Lambda' = S' = 0$ (dans ce cas, $E_k - E_{k'} = B_e[K(K+1) - K'(K'+1)]$) vu que la contribution à la somme des états associés à d'autres nombres quantiques est sensiblement inférieure du fait de la valeur beaucoup plus importante des différences

d'énergie au dénominateur. En prenant ce fait en considération et compte tenu de la relation (2), on peut écrire l'expression (3) sous la forme

$$E^{(2)}_{nKM} = \sum_{\substack{K',K'\neq K\\ M',M'\neq M}} \frac{d^2\mathcal{E}^2|\langle K'M'|\cos\theta|KM\rangle|^2}{B_e[K(K+1)-K'(K'+1)]} = \frac{d^2\mathcal{E}^2[K(K+1)-3M^2]}{2B_eK(K+1)(2K-1)(2K+3)} \tag{4}$$

(comme la fonction d'onde de l'état $|KM\rangle$ est une harmonique sphérique, on remarque que la somme (4) est absolument analogue à celle étudiée dans 8.12 du Tome I, de sorte que la réponse trouvée dans ce problème convient aussi ici : il suffit de procéder à la substitution $l \to K$, $m \to M$, $\hbar^2/2I \to B_e$).

11.61. En dirigeant l'axe z le long du champ magnétique, représentons l'hamiltonien de l'atome sous la forme

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}, \qquad \widehat{V} = \mu B\widehat{l}_z + \frac{e^2B^2}{8mc^2}(x^2+y^2),$$

où $\widehat{H}_0$ est l'hamiltonien de l'atome hydrogénoïde en l'absence du champ, $-e(e>0)$, m sont la charge et la masse du muon, $\mu = e\hbar/2mc$ le magnéton (mésique) de Bohr (on suppose la masse du noyau $M = \infty$; à propos de la valeur finie de M voir 11.64). Vu que l'opérateur $\widehat{H}$, comme d'ailleurs $\widehat{H}_0$ commute avec l'opérateur $\widehat{l}_z$, les fonctions propres bien connues de l'hamiltonien non perturbé Ψ_{nll_z} sont également des fonctions correctes à l'approximation zéro en présence de la perturbation $\widehat{V}$, de sorte que la correction au premier ordre sur les niveaux d'énergie est

$$E^{(1)}_{nl_z} = \mu B\int \Psi^*_{nll_z}\widehat{l}_z\Psi_{nll_z}\,dV = \mu Bl_z$$

(on s'est limité au premier terme dans la perturbation, $\mu B\widehat{l}_z$, car la prise en compte dans $E^{(1)}$ du second terme proportionnel à B^2 aurait péché par excès de précision). Etant donné que les valeurs possibles (entières) de l_z remplissent les conditions $|l_z| \le l \le n-1$, le niveau $E^{(0)}$, n^2 fois dégénéré de l'hamiltonien non perturbé, se scinde au premier ordre en $(2n-1)$ sous-niveaux, dont chacun est dégénéré $(n-|l_z|)$ fois (pour n, $|l_z|$ donnés les valeurs possibles de l sont $|l_z|, |l_z|+1, \ldots, n-1$).

11.62. Le problème se résout de la même façon que le précédent. Il apparaît dans l'hamiltonien un terme complémentaire $\widehat{V}' = 2\mu B\widehat{s}_z$. Les fonctions correctes, à l'approximation zéro, sont de la forme $\Psi_{nll_z}\chi_{s_z}$, où χ_{s_z} sont les fonctions d'onde de spin, fonctions propres de l'opérateur $\widehat{s}_z$ (rappelons que $\chi_{s_z} \equiv |s=1/2, s_z=1/2\rangle$, etc.). La correction au premier ordre sur les niveaux d'énergie est

$$E^{(1)}_{nl_zs_z} = \mu B(l_z+2s_z). \tag{1}$$

Les conditions de validité du résultat (1) supposent que la séparation du niveau $\Delta E_{\text{Zeem}} = E^{(1)}_{n,n-1,1/2} - E^{(1)}_{n,n-1,-1/2} = 2n\mu B$, soit beaucoup plus grande que l'intervalle

de structure fine ΔE_{FS}, mais beaucoup plus petite que l'écartement entre les niveaux voisins de l'hamiltonien non perturbé

$$\Delta E_n = E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)} = 13,6 \left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right] \text{ eV}.$$

Pour $n = 2$, la condition $\Delta E_{\text{FS}} \ll \Delta E_{\text{Zeem}} \ll \Delta E_n$ prend la forme de $5 \cdot 10^{-5}$ eV$\ll \frac{2e\hbar B}{m_e c} \ll 2$ eV ou $3 \cdot 10^3$ gauss$\ll B \ll 10^8$ gauss (rappelons que $e/a_0^2 = 5,14 \cdot 10^9$ V/cm$= 1,71 \cdot 10^7$ gauss, a_0 étant le rayon de Bohr).

11.63. La perturbation (plus précisément, sa partie linéaire en champ B est de la forme[6] $\widehat{V} = \mu B(\widehat{l}_z + 2\widehat{s}_z)$, l'axe z étant dirigé le long du champ magnétique. Les fonctions propres "correctes" de l'hamiltonien à l'approximation zéro sont les fonctions de la forme $\Psi = \Psi_{100}\chi_{SS_z}$, où $\Psi_{100}(r)$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène (sans spin), χ_{SS_z} la fonction de spin du proton et de l'électron avec S et S_z représentant le spin total et sa projection sur l'axe z. Compte tenu de la forme explicite des fonctions χ_{SS_z} (voir, par exemple, 5.17) et du fait que dans l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, $l = 0$, on voit sans peine qu'au premier ordre l'énergie de la composante singulet de la structure hyperfine ne varie pas, tandis que le niveau triplet se scinde en trois sous-niveaux d'énergies

$$E^{(1)}_{S=1,S_z} = \mu B S_z \qquad \text{(c'est-à-dire } E^{(1)} = 0, \pm\mu B).$$

La condition de validité des résultats obtenus est l'inégalité $\mu B \ll \Delta E_{\text{FS}}$, où ΔE_{FS} est la grandeur de la structure hyperfine, voir 11.4 (si $\mu B \gtrsim \Delta E_{\text{FS}}$, le "mélange" des états avec $S = 0$ et $S = 1$, $S_z = 0$, devient essentiel, parce que l'élément matriciel $\langle S = 1, S_z = 0|\widehat{V}|S = 0\rangle \neq 0$).

11.64. Le problème de deux corps interagissant l'un avec l'autre se réduit, comme on le sait, à un problème à un corps dans un champ extérieur. Alors l'hamiltonien du système

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\widehat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \tag{1}$$

se transforme en $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2$, où

$$\widehat{H}_1 = \frac{\widehat{\mathbf{P}}^2}{2M}, \qquad \widehat{H}_2 = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|), \qquad \widehat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}}, \qquad \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}},$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \qquad \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{M}, \qquad \mathbf{r}_{1,2} = \mathbf{R} \pm \frac{m_{2,1}}{M}\mathbf{r}.$$

Si les particules chargées se trouvent dans un champ électrique homogène, il faut ajouter à l'hamiltonien (1) un terme complémentaire $V = -(e_1\mathbf{r}_1 + e_2\mathbf{r}_2)\cdot\mathbf{E}_0$. L'hamiltonien du système peut alors être représenté sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_1 + \widehat{H}_2$, c'est-à-dire

6 Ici $\widehat{s}_z$ est l'opérateur de spin de l'électron ; quant à l'interaction du moment magnétique du proton avec le champ magnétique, vu sa petitesse $\mu_p/\mu_e \sim m_e/m_p \sim 10^{-3}$), on la néglige.

comme la somme de deux hamiltoniens à une particule

$$\widehat{H}_1 = \frac{\widehat{\mathbf{P}}^2}{2M} - (e_1 + e_2)\mathbf{R} \cdot \mathbf{E}_0, \qquad \widehat{H}_2 = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r) - \frac{e_1 m_2 - e_2 m_1}{M}\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_0, \tag{2}$$

dont le premier décrit le mouvement du centre de masse du système et le second représente l'hamiltonien d'un atome hydrogénoïde placé dans un champ électrique (avec $e_1 = -e$, $e_2 = Ze$, $U = -\frac{Ze^2}{r}$). Le dernier terme dans $\widehat{H}_2$,

$$\widehat{V} = -\frac{e_1 m_2 - e_2 m_1}{M}\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_0,$$

constitue l'opérateur d'interaction de cet atome avec le champ électrique. On peut l'écrire sous la forme $\widehat{V} = -\widehat{\mathbf{d}} \cdot \mathbf{E}_0$, où $\widehat{\mathbf{d}}$ est l'opérateur moment dipolaire de l'atome par rapport à son centre de masse (pour $e_1 \neq -e_2$, le moment dipolaire est fonction du point de l'espace par rapport auquel il est défini).

En appliquant un champ magnétique homogène, dont le potentiel vecteur est choisi égal à $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}$, l'hamiltonien (1) prend la forme

$$\widehat{H} = \frac{\left(\widehat{\mathbf{p}}_1 - \frac{e_1}{2c}\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}_1\right)^2}{2m_1} + \frac{\left(\widehat{\mathbf{p}}_2 - \frac{e_2}{2c}\mathbf{B} \wedge \mathbf{r}_2\right)^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \tag{3}$$

Dans le système du centre de masse, où

$$\mathbf{r}_1 = \frac{m_2}{M}\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2 = -\frac{m_1}{M}\mathbf{r}, \qquad \widehat{\mathbf{p}}_1 = -\widehat{\mathbf{p}}_2 \equiv \widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$$

l'hamiltonien (3) peut être écrit sous la forme ($\widehat{\mathbf{l}} = -i\mathbf{r} \wedge \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}$)

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + U(r) + \left\{ -\left(\frac{e_1 m_2}{m_1} + \frac{e_2 m_1}{m_2}\right)\frac{\hbar\widehat{\mathbf{l}} \cdot \mathbf{B}}{2Mc} + \left(\frac{e_1^2 m_2^2}{m_1} + \frac{e_2^2 m_1^2}{m_2}\right)\frac{(\mathbf{B} \wedge \mathbf{r})^2}{8M^2c^2} \right\}. \tag{4}$$

Le dernier terme de cette expression pour $e_1 = -e$, $e_2 = Ze$, $U = -Ze^2/r$, décrit l'interaction de l'atome hydrogénoïde avec le champ magnétique, compte tenu de la masse finie du noyau.

Il faut toutefois souligner que l'expression obtenue (4) n'est pas complète, car avec la présence du champ magnétique le problème à deux corps ne permet plus la séparation des variables, c'est-à-dire que l'hamiltonien ne peut plus se représenter sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_1(\mathbf{R}) + \widehat{H}_2(\mathbf{r})$.

Avec les expressions (2), (4) des hamiltoniens, il devient aisé de dégager l'influence de la masse finie du noyau sur les effets Stark et Zeeman dans les atomes hydrogénoïdes.

11.65. Pour le positronium se trouvant dans un champ magnétique, l'hamiltonien se présente sous la forme

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{m} - \frac{e^2}{r} + 2\mu(\widehat{s}_{z_e} - \widehat{s}_{z_p})B, \qquad \left(\mu = \frac{e\hbar}{2mc}\right) \tag{1}$$

(on s'est limité aux termes linéaires en B ; l'opérateur moment magnétique orbital est nul, voir problème précédent ; la masse réduite du système vaut $m/2$).

Vu que les opérateurs $\widehat{s}_{z\mathrm{e,p}}$ des projections des spins des particules sur l'axe z, dirigé le long du champ magnétique, commutent avec l'hamiltonien, il s'avère manifeste que les fonctions propres de l'hamiltonien (1) sont les fonctions de la forme $\Psi_{nlms_{z\mathrm{e}}s_{z\mathrm{p}}} = \Psi_{nlm}\chi_{s_{z\mathrm{e}}}\chi_{s_{z\mathrm{p}}}$, où Ψ_{nlm} sont des fonctions propres bien connues de l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène (de masse $m/2$), χ_{s_z} les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{s}_z$. A ces fonctions propres correspondent les niveaux d'énergie

$$E_{ns_{z\mathrm{e}}s_{z\mathrm{p}}} = E_n^{(0)} + 2\mu(s_{z\mathrm{e}} - s_{z\mathrm{p}})B, \qquad \left(E_n^{(0)} = -\frac{mc^4}{4h^2n^2}\right)$$

c'est-à-dire que chaque niveau, $4n^2$ fois dégénéré, du positronium non perturbé se scinde dans le champ magnétique en trois sous-niveaux.

11.66. Comme on le sait, un atome dans un état avec les nombres quantiques $L = S = 0$, est diamagnétique et sa susceptibilité magnétique est égale à

$$\chi_{\mathrm{at}} = -\frac{e^2}{6mc^2}\sum_a \overline{r_a^2}.$$

Compte tenu de la forme approchée de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hélium

$$\Psi = \frac{Z_{\mathrm{eff}}^3}{\pi a_0^3}\exp\left[-\frac{Z_{\mathrm{eff}}}{a_0}(r_1 + r_2)\right]\Psi_{S=0}^{\mathrm{spin}}, \qquad Z_{\mathrm{eff}} = \frac{27}{16},$$

on obtient sans peine $\overline{r_1^2} = \overline{r_2^2} = \dfrac{3a_0^2}{Z_{\mathrm{eff}}^2}$ et $\chi_{\mathrm{at}} = -\left(\dfrac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \dfrac{a_0^3}{Z_{\mathrm{eff}}^2}$. La susceptibilité magnétique de 1 cm^3 de gaz vaut $\chi_{\mathrm{gaz}} = n_0\chi_{\mathrm{at}} = -7,7 \cdot 10^{-11}$ ($n_0 = 2,69 \cdot 10^{-19}$ cm^{-3} est le nombre d'atomes de 1 cm^3 de gaz dans les conditions normales, $a_0^3 = 1,49 \cdot 10^{-25}$ cm^3, $e^2/\hbar c \approx 1/137$).

11.67. L'hamiltonien d'un atome placé dans un champ magnétique est de la forme

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \mu_e(\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z)B + \frac{e^2}{2mc^2}\sum_a(\mathbf{r}_a \wedge \mathbf{B})^2 \qquad (1)$$

où $\widehat{H}_0$ est l'hamiltonien de l'atome en l'absence de champ, qui inclut les corrections relativistes donnant lieu à la structure fine de l'atome. Le niveau $^3P_0$ est non dégénéré et son déplacement au premier ordre en B est manifestement nul ($\overline{L_z} = \overline{S_z} = 0$, car pour $J = 0$, il n'y a pas d'orientation privilégiée pour les vecteurs $\overline{\mathbf{L}}$ et $\overline{\mathbf{S}}$).

Au second ordre en B, il apparaît, dans le déplacement du niveau $E^{(2)}$, des termes de deux sortes : ceux qui s'obtiennent par le calcul de la valeur moyenne du dernier terme de l'hamiltonien (1) sur la fonction d'onde du niveau non perturbé et la correction habituelle au second ordre du calcul des perturbations de l'interaction

$$\widehat{V} = \mu_e(\widehat{L}_z + 2\widehat{S}_z)B$$

L'estimation du premier des termes mentionnés de $E^{(2)}$ fournit une grandeur de l'ordre de $e^2 a_0^2 B^2/mc^2$. Quant à la contribution à $E^{(2)}$ du deuxième terme, elle est beaucoup plus grande. En effet,

$$E_k^{(2)} = \sum_{k',k' \neq k} \frac{|\langle k'|\widehat{V}|k\rangle|^2}{E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}}. \tag{2}$$

Dans cette somme, $E_k^{(0)}$ représentent les valeurs propres de l'opérateur $\widehat{H}_0$. Si les états $|k\rangle$ et $|k'\rangle$ appartiennent à des multiplets différents, on a alors $|E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}| \sim e^2/a_0 \sim 10$ eV. Mais dans le cas où les états mentionnés sont les diverses composantes de structure fine d'un même terme, l'estimation se modifie sensiblement : $|E_k^{(0)} - E_{k'}^{(0)}| \sim (e^2/\hbar c)^2 e^2/a_0$, et si dans ce cas l'élément matriciel $\langle k'|\widehat{V}|k\rangle$ n'est pas nul, l'apport de tels termes devient alors dominant. Dans le cas concret de l'état 2^3P_0 de l'atome d'hélium ce terme correspond dans la somme (2) à l'état 2^3P_1 avec $J_z = 0$. Ainsi l'estimation de la somme (2) est de la forme $E^{(2)} \sim a_0^3 B^2$ et la susceptibilité magnétique s'avère une grandeur de l'ordre de $\chi_{\text{at}} \sim a_0^3 \sim 1$ u.a. (vu que selon la règle de Hund $E(2^3P_0) < E(2^3P_1)$, on a $E^{(2)} < 0$ et $\chi_{\text{at}} > 0$, c'est-à-dire que dans l'état 2^3P_0, l'atome d'hélium est paramagnétique).

11.68. L'hamiltonien d'une molécule placée dans un champ magnétique est de la forme

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \mu_e(\widehat{\mathbf{L}} + 2\widehat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a \{r_a^2 B^2 - (\mathbf{r}_a \cdot \mathbf{B})^2\}. \tag{1}$$

Compte tenu de la forme des fonctions propres Ψ_{nvKM} de l'hamiltonien $\widehat{H}_0$, donnée dans 11.60, et en utilisant le procédé de calcul des éléments matriciels indiqué dans ce problème, on remarque, qu'au premier ordre en B, il ne se produit pas de déplacement, car

$$\int (\Psi^{\text{él}}\Psi^{\text{vib}})^* \widehat{\mathbf{L}} \Psi^{\text{él}}\Psi^{\text{vib}} d\tau' \equiv C\mathbf{n}_0 = \Lambda \mathbf{n}_0 = 0, \qquad \overline{\widehat{\mathbf{S}}} = 0. \tag{2}$$

Au second ordre en B le déplacement du niveau se détermine par l'expression

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2}{8mc^2} B_i B_k \int \Psi_{nvKM}^* \sum_a \{r_a^2 \delta_{ik} - x_{ai} x_{ak}\} \Psi_{nvKM} d\tau \tag{3}$$

(la contribution à $E^{(2)}$ des termes au second ordre du calcul des perturbations de l'interaction $\widehat{V}_1 = (\widehat{\mathbf{L}} + 2\widehat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{B}$ est nulle, car les éléments matriciels de la perturbation $\widehat{V}_1$, entrant dans la somme correspondante, sont nuls, tout comme dans (2)).

L'expression (3) après intégration par rapport aux coordonnées des électrons et à la variable R prend la forme

$$E_{KM}^{(2)} = \frac{e^2}{8mc^2} B_i B_k \int Y_{KM}^* \{a\delta ik - b n_{0i} n_{0k}\} Y_{KM} d\Omega$$

où a, b sont des constantes indépendantes de K et de M. Compte tenu de la relation connue (l'axe z est parallèle à $\mathbf{B}$)

$$\int Y^*_{KM} n_{03} n_{03} Y_{KM}\, d\Omega \equiv \int \cos^2\theta |Y_{KM}|^2 d\Omega = \frac{2K^2+2K-1-2M^2}{(2K-1)(2K+3)},$$

on trouve le déplacement des niveaux d'énergie

$$E^{(2)}_{KM} = \frac{e^2B^2}{8mc^2}\left\{a - b\frac{2K^2+2K-1-2M^2}{(2K-1)(2K+3)}\right\}.$$

11.69. L'opérateur interaction de la particule chargée avec l'atome (l'interaction électrostatique habituelle d'un système de charges), vu la petitesse des dimensions de l'atome devant la distance séparant ce dernier de la particule, est de la forme (Ze est la charge de la particule, l'atome étant à l'origine des coordonnées)

$$\widehat{U} = Ze\varphi_{\text{at}}(\mathbf{R}) = Ze\left\{\frac{\mathbf{d}\cdot\mathbf{R}}{R^3} + \varphi_{\text{at quadr}}(\mathbf{R}) + \ldots\right\} \tag{1}$$

Au premier ordre du calcul des perturbations, l'interaction $U(R)$ obtenue par le calcul de la valeur moyenne de l'opérateur U sur la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène n'apparaît pas, vu que les valeurs moyennes de tous les moments multipolaires de l'atome (du dipôle, du quadrupôle, etc.) sont nulles en vertu de la symétrie sphérique de la distribution de la charge dans l'état fondamental s de l'atome. Au second ordre, en se limitant dans l'expression (1) au premier terme qui décroît le moins vite avec R, $V_1 = Ze\dfrac{\mathbf{d}\cdot\mathbf{R}}{R^3} = -Ze^2\dfrac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{R}}{R^3}$, on obtient l'interaction cherchée :

$$U(R) = -\frac{\beta_0}{2}\left(\frac{Ze}{R^2}\right)^2 = -\frac{9Z^2e^2a_0^3}{4R^4}, \tag{2}$$

où $\beta_0 = 9a_0^3/2$ est la polarisabilité de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène ; on a tenu compte de ce que l'interaction V_1 est équivalente à l'interaction de l'atome avec un champ électrique homogène $\mathbf{E} = -Ze\mathbf{R}/R^3$. L'interaction (2) présente manifestement un caractère attractif.

11.70. Compte tenu du résultat du problème précédent, on obtient sans peine l'interaction cherchée :

$$U = \frac{Z_1Z_2e^2}{|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2|} - \frac{9a_0^3}{4}\left\{\frac{Z_1^2e^2}{|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_0|^4} + \frac{Z_2^2e^2}{|\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_0|^4}\right\} - \\ - \frac{9a_0^3Z_1Z_2e^2(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_0)(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_0)}{2|\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_0|^3|\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_0|^3}, \tag{1}$$

où $\mathbf{R}_0$, $\mathbf{R}_1$, $\mathbf{R}_2$ sont les rayons vecteurs de l'atome et des particules chargées (leurs charges sont Z_1e et Z_2e respectivement). Le dernier terme de l'expression (1) dépendant des variables des trois particules, indique que l'interaction n'a pas un caractère additif.

11.71. Comme dans 11.69, l'interaction se détermine par le terme dipolaire

$$\widehat{V} = Ze\frac{\mathbf{d}\cdot\mathbf{R}}{R^3}$$

(dans ce cas il est essentiel que la molécule se trouve dans un état avec $K = 0$, sinon, c'est l'interaction quadrupolaire qui devient dominante car celle-ci est déjà différente de zéro au premier ordre du calcul des perturbations et décroît avec R comme R^{-3}). Le calcul de la correction au second ordre concernant l'interaction mentionnée plus haut, pour une molécule diatomique avec $\mathbf{d} \neq 0$ et qui se trouve dans l'état $^1\Sigma$, s'effectue aisément de façon analogue à ce qui a été fait lors de la résolution du problème 11.60 : dans la somme définissant la correction au second ordre du calcul des perturbations, le rôle dominant est attribué aux états excités de la molécule possédant les mêmes nombres quantiques n, $\Lambda = 0$, $S = 0$, $v = 0$ que l'état fondamental et ne différant que par les nombres quantiques rotationnels (pour ces états les différences d'énergie dans les dénominateurs sont anormalement petites). L'analogie établie dans 11.60 entre les propriétés de la molécule avec $\mathbf{d} \neq 0$ dans l'état $^1\Sigma$ et du rotateur spatial possédant un moment dipolaire concernant leur comportement au sein d'un champ électrique autorise, en se servant de la valeur connue $\beta_0 = 2Id^2/3\hbar^2$ de la polarisabilité de l'état fondamental du rotateur (voir 8.11), de trouver l'expression cherchée de l'énergie d'interaction ($B_e = \hbar^2/2I$) :

$$U(R) = -\frac{\beta_0}{2}\left(\frac{Ze}{R^2}\right)^2 = -\frac{Z^2e^2d^2}{6B_eR^4}.$$

11.72. L'hamiltonien du système a la forme

$$\widehat{H} = \widehat{H}_{0,1} + \widehat{H}_{0,2} + \widehat{U} = \widehat{H}_{0,1} + \widehat{H}_{0,2} - \frac{e^2(2z_1z_2 - x_1x_2 - y_1y_2)}{R^3}, \qquad (1)$$

où $\widehat{H}_{0,1(2)}$ sont les hamiltoniens individuels des atomes d'hydrogène.

La valeur moyenne $\overline{E}(\alpha, R)$ de l'énergie dans l'état décrit par la fonction d'onde Ψ_{essai}, avec un choix adéquat du paramètre α, peut être considérée comme une valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental du système. Elle se calcule sans peine en tenant compte des valeurs des intégrales suivantes :

1) $\langle 0|x|0\rangle \equiv \int x\Psi_0^2(r)dV = 0$ vu que la fonction sous l'intégrale est impaire ; de même, toutes les intégrales dont une composante quelconque des vecteurs $\mathbf{r}_1$ ou $\mathbf{r}_2$ apparaît avec une puissance impaire sont égales à zéro ;

2) $\langle 0|\widehat{H}_0|0\rangle = -e^2/2a_0$, vu que Ψ_0 est fonction propre de l'opérateur $\widehat{H}_0$;

3) $\langle 0|x^2|0\rangle = \langle 0|y^2|0\rangle = \langle 0|z^2|0\rangle = \frac{1}{3}\langle 0|r^2|0\rangle = \frac{1}{3}\int r^2\Psi_0^2(r)dV = a_0^2$;

4) $\langle 0|z\widehat{H}_0z|0\rangle = \int \Psi_0 z\widehat{H}_0(z\Psi_0) = 0$; le procédé le plus simple de calcul de cet élément matriciel est donné dans la solution du problème 11.54, où il est noté $\langle \Psi_1|\widehat{H}_0|\Psi_1\rangle$.

Pour une fonction d'essai de la forme a), compte tenu de ce qui a été dit plus haut, on obtient $C^2 = (1 + \alpha^2 a_0^4)^{-1} \approx 1 - \alpha^2 a_0^4$ (en vertu de la condition de normalisation) et, pour l'énergie,

$$\overline{E} = -\frac{e^2}{a_0} + \alpha^2 e^2 a_0^3 - 2\alpha \frac{2e^2 a_0^4}{R^3}.$$

En minimisant cette valeur par rapport au paramètre α, on obtient une valeur approchée de l'énergie de l'état fondamental du système considéré, composé de deux atomes d'hydrogène :

$$E_0(R) = \min \overline{E} = -\frac{e^2}{a_0} - \frac{4e^2 a_0^5}{R^6}$$

où le premier terme est l'énergie des deux atomes individuels et le second, l'énergie de leur interaction mutuelle.

De façon analogue on obtient pour une fonction d'essai de type b)

$$C^2 \approx 1 - 6\alpha^2 a_0^4, \qquad \overline{E} = -\frac{e^2}{a_0} + 6\alpha^2 e^2 a_0^3 + 12 \frac{\alpha e^2 a_0^4}{R^3}, \tag{2}$$

$$E_0(R) = -\frac{e^2}{a_0} - \frac{6e^2 a_0^5}{R^6}, \qquad U(R) = -\frac{6e^2 a_0^5}{R^6}.$$

Etant donné que le calcul de l'énergie de l'état fondamental par la méthode variationnelle fournit toujours une valeur E_0 par excès, des deux expressions obtenues pour $U(R)$, (1) et (2), la seconde est plus exacte.

La loi de décroissance de l'énergie d'interaction des atomes, $U(R)$, correspond aux forces de Van der Waals.

Notons que le calcul numérique exact donne $U(R) = -\dfrac{6,5e^2 a_0^5}{R^6}$, c'est-à-dire que l'expression (2) ne diffère de l'expression exacte que de 8%.

11.73. L'interaction entre les molécules apparaît au second ordre du calcul des perturbations vis-à-vis de l'interaction dipôle-dipôle :

$$\hat{V} = \frac{(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2)R^2 - 3(\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5}$$

(il est essentiel dans ce cas que les molécules possèdent des nombres quantiques rotationnels $K_1 = K_2 = 0$, car, sinon, l'interaction quadrupôle-quadrupôle intervient au premier ordre et décroît comme R^{-5}), c'est-à-dire que

$$U(R) = E_k^{(2)} = \sum_{\substack{k_1, k_2, \\ k_1, k_2 \neq 0}} \frac{|\langle k_1 k_2 | (\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{d}_2)R^2 - (\mathbf{d}_1 \cdot \mathbf{R})(\mathbf{d}_2 \cdot \mathbf{R}) | 0, 0 \rangle|^2}{[E_{0,1} + E_{0,2} - E_{k_1} - E_{k_2}]R^{10}} \tag{1}$$

où $k_{1,2}$ sont les jeux de nombres quantiques caractérisant les états stationnaires des molécules individuelles (voir 11.60). Le rôle dominant dans la somme (1) est joué par

les termes correspondant aux états des molécules dont tous les nombres quantiques, à l'exception de K et M, sont identiques à ceux des états fondamentaux car, dans ce cas, les différences d'énergie dans les dénominateurs sont anormalement petites. Une fois choisi l'axe z suivant le vecteur $\mathbf{R}$, et effectué, dans les éléments matriciels, l'intégration par rapport aux coordonnées des électrons et à la distance relative séparant les noyaux, comme cela a été fait dans 11.60, écrivons la somme (1) sous la forme

$$U(R) = -\sum_{K_1,M_1,K_2,M_2} \frac{d_1^2 d_2^2 |\langle K_1, M_1, K_2, M_2 | 3n_{1z}n_{2z} - \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 | 0,0\rangle|^2}{[B_1 K_1(K_1+1) + B_2 K_2(K_2+1)]R^6} \qquad (2)$$

(l'énergie de l'état de la molécule ne différant de l'état fondamental que par les nombres quantiques K, M vaut $E_k = E_0 + BK(K+1)$) ; $\mathbf{n}_{1,2}$ étant des vecteurs unitaires définissant les orientations des axes des molécules, les fonctions d'onde des états $|K, M\rangle$ sont des harmoniques sphériques.

Compte tenu de la forme des harmoniques sphériques, on voit sans peine que l'élément matriciel $\langle K, M|\cos\theta|0,0\rangle$ n'est différent de zéro que pour $K = 1$, $M = 0$ et vaut $\langle 1,0|\cos\theta|0,0\rangle = -i/\sqrt{3}$. De façon analogue on peut obtenir les autres éléments matriciels non nuls entrant dans la somme (2) :

$$\langle 1,1|n_x|0,0\rangle \equiv \langle 1,1|\sin\theta\cos\varphi|0,0\rangle = -\langle 1,-1|n_x|0,0\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}},$$
$$\langle 1,1|n_y|0,0\rangle \equiv \langle 1,1|\sin\theta\sin\varphi|0,0\rangle = \langle 1,-1|n_y|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Finalement l'expression de l'énergie d'interaction des molécules prend la forme

$$U(R) = -\frac{d_1^2 d_2^2}{3(B_1+B_2)R^6}.$$

11.74. L'hamiltonien $\widehat{H}_1$ de l'électron avant la désintégration du noyau se transforme instantanément en $\widehat{H}_2$ au moment de la fission ; on a :

$$\widehat{H}_1 = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r}, \qquad \widehat{H}_2 = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{2}{r}.$$

La probabilité cherchée se détermine d'après la formule générale de la théorie de l'approximation soudaine (voir 8.39, Tome 1). Compte tenu de la forme de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome hydrogénoïde de charge nucléaire Z $\Psi_0(r,Z) = \sqrt{Z^3/\pi}\exp(-Zr)$, on trouve sans peine

$$w(0\to 0) = \left|\int \Psi_0^*(r,Z=2)\Psi_0(r,Z=1)dV\right|^2 = \left(\frac{8\sqrt{8}}{27}\right)^2 \approx 0,70.$$

11.75. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Etant donné que dans les conditions du problème, le moment orbital de l'électron se conserve (le champ est central) et qu'avant la fission du noyau on a $l = 0$, après la fission du noyau, les

transitions de l'électron ne s'avèrent possibles que vers les états avec $l = 0$. Compte tenu de la fonction d'onde Ψ_{nlm} avec $n = 2$, $l = m = 0$

$$\Psi_{200} = \sqrt{\frac{Z^3}{8\pi}} \left(1 - \frac{Zr}{2}\right) \mathrm{e}^{-Zr/2},$$

après une intégration élémentaire on aboutit à la probabilité cherchée :

$$w = \left| \int \Psi^*_{200}(r, Z = 2)\Psi_{100}(r, Z = 1)dV \right|^2 = \frac{1}{4}.$$

11.76. L'hamiltonien de l'électron pour $t > 0$ ($t = 0$ est l'instant de la fission du noyau) est donné dans 11.74 (où il est noté $\widehat{H}_2$). Aussitôt après la fission du noyau, la fonction d'onde est une fonction d'onde de l'état fondamental de l'électron au sein de l'atome d'hydrogène. L'énergie moyenne de l'électron pour $t > 0$ ne dépend pas du temps et vaut

$$\overline{E} = \langle \Psi_0 | \widehat{H}_2 | \Psi_0 \rangle \equiv \langle \Psi_0 | \left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} \right) - \frac{1}{r} | \Psi_0 \rangle = E_0 - \langle \Psi_0 | \frac{1}{r} | \Psi_0 \rangle = -\frac{1}{2} - 1 = -\frac{3}{2}.$$

La valeur moyenne de l'énergie acquise par l'électron du fait de la fission du noyau est $E_{\text{ac}} = \overline{E} - E_0 = -3/2 - (-1/2) = -1$ u.a. $= -27,2$ eV ($E_{\text{ac}} < 0$, c'est-à-dire que l'énergie de l'électron diminue).

11.77. Généralement par fonction d'onde atomique on entend la fonction d'onde de l'enveloppe électronique $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ (on n'écrit pas les indices de spin pour simplifier), ce qui correspond à l'étude du mouvement des électrons dans le système du centre de masse de l'atome, la position du centre de masse, $R = 0$, coïncidant avec celle du noyau (la prise en compte du mouvement du noyau engendre des petites corrections). En l'absence de champ extérieur, le mouvement libre du centre de masse n'exerce aucune influence sur la fonction d'onde de l'enveloppe électronique. Dans le problème considéré, la situation est différente. Vu que le noyau reçoit une impulsion, le mouvement du centre de masse n'est plus libre et il s'agit d'établir l'influence qu'exerce la variation de ce mouvement sur la fonction d'onde de l'enveloppe électronique. Pour cela, étudions la fonction d'onde Ψ_{syst} qui décrit aussi bien l'enveloppe électronique que le mouvement du centre de masse. Juste avant l'instant de "secousse", elle est de la forme

$$\Psi_{\text{syst}} = \Psi_{\text{c.m.}}(\mathbf{R}_{\text{c.m.}})\Psi_0(\boldsymbol{\rho}_1 - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}, \boldsymbol{\rho}_2 - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}, \ldots), \tag{1}$$

où $\boldsymbol{\rho}_a$ sont les rayons vecteurs des électrons dans un système quelconque de coordonnées, $\Psi_{\text{c.m.}}$ la fonction d'onde d'état du centre de masse du système. Après la "secousse", la fonction d'onde varie. Les inégalités figurant dans les conditions du problème signifient que pendant la durée du choc τ, la fonction d'onde de l'enveloppe électronique n'a pas le temps de varier sensiblement et la position des noyaux (et, donc, celle du centre de masse) ne change pas, c'est-à-dire que toutes les modifications de la fonction d'onde se réduisent à la multiplication de (1) par $\exp(iM\mathbf{v} \cdot \mathbf{R}_{\text{noy}}/\hbar)$,

où M, $\mathbf{R}_{\text{noy}}$ sont la masse du noyau et son rayon vecteur, ce qui correspond à une variation d'impulsion du noyau du vecteur $M\mathbf{v}$, de sorte que $\widetilde{\Psi}_{\text{syst}} = \exp(iM\mathbf{v}\cdot\mathbf{R}_{\text{noy}}/\hbar)\Psi_{\text{syst}}$. Compte tenu de la forme de la fonction d'onde (1) et des relations évidentes

$$\sum_{a=1}^{N} m\boldsymbol{\rho}_a + M\mathbf{R}_{\text{noy}} = (M+Nm)\mathbf{R}_{\text{c.m.}},$$
$$M\mathbf{R}_{\text{noy}} = M\mathbf{R}_{\text{c.m.}} - m\sum_{a=1}^{N}(\boldsymbol{\rho}_a - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}), \tag{2}$$

la fonction d'onde du système aussitôt après "secousse" peut être écrite sous la forme

$$\widetilde{\Psi}_{\text{syst}} = \exp(i\mathbf{v}M\mathbf{R}_{\text{noy}}/\hbar)\Psi_{\text{c.m.}}\exp\left(-\frac{im\mathbf{v}}{\hbar}\sum_a \mathbf{r}_a\right)\Psi_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots), \tag{3}$$

où les $\mathbf{r}_a$, comme auparavant, sont les rayons vecteurs des électrons dans le système du centre de masse.

La formule (3) montre comment les fonctions d'onde du centre de masse du système et de l'enveloppe électronique varient à cause de la "secousse" étudiée. Donc, la fonction d'onde de l'enveloppe électronique, aussitôt après la "secousse" prend la forme

$$\widetilde{\Psi}_0 = \exp\left(-\frac{im\mathbf{v}}{\hbar}\sum_a \mathbf{r}_a\right)\Psi_0(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N), \tag{4}$$

et les probabilités d'excitation des différents états de l'atome sont

$$w(0\to n) = \left|\int \Psi_n^*\widetilde{\Psi}_0 d\tau\right|^2. \tag{5}$$

11.78. Cherchons w_0, la probabilité pour l'atome de demeurer dans l'état fondamental. Compte tenu de la forme de la fonction d'onde de l'état fondamental $\Psi_0 = (\pi a_0^3)^{-1/3}\exp(-r/a_0)$, d'après les formules (4), (5) du problème précédent, en effectuant une intégration élémentaire, on obtient ($\mathbf{q} = m_e\mathbf{P}/\hbar M_p$)

$$w_0 = \left|\frac{1}{\pi a_0^3}\int \mathrm{e}^{-2r/a_0 - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV\right|^2 = \frac{1}{(1+q^2a_0^2/4)^4}.$$

La probabilité cherchée d'excitation et d'ionisation de l'atome w est manifestement égale à $w = 1 - w_0$. Dans les cas limites d'une "secousse" faible ($qa_0 \ll 1$) et forte ($qa_0 \gg 1$), on a :

$$w \approx \begin{cases} q^2a_0^2 \ll 1, & qa_0 \ll 1, \\ 1 - (2/qa_0)^8 \approx 1, & qa_0 \gg 1. \end{cases}$$

Les critères de validité de l'approximation utilisée, formulés dans le problème précédent, doivent être précisés pour une "secousse" forte. Etant donné que, dans ce cas,

l'ionisation est sensible (l'énergie des électrons de départ $E_q \approx \hbar^2 q^2/2m_e$, et leur impulsion $\mathbf{p} \approx -\hbar\mathbf{q}$), la durée du choc τ doit être petite par rapport aux périodes de Bohr des transitions correspondantes :

$$\tau \ll \hbar/|E_0 - E_q| \approx \hbar/E_q \sim m_e/\hbar q^2.$$

11.79. Le problème se résout de façon absolument analogue à 11.77. La fonction d'onde du système juste avant la "secousse" a la forme

$$\Psi_{\text{syst}} = \Psi(\mathbf{R}_{\text{c.m.}})\Psi_0(\boldsymbol{\rho}_1 - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}, \boldsymbol{\rho}_2 - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}, \ldots \boldsymbol{\rho}_N - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}; \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2),$$

et aussitôt après la "secousse" elle devient égale à

$$\widetilde{\Psi}_{\text{syst}} = e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}_1/\hbar}\Psi(\mathbf{R}_{\text{c.m.}})\Psi_0(\boldsymbol{\rho}_1 - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}, \boldsymbol{\rho}_2 - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}, \ldots \boldsymbol{\rho}_N - \mathbf{R}_{\text{c.m.}}; \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2) \qquad (1)$$

(on suppose que l'impulsion est transmise au noyau 1 dont le rayon vecteur est $\mathbf{R}_1$). Compte tenu de la relation

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{R}_{\text{c.m.}} + \frac{M_2}{M}\mathbf{R} - \frac{m}{M}\sum_a(\boldsymbol{\rho}_a - \mathbf{R}_{\text{c.m.}})$$
$$(\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2, \qquad M = M_1 + M_2),$$

à partir de la formule (1) on obtient la variation de la fonction d'onde de la molécule du fait de la "secousse" :

$$\widetilde{\Psi}_0 = \exp\left\{\frac{iM_2\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}}{\hbar M} - \frac{im\mathbf{P}}{\hbar M}\cdot\sum_a \mathbf{r}_a\right\}\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots; \mathbf{R}),$$

L'expression cherchée de la probabilité de transition :

$$w(0 \to n) = \left|\int \Psi_n^* \widetilde{\Psi}_0 d\tau\right|^2, \qquad (2)$$

où l'intégration est effectuée sur les coordonnées de tous les électrons, la distance relative R entre les noyaux et sur les variables angulaires déterminant la direction de l'axe de la molécule (en outre, on fait une sommation sur les indices de spin).

11.80. La probabilité cherchée se détermine suivant la formule (2) du problème précédent. D'après la forme de la fonction d'onde de la molécule pour le terme électronique $^1\Sigma$, donnée dans 11.60, on obtient

$$w_0 = \left|\int \exp\left\{\frac{iM_2\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}}{\hbar M} - \frac{im\mathbf{P}}{\hbar M}\cdot\sum_a \mathbf{r}_a\right\}|\Psi_n^{\text{él}}\Psi_0^{\text{vib}}\Psi_{00}^{\text{rot}}|^2 d\tau_{\text{él}} dR d\Omega\right|^2, \qquad (1)$$

(ici le symbole $\int \ldots d\tau_{\text{él}}$ indique l'intégration par rapport aux coordonnées des électrons et la sommation par rapport à leurs variables de spin). Vu que d'après la condition $P/M \ll v_{\text{mol}} \sim v_{\text{at}} \sim \hbar/ma_0$ (a_0 est le rayon de Bohr) et les valeurs caractéristiques des coordonnées des électrons $r \sim a_{\text{mol}} \sim a_{\text{at}} \sim a_0$ le facteur

$$\exp\left\{-\frac{im\mathbf{P}}{\hbar M}\cdot\sum_a \mathbf{r}_a\right\}$$

peut être remplacé par l'unité, après quoi on a $\int |\Psi_n^{\text{él}}|^2 d\tau_{\text{él}} = 1$. Une fois l'intégration effectuée par rapport aux variables angulaires (cela se fait aisément en dirigeant l'axe polaire suivant le vecteur $\mathbf{P}$) :

$$\frac{1}{4\pi}\int \exp\left\{\frac{iM_2PR\cos\theta}{\hbar M}\right\} d\Omega = \frac{\exp(i\alpha R) - \exp(-i\alpha R)}{2i\alpha R},$$
$$\left(\alpha = \frac{M_2 P}{\hbar M} = \frac{M_1 M_2 V}{\hbar(M_1+M_2)}\right),$$

on transforme l'expression (1) en

$$w_0 = \left| \int \frac{\exp(i\alpha R) - \exp(-i\alpha R)}{2i\alpha R} |\Psi_0^{\text{vib}}|^2 \, dR \right|^2 . \tag{2}$$

La fonction d'onde Ψ_0^{vib} (de l'état fondamental de l'oscillateur)

$$\Psi_0^{\text{vib}} = \left(\frac{\mu\omega_e}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{\mu\omega_e}{2\hbar}(R-R_0)^2\right] \tag{3}$$

n'est sensiblement différente de zéro que dans le domaine $|R-R_0| \lesssim (\hbar/\mu\omega_e)^{1/2} \ll R_0$ (R_0 étant la distance séparant les noyaux en position d'équilibre, ω_e la pulsation des vibrations de la molécule, $\mu = M_1M_2/(M_1+M_2)$) ; aussi, dans l'intégrale de l'expression (2), peut-on remplacer dans le dénominateur R par R_0, après quoi elle se calcule de façon élémentaire, car

$$\begin{aligned}\int |\Psi_0^{\text{vib}}|^2 \, e^{\pm i\alpha R} dR &= \left(\frac{\mu\omega_e}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{\pm i\alpha R_0} \int \exp\left[-\frac{\mu\omega_e}{\hbar}(R-R_0)^2 \pm i\alpha(R-R_0)\right] dR \\ &= \exp\left(\pm i\alpha R_0 - \frac{\hbar\alpha^2}{4\mu\omega_e}\right).\end{aligned}$$

En définitive, l'expression de la probabilité cherchée est

$$w_0 = \left(\frac{\sin\alpha R_0}{\alpha R_0}\right)^2 \exp\left(-\frac{\hbar\alpha^2}{2\mu\omega_e}\right).$$

11.81. Utilisons la formule générale donnant la probabilité de transition (par unité de temps) d'un état du spectre discret vers un intervalle différentiel d'états du spectre continu, sous l'action d'une perturbation périodique de pulsation ω :

$$dw_\nu = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{n\nu}|^2 \delta(E_\nu - E_n^{(0)} - \hbar\omega) d\nu. \tag{1}$$

Dans ce problème, la perturbation (l'énergie de l'électron dans le champ électrique) a la forme

$$\widehat{V} = e\mathbf{E}(t)\mathbf{r} = e\mathbf{E}_0\mathbf{r}\sin\omega t \equiv \widehat{F}e^{-i\omega t} + \widehat{F}^\dagger e^{i\omega t},$$

avec $\widehat{F} = ie\mathbf{E}_0\mathbf{r}/2$. Dans l'élément matriciel

$$F_{n\nu} = \int \Psi_\nu^* \widehat{F} \Psi_n^{(0)} d\tau \tag{2}$$

il faut interpréter la fonction d'onde $\Psi_n^{(0)}$ comme la fonction d'onde Ψ_0 de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène et Ψ_ν comme la fonction d'onde $\Psi_{\mathbf{k}}$ de l'électron libre avec le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ (rappelons que ν constitue un jeu de grandeurs servant à la description des états du spectre continu), c'est-à-dire

$$\Psi_n^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \qquad \Psi_\nu = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \qquad \left(a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}\right).$$

Pour le calcul de l'intégrale (2) ($d\tau \equiv dV$), introduisons le système de coordonnées sphériques r, θ, φ avec l'axe polaire suivant le vecteur $\mathbf{k}$ et notons Θ, φ_0 les angles polaire et azimutal du vecteur $\mathbf{E}_0$. Alors

$$\mathbf{E}_0 \cdot \mathbf{r} = \mathcal{E}_0 r[\cos\theta\cos\Theta + \sin\theta\sin\Theta\cos(\varphi - \varphi_0)]$$

et l'élément matriciel $F_{n\nu}$, après une simple intégration, s'avère égal à

$$\begin{aligned} F_{n\nu} &= \frac{ie\mathcal{E}_0}{4\pi^2\sqrt{2a_0^3}} \iiint e^{-r/a_0 - ikr\cos\theta}[\cos\theta\cos\Theta \\ &+ \sin\theta\sin\Theta\cos(\varphi - \varphi_0)]r^3 dr\sin\theta d\theta d\varphi = \frac{4\sqrt{2}c\mathcal{E}_0\cos\Theta k a_0^{7/2}}{\pi(1 + k^2a_0^2)^3} \end{aligned} \tag{3}$$

(il convient d'intégrer d'abord par rapport à φ, puis par rapport à r et enfin par rapport à $x \equiv \cos\theta$). Compte tenu de ce que

$$d\nu = d^3k = k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}} = k^2 \frac{dk}{dE_k} dE_k d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{mk dE_k d\Omega_{\mathbf{k}}}{\hbar^2}$$

et en nous servant de la valeur (3), récrivons l'expression (1) sous la forme

$$dw_{\mathbf{k}} = \frac{2^6}{\pi} \frac{m a_0^7 k^3 e^2 \mathcal{E}_0^2 \cos^2\Theta}{\hbar^3(1 + k^2a_0^2)^6} \delta[E_k - E_n^{(0)} - \hbar\omega] dE_k d\Omega_{\mathbf{k}}. \tag{4}$$

En intégrant (4) par rapport à E_k, il vient aussitôt

$$dw_{\mathbf{k}} = \frac{64}{\pi} \frac{a_0^3 \mathcal{E}_0^2}{\hbar} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{3/2} \cos^2\Theta d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{5}$$

(on a introduit ω_0 d'après la formule $E_{n=1} = -e^2/2a_0 = -\hbar\omega_0$).

L'expression (5) a manifestement le sens suivant : elle détermine la probabilité d'ionisation de l'atome par unité de temps pour laquelle la direction de l'impulsion de l'électron ($\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$) est comprise dans de l'angle solide $d\Omega_{\mathbf{k}}$; l'énergie de l'électron vaut $E = \hbar(\omega - \omega_0)$.

En intégrant (5) sur tous les angles solides de l'électron, on aboutit à la probabilité totale d'ionisation de l'atome w_i par l'unité de temps :

$$w_i = \frac{256}{3} \frac{a_0^3 \mathcal{E}_0^2}{\hbar} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^6 \left(\frac{\omega}{\omega_0} - 1\right)^{3/2}. \tag{6}$$

Etant donné qu'en résolvant le problème on a utilisé en guise de fonctions d'onde du spectre continu des ondes planes, les expressions obtenues ne sont, strictement parlant, valables qu'à la condition $\omega \gg \omega_0$, quand la vitesse de l'électron de départ est beaucoup plus grande que v_{at}.

Notons que pour $\omega < \omega_0$, la probabilité d'ionisation de l'atome selon la formule (1) est nulle. Cela ne signifie toutefois pas que, pour ces valeurs de ω, il ne se produit pas d'ionisation de l'atome, car il y a une probabilité non nulle d'ionisation par les ordres plus élevés du calcul des perturbations.

11.82. Le système envisagé "noyau + électron K" est décrit par l'hamiltonien

$$\widehat{H} = \widehat{H}_{\text{noy}} - \frac{1}{2}\Delta_e - \sum_p \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|}, \tag{1}$$

où $\widehat{H}_{\text{noy}}$ est l'hamiltonien du sous-système nucléaire, la somme dans (1) étant prise sur tous les protons du noyau. En représentant l'énergie d'interaction de l'électron avec le noyau sous la forme

$$U = -\sum_p \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} = -\frac{Z}{r_e} - \sum_p \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} - \frac{1}{r_e}\right) \equiv -\frac{Z}{r_e} + V$$

(l'origine des coordonnées est choisie au centre de masse du noyau), notons que V représente la partie de l'interaction dépendant de l'état du sous-système nucléaire et régissant la transition étudiée. La probabilité de transition peut être calculée d'après la formule générale relative à une perturbation indépendante du temps :

$$dw_\nu = 2\pi |V_{\nu n}|^2 \delta(E_\nu - E_n^{(0)}) d\nu. \tag{2}$$

L'élément matriciel $V_{\nu n}$ inclut les fonctions d'onde $\Psi_n^{(0)}$ et Ψ_ν qui, dans ce problème sont

$$\Psi_n^{(0)} = \Psi_0^{\text{noy}} \Psi_0, \qquad \Psi_0 = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}} e^{-Zr_e},$$

$$\Psi_\nu = \Psi_1^{\text{noy}} \Psi_{\mathbf{k}}, \qquad \Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_e}$$

où $\Psi_{0,1}^{\text{noy}}$ sont les fonctions d'onde des états initial et final du noyau. Donc,

$$V_{\nu n} = -\frac{Z^{3/2}}{\sqrt{8}\pi^2} \iint \Psi_1^{\text{noy}\,*} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_e} \sum_p \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} - \frac{1}{r_e}\right) \Psi_0^{\text{noy}} e^{-Zr_e} d\tau dV_e,$$

où $d\tau$ est le produit des différentielles de toutes les coordonnées du noyau, dV_e remplissant le même rôle pour l'électron.

Pour le calcul de l'élément matriciel, utilisons le développement du potentiel coulombien en intégrale de Fourier :

$$\sum_p \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3q}{q^2} \sum_p \exp\left(i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p)\right) = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d^3q}{q^2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_e} \sum_p e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_p},$$

de sorte que

$$V_{\nu n} = -\frac{Z^{3/2}}{2^{5/2}\pi^4}\int\frac{d^3q}{q^2}\int d\tau\Psi_1^{\text{noy}\,*}\sum_{\text{p}}(\text{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}}}-1)\Psi_0^{\text{noy}}\int dV_{\text{e}}\text{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\text{e}}+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{e}}-Zr_{\text{e}}}. \quad (3)$$

On remarque sans peine que dans l'intégrale (3), ne sont essentielles que les valeurs de q pour lesquelles $|\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}}| \ll 1$ (voir plus bas). En développant l'exponentielle en série suivant les puissances $\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}}$, effectuons l'intégration par rapport aux variables du sous-système nucléaire :

$$\int\Psi_1^{\text{noy}\,*}\sum_{\text{p}}(\text{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}}}-1)\Psi_0^{\text{noy}}d\tau \approx \int\Psi_1^{\text{noy}\,*}\left(-i\mathbf{q}\cdot\sum_{\text{p}}\mathbf{r}_{\text{p}}\right)\Psi_0^{\text{noy}}d\tau = -i\mathbf{q}\cdot\mathbf{d}_{10}, \quad (4)$$

où l'on note par $\mathbf{d}_{10}$ l'élément matriciel du moment dipolaire du noyau. En intégrant par rapport aux coordonnées de l'électron, il vient

$$\int dV_{\text{e}}\exp[-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\text{e}}+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{e}}-Zr_{\text{e}}] = \frac{8\pi Z}{[Z^2+(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2]^2}.$$

et, par suite, l'élément matriciel (3) se met sous la forme

$$V_{\nu n} = \frac{i\sqrt{2}Z^{5/2}}{\pi^3}\mathbf{d}_{10}\cdot\int\frac{d^3q}{q^2}\frac{\mathbf{q}}{[Z^2+(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2]^2}. \quad (5)$$

D'après les conditions du problème, la vitesse de l'électron est beaucoup plus grande que la vitesse atomique, c'est-à-dire $k \gg Z$ (l'énergie de l'électron se détermine à partir de la fonction δ de l'expression (2) et vaut $E_k = k^2/2 = E_{\text{noy},0} - E_{\text{noy},1} + E_{\text{él},0} \approx E_{\text{noy},0} - E_{\text{noy},1}$). Compte tenu de ce fait, on note que dans l'intégrale (5) le rôle dominant est joué par le domaine $|\mathbf{q}-\mathbf{k}| \lesssim Z$ (ce qui confirme l'utilisation plus haut de l'inégalité $|\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}}| \ll 1$) cette intégrale est donc égale ($\mathbf{q} \approx \mathbf{k}$) à

$$\int\frac{d^3q}{q^2}\frac{\mathbf{q}}{[Z^2+(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2]^2} \approx \frac{\mathbf{k}}{k^2}\int d^3q\frac{1}{[Z^2+(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2]^2} = \frac{\pi^2}{Z}\frac{\mathbf{k}}{k^2}$$

et

$$V_{\nu n} = \frac{i\sqrt{2}Z^{3/2}}{\pi k^2}\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_{10}. \quad (6)$$

Vu que dans la formule (2), $d\nu = k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}} = k dE_k d\Omega_{\mathbf{k}}$, $E_\nu \equiv E_k + E_{\text{noy},1} = \dfrac{k^2}{2} + E_{\text{noy},1}$, $E_n^{(0)} \equiv E_{\text{él},0} + E_{\text{noy},0} \approx E_{\text{noy},0}$ en effectuant l'intégration d'abord par rapport à E_k (compte tenu de la valeur (6) de l'élément matriciel), puis par rapport aux angles d'éjection de l'électron, on obtient la probabilité cherchée sous la forme

$$dw_{\mathbf{k}} = \frac{4Z^3}{\pi}\frac{|\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}_{10}|^2}{k^3}d\Omega_{\mathbf{k}}, \qquad w = \frac{16Z^3}{3k}|\mathbf{d}_{10}|^2$$

(la première de ces expressions définit la distribution angulaire des électrons). Vu que dans l'atome il y a deux électrons K, la probabilité totale de la conversion interne sur les électrons de la couche K est

$$w_K = 2w = \frac{32Z^3}{3k}|\mathbf{d}_{10}|^2 = \frac{32m^3e^6}{3\hbar^7}\frac{Z^3e^2}{\hbar\nu}|\mathbf{d}_{10}|^2. \quad (7)$$

D'autre part, la probabilité d'émission dipolaire (voir, par exemple, 14.1) est

$$w_{\text{ém}} = \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}|\mathbf{d}_{10}|^2, \tag{8}$$

où ω est la pulsation d'émission, $\hbar\omega = mv^2/2$.

De (7) et (8) on tire le coefficient de conversion interne :

$$\beta_K \equiv \frac{w_K}{w_{\text{ém}}} = \frac{\alpha(Z\alpha)^3}{2}\left(\frac{2mc^2}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \qquad \left(\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}\right).$$

11.83. Le problème se résout de façon analogue au précédent, le début de la résolution étant absolument la même (jusqu'à la formule (4) du problème précédent). Mais pour le calcul de la partie nucléaire de l'élément matriciel, on ne peut plus se servir de la formule (4), car ici les états initial et final du noyau possèdent des moments nuls et $\mathbf{d}_{10} = 0$. En prenant le terme suivant du développement de l'exponentielle en puissances de $(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}})$, on obtient la partie nucléaire de l'élément matriciel :

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\int \Psi_1^{\text{noy}\,*}\sum_{\text{p}}(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}})(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{p}})\Psi_0^{\text{noy}}d\tau &= \frac{q_i q_k}{2}\int \Psi_1^{\text{noy}\,*}\sum_{\text{p}} x_{\text{p}i}x_{\text{p}k}\Psi_0^{\text{noy}}d\tau \\ &\equiv \frac{1}{6}q_i q_k Q_0\delta_{ik} = \frac{1}{6}Q_0 q^2 \end{aligned} \tag{1}$$

où

$$Q_0 = \int \Psi_1^{\text{noy}\,*}\sum_{\text{p}} r_{\text{p}}^2\Psi_0^{\text{noy}}d\tau, \tag{2}$$

et l'élément matriciel de la perturbation devient

$$V_{\nu n} = \frac{Q_0}{12\pi^2}\iint d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{e}}}\Psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}_{\text{e}})\Psi_0(r_{\text{e}})dV_{\text{e}}. \tag{3}$$

L'intégration par rapport à la variable $\mathbf{q}$ dans l'expression (3) donne

$$\int d^3q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\text{e}}} = (2\pi)^3\delta(\mathbf{r}_{\text{e}}),$$

et, par suite,

$$V_{\nu n} = \frac{2\pi}{3}\Psi_{\mathbf{k}}^*(0)\Psi_0(0)Q_0 \tag{4}$$

(comparer à l'expression (6) du problème précédent).

En utilisant la valeur (4) de l'élément matriciel, on obtient sans peine la distribution angulaire de l'électron éjecté et la probabilité totale de son éjection :

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{8\pi^3}{9}k|Q_0|^2|\Psi_{\mathbf{k}}^*(0)\Psi_0(0)|^2, \qquad w = \frac{32\pi^4}{9}k|Q_0|^2|\Psi_{\mathbf{k}}^*(0)\Psi_0(0)|^2 \tag{5}$$

(l'isotropie de la distribution $dw/d\Omega$ était évidente à priori).

En multipliant (5) par 2 (dans l'atome il y a deux électrons K), on obtient la probabilité de la transition $E0$ étudiée:

$$w_{E0} = \frac{64\pi^4}{9} k |Q_0|^2 |\Psi^*_{\mathbf{k}}(0)\Psi_0(0)|^2 \tag{6}$$

(notons que pour la transition $E0$ les parités des états initial et final doivent être les mêmes, sinon $Q_0 = 0$). En particulier, si l'électron éjecté est rapide : $k \gg Z$, alors $\Psi_{\mathbf{k}}(0) \approx (2\pi)^{-3/2}$ et la formule (6) donne

$$w_{E0} = \frac{8kZ^3}{9} |Q_0|^2. \tag{7}$$

11.84. L'hamiltonien du système comprenant le méson μ et l'électron (représentant l'un des électrons de la couche K) placés dans le champ coulombien du noyau de charge Z (on utilise le système d'unités atomique, la masse du muon $m_\mu = 207 m_e = 207$ u.a., le noyau est considéré comme ponctuel et infiniment lourd) est de la forme

$$\widehat{H} = -\frac{1}{2m_\mu}\Delta_\mu - \frac{Z}{r_\mu} - \frac{1}{2}\Delta_e - \frac{Z}{r_e} + \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_\mu|}. \tag{1}$$

Considérant que les dimensions de l'orbite muonique sont beaucoup plus petites que celles de l'électron, écrivons l'hamiltonien (1) sous la forme $\widehat{H} = \widehat{H}_\mu + \widehat{H}_e + \widehat{V}$, où

$$\widehat{H}_\mu = -\frac{1}{2m_\mu}\Delta_\mu - \frac{Z}{r_\mu}, \qquad \widehat{H}_e = -\frac{1}{2}\Delta_e - \frac{Z-1}{r_e}, \qquad \widehat{V} = \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_\mu|} - \frac{1}{r_e}.$$

Sans la perturbation $\widehat{V}$, le système peut être considéré comme constitué de deux sous-systèmes indépendants : électronique et muonique.

On note aussitôt que le calcul de l'effet Auger est absolument analogue à celui de la probabilité de la conversion interne (voir 11.82), car de façon formelle on peut assimiler le sous-système muonique au noyau. Aussi la solution du problème considéré est-elle identique à celle du problème 11.83, après substitution de Z en $Z-1$ dans la fonction d'onde de l'électron K et remplacement par des fonctions d'onde muoniques des états initial et final des fonctions d'onde nucléaires $\Psi^{\text{noy}}_{0,1}$.

Donnons la réponse définitive de la probabilité de l'effet Auger (P) dipolaire (par unité de temps), compte tenu de la présence de deux électrons K (comparer à la formule (7) du problème 11.82) :

$$w_P = \frac{32}{3} \frac{m^3 e^6}{\hbar^7} \frac{(Z-1)^3 e^2}{\hbar v} |\mathbf{d}_{10}|^2, \tag{2}$$

où v est la vitesse de l'électron et $\mathbf{d}_{10}$ l'élément matriciel du moment dipolaire du muon. En particulier, pour la transition muonique $2p \to 1s$, on a $|\mathbf{d}_{10}| = 4\sqrt{2}(2/3)^5 \hbar^2/Ze^2 m_\mu$, $v = (3Z^2 e^4 m_\mu/4m\hbar^2)^{1/2}$.

Vu que les dimensions de l'orbite muonique dans un état avec le nombre quantique principal n sont de l'ordre de grandeur de $a_{\mu n} \sim n^2/Zm_\mu$ u.a. et que la dimension de l'orbite d'un électron K est de l'ordre de $1/Z$, la condition de validité de l'expression

(2) se définit par l'inégalité $n^2 \ll m_\mu \approx 200$; si cette condition est satisfaite la vitesse des électrons éjectés est beaucoup plus grande que la vitesse atomique.

11.85. Si la transition d'Auger dipolaire est analogue au processus de conversion interne dans la transition dipolaire du noyau (voir 11.84), alors la transition d'Auger S, dans le cas où les états initial et final du muon ont un moment orbital $l = 0$, constitue l'analogue de la conversion de transition E_0 dans le noyau (voir 11.83).

De même que la solution du problème précédent était identique à celle de 11.82, ici, la solution est identique à celle de 11.83.

L'expression définitive de la probabilité de la transition étudiée est de la forme (compte tenu de la présence de deux électrons K)

$$w_{S(0\to 0)} = \frac{8k(Z-1)^3}{9}|Q_0|^2 \tag{1}$$

où

$$Q_0 = \int \Psi^*_{n_2 00}(r_\mu) r_\mu^2 \Psi_{n_1 00}(r_\mu) dV_\mu$$

(comparer aux formules (7) et (2) du problème 11.83).

Compte tenu de la forme explicite de la fonction d'onde Ψ_{nlm} d'un mésoatome hydrogénoïde, on trouve pour la transition muonique $2s \to 1s$, la valeur de l'intégrale pour $Q_0 = -16\sqrt{2}(2/3)^5 Z^{-2} m_\mu^{-2}$, et comme dans ce cas $k = (3Z^2 m_\mu/4)^{1/2}$, (1) s'écrit

$$\begin{aligned} w_S(2s \to 1s) &= \frac{2^{21}}{\sqrt{3}3^{11}} \frac{(Z-1)^3}{Z^3} \frac{1}{m_\mu^{7/2}} \text{ u.a.} \\ &= \frac{2^{21}}{\sqrt{3}\,3^{11}} \frac{(Z-1)^3}{Z^3} \left(\frac{m_e}{m_\mu}\right)^{7/2} \frac{m_e e^4}{\hbar^3} \sim 10^9 \text{ s}^{-1}. \end{aligned}$$

CHAPITRE 12

LE NOYAU ATOMIQUE

12.1. $U_{\text{coul}} = \dfrac{e^2}{R_0} = \dfrac{e^2}{a_0}\dfrac{a_0}{R_0} \approx 0,7$ MeV $\ll U_0 \approx 40$ MeV ($a_0 \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$ cm est le rayon de Bohr, $e^2/a_0 \approx 27$ eV).

Pour estimer l'énergie d'interaction des moments magnétiques de spin de deux nucléons, utilisons de la formule connue de l'électrodynamique classique de l'énergie d'interaction de deux moments magnétiques :

$$U_{\text{magn}} = \frac{(\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \boldsymbol{\mu}_2)R^2 - 3(\boldsymbol{\mu}_1 \cdot \mathbf{R})(\boldsymbol{\mu}_2 \cdot \mathbf{R})}{R^5}.$$

Etant donné que la grandeur caractéristique du moment magnétique du nucléon (du proton comme du neutron) est de l'ordre de $\mu_{\text{N}} \sim e\hbar/Mc$ (M étant la masse du proton), il vient

$$U_{\text{magn}} \sim \frac{\mu_{\text{N}}^2}{R_0^3} \sim \frac{e^2\hbar^2}{M^2c^2R_0^3} \equiv \frac{e^2\hbar^2}{m_e a_0^3}\frac{m_e}{M}\frac{1}{Mc^2}\frac{a_0^3}{R_0^3} \approx 10^{-2} \text{ MeV} \ll U_0 \quad (Mc^2 \approx 938 \text{ MeV}).$$

12.2. Par définition, on appelle moment magnétique μ_0 d'un système caractérisé par un moment total J (et par d'autres nombres quantiques) la valeur moyenne $\overline{\widehat{\mu}_z}$, ou $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ est l'opérateur moment magnétique du système dans l'état avec $J_z = J$, c'est-à-dire

$$\mu_0 = \langle J, J_z = J|\widehat{\mu}_z|J, J_z = J\rangle, \text{ avec } \overline{\widehat{\mu}_x} = \overline{\widehat{\mu}_y} = 0. \tag{1}$$

Dans le cas considéré, en posant $\widehat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{p}} + \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{n}})$,

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{orb}} + \widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{sp}} = \frac{1}{2}\widehat{\mathbf{L}} + \mu_{\text{p}}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{p}} + \mu_{\text{n}}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{n}} = \frac{1}{2}\widehat{\mathbf{L}} + (\mu_{\text{p}} + \mu_{\text{n}})\widehat{\mathbf{S}} + \frac{\mu_{\text{p}} - \mu_{\text{n}}}{2}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{p}} - \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\text{n}}) \tag{2}$$

(les moments magnétiques s'expriment en magnétons nucléaires, 1 magn. nucl. $= e\hbar/2Mc$; le coefficient $1/2$ dans l'expression de $\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{orb}}$ est liée au fait que, dans le

deutéron, les moments orbitaux du proton et du neutron sont les mêmes et valent la moitié du moment orbital du mouvement relatif, de sorte que $\widehat{\mathbf{L}}/2$ est l'opérateur moment orbital magnétique du proton dans le deutéron (en magnétons nucléaires)).

Dans l'état ${}^1L$ (c'est-à-dire pour un spin total du neutron et du proton nul, $S = 0$), $\overline{\widehat{\mathbf{S}}} = \overline{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{p}}} = \overline{\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{n}}} = 0$, $J \equiv L$. Alors, selon (1) et (2), on obtient $\mu({}^1L) = L/2$:

$$\mu({}^1S_0) = 0, \qquad \mu({}^1P_1) = 1/2, \qquad \mu({}^1D_2) = 1, \qquad \text{etc.}$$

Notons que, pour calculer les moments magnétiques des états ${}^3L_J$ triplets en spin ($S = 1$) du système proton-neutron, on a pour ces états $\overline{(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{p}} - \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{n}})} = 0$ (la fonction de spin de l'état avec $S = 1$ est symétrique, tandis que l'opérateur $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{p}} - \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{n}})$ est antisymétrique par rapport à la permutation des variables de spin du proton et du neutron), de sorte que de (1) et (2) on déduit que

$$\mu({}^3L_J) = \langle J, J_z = J, L, S | \frac{1}{2}\widehat{L}_z + (\mu_{\mathrm{p}} + \mu_{\mathrm{n}})\widehat{S}_z | J, J_z = J, L, S\rangle. \tag{3}$$

En utilisant le résultat obtenu dans le problème 3.54 du Tome I, (3) se transforme en

$$\mu({}^3L_J) = \frac{1}{2(J+1)}\{1,38J(J+1) - 0,38[L(L+1) - 2]\} \tag{4}$$

(on a tenu compte dans (4) du fait que $S = 1$ et on a procédé à la substitution des valeurs numériques de $\mu_{\mathrm{p,n}}$).

Selon (4), il vient

$$\mu({}^3S_1) = 0,88\ ; \quad \mu({}^3P_1) = 0,69\ ; \quad \mu({}^3P_0) = 0\ ; \quad \mu({}^3D_1) = 0,31.$$

12.3. Une particularité du deutéron est la faiblesse de l'énergie de liaison. En effet, $\varepsilon_{\mathrm{d}} = 2,2$ MeV est beaucoup plus petite que la grandeur $\hbar^2/\mu R_0^2 \approx 20$ MeV ($\mu = M/2$, M étant la masse du nucléon, $R_0 \approx 2 \cdot 10^{-13}$ cm le rayon d'action des forces nucléaires). Cela signifie que la probabilité est grande que le proton et le neutron se trouvent, dans le deutéron, hors d'action des forces nucléaires, et la fonction d'onde du système peut être représentée comme (comparer à 2.9 du Tome I)

$$\Psi \approx \sqrt{\frac{\kappa}{2\pi}}\frac{\mathrm{e}^{-\kappa r}}{r}\chi, \qquad \kappa = \sqrt{\frac{M\varepsilon_{\mathrm{d}}}{\hbar^2}}. \tag{1}$$

où χ est la fonction d'onde de spin. L'expression (1) n'est pas applicable dans le domaine d'action des forces nucléaires, mais l'approximation considérée s'appuie justement sur le fait qu'on peut négliger la contribution à l'intégrale de normalisation $\int |\Psi|^2 dV$ du domaine d'action des forces aussi bien pour la fonction d'onde exacte (inconnue !) qu'approchée (1) (dans ce dernier cas le lecteur est invité à apprécier par lui-même cette contribution). On a

$$\overline{r^k} = \int \Psi^* r^k \Psi dV = \frac{\kappa}{2\pi}\int r^{k-2}\mathrm{e}^{-2\kappa r} r^2 dr d\Omega = \frac{1}{(2\kappa)^k}\Gamma(k+1).$$

Les valeurs numériques sont ($\hbar^2/m_e a_0^2 \approx 27$ eV, $a_0 \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ cm) :

$$\frac{1}{2\kappa} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{M\varepsilon_d}} \equiv \frac{a_0}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}\frac{m_e}{M}\frac{1}{\varepsilon_d}} \approx 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ cm},$$

$$\overline{r} \approx 2,2 \cdot 10^{-13} \text{ cm}, \qquad \overline{r^2} \approx 10^{-25} \text{ cm}^2. \tag{2}$$

12.4. Par définition, on appelle moment quadrupolaire Q_0 du noyau dans un état caractérisé par un moment total J (et les autres nombres quantiques) la valeur moyenne (la sommation s'effectue sur tous les protons du noyau)

$$Q_0 = \langle J, J_z = J | \sum_{\text{p}} (3z_{\text{p}}^2 - r_{\text{p}}^2) | J, J_z = J \rangle. \tag{1}$$

Pour un système composé d'un proton et d'un neutron se trouvant dans un état $^1P_1$, l'expression (1) prend la forme

$$Q_0(^1P_1) = \frac{1}{4}\int \Psi^*(3z^2 - r^2)\Psi dV, \tag{2}$$

où $\Psi \equiv \Psi_{J=L=1,J_z=L_z=1,S=0} = f(r)Y_{11}(\mathbf{n})\chi_{S=0}$ est la fonction d'onde normée de l'état considéré, $\chi_{S=0}$ est la fonction d'onde de spin, $\chi^*_{S=0}\chi_{S=0} = 1$, $\mathbf{r_p} = \mathbf{r}/2$.

Après avoir écrit $(3z^2 - r^2) = r^2(3\cos^2\theta - 1)$ et effectué l'intégration

$$\int (3\cos^2\theta - 1)|Y_{11}|^2 d\Omega = \frac{3}{8\pi}\int (3\cos^2\theta - 1)\sin^2\theta d\Omega = -\frac{2}{5}, \tag{3}$$

l'expression (2) se ramène à la forme

$$Q_0(^1P_1) = -\frac{1}{10}\overline{r^2}, \tag{4}$$

où $\overline{r^2} = \int \Psi^* r^2 \Psi dV > 0$.

Le moment quadrupolaire du système proton-neutron dans les états $^1S_0$, $^3S_1$, $^3P_0$ est nul car, dans ces états, la densité moyenne de la charge est sphériquement symétriques.

12.5. Le moment quadrupolaire se calcule avec la formule (2) du problème précédent où, ici, la fonction d'onde Ψ est la fonction d'onde de l'état avec $J = L = S = 1$, $J_z = 1$. Elle prend la forme $\Psi = f(r)\widetilde{\Psi}_{J=L=S=1,J_z=1}$ où

$$\widetilde{\Psi}_{J=L=S=1,J_z=1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{Y_{11}(\mathbf{n})\chi_{1,0} - Y_{10}(\mathbf{n})\chi_{1,1}\} \tag{1}$$

est la partie spin-angulaire de la fonction d'onde d'état étudié, χ_{S,S_z} la fonction d'onde de spin de l'état à deux nucléons avec $S = 1$, en représentation S_z. Pour déterminer la forme explicite de (1), on a utilisé les coefficients de Clebsch-Gordan.

Notons que la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde de l'état avec $J = L = S = 1$ peut être écrite sous une forme élégante :

$$\widetilde{\Psi}_{J=L=S=1,J_z=1} = C(\widehat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n})\chi, \qquad |C|^2 = 3/8\pi, \tag{2}$$

où $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$, $\widehat{\mathbf{S}}$ étant l'opérateur du spin total $S = 1$; pour $\chi^*\chi = 1$ et la valeur mentionnée de $|C|^2$, la fonction d'onde (2) est normée à l'unité. Pour que la fonction d'onde (2) décrive l'état avec $J_z = 1$, il faut choisir $\chi = \chi_{1,1}$ (voir à ce propos 12.15).

Une fois établie la forme de la fonction d'onde de l'état considéré, on obtient

$$Q_0(^3P_1) = \frac{1}{20}\overline{r^2}, \tag{3}$$

Soulignons que les valeurs obtenues des moments quadrupolaires des états $^1P_1$ et $^3P_1$ diffèrent de signe. L'estimation des valeurs numériques de Q_0 pour les états considérés du deutéron peut être obtenue en se servant de $\overline{r^2} \approx 10^{-25}$ cm^2 (comparer à 12.3).

12.6. L'isospin est une grandeur vectorielle dans un espace tridimensionnel abstrait, dont les propriétés formelles sont analogues à celles du moment (ou du spin) d'un espace tridimensionnel habituel.

L'isospin du nucléon est $t_N \equiv \tau = 1/2$. Le rôle des opérateurs des composantes de l'isospin du nucléon $\widehat{\boldsymbol{\tau}}$ est joué par les matrices (comparer au cas du spin 1/2)

$$\widehat{\tau}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{\tau}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{\tau}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Dans ce cas les états physiques du nucléon, proton et neutron, sont décrits par les fonctions propres de l'opérateur $\widehat{\tau}_3$, de sorte que[1]

$$\psi_{\mathrm{p}} \equiv \psi_{\tau_3=+1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \psi_{\mathrm{n}} \equiv \psi_{\tau_3=-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

et les valeurs propres $\tau_3 = \pm 1/2$ définissent la charge électrique de la particule $q = \frac{1}{2}(1 + 2\tau_3)$ (en unités de charge du proton).

Considérant l'analogie existant entre les propriétés de l'isospin et du spin ainsi que le résultat obtenu dans le problème 5.17 du Tome I, on trouve aisément la forme des fonction d'onde d'isospin Ψ_{TT_3} d'un système de deux nucléons correspondant à des valeurs déterminées de l'isospin total T et de sa projection T_3 :

$$\begin{aligned}
\Psi_{1,1} &= \psi_{1/2,1/2}(1)\psi_{1/2,1/2}(2) \equiv \psi_{\mathrm{p}}(1)\psi_{\mathrm{p}}(2), \\
\Psi_{1,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{1/2,1/2}(1)\psi_{1/2,-1/2}(2) + \psi_{1/2,-1/2}(1)\psi_{1/2,1/2}(2)\} \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{\mathrm{p}}(1)\psi_{\mathrm{n}}(2) + \psi_{\mathrm{n}}(1)\psi_{\mathrm{p}}(2)\}, \\
\Psi_{1,-1} &= \psi_{1/2,-1/2}(1)\psi_{1/2,-1/2}(2) \equiv \psi_{n}(1)\psi_{n}(2), \\
\Psi_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{1/2,1/2}(1)\psi_{1/2,-1/2}(2) - \psi_{1/2,-1/2}(1)\psi_{1/2,1/2}(2)\} \\
&\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_{\mathrm{p}}(1)\psi_{\mathrm{n}}(2) - \psi_{\mathrm{n}}(1)\psi_{\mathrm{p}}(2)\}.
\end{aligned}$$

1 Dans littérature, on se sert également de la classification "inverse" dans laquelle $\tau_3 = +1/2$ correspond au neutron et $\tau_3 = -1/2$ au proton.

Notons que dans les états avec une valeur déterminée de T et avec $T_3 = 0$, chacun des nucléons se trouve non pas dans un état de charge déterminé mais a une probabilité $1/2$ d'être dans un état proton et dans un état neutron.

12.7. Compte tenu de la symétrie d'isospin des forces nucléaires, il faut considérer le proton et le neutron comme des particules identiques, les nucléons se trouvant dans des états de charge différents se distinguant par la valeur de la composante t_3 du spin isotopique. Le nucléon étant un fermion, la fonction d'onde d'un système de nucléons doit être antisymétrique par rapport à la permutation de toutes les variables (d'espace, de spin et d'isospin) de deux nucléons quelconques (principe généralisé de Pauli).

Etant donné que pour un système à deux nucléons :

a) la permutation des coordonnées spatiales est équivalente à une inversion des coordonnées par rapport au centre de masse du système, la symétrie des fonctions des coordonnées, avec un L donné, coïncide avec la parité $(-1)^L$,

b) la symétrie de la fonction de spin correspondant à un état de spin total S, par rapport à la permutation des variables de spin, est donnée par le facteur $(-1)^{S+1}$,

c) la symétrie de la fonction d'onde de l'isospin de façon analogue à celle de spin est donnée par le facteur $(-1)^{T+1}$,

la fonction d'onde d'état d'un système de deux nucléons Ψ_{LST} dans des valeurs déterminées de L, S, T avec la permutation des variables des nucléons est multipliée par $(-1)^{L+S+T}$, de sorte que l'exigence d'antisymétrie de la fonction d'onde entraîne que

$$(-1)^T = (-1)^{L+S+1}. \tag{1}$$

La relation (1) définit les valeurs possibles de T (0 ou 1) dans des états avec L et S donnés. Ainsi, pour $S = 1$ et un L pair (comme c'est le cas, par exemple, pour un deutéron) l'isospin des deux nucléons vaut $T = 0$, etc.

La partie de la fonction d'onde d'isospin du deutéron avec $T = 0$, est donnée dans le problème précédent (fonction $\Psi_{0,0}$).

12.8. L'opérateur cherché, étant un scalaire dans l'espace d'isospin, ne peut être exprimé qu'au moyen des opérateurs scalaires suivants

$$1, \widehat{\boldsymbol{\tau}}_1^2, (\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1^2)^2, \ldots, 1, \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2^2, (\widehat{\boldsymbol{\tau}}_2^2)^2, \ldots, (\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2), (\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2)^2, \ldots \tag{1}$$

($\widehat{\boldsymbol{\tau}}_{1,2}$ étant les opérateurs d'isospin des nucléons individuels).

Il est aisé de voir que de tous les opérateurs de (1) seuls deux sont indépendants : 1 et $\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2$. En effet, $\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1^2 = \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2^2 = 3/4$, et ils sont donc des multiples de l'opérateur unité, tandis que l'opérateur $(\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2)^2$ s'exprime linéairement au moyen de 1 et $\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2$:

$$(\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2)^2 = \frac{3}{16} - \frac{1}{2}(\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2)$$

(comparer au problème 5.20 du Tome I).

En conséquence, la forme la plus générale de l'opérateur $\widehat{U}$ d'interaction de deux nucléons qui conserve l'isospin (plus précisément, qui soit isotopiquement invariante)

est la suivante :

$$\widehat{U} = \widehat{V}_1 + \widehat{V}_2(\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2) \tag{2}$$

où $\widehat{V}_{1,2}$ sont les opérateurs indépendants des variables de l'isospin (ce sont des opérateurs qui, dans les espaces des coordonnées et du spin, sont symétriques par rapport à la permutation des nucléons).

Comme l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2$ dans un état avec une valeur déterminée de l'isospin total T possède également une valeur déterminée égale à

$$\text{Valeur propre de } (\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2) = \begin{cases} 1/4 \text{ dans l'état avec } T = 1, \\ -3/4 \text{ dans l'état avec } T = 0, \end{cases}$$

on voit que les opérateurs d'interaction nucléon-nucléon dans un état avec une valeur déterminée $T = 0$; 1, s'expriment de la façon suivante en fonction des opérateurs $\widehat{V}_1$ et $\widehat{V}_2$ introduits dans (2) :

$$\widehat{U}(T=0) = \widehat{V}_1 - \frac{3}{4}\widehat{V}_2, \qquad \widehat{U}(T=1) = \widehat{V}_1 + \frac{1}{4}\widehat{V}_2.$$

Il est de même aisé d'exprimer les opérateurs $\widehat{V}_{1,2}$ en termes de $\widehat{U}(T = 0\,;1)$ et d'écrire (2) sous la forme

$$\widehat{U} = \frac{\widehat{U}_0 + 3\widehat{U}_1}{4} + (\widehat{U}_1 - \widehat{U}_0)(\widehat{\boldsymbol{\tau}}_1 \cdot \widehat{\boldsymbol{\tau}}_2), \qquad \widehat{U}_{0,1} \equiv \widehat{U}(T = 0\,;1).$$

12.9. Dans un système à deux nucléons, l'interaction coulombienne n'est différente de zéro que dans le cas où les deux nucléons se trouvent dans l'état proton (état d'isospin).

Compte tenu de la relation entre l'opérateur charge du nucléon et la composante t_3 de l'isospin

$$\widehat{q} = \frac{e}{2}(1 + 2\widehat{\tau}_3),$$

il n'est pas difficile de voir que l'opérateur d'interaction coulombienne peut être écrit sous la forme

$$U_{\text{coul}} = \frac{e^2}{4|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}(1 + 2\widehat{\tau}_3^{(1)})(1 + 2\widehat{\tau}_3^{(2)}).$$

12.10. Le système de deux protons, de même que celui de deux neutrons, possède un isospin $T = 1$. Aussi l'existence d'un état lié dans ces systèmes signifierait-elle qu'il existe un état avec $T = 1$. Cet état avec $T = 1$ et $T_3 = 0$ aurait dû aussi se manifester dans le système "proton + neutron". Mais l'expérience montre que l'unique état lié dans le système "proton + neutron" – le deutéron – a un isospin $T = 0$ (voir, par exemple, 12.7), de sorte que l'état lié avec $T = 1$ n'existe pas, ce que confirme l'assertion du problème.

On invite un lecteur préparé à comprendre si le résultat reste le même si l'on tient compte d'une brisure faible de la symétrie isotopique des forces nucléaires, et compte

tenu du fait que, dans le système "proton + neutron", il existe un niveau virtuel de faible énergie avec $T = 1$.

12.11. Compte tenu du résultat du problème 12.7, on note que le système "proton + neutron", dans les états ${}^3P_1$ et ${}^1P_1$, possède des valeurs différentes de l'isospin (respectivement $T = 1$ et $T = 0$). Cela signifie qu'une interaction conduisant à l'état considéré (la superposition ${}^1P_1 + {}^3P_1$) ne conserve pas l'isospin, c'est-à-dire n'est pas isotopiquement invariante.

Vu que dans l'état ${}^1P_1 + {}^3P_1$, le spin total ne possède également pas de valeur déterminée, une interaction conduisant à un tel état ne conserve pas non plus le spin. En guise d'exemple d'une telle interaction, on peut mentionner

$$\widehat{U} = V(r)(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{p}} - \widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{n}})\widehat{\mathbf{l}}. \tag{1}$$

De (1) on voit directement pourquoi cette interaction ne satisfait pas l'invariance isotopique : elle change de signe avec la permutation de deux nucléons (du proton et du neutron).

12.12. Si les deux nucléons sont soit deux protons soit deux neutrons, avec ces états de charge du système à deux nucléons, l'interaction est la même et est décrite par l'opérateur

$$\widehat{U}_{\mathrm{pp}} = \widehat{U}_{\mathrm{nn}} = \widehat{V}_1 + \frac{1}{4}\widehat{V}_2. \tag{1}$$

Pour le système "proton + neutron", on a

$$\widehat{U}_{\mathrm{pn}} = \widehat{V}_1 - \frac{1}{4}\widehat{V}_2. \tag{2}$$

La différence entre (1) et (2) témoigne du fait que l'interaction étudiée n'est pas invariante d'isospin (dans l'espace d'isospin, c'est une superposition du scalaire $\widehat{V}_1$ et de la composante du tenseur $\widehat{V}_2\widehat{\tau}_3^{(1)}\widehat{\tau}_3^{(2)}$; c'est n'est donc pas un scalaire, comme l'exigerait l'invariance isotopique).

En même temps, l'égalité $\widehat{U}_{\mathrm{pp}} = \widehat{U}_{\mathrm{nn}}$ montre l'indépendance par rapport à la charge de l'interaction considérée.

12.13. L'ensemble des données expériementales sur les propriétés du deutéron montre que son état est une superposition ${}^3S_1 + {}^3D_1$, de sorte que le moment orbital L ne présente pas de valeur déterminée, comme dans le cas de forces centrales indépendantes du spin.

On remarque toutefois que des trois potentiels donnés dans l'énoncé, seul le troisième, décrivant des forces tensorielles, peut conduire à l'état du deutéron mentionné plus haut (superposition d'ondes S et D).

En effet, le premier des potentiels est central, bien que l'intensité de l'interaction dépende de la valeur S du spin total :

$$\widehat{U}_S = \begin{cases} -3V(r) \text{ pour l'état avec } S = 0, \\ V(r) \text{ pour l'état avec } S = 1. \end{cases}$$

Pour ce potentiel les constantes du mouvement sont le moment orbital $\mathbf{L}$ et le spin total $\mathbf{S}$ séparément.

Dans le second potentiel, il n'y pas de conservation de $\mathbf{L}$ et $\mathbf{S}$ séparément mais seulement du moment total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Néanmoins, comme le premier potentiel, il ne peut conduire à l'apparition de l'état du deutéron observé (superposition d'ondes S et D). La raison vient du fait que, pour ce potentiel, même si les vecteurs $\mathbf{L}$ et $\mathbf{S}$ ne se conservent pas, les carrés de ces derniers sont des constantes du mouvement (les opérateurs $\widehat{\mathbf{L}}^2$ et $\widehat{\mathbf{S}}^2$ commutent avec l'opérateur interaction).

En ce qui concerne le dernier potentiel, il ne conserve ni $\mathbf{L}$ ni $\mathbf{L}^2$ et on peut donc l'utiliser (à côté du potentiel central) pour décrire le deutéron. Notons que le potentiel des forces tensorielles, sans conserver $\mathbf{S}$, conserve tout de même $\mathbf{S}^2$.

Tous les potentiels étudiés conservent aussi bien le moment total $\widehat{\mathbf{J}}$ (et $\widehat{\mathbf{J}}^2$) que la parité.

12.14. En utilisant la formule connue

$$E_0^{(1)} = \int \Psi_0^* \widehat{V} \Psi_0 d\tau, \qquad \Psi_0 = \psi_0(r)\chi_S$$

(χ_S est la partie de spin de la fonction d'onde correspondant à une valeur déterminée du spin total S ; en fait il s'agit de l'état avec $S = 1$, car pour $S = 0$ les forces tensorielles sont identiquement nulles), récrivons-la sous la forme ($\widehat{V} \equiv \widehat{U}_T$)

$$E_0^{(1)} = \int V(r)\psi_0^*(r)[6n_i n_k - 2\delta_{ik}]\psi_0(r)dv \; \chi_S^* \widehat{S}_i \widehat{S}_k \chi_S. \tag{1}$$

Il est manifeste que

$$\int V(r)\psi_0^*(r)[6n_i n_k - 2\delta_{ik}]\psi_0(r)dv \equiv C\delta_{ik} \tag{2}$$

(il est important que la fonction d'onde $\psi_0(r)$ ait la symétrie sphérique, car, pour l'état non perturbé, $L = 0$). En effectuant dans (2) une convolution sur les indices i et k, on obtient $C = 0$ et, en vertu de (1) et (2), il vient $E_0^{(1)} = 0$.

12.15. Le problème consiste à démontrer que la fonction d'onde donnée est la forme la plus générale de la fonction correspondant à l'état du deutéron qui est une superposition ${}^3S_1 + {}^3D_1$.

Notons avant tout le fait évident que la fonction d'onde

$$\Psi_1 = f_0(r)\chi \tag{1}$$

décrit un état avec $L = 0$ (la fonction d'onde a la symétrie sphérique), $S = 1$ et, donc, correspond au moment total $J = 1$, autrement dit elle représente l'état $^3S_1$. Démontrons que la fonction d'onde

$$\Psi_2 = f_1(r)\widehat{S}_{12}\chi \equiv f_1(r)\{6(\widehat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{n})^2 - 2\widehat{\mathbf{S}}^2\}\chi \tag{2}$$

correspond aux nombres quantiques suivants : $S = 1$ (assertion évidente), $L = 2$ et $J = 1$, c'est-à-dire décrit l'onde $^3D_1$ dans le deutéron. Ecrivons (2) sous la forme

$$\Psi_2 = f_1(r)\{6n_in_k - 2\delta_{ik}\}\widehat{S}_i\widehat{S}_k\chi. \tag{3}$$

La partie angulaire de cette fonction d'onde $T_{ik} = 6n_in_k - 2\delta_{ik}$ est un tenseur symétrique de second ordre avec une trace nulle, $T_{ii} = 0$, de sorte qu'en s'appuyant sur la solution du problème 3.57 du Tome I (voir également 3.68) on est en mesure d'affirmer que la fonction d'onde (2) décrit de fait un état de moment orbital $L = 2$.

Il reste à démontrer que la fonction d'onde (2) correspond au moment total $J = 1$. Faisons agir l'opérateur $\widehat{\mathbf{J}}^2 = (\widehat{\mathbf{L}} + \widehat{\mathbf{S}})^2$ sur la fonction Ψ_2 :

$$\widehat{\mathbf{J}}^2\Psi_2 \equiv \widehat{J}_i\widehat{J}_i f_1(r)\widehat{S}_{12}\chi. \tag{4}$$

Vu que l'opérateur $f_1(r)\widehat{S}_{12}$ est un opérateur scalaire, il commute manifestement avec les opérateurs des composantes du moment

$$[\widehat{J}_i, f_1(r)\widehat{S}_{12}] = 0,$$

et avec l'opérateur $\widehat{\mathbf{J}}^2$, de sorte que (4) peut être écrit sous la forme

$$\widehat{\mathbf{J}}^2\Psi_2 = f_1(r)\widehat{S}_{12}\widehat{\mathbf{J}}^2\chi. \tag{5}$$

Ensuite, puisque χ ne dépend pas des angles, $\widehat{L}_i\chi \equiv 0$, et

$$\widehat{\mathbf{J}}^2\chi = (\widehat{\mathbf{L}}^2 + 2\widehat{\mathbf{L}}\cdot\widehat{\mathbf{S}} + \widehat{\mathbf{S}}^2)\chi = \widehat{\mathbf{S}}^2\chi = 2\chi. \tag{6}$$

Compte tenu de (5) et (2), il vient $\widehat{\mathbf{J}}^2\Psi_2 = 2\Psi_2$, c'est-à-dire que la fonction d'onde Ψ_2 décrit un état avec $J = 1$ (et avec $L = 2$, $S = 1$).

Enfin, en choisissant χ sous la forme χ_{s_z}, c'est-à-dire sous une fonction propre de l'opérateur $\widehat{S}_z$, on se convainc sans peine que

$$\widehat{J}_z\Psi_1 = S_z\Psi_1, \qquad \widehat{J}_z\Psi_2 = S_z\Psi_2,$$

c'est-à-dire qu'avec ce choix de χ, la fonction d'onde étudiée $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ est fonction propre de l'opérateur $\widehat{J}_z$ avec la valeur propre $J_z = S_z$.

Notons en conclusion qu'on a l'égalité

$$\langle\mathbf{J}\rangle = \int \Psi^*\widehat{\mathbf{J}}\Psi d\tau \equiv \chi^*\widehat{\mathbf{S}}\chi \qquad (\chi^*\chi = 1).$$

12.16. En écrivant la fonction d'onde du deutéron sous la forme $\Psi = \Psi_S + \Psi_D$ avec

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1, \qquad \int |\Psi_S|^2 d\tau = 1 - w, \qquad \int |\Psi_D|^2 d\tau = w$$

(la forme explicite de la fonction d'onde $\Psi_{S,D}$ a été étudiée dans 12.15), on obtient sans peine

$$\overline{\boldsymbol{\mu}} = \int \Psi_S^* \boldsymbol{\mu} \Psi_S d\tau + \int \Psi_D^* \boldsymbol{\mu} \Psi_D d\tau. \tag{1}$$

On a tenu compte ici du fait que les termes d'interférence de (1) sont nuls :

$$\int \Psi_S^* \boldsymbol{\mu} \Psi_D d\tau = \int \Psi_D^* \boldsymbol{\mu} \Psi_S d\tau = 0 \tag{2}$$

(les égalités (2) s'avèrent évidentes si l'on tient compte de la forme explicite de $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$, voir 12.2, de l'orthogonalité des fonctions d'onde

$$\int \Psi_S^* \Psi_D d\tau = 0$$

et de la condition $\widehat{\mathbf{L}} \Psi_S \equiv 0$).

Le corollaire direct de (1) est l'expression de μ_d donnée dans l'énoncé.

Dans le cas du moment quadrupolaire, la situation change, car le terme d'interférence n'est pas nul :

$$\frac{1}{4} \left\{ \int \Psi_S^* (3z^2 - r^2) \Psi_D d\tau + \int \Psi_D^* (3z^2 - r^2) \Psi_S d\tau \right\} \neq 0 \tag{3}$$

(comparer à 12.4).

De plus, étant donnée la petitesse de la contribution de l'onde D au deutéron, on doit s'attendre à ce que sa contribution au moment quadrupolaire

$$\frac{1}{4} \int \Psi_D^* (3z^2 - r^2) \Psi_D d\tau$$

soit sensiblement plus petite que celle du terme d'interférence (3). Le signe de ce dernier est fonction de la nature des forces tensorielles (d'attraction ou de répulsion). Comme le montre une analyse plus poussée, les forces tensorielles ont un caractère attractif.

12.17. Si l'invariance d'isospin des forces nucléaires était une loi stricte de la nature (il s'agit en fait ici d'une forme de symétrie plus basse des forces nucléaires, que l'indépendance de charge), toutes les propriétés des noyaux du tritium et de l'hélium ^{3}He – leurs masses (comme celles du proton et du neutron), leurs niveaux d'énergie et leurs nombres quantiques – seraient identiques et la désintégration β serait interdite par la loi de conservation de l'énergie. La brisure de cette invariance se manifestant dans la différence des masses M_n et M_p est en rapport avec l'interaction électromagnétique et sa grandeur est faible.

La violation de l'indépendance de charge des forces nucléaires s'exprime dans la différence de masses des noyaux ^{3}H et ^{3}He, et des énergies au repos (Mc^2) de ces noyaux.

Cette différence est liée à deux facteurs : la différence des masses M_n et M_p et l'énergie d'interaction coulombienne des protons au sein du noyau ^{3}He. Il est manifeste que

$$[M(^3\mathrm{H}) - M(^3\mathrm{He})]c^2 = (M_n - M_p)c^2 - \int \Psi^* \frac{e^2}{r} \Psi d\tau \tag{1}$$

où Ψ est la fonction d'onde du noyau ^{3}He, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{p_1} - \mathbf{r}_{p_2}$. Comme

$$m_e c^2 + \varepsilon_0 = [M(^3\mathrm{H}) - M(^3\mathrm{He})]c^2, \tag{2}$$

selon (1) et (2), on a :

$$\overline{\frac{1}{r}} = \frac{(M_n - M_p)c^2 - m_e c^2 - \varepsilon_0}{e^2/a_0} \frac{1}{a_0} \approx \frac{1}{1,9 \cdot 10^{-13}} \text{ cm}^{-1} \tag{3}$$

($a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8}$ cm est le rayon de Bohr, $e^2/a_0 \approx 27$ eV).

La valeur (3) obtenue permet d'estimer les dimensions des noyaux étudiés : $R \approx \overline{1/r}^{-1} \approx 1,9 \cdot 10^{-13}$ cm.

12.18. Sur la base des considérations générales exprimées dans le problème précédent et compte tenu de la valeur $U_{coul} = 3(Ze)^2/5R$ de l'énergie électrostatique d'une sphère régulièrement chargée (charge Ze) de rayon R, on obtient

$$\varepsilon_0 = -\Delta + \frac{3(2Z+1)e^2}{5r_0(2Z+1)^{1/3}}, \tag{1}$$

où $\Delta = (M_n - M_p)c^2 \approx 1,29$ MeV, tandis que le dernier terme représente la différence de U_{coul} entre deux sphères de rayon $R = r_0 A^{1/3}$ et de charges $(Z+1)e$ et Ze avec $A = 2Z + 1$.

D'après (1),

$$r_0 = \frac{3(2Z+1)e^2}{5(\varepsilon_0 + \Delta)(2Z+1)^{1/3}}. \tag{2}$$

En se basant sur les données de la désintégration β de ^{27}Si, la valeur numérique de (2) est $r_0 \approx 1,6 \cdot 10^{-13}$ cm.

12.19.

$$r_0 = \frac{3(2Z+1)e^2}{5(\varepsilon_0 + \Delta)A^{1/3}} \approx 1,3 \cdot 10^{-13} \text{ cm}. \tag{1}$$

Dans (1), A et Z sont les nombres de nucléons et de protons au sein du noyau qui se désintègre ; ici $A = 34$; $Z = 17$.

12.20. Les niveaux d'énergie individuels et des fonctions propres associées à partir de l'équation de Schrödinger

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - U_0 + \frac{1}{2}kr^2 \right\} \Psi = E\Psi$$

ont été trouvés dans les problèmes 4.23 et 4.25 du Tome I.

Les niveaux d'énergie sont donnés par l'expression $E_N = -U_0 + \hbar\omega(N + 3/2)$; $\omega = \sqrt{k/M}$, $N = 2n_r + l$, $N = 0, 1, 2, \ldots$ A chaque niveau de N donné correspondent des états individuels avec un moment orbital $l = N, N-2, \ldots, 1(0)$; autrement dit, il y a dégénérescence accidentelle. La multiplicité du niveau vaut

$$G(N) = \frac{(N+1)(N+2)}{2}.$$

La fig. 4 représente les niveaux individuels pour le potentiel étudié. A côté, on a donné les nombres : $G(N)$, multiplicité du niveau ; $n(N) = 2G(N)$, nombre maximal de nucléons d'état de charge déterminé (de protons ou de neutrons) qui peuvent occuper en même temps le niveau concerné (le facteur 2 supplémentaire par rapport à $G(N)$ est lié au degré de liberté du spin) ; $M(N)$, nombre maximal de nucléons d'état de charge déterminé qui peuvent occuper toutes les couches, depuis la couche inférieure, jusqu'à la couche étudiée ; il est clair que $M(N+1) = M(N) + n(N+1)$. Les nombres $M(N)$ trouvés correspondant aux nombres de nucléons qui remplissent complètement les couches (à commencer par la couche inférieure) : $2, 8, 20, 40, 70, 112, 168, \ldots$ sont les valeurs des nombres magiques du modèle considéré.

N		$G(N)$	$n(N)$	$M(N)$
6	$4s, 3d, 2g, 1i$	28	56	168
5	$3p, 2f, 1h$	21	42	112
4	$3s, 2d, 1g$	15	30	70
3	$2p, 1f$	10	20	40
2	$2s, 1d$	6	12	20
1	$1p$	3	6	8
0	$1s$	1	2	2

Figure 4

La particularité du potentiel de l'oscillateur réside dans la dégénérescence accidentelle des niveaux. Si l'on modifie légèrement ce potentiel, la dégénérescence accidentelle est levée, et il se produit une décomposition des niveaux (chaque niveau se scinde en un nombre de sous-niveaux correspondant au nombre de valeurs de l du niveau non perturbé caractérisé par le nombre quantique N). Ce fait est illustré par la fig. 5 où schématiquement on donne la décomposition des niveaux d'un hamiltonien non perturbé pour les valeurs de $N = 3$ et $N = 4$. L'ordre dans lequel se disposent les sous-niveaux suivant les valeurs de Z dépend de la forme de δU.

Dans ce modèle, qui ne tient pas compte de l'interaction spin-orbite, la prévision des valeurs des moments totaux J des états fondamentaux de noyaux est très imprécise, vu la grande multiplicité des niveaux J. On comprend aisément que la la parité est absolument déterminée, par le fait que la parité des états individuels $(-1)^l$ du modèle

étudié vaut $(-1)^N$, et que la parité est un nombre quantique multiplicatif. C'est ainsi que pour l'état fondamental du noyau $^{11}_{5}\mathrm{B}$, le modèle permet de prévoir une parité négative, et pour celui du noyau $^{17}_{6}\mathrm{O}$ une parité positive, etc.

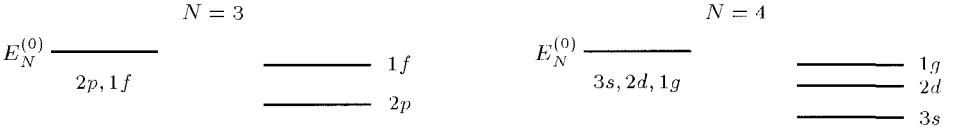

Figure 5

12.21. Pour un potentiel central quelconque, les niveaux d'une particule douée de spin ne dépendent pas de son état de spin et ne se déterminent qu'en fonction des nombres quantiques n_r, l (mais pas de l_z, s_z). Un niveau (pour $s = 1/2$) possède la multiplicité $2(2l+1)$ (pour le potentiel étudié de l'oscillateur on a une dégénérescence accidentelle, car $E_{n_r l} \equiv E(2n_r + l) \equiv E_N$).

En présence d'une interaction spin-orbite, un niveau avec une valeur donnée de l se décompose en deux niveaux correspondant aux valeurs $j = l + 1/2$ et $j = l - 1/2$ du moment total de la particule (exception faite pour les niveaux avec $l = 0$). Dans ce cas, les "bons" nombres quantiques sont : le moment total j, sa projection j_z ainsi que la parité et, avec cette dernière, le moment orbital l, vu que $\widehat{\mathbf{l}}^2$ (mais pas les projections $\widehat{l}_i$) commute avec l'hamiltonien. Les fonctions propres de l'hamiltonien peuvent être représentées sous la forme

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = f(r)\Psi_{jlj_z}(\mathbf{n}),$$

où les fonctions spin-angulaires Ψ_{jlj_z} ont été discutées dans les problèmes 5.41 et 5.42 du Tome I.

Il est aisé d'obtenir la solution du problème si l'on remarque que l'opérateur $\widehat{\mathbf{l}} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}}$ possède des valeurs déterminées dans les états de la particule avec des valeurs déterminées de j et l :

$$\widehat{\mathbf{l}} \cdot \widehat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{cases} l & \text{dans l'état avec } j = l + 1/2, \\ -l - 1 & \text{dans l'état avec } j = l - 1/2, \end{cases} \tag{1}$$

de sorte que l'interaction spin-orbite considérée ne dépend pas de r. On saisit aussitôt qu'indépendamment de la forme du potentiel central $U(r)$, les niveaux d'énergie $E_{n_r l}$ dans ce potentiel, sous l'effet de l'interaction spin-orbite, se dédoublent en deux sous-niveaux, le déplacement de chacun de ces sous-niveaux se déterminant par l'expression

$$\Delta E_{lj} = \begin{cases} -\alpha l & \text{dans l'état avec } j = l + 1/2, \\ \alpha(l+1) & \text{dans l'état avec } j = l - 1/2. \end{cases} \tag{2}$$

Les niveaux d'énergie dans ce modèle sont donnés par l'expression

$$E_{n_r l} = -U_0 + \hbar\omega(2n_r + l + 3/2) + \Delta E_{lj} \tag{3}$$

(pour éviter les ambiguïtés, soulignons que (3) représente la solution exacte du modèle étudié et non pas le résultat d'un calcul de perturbations, de sorte qu'il n'y a aucune restriction sur la grandeur ΔE_{lj}).

Notons deux propriétés de la décomposition des niveaux :

1) l'amplitude totale de la décomposition $\Delta E_l = |E_{l,j=l+1/2} - E_{l,j=l-1/2}| \sim (2l+1)\alpha$ croît avec l ;
2) la valeur moyenne du déplacement des niveaux, compte tenu de leurs poids statistiques $(2j+1)$, est nulle, de sorte que

$$\sum_{j=l\pm 1/2} (2j+1)\Delta E_{lj} = 0.$$

Sur la fig. 6, on a représenté à gauche la décomposition du niveau $N = 2$ d'un oscillateur non perturbé, et à droite on a donné l'image des niveaux individuels inférieurs les plus bas dans le cadre du modèle étudié.

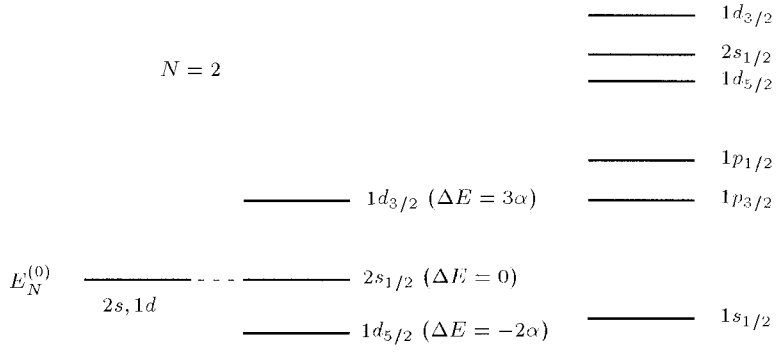

Figure 6

Dans ce modèle l'état fondamental du noyau est défini par la répartition des nucléons suivant les niveaux individuels inférieurs, compte tenu du principe de Pauli ; le moment total J et la parité P des nucléons des couches pleines valent $J^P = 0^+$; les nombres quantiques d'un état "vacant" sont identiques à ceux du niveau à une particule correspondant (idem pour deux ou plusieurs vacances). On peut alors formuler les prévisions suivantes en ce qui concerne le moment total et la parité des états fondamentaux des noyaux spécifiés :

1) pour les noyaux ^{12}C, ^{14}C, ^{16}O, ^{40}Ca, on a $J^P = 0^+$ (ces noyaux n'ont que des couches pleines) ;
2) les noyaux ^{13}N, ^{17}O, ^{27}Al, ^{13}C possèdent, en plus des couches pleines, un nucléon (proton ou neutron) ou une vacance définissant J^P pour ces noyaux : $(1/2)^-$, $(5/2)^+$, $(5/2)^+$, $(1/2)^-$ respectivement ;
3) les prévisions du modèle concernant le moment (mais non la parité) des noyaux ^{6}He, ^{6}Li, ^{10}B ne sont pas univoques. C'est ainsi que pour le noyau ^{6}Li ayant en plus de la couche pleine $(1s)^4$, un proton et un neutron dans l'état $1p_{3/2}$, selon le modèle, J^P peut prendre l'une des valeurs suivantes : 3^+, 2^+, 1^+, 0^+. La prévision

est absolument analogue pour le noyau ^{10}B ayant une vacance protonique et une vacance neutronique sur la couche $1p_{3/2}$. Le noyau ^{6}He possède deux neutrons dans l'état $1p_{3/2}$ (en plus de la couche pleine $(1s)^4$) et, selon le modèle, les valeurs possibles de J^P sont 2^+ et 0^+ (les valeurs 3^+ et 1^+ sont interdites par le principe de Pauli). Si l'on tient compte du phénomène des *paires* de Cooper, alors pour le noyau ^{6}He, la prévision de J^P devient univoque : $J^P = 0^+$.

12.22. Les fonctions propres de l'hamiltonien

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - U_0 + \frac{1}{2}kr^2 - \alpha r^2\ \widehat{\mathbf{l}}\cdot\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$$

peuvent être choisies comme fonctions propres des opérateurs $\widehat{\mathbf{j}}^2$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$, $\widehat{j}_z$. Dans ce cas la dépendance spin-angulaire des fonctions propres $\Psi_E(\mathbf{r}) = f(r)\Psi_{jlj_z}(\mathbf{n})$ se détermine de façon univoque (pour les fonctions d'onde Ψ_{jlj_z} voir les problèmes 5.41 et 5.42 du Tome I), tandis que la partie radiale de la fonction d'onde est solution de l'équation de Schrödinger

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2Mr^2} - U_0 + \frac{1}{2}(k-\gamma_{lj})r^2\right] f = Ef, \tag{1}$$

où

$$\gamma_{lj} = \begin{cases} 2\alpha l, & j = l + 1/2, \\ -2\alpha(l+1), & j = l - 1/2, \end{cases}$$

(comparer à la formule (1) du problème précédent).

L'équation (1) est absolument analogue à l'équation de Schrödinger radiale d'un oscillateur sphérique d'élasticité $k_{lj} = k - \gamma_{lj}$ pour un état de moment orbital l. Vu que les niveaux d'un oscillateur sphérique sont données par l'expression

$$E_{n_r l} = E_N = \hbar\omega(2n_r + l + 3/2), \qquad \omega = \sqrt{k/M},$$

on voit que le spectre d'énergie, en vertu de l'équation (1), est de la forme

$$E_{n_r lj} = -U_0 + \hbar\omega_{lj}(2n_r + l + 3/2), \qquad \omega_{lj} = \sqrt{\frac{k_{lj}}{M}},$$

(il va de soi que le modèle étudié n'a de sens que tant que $k_{lj} > 0$). On invite le lecteur à étudier par lui-même la nature de la décomposition spin-orbite des niveaux dans le cas où $\gamma_{lj} \ll k$ et à comparer le résultat obtenu à celui du problème précédent.

12.23. Dans les noyaux considérés, trois nucléons sont sur la couche $1s$. Cette configuration peut être assimilée à une vacance sur la couche $1s$ définissant ainsi l'isospin, le moment et la parité des noyaux : $T = 1/2$, $J^P = 1/2^+$ (alors $T_3 = -1/2$ pour ^{3}H et $1/2$ pour ^{3}He).

La partie orbitale (d'espace) des fonctions d'onde des noyaux est symétrique par rapport à la permutation de coordonnées des nucléons (ils se trouvent tous dans le même

état $1s$). Donc la partie spin-isospin de la fonction d'onde doit être antisymétrique. Sa forme explicite se détermine suivant la règle générale d'antisymétrisation d'une fonction d'onde d'état d'un système de fermions identiques lorsque l'on connaît leur répartition suivant les états (occupés) individuels. Pour abréger l'écriture, on utilisera une notation du type : $p_\uparrow(1)$ qui représente la fonction d'onde du 1-er nucléon dans l'état de charge protonique avec la valeur déterminée de sa projection de spin $S_z = +1/2$, etc.

Si les trois nucléons occupent les états : $p_\uparrow$, $p_\downarrow$, $n_\uparrow$, alors la partie spin-isospin de la fonction d'onde de cet état du système (dans son ensemble) est définie par le déterminant

$$\Psi_{T_3=1/2,S_z=1/2} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} p_\uparrow(1) & p_\downarrow(1) & n_\uparrow(1) \\ p_\uparrow(2) & p_\downarrow(2) & n_\uparrow(2) \\ p_\uparrow(3) & p_\downarrow(3) & n_\uparrow(3) \end{vmatrix} \tag{1}$$

(il est évident que (1) décrit le noyau ^{3}He dans l'état avec $J_z = 1/2$, car $J = S$).

En effectuant dans (1) la substitution $p \leftrightarrow n$, on obtient la partie spin-isospin de la fonction d'onde du système à trois nucléons du noyau ^{3}H. De façon analogue, la substitution $\uparrow\leftrightarrow\downarrow$ donne la fonction d'onde des états concernés avec la valeur opposée ($J_z = -1/2$) de la projection du moment total.

12.24. Vu que le moment et l'isospin d'une couche entièrement remplie de nucléons (des deux états de charge) sont nuls, J et T du noyau sont définis par les nucléons de couches non pleines. Si les deux nucléons sont dans le même état de charge (noyaux ^{14}C et ^{14}O), alors l'isospin du noyau est manifestement égal à $T = 1$, tandis que le moment total vaut $J = 0$.

Mais si l'un des nucléons est un proton et l'autre un neutron, l'isospin peut prendre deux valeurs : 0 et 1. Dans ce cas l'identité des nucléons (compte tenu du degré de liberté d'isospin) et le principe généralisé de Pauli qui lui est lié, imposent des restrictions sur la valeur du moment J. On voit aussitôt que pour $T = 0$ seule la valeur $J = 1$ est possible, tandis que, pour $T = 1$, on a $J = 0$ (voir aussi la solution du problème suivant).

12.25. En prenant en considération la nature de la symétrie de la partie d'isospin de la fonction d'onde par rapport à la permutation des variables d'isospins des nucléons : sa symétrie pour $T = 1$ et son antisymétrie pour $T = 0$, puis la nature de la symétrie de la fonction d'onde pour deux moments égaux[2] j (dans ce problème $j_1 = j_2 = 3/2$) par rapport à la permutation de leurs variables j_z en représentation $j_{1z}j_{2z}$ (voir le problème 3.39 du Tome I) : sa symétrie pour $J = 2j, 2j-2, \ldots$ (ici, pour $J = 3$; 1) et son antisymétrie pour $J = 2j-1, 2j-3, \ldots$ (pour $J = 2$; 0), et, enfin, en notant la dépendance radiale identique des fonctions d'onde des deux nucléons, liée à leur équivalence, on conclut :
1) pour $T = 1$, ne sont possibles que les valeurs $J = 2$; 0 ;
2) pour $T = 0$, ne sont possibles que les valeurs $J = 3$; 1.

2 Dans ce problème, cette symétrie coïncide avec la symétrie de la partie spin-angulaire de la fonction d'onde.

12.26. Dans le modèle en couches, le spin et le moment magnétique du noyau ne sont déterminés que par les nucléons des couches incomplètes. Pour un de ces nucléons, l'opérateur moment magnétique est de la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = g_l \widehat{\mathbf{l}} + g_s \widehat{\mathbf{s}}, \tag{1}$$

où g_l et g_s sont les facteurs gyromagnétiques orbital et de spin valant : $g_l = 1$, $g_s = 5,59$ pour le proton et $g_l = 0$, $g_s = -3,83$ pour le neutron (rappelons que μ et g s'expriment en unités de magnétons nucléaires $\mu_n = e\hbar/2M_p c$). En calculant la valeur moyenne de l'opérateur (1), compte tenu du résultat du problème 3.54 du Tome I (comparer à 12.2), on obtient le moment magnétique et le facteur gyromagnétique du nucléon dans l'état de moment orbital l et de moment total $j = l \pm 1/2$:

$$\begin{aligned} \mu_j \equiv g_j j &= \langle j, l, j_z = j | \widehat{\mu_z} | j, l, j_z = j \rangle \\ &= \frac{(g_l + g_s) j(j+1) + (g_l - g_s)[l(l+1) - 3/4]}{2(j+1)}. \end{aligned} \tag{2}$$

Les valeurs numériques de μ_j et g_j sont données dans le tableau 12.1 pour une série d'états :

Tableau 12.1 : μ_j et g_j pour des différents états

Particule	Grandeur	$s_{1/2}$	$p_{1/2}$	$p_{3/2}$	$d_{3/2}$	$d_{5/2}$
Proton	μ	2,79	−0,26	3,79	0,12	4,79
	g	5,58	−0,53	2,53	0,08	1,92
Neutron	μ	−1,91	0,64	−1,91	1,15	−1,91
	g	−3,82	1,28	−1,27	0,77	−0,76

Pour un seul nucléon dans l'état nl_j en plus des couches pleines, le spin du noyau est $J = j$ et son moment magnétique se détermine grâce à la formule (2). On voit aussitôt que, pour un noyau ayant, dans une couches pleine, une vacance (protonique ou neutronique) dans un état nl_j, on a de même $J = j$, et le moment magnétique se détermine avec la formule (2) dans laquelle g_l et g_s sont les valeurs relatives au proton et neutron.

Compte tenu de ce qui a été dit plus haut et en se basant sur le schéma des niveaux individuels obtenu dans 12.21, on trouve les prévisions du modèle en couches pour les valeurs de J et μ pour les noyaux mentionnés dans l'énoncé du problème[3] :

3 Ici et dans la suite, on ne donne la configuration nucléonique du noyau qu'en dehors des couches pleines ; l'écriture $(nl_j)^{-1}$ désigne une vacance dans un état nl_j.

Tableau 12.2 : J et μ pour différents noyaux

	J	μ		J	μ
$^3\mathrm{H}(p(1s_{1/2}))$	1/2	2,79	$^{15}\mathrm{N}(p(1p_{1/2}))$	1/2	−0,26
$^3\mathrm{He}(n(1s_{1/2}))$	1/2	−1,91	$^{17}\mathrm{O}(n(1d_{5/2}))$	5/2	−1,91
$^{11}\mathrm{B}(p(1p_{3/2})^{-1})$	3/2	3,79	$^{29}\mathrm{Si}(n(2s_{1/2}))$	1/2	−1,91
$^{13}\mathrm{C}(n(1p_{1/2}))$	1/2	0,64			

L'accord entre les valeurs calculée et expérimentale de μ est satisfaisant, exception faite des noyaux ^{11}B et ^{29}Si.

12.27. Dans le modèle en couches le moment magnétique et le spin du noyau sont définis par les nucléons des couches incomplètes. Dans ce problème,

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = g_{\mathrm{p}}(l,j)\widehat{\mathbf{j}}_{\mathrm{p}} + g_{\mathrm{n}}(l,j)\widehat{\mathbf{j}}_{\mathrm{n}}, \tag{1}$$

où $g_{\mathrm{p,n}}(l,j)$ sont tes facteurs gyromagnétiques du proton et du neutron dans les états l_j ($j = j_{\mathrm{p}} = j_{\mathrm{n}}$) qui ont été trouvés dans le problème précédent.

En calculant la valeur moyenne de l'opérateur (1), compte tenu du résultat du problème 3.54 du Tome I (comparer à la solution des problèmes 12.2 et 12.26), on aboutit sans peine au moment magnétique du noyau ayant la configuration nucléonique étudiée $(\mathrm{p}(nl_j)^1\mathrm{n}(nl_j)^1)$ et le spin J ($\widehat{\mathbf{J}} = \widehat{\mathbf{j}}_{\mathrm{p}} + \widehat{\mathbf{j}}_{\mathrm{n}}$) :

$$\mu(J) = \langle J, J_z = J|\widehat{\mu_z}|J, J_z = J\rangle = \frac{g_{\mathrm{p}}(l,j) + g_{\mathrm{n}}(l,j)}{2} J. \tag{2}$$

Il n'est pas difficile de comprendre que la formule (2) donne également le moment magnétique d'un noyau ayant une vacance protonique et une vacance neutronique dans l'état nl_j (comparer à la situation analogue du problème précédent).

En utilisant des valeurs $g_{\mathrm{p,n}}(l,j)$ calculées dans le problème précédent, on obtient (voir le tableau 12.3) les prévisions du modèle en couches pour les moments magnétiques des noyaux. Pour la valeur μ de ^{6}Li voir également le problème suivant.

12.28. Ici, l'opérateur moment magnétique du noyau peut se représenter sous la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = g_L\widehat{\mathbf{L}} + g_S\widehat{\mathbf{S}}, \tag{1}$$

où $g_{L,S}$ sont les facteurs gyromagnétiques orbital et de spin des nucléons (du proton et du neutron) de la couche incomplète.

Tableau 12.3 : Moments magnétiques μ pour différents noyaux

	μ	J
$^2\mathrm{H}(p(1s_{1/2})^1, n(1s_{1/2})^1)$	0,88	1
$^6\mathrm{Li}(p(1p_{3/2})^1, n(1p_{3/2})^1)$	0,63	1
$^{10}\mathrm{B}(p(1p_{3/2})^{-1}, n(1p_{3/2})^{-1})$	1,89	3
$^{14}\mathrm{N}(p(1p_{1/2})^1, n(1p_{1/2})^1)$	0,38	1

En calculant la valeur moyenne de l'opérateur (1), compte tenu du résultat du problème 3.54 du Tome I (comme dans les deux problèmes précédents), on obtient le moment magnétique du noyau dans l'état de moment total (spin) J :

$$\begin{aligned} \mu(L,S,J) &= \langle J, J_z = J|\widehat{\mu_z}|J, J_z = J\rangle \\ &= \frac{(g_L + g_S)J(J+1) + (g_L - g_S)[L(L+1) - S(S+1)]}{2(J+1)}, \end{aligned} \tag{2}$$

où L, S sont les moments orbital et de spin totaux des nucléons du noyau qui, dans le schéma de couplage LS, tout comme J, caractérisent l'état du noyau.

Cherchons $g_{L,S}$. Pour ce faire, notons que l'opérateur moment magnétique orbital du système composé d'un proton et d'un neutron vaut

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{orb}} = g_{l,\mathrm{p}}\widehat{\mathbf{l}}_{\mathrm{p}} + g_{l,\mathrm{n}}\widehat{\mathbf{l}}_{\mathrm{n}}, \tag{3}$$

($g_{l,p(n)}$ sont les facteurs gyromagnétiques orbitaux du proton et du neutron : $g_{l,\mathrm{p}} = 1$ et $g_{l,\mathrm{n}} = 0$) et cet opérateur ne prend la forme $\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{orb}} = g_L\widehat{\mathbf{L}}$ qu'après le calcul de la valeur moyenne dans un état du système "proton + neutron" correspondant à une valeur déterminée de L. Dans ce cas, g_L se détermine également à l'aide du résultat du problème 3.54 du Tome I :

$$\mu_L \equiv g_L L = \frac{g_{l,\mathrm{p}} + g_{l,\mathrm{n}}}{2} L, \text{ c'est-à-dire } g_L = \frac{g_{l,\mathrm{p}} + g_{l,\mathrm{n}}}{2} = \frac{1}{2} \tag{4}$$

(pour obtenir (4), on a tenu compte de ce que $l_{\mathrm{p}} = l_{\mathrm{n}}$). On détermine de façon absolument analogue la valeur

$$\mu_S \equiv g_S S = \frac{g_{l,\mathrm{p}} + g_{l,\mathrm{n}}}{2} S,$$

soit

$$g_S = \frac{g_{s,\mathrm{p}} + g_{s,\mathrm{n}}}{2} = 0,88. \tag{5}$$

En vertu de (2), (4), (5), on obtient la valeur cherchée

$$\mu(L,S,J) = 0,69J - \frac{0,19}{J+1}[L(L+1) - S(S+1)]. \tag{6}$$

En appliquant la formule (6) au noyau ^{6}Li avec $J = 1$, on obtient pour les différentes valeurs de L, S (compatibles avec $J = 1$)

$$\begin{array}{ll} \mu(0,1,1) = 0,88 \quad (T=0); & \mu(2,1,1) = 0,31 \quad (T=0); \\ \mu(1,0,1) = 0,50 \quad (T=0); & \mu(1,1,1) = 0,69 \quad (T=1); \end{array} \tag{7}$$

Dans (7), on donne également les valeurs de l'isospin T pour les états correspondants du noyau (comparer à 12.25).

Notons que l'ensemble des données expérimentales sur les propriétés du noyau ^{6}Li prouve que le couplage LS avec $L = 0$, $S = 1$ est le mieux adapté.

12.29. L'opérateur moment magnétique du nucléon (indépendamment de son état de charge) se trouvant dans un état avec les nombres quantiques l et j peut être écrit sous la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{N}} = g_{\mathrm{p}}(l,j)\left(\frac{1}{2} + \widehat{\tau}_3\right)\widehat{\mathbf{j}} + g_{\mathrm{n}}(l,j)\left(\frac{1}{2} - \widehat{\tau}_3\right)\widehat{\mathbf{j}}, \tag{1}$$

où g_{p} et g_{n} sont les facteurs gyromagnétiques du proton et du neutron dans l'état nlj donnés dans 12.26.

L'opérateur moment magnétique du noyau est de la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{g_{\mathrm{p}} + g_{\mathrm{n}}}{2}\sum_a \widehat{\mathbf{j}}_a + (g_{\mathrm{p}} - g_{\mathrm{n}})\sum_a \widehat{\tau}_{3,a}\,\widehat{\mathbf{j}}_a, \tag{2}$$

où la somme est prise en tous les nucléons de la couche (incomplète) nlj. Après évaluation de la moyenne de l'opérateur (2) sur la partie d'isospin de la fonction d'onde du noyau concerné, pour lequel manifestement $T_3 = 0$, la seconde somme de (2) devient nulle. En effet,

$$\langle T, T_3 = 0|\widehat{\tau}_{3,a}|T, T_3 = 0\rangle \propto \langle T, T_3 = 0|\widehat{T}_3|T, T_3 = 0\rangle = 0$$

(on a tenu compte de l'analogie formelle des propriétés du moment et de l'isospin, de l'égalité $[\widehat{T}_i, \widehat{\tau}_{k,a}] = i\varepsilon_{ikl}\widehat{\tau}_{l,a}$, et on a utilisé le résultat du problème 3.52 du Tome I). En conséquence, le moment magnétique du noyau est égal à la première somme de (2), et comme $\sum\limits_a \widehat{\mathbf{j}}_a = \widehat{\mathbf{J}}$, il est manifestement égal à

$$\mu(J) = \frac{1}{2}[g_{\mathrm{p}}(l,j) + g_{\mathrm{n}}(l,j)]J. \tag{3}$$

C'est la généralisation naturelle du résultat du problème 12.27.

Le noyau $^{22}_{11}$Na dans son état fondamental a une configuration nucléonique suivante $p(1d_{5/2})^3 n(1d_{5/2})^3$ (en plus des couches pleines ; voir le schéma des niveaux individuels

dans la solution du problème 12.21). En utilisant les valeurs $g_{\mathrm{p,n}}(l,j)$ pour l'état $d_{5/2}$ (voir 12.26), on obtient, en conformité avec (3), la prévision du modèle en couches pour le moment magnétique du noyau ^{22}Na avec $J=3$:

$$\mu_{\text{couche}} = 1,74,$$

qui coïncide pratiquement avec la valeur expérimentale $\mu_{\text{couche}} = 1,75$.

12.30. L'opérateur moment magnétique du nucléon (indépendamment de son état de charge) est de la forme

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\mathrm{N}} = (g_{l,\mathrm{p}}\widehat{\mathbf{l}} + g_{s,\mathrm{p}}\widehat{\mathbf{s}})\left(\frac{1}{2}+\widehat{\tau}_3\right) + (g_{l,\mathrm{n}}\widehat{\mathbf{l}} + g_{s,\mathrm{n}}\widehat{\mathbf{s}})\left(\frac{1}{2}-\widehat{\tau}_3\right), \tag{1}$$

où g_l et g_s sont des facteurs gyromagnétiques orbital et de spin : $g_{l,\mathrm{p}}=1$, $g_{l,\mathrm{n}}=0$, $g_{s,\mathrm{p}}=5,59$, $g_{s,\mathrm{n}}=-3,83$.

L'opérateur moment magnétique du noyau vaut donc

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = g_L\widehat{\mathbf{L}} + g_S\widehat{\mathbf{S}} + \sum_a [(g_{l,\mathrm{p}} - g_{l,\mathrm{n}})\widehat{\mathbf{l}}_a + (g_{s,\mathrm{p}} - g_{s,\mathrm{n}})\widehat{\mathbf{s}}]\widehat{\tau}_{3,a}, \tag{2}$$

où la somme est prise en tous les nucléons de la couche incomplète

$$\widehat{\mathbf{L}} = \sum_a \widehat{\mathbf{l}}_a, \qquad \widehat{\mathbf{S}} = \sum_a \widehat{\mathbf{s}}_a, \qquad g_L = \frac{g_{l,\mathrm{p}} + g_{l,\mathrm{n}}}{2} = \frac{1}{2}, \qquad g_S = \frac{g_{s,\mathrm{p}} + g_{s,\mathrm{n}}}{2} = 0,88$$

(comparer à la formule (2) du problème précédent, déterminant $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$ dans le schéma de couplage jj).

En calculant la valeur moyenne de (2) dans l'état du noyau correspondant à $T_3=0$, le dernier terme (la somme) dans cette expression (représentant la partie isovectorielle de $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$) s'annule (comparer au problème précédent). Le moment magnétique des noyaux avec $T_3=0$ est égal à la partie isoscalaire de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{\mu}}$:

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}}_{\text{isosc}} = g_L\widehat{\mathbf{L}} + g_S\widehat{\mathbf{S}},$$

et vaut (comparer, par exemple, à la solution du problème 12.26)

$$\mu(L,S,J) = \frac{(g_L+g_S)J(J+1) + (g_L-g_S)[L(L+1) - S(S+1)]}{2(J+1)}.$$

où L, S sont les moments orbital et de spin totaux des nucléons du noyau qui, dans le schéma de couplage LS, tout comme J, caractérisent l'état du noyau.

12.31. L'opérateur moment magnétique du noyau, où tous les nucléons (des deux états de charge), en plus des couches pleines, se trouvent dans des états identiques nlj, a la forme (voir 12.29)

$$\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{g_{\mathrm{p}}(l,j) + g_{\mathrm{n}}(l,j)}{2}\widehat{\mathbf{J}} + [g_{\mathrm{p}}(l,j) - g_{\mathrm{n}}(l,j)]\sum_a \widehat{\tau}_{3,a}\,\widehat{\mathbf{j}}_a. \tag{1}$$

Le moment magnétique du noyau est défini comme la valeur moyenne :

$$\mu = \langle T, T_3, J, J_z = J|\hat{\mu}_z|T, T_3, J, J_z = J\rangle$$

(on n'indique que les nombres quantiques de l'isospin et du moment total) et, en accord avec (1), il vient

$$\mu = \mu_{\text{isosc}} + \mu_{\text{isovec}}, \tag{2}$$

où

$$\mu_{\text{isosc}} = \frac{g_\text{p} + g_\text{n}}{2} J, \qquad \mu_{\text{isovec}} = (g_\text{p} - g_\text{n})\langle\, | \sum_a \hat{\tau}_{3,a} \hat{j}_{z,a} | \,\rangle, \tag{3}$$

En appliquant (2), (3) aux noyaux miroirs (notons-les A et $\bar{A}$), il faut tenir compte du fait que les états concernés constituent deux états du même système de nucléons ne se distinguant que par le signe de la projection T_3 de l'isospin. Pour ces noyaux, la partie isoscalaire du moment magnétique μ_{isosc} est la même, tandis que la partie isovectorielle μ_{isovec} change de signe, de sorte que

$$\mu(A) + \mu(\bar{A}) = [g_\text{p}(l, j) + g_\text{n}(l, j)]J. \tag{4}$$

Pour les noyaux ^{3}H et ^{3}He, la configuration nucléonique est $(1s)^3$ et, compte tenu des valeurs de $g_{\text{p,n}}$ dans l'état $s_{1/2}$ (voir 12.26), en vertu de (4) on obtient la prévision du modèle en couches pour les moments magnétiques de ces noyaux ($J = 1/2$) :

$$\mu_{\text{couche}}(^3\text{H}) + \mu_{\text{couche}}(^3\text{He}) = 0,88 \tag{5}$$

qui doit être comparée à la valeur expérimentale 0,78.

12.32. Le moment quadrupolaire se détermine à partir du proton en plus des couches pleines (les protons des couches pleines conduisent à une symétrie sphérique de la distribution des charges pour laquelle $Q_0 = 0$) et vaut

$$Q_0 = \int \Psi^*_{njlj_z=j}(3\cos^2\theta - 1)\Psi_{njlj_z=j} r^2 dV \tag{1}$$

(comparer à la solution du problème 12.4), où $\Psi_{njlj_z=j}$ est la fonction d'onde de l'état individuel nlj, où j, j_z déterminent le moment (le spin) du noyau ($J = j$, $J_z = j_z$).

Pour les états étudiés $j = l + 1/2$ et la fonction d'onde de (1) a manifestement la forme

$$\Psi_{njlj_z=j} = Y_{ll}(\mathbf{n}) f(r) \chi_{1/2,1/2}.$$

Vu que

$$|Y_{ll}|^2 = \frac{(2l+1)!!}{2^{l+2} l! \pi} \sin^{2l}\theta,$$

l'expression (1) prend la forme

$$Q_0 = \frac{(2l+1)!!}{2^{l+2} l! \pi} \int (3\cos^2\theta - 1) \sin^{2l}\theta d\Omega \overline{r_\text{p}^2} \tag{2}$$

où

$$\overline{r_p^2} = \int_0^\infty |f(r)|^2 r^4 dr$$

est la valeur moyenne du carré de la distance du proton qui est en plus des couches pleines.

Une intégration élémentaire dans (2) sur les angles ($d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$) donne :
a) $Q_0(s_{1/2}) = 0$;
b) $Q_0(p_{3/2}) = -(2/5)\ \overline{r_p^2}$;
c) $Q_0(d_{5/2}) = -(4/7)\ \overline{r_p^2}$
(noter le signe de Q_0 ; voir de même les deux problèmes suivants).

Il est aisé de comprendre que les moments quadrupolaires des noyaux ayant respectivement un proton en plus des couches pleines et une vacance protonique (dans le même état) changent de signe, contrairement aux moments magnétiques de ces noyaux.

12.33. Le moment quadrupolaire se détermine au moyen de la formule (2) du problème précédent. En utilisant la forme de la fonction $|Y_{ll}|^2$ donnée dans le problème précédent, il vient

$$Q_0 = \int \left\{ 2|Y_{ll}|^2 - \frac{6(l+1)}{2l+3} |Y_{l+1,l+1}|^2 \right\} d\Omega \overline{r_p^2} = \left[2 - \frac{6(l+1)}{2l+3} \right] \overline{r_p^2} = -\frac{2j-1}{2j+2} \overline{r_p^2}$$

(comparer au résultat du problème suivant).

12.34. Le problème se résout de façon analogue au problème 12.32, mais il faut maintenant utiliser les fonctions d'onde avec $j = l - 1/2$, dont la forme explicite a été obtenue dans 5.42 (Tome I). On laisse au lecteur le soin de la résolution du problème par ce procédé. Pour notre part, on s'appuiera sur un raisonnement permettant d'obtenir la réponse sans calculs, en ne se fondant que sur le résultat du problème précédent. Pour ce faire, souvenons-nous du résultat utile du problème 5.43 du Tome I :

$$\Psi^*_{jl_1j_z}(\mathbf{n})\Psi_{jl_1j_z}(\mathbf{n}) = \Psi^*_{jl_2j_z}(\mathbf{n})\Psi_{jl_2j_z}(\mathbf{n})$$

exprimant une dépendance angulaire identique avec la direction du rayon vecteur $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ de la particule de spin $s = 1/2$, dans des états avec j et j_z donnés et des valeurs distinctes de $l_{1,2} = j \pm 1/2$. De même, la partie angulaire de l'intégrale (1) du problème 12.32 ne dépend que de j (mais non pas de $l = j \pm 1/2$), de sorte que l'expression de Q_0, obtenue dans le problème précédent, $Q_0 = -\dfrac{2j-1}{2j+2}\overline{r_p^2}$ demeure vraie dans le cas où $j = l - 1/2$.

A ce propos, soulignons encore une fois que pour les états étudiés de noyaux n'ayant qu'un seul proton en plus des couches pleines, $Q_0 < 0$, tandis que pour les noyaux avec une seule vacance protonique, $Q_0 > 0$.

12.35. Dans l'approximation ayant permis d'obtenir le moment quadrupolaire Q_0 des noyaux dans les problèmes précédents, en considérant que le centre de masse du

noyau (par rapport auquel était déterminé Q_0) coïncide avec le centre de masse du système de nucléons des couches saturées, on trouve un moment quadrupolaire du noyau nul dans les conditions du problème considéré.

En se référant au conseil donné dans l'énoncé, on peut noter que le centre de la distribution sphérique des charges nucléoniques des couches pleines (la charge étant Z, la masse $(A-1)M$), coïncidant avec leur centre de masse, se trouve au point $\mathbf{r}_{\text{couche}} = -\mathbf{r}_{\text{n}}/(A-1)$, où $\mathbf{r}_{\text{n}}$ est le rayon vecteur du neutron par rapport au centre de masse du noyau dans son ensemble. Dans ce cas le moment quadrupolaire du noyau est lié à la charge des nucléons des couches pleines et, comme on le voit immédiatement, se détermine par l'expression

$$Q_0^{(n)} = \frac{Z}{(A-1)^2} \int \Psi^*_{njlj_z=j}(3\cos^2\theta - 1)\Psi_{njlj_z=j} r^2 dV$$

(comparer à la solution des problèmes 12.4 et 12.32), où $\Psi_{njlj_z=j}$ est la fonction d'onde de l'état neutronique individuel.

Considérant les résultats des problèmes 12.33 et 12.34, on conclut que dans l'approximation envisagée, le moment quadrupolaire du noyau avec un seul neutron en plus des couches pleines vaut

$$Q_0^{(n)} = -\frac{2j-1}{2j+2} \frac{Z}{(A-1)^2} \overline{r_{\text{n}}^2}$$

(dans ce cas le spin du noyau est $J = j$).

12.36. L'état fondamental du noyau correspond à une distribution des nucléons suivant les niveaux individuels les plus bas, compte tenu du principe de Pauli.

En négligeant l'interaction coulombienne, on note que les niveaux individuels du proton et du neutron sont les mêmes. De plus, pour un noyau avec $A = 2Z$, dans l'état fondamental, ce sont les mêmes états individuels qui sont occupés aussi bien pour les protons que pour les neutrons.

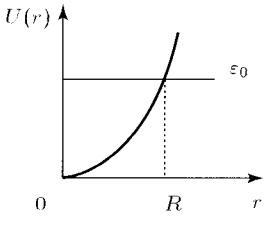

Figure 7

En notant ε_0 l'énergie maximale des états occupés (voir fig. 7; la constante $-U_0$ est négligée), on remarque que le volume de l'espace des phases correspondant aux états occupés dans le volume dV vaut

$$d\Gamma = \frac{4\pi p_F^3}{3} dV = \frac{4\pi}{3}\left[2m\left(\varepsilon_0 - \frac{kr^2}{2}\right)\right]^{3/2} dV. \qquad (1)$$

Après avoir divisé (1) par $(2\pi\hbar)^3$, on obtient le nombre d'états orbitaux différents, et comme dans chaque état il y a deux protons et deux neutrons, le nombre total de nucléons dans le volume dV dans l'état fondamental du noyau vaut ($\omega = \sqrt{k/m}$)

$$dN = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3}(m\omega R)^3 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2} dV, \qquad r \le R \equiv \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{k}}. \qquad (2)$$

La densité des nucléons dans le noyau est

$$n(r) = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3}(m\omega R)^3 \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2}, \qquad r \leq R \tag{3}$$

(pour $r > R$, il est manifeste que $n(r) \equiv 0$).

La condition de normalisation des expressions (2), (3) sur le nombre total des nucléons A donne la relation suivante entre les paramètres ω, R du modèle :

$$\frac{m\omega R^2}{\hbar} = (12A)^{1/3}, \tag{4}$$

et permet ainsi d'écrire (3) sous la forme

$$n(r) = \frac{8A}{\pi^2 R^3} \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right)^{3/2} \tag{5}$$

(l'intégrale de normalisation se calcule facilement par une substitution $r/R = \sin u$).

On ne poursuivra pas l'étude du modèle considéré, vu que l'expression (5) est en contradiction avec les données expérimentales, selon lesquelles la densité des nucléons dans le noyau est presque constante à l'exception d'un domaine étroit voisin de sa frontière.

12.37. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Mais cette fois l'impulsion limite p_F au sein du noyau est constante : $p_F = \sqrt{2m\varepsilon_0}$. Ainsi, la formule (3) du problème précédent prend la forme

$$n(r) = \frac{2}{3\pi^2\hbar^3} p_F^3 = \text{ cte}, \qquad r < R. \tag{1}$$

La normalisation de (1) sur le nombre total de nucléons A, donne $p_F^3 R^3 = \frac{9\pi}{8} A\hbar^3$, où, compte tenu de l'expression de R, $p_F = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/3} \frac{\hbar}{r_0}$.

La vitesse maximale des nucléons dans le noyau correspondant à cette impulsion (le noyau étant assimilé, dans l'énoncé, à un gaz de Fermi parfait) est égale à

$$v_0 = \frac{p_F}{m} = \left(\frac{9\pi}{8}\right)^{1/3} \frac{m_e}{m} \frac{a_0}{r_0} \frac{\hbar}{m_e a_0} \approx \frac{c}{4}$$

($m/m_e \approx 1840$, $a_0 \approx 0,53 \cdot 10^{-8}$ cm est le rayon de Bohr, $v_{at} \equiv \hbar/m_e a_0 \approx c/137$, c vitesse de la lumière), et son énergie cinétique est

$$\varepsilon_0 \approx \frac{mv_0^2}{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{v_0}{c}\right)^2 mc^2 \approx 30 \text{ MeV} \ll mc^2 \approx 940 \text{ MeV}.$$

CHAPITRE 13

THÉORIE DE LA DIFFUSION

13.1. La recherche de la solution de l'équation de Schrödinger ($k = \sqrt{2mE/\hbar^2} > 0$)

$$[\Delta + k^2]\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r})\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}$$

ayant le comportement asymptotique donné dans l'énoncé pour $r \to \infty$, est équivalente à la solution de l'équation intégrale

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}')\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}')dV'. \tag{1}$$

Le passage de la forme différentielle de l'équation de Schrödinger à la forme intégrale a été effectué ici en utilisant la fonction de Green $G^{(+)}_E$ de l'équation de Schrödinger de particules libres :

$$G^{(+)}_E(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$
$$(\Delta + k^2)G^{(+)}_E(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

(comparer au cas unidimensionnel étudié dans 2.57 du Tome I).

Pour $r \to \infty$, il vient

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\mathrm{e}^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx \frac{1}{r}\mathrm{e}^{ikr}\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}, \qquad \mathbf{k} \equiv k\frac{\mathbf{r}}{r},$$

et la relation (1) prend la forme

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \approx \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) + \frac{1}{r}\mathrm{e}^{ikr}\left(-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}')dV', \tag{2}$$

à partir de laquelle on retrouve l'expression la donnée dans l'énoncé de l'amplitude de diffusion, commode pour différents calculs approchés. C'est ainsi que pour $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \approx$

$\exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r})$, on obtient à partir de (2) l'amplitude de diffusion dans l'approximation de Born au premier ordre.

13.2. A première vue, il peut paraître que la condition de décroissance du potentiel (c'est-à-dire $n > 0$) soit nécessaire et suffisante pour que la fonction d'onde ne se déforme pas aux grandes distances. Or, en réalité, la situation est plus délicate. Le comportement asymptotique de la fonction d'onde pour $r \to \infty$

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \approx \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) + f\left(\mathbf{k}_0, \mathbf{k} \equiv k\frac{\mathbf{r}}{r}\right)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{1}$$

suppose que l'amplitude de diffusion est une fonction bornée (sauf pour quelques valeurs de l'énergie et des angles de diffusion). Selon le problème précédent,

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}U(\mathbf{r})\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})dV, \tag{2}$$

et la condition de convergence de l'intégrale dans cette expression pour des grandes distances, où la fonction d'onde est de la forme (1) et le potentiel $U \propto r^{-n}$, sera satisfaite s'il y a convergence de l'intégrale ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$)

$$\int_{r>R}\frac{1}{r^n}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV = \frac{4\pi}{q}\int_R^\infty r^{-n+1}\sin qr dr. \tag{3}$$

Pour que l'intégrale (3) converge, il faut qu'on ait $n > 1$, qui est la restriction cherchée à la loi de décroissance du potentiel.

13.3. La fonction d'onde $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}$ décrivant le processus de diffusion des particules d'impulsion $\hbar\mathbf{k}_0$ vérifie l'équation (voir, par exemple, 13.1)

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0} = \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}')dV'. \tag{1}$$

Compte tenu du développement

$$k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = kr - k\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r} + \frac{k}{2}\left[\frac{r'^2}{r} - \frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}')^2}{r^3}\right] + \ldots \qquad (r' \ll r), \tag{2}$$

on remarque que si $r \gg R$, on peut remplacer $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}$ par r^{-1}, et que si $r \gg kR^2$ on peut, dans l'exposant de l'exponentielle, ne garder que les deux premiers membres du développement (2). Alors l'expression (1) prend la forme

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0} = \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}')dV'. \tag{3}$$

Soulignons que pour des particules rapides ($kR \gg 1$), la fonction d'onde n'a la forme asymptotique (3) que pour $r \gg kR^2 \gg R$ (et pas seulement pour $r \gg R$).

13.4. Dans l'approximation de Born, le calcul de l'amplitude de diffusion se réduit au calcul de l'intégrale

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}U(r)dV = \frac{im}{\hbar^2 q}\int_0^\infty U(r)[e^{iqr} - e^{-iqr}]rdr. \qquad (1)$$

Vu que $d\sigma = |f|^2 d\Omega$, la section efficace totale de diffusion dans l'approximation de Born vaut

$$\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega = 2\pi\int_0^\pi |f|^2 \sin\theta d\theta = \frac{\pi\hbar^2}{2mE}\int_0^{8mE/\hbar^2} f^2(q)dq^2 \qquad (2)$$

(rappelons que $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, $q = 2k\sin(\theta/2)$).

Le calcul des intégrales (1) et (2) donne :

a) $f = -\dfrac{2m\alpha R^2}{\hbar^2}\dfrac{\sin qR}{qR}$, $\qquad \sigma(E) = \dfrac{4\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E}\displaystyle\int_0^{\sqrt{8mER^2/\hbar^2}} \frac{\sin^2 x}{x}dx.$

L'intégrale dans $\sigma(E)$ ne s'exprime pas en termes de fonctions élémentaires. Les cas limites des faibles ($kR \ll 1$) et des grandes ($kR \gg 1$) énergies sont :

$$\sigma(E \to 0) = \frac{16\pi m^2\alpha^2 R^4}{\hbar^4}, \qquad \sigma(E \to \infty) = \frac{\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E}\ln\frac{8mER^2}{\hbar^2},$$

(pour $E \to \infty$ l'intégrale dans l'expression $\sigma(E)$ diverge ; pour son calcul il faut remplacer le facteur oscillant $\sin^2 x$ par sa valeur moyenne égale à $1/2$).

La condition de validité des expressions obtenues est la réalisation d'une des deux inégalités : $mR|\alpha| \ll \hbar^2$ ou $|\alpha| \ll \hbar v$.

b) $f = -\dfrac{4mU_0R^3}{\hbar^2(1+q^2R^2)^2}$,

$$\sigma(E) = \frac{8\pi mR^4U_0^2}{3\hbar^2 E}\left[1 - \left(1 + \frac{8mER^2}{\hbar^2}\right)^{-3}\right],$$

$$\sigma(E \to 0) = \frac{64\pi m^2R^6U_0^2}{\hbar^4}, \qquad \sigma(E \to \infty) = \frac{8\pi mR^4U_0^2}{3\hbar^2 E}.$$

Les conditions de validité sont $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ ou $R|U_0| \ll \hbar v$.

c) $f = -\dfrac{2m\alpha R^2}{\hbar^2(1+q^2R^2)}$,

$$\sigma(E) = 16\pi\left(\frac{m\alpha R^2}{\hbar^2}\right)^2\left(1 + \frac{8mER^2}{\hbar^2}\right)^{-1},$$

$$\sigma(E \to 0) = 16\pi\left(\frac{m\alpha R^2}{\hbar^2}\right)^2, \qquad \sigma(E \to \infty) = \frac{2\pi m\alpha^2 R^2}{\hbar^2 E}.$$

Les conditions de validité sont $mR|\alpha| \ll \hbar^2$ ou $|\alpha| \ll \hbar v$.

d) $f = -\dfrac{\pi m\alpha}{\hbar^2 q}$, la condition de validité est $m|\alpha| \ll \hbar^2$. La section efficace totale de diffusion est égale à l'infini, vu la décroissance lente du potentiel aux grandes distances $r \to \infty$.

e) $f = \dfrac{2mU_0}{\hbar^2}\left[\dfrac{R\cos(qR)}{q^2} - \dfrac{\sin(qR)}{q^3}\right]$,

$$\sigma\left(E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \frac{2\pi}{k^2}\left(\frac{mU_0R^2}{\hbar^2}\right)^2\left[1 - \frac{1}{(2kR)^2} + \frac{\sin(4kR)}{(2kR)^3} - \frac{\sin^2(2kR)}{(2kR)^4}\right],$$

$$\sigma(E \to 0) = \frac{16\pi m^2 U_0^2 R^6}{9\hbar^4}, \qquad \sigma(E \to \infty) = \frac{\pi m U_0^2 R^4}{\hbar^2 E}.$$

Les conditions de validité sont $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ ou $R|U_0| \ll \hbar v$.

f) $f = -\dfrac{\sqrt{\pi}mU_0R^3}{2\hbar^2}\exp\left(-\dfrac{q^2R^2}{4}\right)$,

$$\sigma(E) = \frac{\pi^2 m U_0^2 R^4}{4\hbar^2 E}\left[1 - \exp\left(-\frac{4mER^2}{\hbar^2}\right)\right],$$

$$\sigma(E \to 0) = \frac{\pi^2 m^2 U_0^2 R^6}{\hbar^4}, \qquad \sigma(E \to \infty) = \frac{\pi^2 m U_0^2 R^4}{4\hbar^2 E}.$$

Les conditions de validité sont $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ ou $R|U_0| \ll \hbar v$.

Vu que dans ce cas, l'amplitude de Born décroît exponentiellement pour des q^2 grands, l'approximation de Born ne peut être appliquée que pour des valeurs suffisamment grandes de q^2. Donc, dans l'expression de la section totale de diffusion, la prise en compte du terme exponentiellement petit n'est pas nécessaire (voir [1] et 13.15).

13.5. La résolution du problème de la diffusion élastique dans le potentiel $U(r)$ donne, d'après le calcul des perturbations, l'expression suivante de la fonction d'onde : $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \approx \Psi_{\mathbf{k}}^{(0)} + \Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}$, où $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)} = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ et

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}U(\mathbf{r}')e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}dV'. \tag{1}$$

Pour trouver $\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(0)$ pour un potentiel central, il est commode d'effectuer l'intégration en θ' et φ' dans l'expression (1) (pour $r = 0$) en utilisant pour cela les coordonnées sphériques avec l'axe polaire parallèle au vecteur $\mathbf{k}$. L'intégration élémentaire donne

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(0) = \frac{im}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)(e^{2ikr} - 1)dr. \tag{2}$$

Pour les potentiels $U = U_0R\delta(r - R)$ et $U = U_0e^{-r/R}$, à partir de (2), on obtient :

a) $\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(0) = \dfrac{imU_0R}{k\hbar^2}(e^{2ikR} - 1)$;

b) $\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(0) = -\dfrac{2mR^2U_0}{\hbar^2(1-2ikR)}$.

Comme il fallait s'y attendre, dans les conditions de validité de l'approximation de Born (quand une au moins des deux inégalités $mR^2|U_0| \ll \hbar^2$ ou $R|U_0| \ll \hbar v$ est satisfaite) $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(0)| \ll 1$, c'est-à-dire $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(1)}(0)| \ll |\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}| = 1$.

13.6. La propriété recherchée de $\sigma(E)$ est évidente si l'on tient compte du fait que, dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion vaut

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}U(r)dV = -\frac{2m}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \sin(qr)\ U(r)rdr,$$

et qu'avec le calcul de la section efficace de diffusion $\sigma(E) = \int |f(E)|^2 d\Omega$, on passe des variables angulaires θ, φ aux variables $q^2 = 2k^2(1-\cos\theta)$, φ ; alors

$$E\sigma(E) = \frac{\pi\hbar^2}{2m}\int_0^{8mE/\hbar^2} |f(q)|^2 dq^2.$$

13.7. Dans l'approximation de Born

$$\sigma(E) = \int |f(\mathbf{q})|^2 d\Omega, \qquad f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}U(\mathbf{r})dV. \tag{1}$$

Vu que $q^2 = 2k^2(1-\cos\theta) = 4mE(1-\cos\theta)/\hbar^2$, on a pour $E = 0$

$$\sigma(E=0) = \int |f(0)|^2 d\Omega = 4\pi|f(0)|^2. \tag{2}$$

Compte tenu de l'inégalité

$$|\widetilde{U}(\mathbf{q})| \equiv \left|\int U(\mathbf{r})\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV\right| \le \int |U(\mathbf{r})|\,dV = \left|\int U(\mathbf{r})dV\right| = |\widetilde{U}(0)| \tag{3}$$

(il est essentiel dans (3) que la fonction réelle $U(\mathbf{r})$ ne soit pas alternée) et vu que pour $E \neq 0$, on a pour une diffusion d'angle $\theta \neq 0$, $q^2 \neq 0$, on voit, en confrontant (1)–(3), que $\sigma(E) \le \sigma(0)$, l'égalité ne se réalisant que pour $E = 0$.

13.8. En substituant dans la formule générale de l'amplitude de diffusion

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\widehat{U}\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r})dV,$$

(voir, par exemple, 13.1) la fonction d'onde $\mathrm{e}^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}$ d'une particule libre à la fonction d'onde exacte $\Psi_{\mathbf{k}_0}^{(+)}(\mathbf{r})$ on obtient, compte tenu de la forme de l'opérateur $\widehat{U}_{\text{éch}}$,

$$f_{\text{éch}}^{\text{B}}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) \equiv f_{\text{éch}}^{\text{B}}(\Delta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{\Delta}\cdot\mathbf{r}}U(r)dV, \tag{1}$$

où $\mathbf{\Delta} = \mathbf{k} + \mathbf{k}_0$, de sorte que $\Delta^2 = 2k^2(1 + \cos\theta)$. Si l'on exprime l'amplitude de diffusion en fonction de l'énergie et de l'angle de diffusion, il devient clair que

$$f^{\mathrm{B}}_{\text{échange}}(E, \theta) = f^{\mathrm{B}}_0(E, \pi - \theta), \tag{2}$$

où $f^{\mathrm{B}}_0(E, \theta)$ est l'amplitude de diffusion dans le potentiel central $U(r)$.

Comme on le sait, la diffusion de particules rapides $kR \gg 1$ sur un potentiel "ordinaire" se fait essentiellement vers l'avant dans le domaine d'angles $\theta \sim (kR)^{-1} \ll 1$ (où R est le rayon du potentiel). Avec un potentiel d'échange, selon (2), la diffusion s'effectue pour l'essentiel vers l'arrière (les angles de diffusion sont proches de π). Pour un potentiel constitué par la superposition d'un potentiel "ordinaire" et d'un potentiel "d'échange", la section efficace différentielle de diffusion des particules rapides présente des maxima marqués vers l'avant et vers l'arrière ($\theta \approx 0$ et $\theta \approx \pi$).

13.9. Dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion s'exprime comme la transformée de Fourier du potentiel ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$) :

$$f^{\mathrm{B}}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\widetilde{U}(\mathbf{q}), \qquad \widetilde{U}(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) dV. \tag{1}$$

La transformée de Fourier $\widetilde{U}(\mathbf{q})$ de la fonction $U(\mathbf{r})$, non nulle dans le domaine $r \lesssim R$, n'a une valeur significative que pour $qR \lesssim 1$, car pour $qR \gg 1$, l'intégrale définissant $\widetilde{U}(\mathbf{q})$ est petite à cause des oscillations rapides de la fonction sous l'intégrale engendrées par la présence du facteur $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. Vu que $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta)$ et que $kR \gg 1$ et $qR \lesssim 1$, la diffusion des particules rapides s'effectue pour l'essentiel sous de petits angles $\theta \sim (kR)^{-1} \ll 1$.

Trouvons comment on peut simplifier l'expression (1) et la formule donnant la section efficace totale de diffusion $\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega$, pour $kR \gg 1$, compte tenu du fait que seuls les petits angles (pour lesquels $q^2 \approx k^2\theta^2 \sim R^{-2}$) jouent un rôle important.

Décomposons le vecteur $\mathbf{q}$ en deux composantes : $\mathbf{q} = \mathbf{q}_\perp + \mathbf{q}_\parallel$, où $\mathbf{q}_\parallel$ représente le vecteur dirigé suivant le vecteur $\mathbf{k}_0$, tandis que $\mathbf{q}_\perp \perp \mathbf{k}_0$ (fig. 8). Pour $\theta \ll 1$ on a $q_\parallel = k_0(1 - \cos\theta) \approx k_0\theta^2/2$, $q_\perp \approx k_0\theta$, autrement dit $q_\perp \gg q_\parallel$. Vu que $\mathbf{q} \approx \mathbf{q}_\perp$, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} \approx \mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}$ et la formule (1) prend la forme

$$\widetilde{U}(\mathbf{q}) \approx \widetilde{U}(\mathbf{q}_\perp) = \int e^{-i\mathbf{q}_\perp\cdot\boldsymbol{\rho}} U(\boldsymbol{\rho}, z) dz d^2\rho. \tag{2}$$

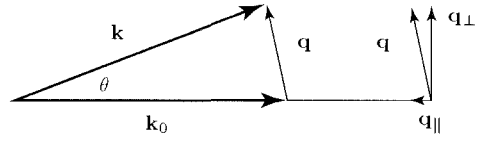

Figure 8

De plus, la grandeur $k^2 d\Omega_{\mathbf{k}}$ peut être assimilée à un élément de surface de la sphère de rayon k ($d\Omega_{\mathbf{k}}$ étant un élément de l'angle solide dans lequel les particules sont diffusées). La partie de la sphère au voisinage de l'axe polaire orienté le long du vecteur $\mathbf{k}_0$ peut être assimilée à une surface plane perpendiculaire au vecteur $\mathbf{k}_0$, et, donc, $k^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = dS = dq_{\perp x} dq_{\perp y} = d^2 q_\perp$ (l'axe z est dirigé suivant le vecteur $\mathbf{k}_0$).

Donc,

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4 k^2} \int |\widetilde{U}(\mathbf{q}_\perp)|^2 d^2 q_\perp. \tag{3}$$

En portant l'expression (2) dans la formule (3), on obtient

$$\sigma = \frac{m}{8\pi^2 \hbar^2 E} \int \left[\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} U(\boldsymbol{\rho}, z) dz d^2 \rho \right] \left[\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}'} U(\boldsymbol{\rho}', z') d' z d^2 \rho' \right] d^2 q_\perp. \tag{4}$$

Après intégration par rapport à $\mathbf{q}_\perp$ dans l'expression (4) à l'aide de la formule

$$\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot (\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}')} d^2 q_\perp = (2\pi)^2 \delta(\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'),$$

on peut effectuer l'intégration par rapport à $\boldsymbol{\rho}'$ et l'on obtient la section efficace de diffusion des particules rapides :

$$\sigma(E \to \infty) = \frac{m}{2\hbar^2 E} \iint \left[\int U(\boldsymbol{\rho}, z) dz \right]^2 d^2 \rho. \tag{5}$$

Pour le potentiel $U = U_0 \mathrm{e}^{-r^2/R^2} \equiv U_0 \mathrm{e}^{-\rho^2/R^2} \mathrm{e}^{-z^2/R^2}$, la formule (5) donne $\sigma(E) = \pi^2 m U_0^2 R^4 / 4E\hbar^2$.

13.10. L'approximation de Born correspond à la prise en compte du premier terme du développement en série de l'amplitude de diffusion suivant les puissances du potentiel d'interaction. Le paramètre du développement est soit $m|U_0|R^2/\hbar^2$, soit $|U_0|R/\hbar v$, où U_0 et R sont les grandeurs caractéristiques du potentiel et de son rayon et où v est la vitesse des particules. La condition de validité de l'approximation de Born est que l'un de ces paramètres soit petit devant l'unité. La section efficace de diffusion se développe de même en série suivant ce petit paramètre. Mais puisque $\sigma \sim |f|^2$, le premier terme dans le développement de la section efficace est du second ordre ; ainsi dans l'expression du théorème optique, $4\pi \operatorname{Im} f(E, \theta = 0)/k = \sigma(E)$, il n'y a pas de terme du premier ordre, d'où il s'ensuit nécessairement que $\operatorname{Im} f^{\mathrm{B}}(\theta = 0) = 0$. La validité approchée du théorème optique est assurée par la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion au second ordre du calcul des perturbations (voir problème suivant).

13.11. Utilisons les expressions bien connues de l'amplitude de diffusion au premier et au second ordre du calcul des perturbations [1] ($\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}$ étant les vecteurs d'onde de

la particule avant et après la diffusion) :

$$f^{\mathrm{B}}(\mathbf{q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)=-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\widetilde{U}(\mathbf{q}), \qquad \widetilde{U}(\mathbf{q})=\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}U(\mathbf{r})dV,$$

$$f^{(2)}(\mathbf{k}_0,\mathbf{k})=\frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4}\int\frac{\widetilde{U}(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_0)\widetilde{U}(\mathbf{k}-\boldsymbol{\kappa})}{\kappa^2-k_0^2-i\varepsilon}d^3\kappa$$

($\varepsilon>0$ est une quantité infiniment petite).

Pour la diffusion vers l'avant ($\theta=0$, $\mathbf{k}_0=\mathbf{k}$), on obtient

$$f^{(2)}(\mathbf{k}_0,\mathbf{k}_0)=\frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4}\int\frac{|\widetilde{U}(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_0)|^2}{\kappa^2-k_0^2-i\varepsilon}d^3\kappa \tag{1}$$

(on a tenu compte de ce que $\widetilde{U}(\mathbf{q})=\widetilde{U}^*(-\mathbf{q})$). De l'égalité (1) il s'ensuit que

$$\operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}_0,\mathbf{k}_0)=\frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4}\int\frac{\varepsilon}{(\kappa^2-k_0^2)^2+\varepsilon^2}|\widetilde{U}(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_0)|^2d^3\kappa \tag{2}$$

En notant que, pour $\varepsilon>0$ infiniment petit, la fonction

$$g(x,\varepsilon)=\frac{\varepsilon}{\pi(x^2+\varepsilon^2)}\to\delta(x)$$

est une fonction δ (en effet, la fonction $g(x,\varepsilon)$ n'est différente de zéro que pour $x\sim\varepsilon\to 0$, tandis que l'intégrale $\int\limits_{-\infty}^{\infty} g(x,\varepsilon)dx=1$), et en écrivant $d^3\kappa=\frac{\kappa}{2}d\kappa^2d\Omega_{\mathbf{n}}$, $\boldsymbol{\kappa}=\kappa\mathbf{n}$, l'expression (2) s'écrit

$$\begin{aligned}\operatorname{Im} f^{(2)}(\mathbf{k}_0,\mathbf{k}_0) &= \frac{m^2}{16\pi^3\hbar^4}\int|\widetilde{U}(\kappa\mathbf{n}-\mathbf{k}_0)|^2\kappa\delta(\kappa^2-k_0^2)d\kappa^2d\Omega_{\mathbf{n}}\\ &= \frac{m^2k_0}{16\pi^3\hbar^4}\int|\widetilde{U}(k_0\mathbf{n}-\mathbf{k}_0)|^2d\Omega_{\mathbf{n}}\equiv\frac{k_0}{4\pi}\int|f^{\mathrm{B}}(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)|^2d\Omega_{\mathbf{k}}.\end{aligned} \tag{3}$$

La relation obtenue $\operatorname{Im} f^{(2)}(E,\theta=0)=k\sigma^{\mathrm{B}}(E)/4\pi$ est le théorème optique au second ordre du calcul des perturbations (au premier ordre il a l'aspect d'identité $0\equiv 0$, voir 13.10).

13.12. La grandeur cherchée $|\eta|$ se déduit des relations

$$\sigma(E)=\frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} f(E,\theta=0),$$

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=0}=[\operatorname{Re} f(E,\theta=0)]^2+[\operatorname{Im} f(E,\theta=0)]^2,$$

de sorte que

$$|\eta(E)|=\frac{4\pi}{k\sigma(E)}\sqrt{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\theta=0}-\left(\frac{k\sigma(E)}{4\pi}\right)^2}, \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Comme Re $f(E, \theta = 0)$ est différent de zéro dès le premier ordre du calcul des perturbations tout en étant indépendant de l'énergie :

$$\text{Re } f(E, \theta = 0) \approx f^{\text{B}}(E, \theta = 0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV,$$

et du fait que Im $f(E, \theta = 0) > 0$, n'est non nul qu'au second ordre du calcul des perturbations, dans les conditions de validité de l'approximation de Born, $\eta(E)$ a les propriétés suivantes :

a) la fonction $\eta(E)$ possède un signe déterminé (pour un potentiel répulsif $U(r) \geq 0$ on a $\eta(E) < 0$, et pour un potentiel attractif $U(r) \leq 0$, on a $\eta(E) > 0$;
b) $|\eta(E)| \gg 1$ pour toutes les énergies (sauf dans le cas particulier où le potentiel est alterné et l'intégrale $\int U(r) dV$ est anormalement petite par rapport à $\int |U(r)| dV$).

On remarque aisément que $|\eta(E)| \to \infty$ lorsque $E \to 0$, pour un potentiel quelconque, même s'il ne peut pas être assimilé à une perturbation.

13.13. L'amplitude de diffusion sur deux centres dans l'approximation de Born vaut

$$f^{\text{B}}_{2c}(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} [U_0(\mathbf{r}) + U_0(\mathbf{r} - \mathbf{a})] dV = f^{\text{B}}_0(\mathbf{q})(1 + \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}}) \qquad (1)$$

(dans la seconde intégrale on a procédé à la substitution $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{a}$).

Pour $ka \ll 1$, comme $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta)$, on a de même $qa \ll 1$ et $\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}} \approx 1$, $f^{\text{B}}_{2c} \approx 2f^{\text{B}}_0$ et la section efficace de diffusion sur deux centres est quatre fois plus grande que sur un centre : $\sigma_{2c} \approx 4\sigma_0$.

Compte tenu de la relation (1), la section efficace de diffusion sur deux centres peut être écrite sous la forme

$$\sigma_{2c} = 2 \int |f^{\text{B}}(\mathbf{q})|^2 (1 + \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}) d\Omega. \qquad (2)$$

Pour $kR \gtrsim 1$ et $a \gg R$ on a $ka \gg 1$, aussi la grandeur qa varie-t-elle sensiblement pour une petite modification de l'angle de diffusion. Le terme dans l'intégrale (2) contenant $\cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}$ oscille rapidement et sa contribution dans l'intégrale est beaucoup plus petite que celle du premier terme qui n'oscille pas. C'est pourquoi dans les conditions posées, $kR \gtrsim 1$, $a \gg R$, la section efficace de diffusion sur deux centres est deux fois plus grande que celle sur un centre : $\sigma_{2c} \approx 2\sigma_0$.

Le fait que la relation entre les sections efficaces de diffusion sur deux centres et sur un centre dépende des conditions de diffusion est dû à l'interférence des ondes diffusées sur chaque centre.

13.14. L'amplitude de diffusion vaut (comparer au problème précédent)

$$f^{\text{B}}(\mathbf{q}) = f^{\text{B}}_0(q) \sum_n \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_n} \equiv f^{\text{B}}_0(q) G_N(\mathbf{q}). \qquad (1)$$

La section efficace différentielle de diffusion est donc

$$\frac{d\sigma_N}{d\Omega} = \frac{d\sigma_0}{d\Omega} |G_N(\mathbf{q})|^2. \qquad (2)$$

Soulignons le fait que le facteur $|G_N(\mathbf{q})|^2$ ne dépend que de la position des centres dans l'espace et du vecteur $\mathbf{q}$ (mais pas de la forme de l'interaction des particules avec un centre particulier !).

Pour une chaîne linéaire de centres de diffusion (fig. 9) $\mathbf{a}_n = (n-1)b\mathbf{n}_0$, $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}_0/k_0$, et comme $\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}_0 = -q^2/2k$, on a

$$G_N = \sum_{n=1}^{N} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}_0 b(n-1)} = \frac{1-\exp(iNq^2b/2k)}{1-\exp(iq^2b/2k)}, \qquad |G_N(\mathbf{q})| = \left[\frac{\sin(Nq^2b/4k)}{\sin(q^2b/4k)}\right]^2. \quad (3)$$

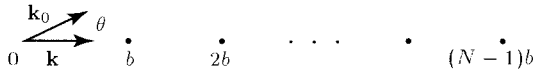

Figure 9

Pour $N \gg 1$, selon (3), $|G_N(\mathbf{q})|^2$ n'est sensiblement grand que pour des valeurs de q, telles que $q^2b/4k \approx \pi p$ avec $p = 0, 1, \ldots$. Les particules ne sont donc diffusées que sous des angles déterminés.

Pour $kb \ll 1$ (alors, on a aussi $qb \ll 1$), la section efficace de diffusion totale des particules peut être écrite sous la forme

$$\sigma = \frac{\pi N}{k^2}\int_0^{4k^2} |f_0^{\mathrm{B}}(q)|^2 \left[\frac{\sin(Nq^2b/4k)}{Nq^2b/4k}\right]^2 N\,dq^2. \quad (4)$$

Vu que la fonction $(\sin y/y)^2$ n'est sensiblement différente de zéro que pour $y \lesssim 1$, la contribution essentielle à l'intégrale (4) est due à l'intervalle $q^2 \lesssim k/Nb$. Aussi la grandeur $|f_0^{\mathrm{B}}(q)|^2$ peut-elle être sortie de l'intégrale avec sa valeur au point $q = 0$ et, du fait que

$$\int_0^\infty \frac{\sin^2 y}{y^2}dy = -\int_0^\infty \sin^2 y\ \ d\left(\frac{1}{y}\right) = \int_0^\infty \frac{2\sin y\cos y}{y}dy = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x}dx = \frac{\pi}{2},$$

on obtient la section efficace de diffusion totale des particules $\sigma = 2\pi^2 N|f_0^{\mathrm{B}}(0)|^2/bk$.

13.15. La transformée de Fourier du potentiel vaut

$$\widetilde{U}(q) = \int U_0 \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-r^2/R^2}dV = \pi\sqrt{\pi}R^3U_0\mathrm{e}^{-q^2R^2/4}.$$

De plus, l'amplitude de diffusion au second ordre du calcul des perturbations $f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ s'écrit

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\mathbf{k}_0,\mathbf{k}) &= \frac{m^2}{8\pi^4\hbar^4}\int \frac{\widetilde{U}(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_0)\widetilde{U}(\mathbf{k}-\boldsymbol{\kappa})}{\kappa^2-k_0^2-i\varepsilon}d^3\kappa \\ &= \frac{m^2R^6U_0^2}{8\pi\hbar^4}\mathrm{e}^{-q^2R^2/8}\int \frac{\exp\left\{-[\boldsymbol{\kappa}-(\mathbf{k}_0+\mathbf{k})/2]^2R^2/2\right\}}{\kappa^2-k_0^2-i\varepsilon}d^3\kappa. \quad (1) \end{aligned}$$

De l'expression (1), on déduit que le rôle dominant dans l'intégrale en κ est joué par le domaine pour lequel $|\boldsymbol{\kappa} - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2|R \lesssim 1$ (pour les autres points, la fonction sous l'intégrale est exponentiellement petite). Dans ce domaine de valeurs de κ, pour $qR \gg 1$ (dans ce cas, on a également $|\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}|R \gg 1$) le dénominateur de la fonction sous l'intégrale de l'expression (1) varie très peu et il peut être sorti de l'intégrale avec sa valeur au point $\boldsymbol{\kappa} = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2$; l'intégrale qui en résulte se calcule de façon élémentaire par le changement de variable $\boldsymbol{\kappa}' = \boldsymbol{\kappa} - (\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})/2$, et l'on obtient pour $f^{(2)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ dans le domaine des grands transferts d'impulsion $qR \gg 1$, l'expression suivante :

$$f^{(2)} = -\frac{\sqrt{2\pi} m^2 R^3 U_0^2}{q^2 \hbar^4} \mathrm{e}^{-q^2R^2/8}. \tag{2}$$

Vu que dans l'approximation de Born, $f^{\mathrm{B}} = f^{(1)} \propto \mathrm{e}^{-q^2R^2/4}$, pour des valeurs suffisamment grandes de q^2 on aura $|f^{(2)}| \gg |f^{\mathrm{B}}|$ ($f^{(2)}$ décroît plus lentement que f^{B}). Cela signifie que pour de grandes valeurs de q^2, l'approximation de Born n'est plus valable, et dans le calcul de l'amplitude de diffusion, suivant la théorie des perturbations, on ne peut pas se limiter aux premiers termes de la série.

13.16. Pour des particules d'énergie $E = 0$, l'amplitude de diffusion de Born ainsi que celle de diffusion exacte sont données par les expressions

$$f^{\mathrm{B}}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) dV, \qquad f^{\mathrm{ex}}(0) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r) \Psi_0(r) dV, \tag{1}$$

où $\Psi_0(r)$ est la fonction d'onde de l'état avec $E = 0$ satisfaisant à l'équation

$$\Psi_0(r) = 1 - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(r') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi_0(r') dV' \tag{2}$$

(voir, par exemple, 13.1 ; pour $E = 0$ on a de même $k_0 = 0$ et les fonctions $\Psi_0^{(+)}$ et $\Psi_0^{(-)}$ coïncident, ce qui permet d'écrire tout simplement Ψ_0).

Dans un potentiel répulsif $U(r) \geq 0$, la fonction d'onde avec $E = 0$ est la fonction d'onde de l'état fondamental ; elle n'a pas de zéros, c'est-à-dire n'est pas alternée, et comme $\Psi_0(\infty) = 1$, on a $\Psi_0(r) \geq 0$. Dans ce cas, l'intégrale de l'expression (2) est positive ; ainsi, pour un potentiel répulsif, $0 \leq \Psi_0(r) \leq 1$, et, d'après (1), on a $|f^{\mathrm{ex}}(0)| < |f^{\mathrm{B}}(0)|$; donc la valeur exacte de la section efficace de diffusion est plus petite que celle calculée d'après la formule de l'approximation de Born.

De façon absolument analogue on trouve que dans le cas b) $f^{\mathrm{ex}}(0) > f^{\mathrm{B}}(0) > 0$ et la valeur de Born de la section efficace est inférieure à la valeur exacte.

Soulignons que les relations obtenues entre la valeur de Born et la valeur exacte de la section efficace de diffusion pour $E = 0$, sont valables, même en dehors des conditions de validité de l'approximation de Born.

13.17. En reportant dans l'expression de l'amplitude de diffusion pour un potentiel central $U(r)$, avec l'approximation de Born,

$$f^{\mathrm{B}} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int U(r) \frac{\sin qr}{qr} r^2 dr$$

le développement

$$\frac{\sin qr}{qr} = \frac{\sin\sqrt{2k^2r^2 - 2k^2r^2\cos\theta}}{\sqrt{2k^2r^2 - 2k^2r^2\cos\theta}} = \frac{\pi}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[J_{l+1/2}(kr)]^2 P_l(\cos\theta),$$

on trouve

$$f^{\mathrm{B}} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left\{-\frac{\pi m}{k\hbar^2}\int_0^{\infty} U(r)[J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr\right\} P_l(\cos\theta). \tag{1}$$

En comparant l'expression (1) au développement général de l'amplitude de diffusion exacte en ondes partielles pour des petits déphasages $|\delta_l(k)| \ll 1$ (ce qui constitue ici la condition de validité de l'approximation de Born) :

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

il vient de l'égalité $f^{\mathrm{ex}} \approx f^{\mathrm{B}}$

$$\delta_l(k) \approx \delta_l^{\mathrm{I}}(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} U(r)[J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr. \tag{2}$$

L'expression (2) est le premier terme du développement du déphasage en puissances de l'interaction.

13.18. Comme dans l'approximation de Born les amplitudes de diffusion pour les potentiels d'échange et ordinaire sont liées par la relation $f^{\mathrm{B}}_{\text{éch}}(\theta) = f^{\mathrm{B}}(\pi - \theta)$ (voir 13.8), le développement de l'amplitude $f^{\mathrm{B}}_{\text{éch}}$ en ondes partielles peut être obtenu directement de l'expression (1) du problème précédent par substitution de $(\pi - \theta)$ à θ. Or dans cette substitution $P_l(\cos\theta)$ devient $(-1)^l P_l(\cos\theta)$, et, compte tenu de l'expression (2) du problème précédent, les déphasages de Born pour le potentiel d'échange valent

$$\delta^{\mathrm{B}}_{\text{éch},l}(k) = -(-1)^l \frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} U(r)[J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr. \tag{1}$$

L'apparition dans l'expression (1) d'un facteur supplémentaire $(-1)^l$, absent pour le potentiel ordinaire, s'explique facilement si l'on tient compte de la propriété suivante de l'interaction d'échange : $\widehat{U}_{\text{éch}}\Psi(\mathbf{r}) = U(r)\Psi(-\mathbf{r})$. Dans un état ayant une valeur déterminée du moment cinétique l de la particule, cette interaction donne $\widehat{U}_{\text{éch}}\Psi_l(\mathbf{r}) = U(r)\Psi_l(-\mathbf{r}) = (-1)^l U(r)\Psi_l(+\mathbf{r})$, et l'énergie potentielle change de signe selon que l est pair ou impair (si pour des l pairs, l'interaction est attractive, pour des l impairs, elle est répulsive).

13.19. L'expression du déphasage dans l'approximation de Born est

$$\delta_l^{\mathrm{B}}(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^{\infty} U(r)[J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr. \tag{1}$$

Pour $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \to 0$, l'argument de la fonction de Bessel $x = kr$ dans le domaine des valeurs de r tel que $r \lesssim R$, est petit ($x \ll 1$), et comme

$$J_{l+1/2}(x) \approx \frac{1}{\Gamma(l+3/2)} \left(\frac{x}{2}\right)^{l+1/2}, \qquad x^2 \ll l + 1/2,$$

on a, d'après (1), pour $E \to 0$

$$\delta_l^{\mathrm{B}}(k) \approx -\frac{\pi m}{\hbar^2 \Gamma^2(l+3/2)} \int_0^\infty U(r) r^{2l+2} dr (k/2)^{2l+1} \propto k^{2l+1}. \tag{2}$$

Il est clair que l'expression (2) est également valable pour des potentiels de la forme : $U \propto r^{-\nu}$ pour $r \to \infty$, mais seulement si $l < (\nu - 3)/2$ (dans le cas contraire l'intégrale dans (2) diverge).

Pour les potentiels ne satisfaisant pas à la condition de validité de l'approximation de Born $m|U_0|R^2/\hbar^2 \ll 1$, la formule (2) n'est plus valable ; toutefois, on a toujours un comportement $\delta_l(k) \propto k^{2l+1}$ pour $k \to 0$.

13.20. L'expression du déphasage dans l'approximation de Born est

$$\delta_l^{\mathrm{B}}(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2} \int_0^\infty U(r) [J_{l+1/2}(kr)]^2 r dr. \tag{1}$$

Pour $k = \sqrt{2mE/\hbar^2} \to \infty$, dans tout le domaine d'intégration, à l'exception d'une bande étroite de petites valeurs de r, l'argument de la fonction de Bessel $x = kr$ est grand : $x \gg 1$. En remplaçant dans la formule (1) la fonction de Bessel par son expression asymptotique

$$J_{l+1/2}(x) \approx \left(\frac{2}{\pi x}\right)^{1/2} \sin\left(x - \frac{\pi l}{2}\right), \qquad x \gg (l+1/2)^2,$$

on trouve pour $k \to \infty$

$$\delta_l^{\mathrm{B}}(k) \approx -\frac{2m}{k\hbar^2} \int_0^\infty U(r) \sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right) dr \approx -\frac{m}{k\hbar^2} \int_0^\infty U(r) dr \tag{2}$$

(dans l'intégrale le facteur qui oscille rapidement $\sin^2\left(kr - \frac{\pi l}{2}\right)$ peut être remplacé par sa valeur moyenne égale à $1/2$). Mais si $U(r)$, pour $r \to 0$, croît comme r^{-1}, ou plus rapidement, l'expression (2) n'est plus valable (l'intégrale diverge). Pour ces potentiels, le domaine des petites valeurs de r donne une contribution dominante à l'intégrale de l'expression (1) et la substitution dans ce domaine de la fonction de Bessel par son expression asymptotique donne un résultat erroné.

Notons que si le potentiel est borné pour toutes les valeurs de r, pour une énergie suffisamment grande (telle que $|U_0|R \ll \hbar v$) il peut toujours être assimilé à une perturbation et, dans ce cas, le comportement asymptotique des déphasages pour $E \to \infty$ est donné par la formule (2).

13.21. L'expression quasi classique du déphasage [1]

$$\delta_l(k) = -\int_{r_0}^\infty \frac{mU(r)dr}{\hbar^2 \sqrt{k^2 - (l+1/2)^2/r^2}}, \qquad r_0 = \frac{l+1/2}{k}, \tag{3}$$

pour $E \to \infty$ donne

$$\delta_l(k) \approx -\frac{m}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)dr \tag{1}$$

en accord avec le résultat obtenu dans le problème précédent. La condition de validité de l'expression (1) est la convergence de l'intégrale.

13.22. Les déphasages des ondes s dans l'approximation de Born sont égaux à

$$\delta_0(k) = -\frac{\pi m}{\hbar^2}\int_0^\infty rU(r)J_{1/2}^2(kr)dr = -\frac{2m}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)\sin^2 krdr. \tag{1}$$

Une intégration élémentaire donne :

a) $\delta_0(k) = -\dfrac{2mRU_0\sin^2 kR}{k\hbar^2}$;

b) $\delta_0(k) = -\dfrac{4mR^3U_0k}{\hbar^2(1+4k^2R^2)}$.

La condition de validité de l'expression (1) pour des particules pas trop rapides avec $kR \lesssim 1$, est $|\delta_0(kR \sim 1)| \ll 1$ (R étant le rayon d'action du potentiel). Dans les cas considérés, cette condition prend la forme $|U_0| \ll \hbar^2/mR^2$, comme il fallait s'y attendre.

La valeur des déphasages des ondes s permet d'obtenir la section efficace de diffusion des particules lentes $kR \ll 1$:

$$\sigma \approx 4\pi\left[\frac{\delta_0(k)}{k}\right]^2, \qquad k \to 0.$$

13.23. Vu que $|\delta_0(k)| \ll 1$, le potentiel est faible et il peut être assimilé à une perturbation. Dans ce cas le déphasage est défini par l'expression (voir, par exemple, 13.17)

$$\delta_0(k) = -\frac{2m}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)\sin^2(kr)dr = -\frac{m}{k\hbar^2}\int_0^\infty U(r)[1-\cos 2kr]dr. \tag{1}$$

Multiplions les deux membres de l'égalité (1) par $(-k\hbar^2/2m)$ et, ensuite, dérivons par rapport à k ; on obtient ainsi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)] = \int_0^\infty rU(r)\sin(2kr)dr \equiv \frac{i}{2}\int_{-\infty}^\infty rU(|r|)e^{-2ikr}dr. \tag{2}$$

Le potentiel $U(r)$ est défini pour $r > 0$; on a introduit de façon formelle les valeurs $r < 0$ en définissant la fonction $U(r)$ par $U(-|r|) = U(|r|)$. De façon analogue, le déphasage n'est défini que pour $k > 0$, toutefois la formule (1) permet aussi de considérer formellement $\delta_0(k)$ pour $k < 0$, $\delta_0(k) = -\delta_0(-k)$ étant dans ce cas une fonction impaire de k.

La formule (2) correspond à la transformée de Fourier de la grandeur $rU(|r|)$ et permet d'obtenir le potentiel par la transformation de Fourier inverse

$$rU(|r|) = \frac{i\hbar^2}{m}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)]\mathrm{e}^{2ikr}d(2k). \tag{3}$$

Comme la fonction $\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)]$ est impaire (voir plus haut),

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2}{\pi mr}\int_0^{\infty}\frac{d}{dk}[k\delta_0(k)]\sin(2kr)dk \qquad (r>0). \tag{4}$$

a) Pour $\delta_0(k) = C = \text{cte}$ (pour $k > 0$), selon (4), on a

$$U(r) = -\frac{2\hbar^2 C}{\pi mr}\int_0^{\infty}\sin(2kr)dk = -\frac{C\hbar^2}{\pi mr^2}\int_0^{\infty}\sin x\,dx = -\frac{C\hbar^2}{\pi mr^2} \equiv -\frac{\alpha}{r^2}.$$

b) Ici on a $\dfrac{d}{dk}[k\delta_0(k)] = \dfrac{2\alpha k}{[1+\beta k^2]^2}$. En reportant cette expression dans (3) et en calculant l'intégrale par le théorème des résidus (pour $r > 0$ le contour d'intégration peut être fermé sur le demi-plan supérieur de la variable complexe k), on obtient

$$U(r) = -\frac{2\alpha\hbar^2}{m\sqrt{\beta^3}}\mathrm{e}^{-2r/\sqrt{\beta}} \equiv U_0\mathrm{e}^{-r/R}.$$

13.24. Pour calculer le déphasage de l'onde s, il faut trouver la solution à symétrie sphérique (vu que $l = 0$) de l'équation de Schrödinger $\Psi_0(r)$. Son comportement asymptotique pour $r \to \infty$: $\Psi_0(r) \propto \frac{1}{r}\sin(kr+\delta_0)$ donne alors $\delta_0(k)$.

a) L'équation de Schrödinger pour $r > R$ de la fonction $\chi(r)$, liée à la fonction d'onde Ψ_0 par la relation $\chi = r\Psi_0$, et sa solution satisfaisant à la condition limite $\chi(R) = 0$, sont de la forme

$$\chi'' + k^2\chi = 0, \qquad \chi(r) = A\sin[k(r-R)]. \tag{1}$$

On voit à partir de (1) que $\delta_0(k) = -kR$.

b) La solution de l'équation de Schrödinger pour la fonction $\chi = r\Psi_0$, satisfaisant à la condition $\chi(0) = 0$, a la forme

$$\chi(r) = \begin{cases} A\sin\kappa r, & r < R, \\ B\sin(kr+\delta_0(k)), & r > R, \end{cases} \tag{2}$$

avec $\kappa = \sqrt{2m(E+U_0)/\hbar^2}$.

Les conditions de continuité de la fonction d'onde $\chi(r)$ (2) et de sa dérivée au point $r = R$, conduisent à la relation $\kappa\,\text{cotan}\,\kappa R = k\,\text{cotan}\,(kR+\delta_0(k))$ d'où

$$\delta_0(k) = -kR + \text{arc cotan}\left[\frac{\kappa}{k}\,\text{cotan}\,\kappa R\right].$$

c) Si l'on représente la fonction d'onde $\Psi_0(r)$ sous la forme $\Psi_0(r) = \chi(r)/r$ et si l'on procède au changement de variable $x = \exp(-r/2R)$, l'équation de Schrödinger prend alors la forme

$$\frac{d^2}{dx^2}\chi + \frac{1}{x}\frac{d}{dx}\chi + \left[\lambda^2 - \frac{(ip)^2}{x^2}\right]\chi = 0, \tag{3}$$

où $\lambda = \sqrt{8mU_0R^2/\hbar^2}$, $p = \sqrt{8mER^2/\hbar^2} = 2kR$.

L'équation (3) est l'équation de Bessel et sa solution générale est

$$\chi(x) = C_1 J_{ip}(\lambda x) + C_2 J_{-ip}(\lambda x).$$

La solution qui nous intéresse doit satisfaire à la condition limite $\chi(r = 0) = \chi(x = 1) = 0$. Elle a la forme

$$\chi(x) = A[J_{-ip}(\lambda)J_{ip}(\lambda x) - J_{ip}(\lambda)J_{-ip}(\lambda x)]. \tag{4}$$

Le déphasage se détermine par le comportement asymptotique de la fonction d'onde pour $r \to \infty$ $(x \to 0)$:

$$\chi \propto \sin[kr + \delta_0] \equiv \frac{1}{2i}[e^{ikr+i\delta_0} - e^{-ikr-i\delta_0}] = \frac{1}{2i}[e^{i\delta_0}x^{-2ikR} - e^{-i\delta_0}x^{2ikR}]. \tag{5}$$

Compte tenu de la propriété de la fonction de Bessel $J_\nu(x) \approx \frac{1}{\Gamma(1+\nu)}(x/2)^\nu$, $x \to 0$, on obtient le comportement de la fonction (4) pour $x \to 0$:

$$\chi(x) \approx A\left[\frac{J_{-ip}(\lambda)}{\Gamma(1+ip)}\left(\frac{\lambda x}{2}\right)^{ip} - \frac{J_{ip}(\lambda)}{\Gamma(1-ip)}\left(\frac{\lambda x}{2}\right)^{-ip}\right]. \tag{6}$$

En comparant les expressions (5) et (6), on obtient

$$e^{2i\delta_0} = \frac{(\lambda/2)^{-ip}\Gamma(1+ip)J_{ip}(\lambda)}{(\lambda/2)^{ip}\Gamma(1-ip)J_{-ip}(\lambda)}. \tag{7}$$

Pour des particules de vitesse nulle, la section efficace de diffusion peut être calculée d'après la formule $\sigma(E = 0) = 4\pi(\delta_0(k)/k)^2_{k\to 0}$ et est égale à :

a) $\sigma = 4\pi R^2$;

b) $\delta_0(k) \approx k(-R + \frac{1}{\kappa_0}\ \mathrm{tg}\ \kappa_0 R)$ pour $k \to 0$, $\kappa_0 = \sqrt{2mU_0/\hbar^2}$

$$\sigma(E = 0) = 4\pi R^2\left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0R^2}}\ \mathrm{tg}\ \sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} - 1\right)^2. \tag{8}$$

L'expression (8) pour $U_0 > 0$ fournit la section efficace de diffusion par un puits de potentiel de profondeur U_0 et de largeur R. Pour $U_0 < 0$, on a une barrière de potentiel ; κ_0 est alors purement imaginaire. En représentant κ_0 sous la forme

de $\kappa_0 \equiv i|\kappa_0|$ et compte tenu de la relation $\tan i|x| = i\,\mathrm{th}\,|x|$, on trouve la section efficace de diffusion par la barrière de potentiel des particules d'énergie nulle :

$$\sigma(E=0) = 4\pi R^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|U_0|R^2}}\ \mathrm{th}\ \sqrt{\frac{2m|U_0|R^2}{\hbar^2} - 1} \right)^2 . \tag{9}$$

Dans la limite $|U_0| \ll \hbar^2/mR^2$, les formules (8) et (9) donnent

$$\sigma \approx \frac{16\pi R^2}{9} \left(\frac{mU_0R^2}{\hbar^2} \right)^2 \ll \pi R^2,$$

ce qui correspond au résultat de l'approximation de Born (voir 13.4, e)).

c) Le comportement de $\delta_0(k)$ pour $k \to 0$ s'obtient aisément si l'on se sert des développements suivants ($p = 2kR \to 0$) :

$$\Gamma(1 \pm ip) \approx \Gamma(1) + \Gamma'(1)(\pm ip) \equiv 1 \mp 2ikRC, \tag{10}$$

où $C = -\Gamma'(1) = 0,577$ est la constante d'Euler,

$$(\lambda/2)^{\pm ip} = \mathrm{e}^{\pm ip \ln(\lambda/2)} \approx 1 \pm ip \ln(\lambda/2) = 1 \pm 2ikR \ln(\lambda/2), \tag{11}$$
$$J_{\pm ip}(\lambda) \approx J_0(\lambda) \pm ip(dJ_\nu(\lambda)/d\nu)_{\nu=0}.$$

Pour le calcul de la dérivée $dJ_\nu/d\nu$, utilisons la fonction de Neumann

$$N_\nu(z) = \frac{J_\nu(z)\cos\nu\pi - J_{-\nu}(z)}{\sin\nu\pi}. \tag{12}$$

Pour $\nu \to 0$, on a d'après (12)

$$(dJ_\nu(z)/d\nu)_{\nu=0} = \frac{\pi}{2} N_0(z)$$

et, donc,

$$J_{\pm ip}(\lambda) \approx J_0(\lambda) \pm \frac{ip\pi}{2} N_0(\lambda) = J_0(\lambda) \pm ik\pi R N_0(\lambda). \tag{13}$$

Compte tenu des relations (10), (11), (13), il vient de la formule (7), pour $k \to 0$,

$$\mathrm{e}^{2i\delta_0} \approx 1 + 2i\delta_0(k) \approx 1 + 2ikR \left[\pi \frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)} - 2\ln\frac{\lambda}{2} - 2C \right], \tag{14}$$

et la section efficace de diffusion pour des particules d'énergie $E = 0$ est égale à

$$\sigma(E=0) = 16\pi R^2 \left[C + \ln\frac{\lambda}{2} - \frac{\pi}{2}\frac{N_0(\lambda)}{J_0(\lambda)} \right]^2 . \tag{15}$$

Pour $U_0 < 0$, le potentiel représente une barrière de potentiel. Dans ce cas, λ est une grandeur purement imaginaire. En écrivant $\lambda \equiv i|\lambda|$ et en se servant des formules connues

$$I_0(|\lambda|) = J_0(i|\lambda|), \qquad K_0(|\lambda|) = -\frac{\pi}{2} N_0(i|\lambda|) + \frac{i\pi}{2} I_0(|\lambda|),$$
$$\ln(i|\lambda|) = \ln|\lambda| + i\pi/2,$$

on trouve sans peine comment varient les expressions (14), (15) quand on passe d'un puits de potentiel à une barrière. En particulier, la section efficace de diffusion prend la forme

$$\sigma(E=0) = 16\pi R^2 \left[C + \ln\frac{|\lambda|}{2} + \frac{K_0(|\lambda|)}{I_0(|\lambda|)}\right]^2. \tag{16}$$

On invite le lecteur à montrer que, pour $|U_0| \ll \hbar^2/mR^2$, on retrouve le résultat de l'approximation de Born.

Les sections efficaces de diffusion des particules d'énergie $E = 0$ obtenues ci-dessus, sont également valables pour des particules lentes $kR \ll 1$, sauf sauf dans le cas d'une diffusion résonnante, quand $\sigma(E=0) \gg \pi R^2$.

13.25. Dans un potentiel central $U(r)$, décroissant pour $r \to \infty$ plus vite que r^{-3}, la solution de l'équation de Schrödinger pour $E = 0$ a la symétrie sphérique, ce qui prouve que, pour des particules de faible énergie, la diffusion n'est importante que dans l'état s. De plus, le comportement asymptotique de la fonction d'onde pour $r \to \infty$ est de la forme $\Psi \approx 1 - a/r$, où $a = -f(E=0)$ est la longueur de diffusion et $\sigma(0) = 4\pi a^2$.

Pour le potentiel donné dans ce problème, l'équation de Schrödinger pour $E = 0$ s'écrit

$$\Delta\Psi(r) - \frac{2m\alpha}{\hbar^2 r^4}\Psi(r) = 0, \text{ ou } \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr}\Psi(r) - \frac{2m\alpha}{\hbar^2 r^4}\Psi(r) = 0,$$

et après le changement de variable $x = 1/r$, elle prend la forme

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi - \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\Psi = 0,$$

et possède la solution suivante, bornée pour $r = 0$ $(x = \infty)$:

$$\Psi = C\exp[-x\sqrt{2m\alpha/\hbar^2}] = C\exp\left[-\frac{1}{r}\sqrt{2m\alpha/\hbar^2}\right].$$

Pour $r \to \infty$, $\Psi(r) \approx C\left[1 - \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\frac{1}{r}\right]$, de sorte que $a = \sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}$ et la section efficace totale $\sigma(E=0) = 8\pi m\alpha/\hbar^2$.

13.26. Il s'agit de résoudre l'équation de Schrödinger $(E = 0)$

$$\Delta\Psi(\mathbf{r}) = 0, \qquad \left(\text{pour } \frac{x^2+y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} > 1\right)$$

avec la condition limite $\Psi(\mathbf{r}_0) = 0$, pour $\dfrac{x_0^2+y_0^2}{b^2} + \dfrac{z_0^2}{c^2} = 1$.

L'expression asymptotique de la solution pour $r \to \infty$ s'écrit :

$$\Psi(\mathbf{r}) \approx 1 - a/r \qquad (a = -f(E=0)),$$

où a est la longueur de diffusion.

Pour la fonction $\varphi(\mathbf{r}) = 1 - \Psi$, l'équation, les conditions aux limites et le comportement asymptotique s'écrivent

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) = 0, \qquad \varphi(\mathbf{r}) = a/r \text{ pour } r \to \infty, \tag{1}$$
$$\varphi(\mathbf{r}_0) = 1 \text{ pour } \frac{x_0^2 + y_0^2}{b^2} + \frac{z_0^2}{c^2} = 1.$$

Pour déterminer la valeur de a, notons que, d'après (1), la fonction $\varphi(\mathbf{r})$ peut être considérée comme le potentiel électrostatique créé par un ellipsoïde de révolution conducteur (avec l'axe z comme axe de symétrie) dont le potentiel sur la surface vaut $\varphi_0 = 1$ et dont la charge est $e = a$. Le potentiel et la charge étant liés par la relation $e = C\varphi_0$, où C est la capacité de l'ellipsoïde, la longueur de diffusion des particules sur l'ellipsoïde "dur" est égale à la capacité électrostatique du conducteur[1]. La solution du problème électrostatique (1) pour $c > b$ est connue et s'écrit

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{e}{2\sqrt{c^2 - b^2}} \ln \frac{z + \sqrt{c^2 - b^2} + \sqrt{[z + \sqrt{c^2 - b^2}]^2 + x^2 + y^2}}{z - \sqrt{c^2 - b^2} + \sqrt{[z - \sqrt{c^2 - b^2}]^2 + x^2 + y^2}}. \tag{2}$$

Ce problème peut être résolu par la méthode des images : le potentiel de l'ellipsoïde de révolution conducteur coïncide avec celui d'un segment régulièrement chargé dont les extrémités se trouvent aux foyers de l'ellipsoïde de coordonnées $x = y = 0$, $z = \pm\sqrt{c^2 - b^2}$. En déterminant la "charge" e dans la formule (2) à partir de la condition $\varphi_0 = 1$ à la surface de l'ellipsoïde ($a = e$), il vient

$$a = 2\sqrt{c^2 - b^2} \left[\ln \frac{c + \sqrt{c^2 - b^2}}{c - \sqrt{c^2 - b^2}} \right]^{-1} \tag{3}$$

(il est commode, pour déterminer le potentiel, de choisir le point de l'ellipsoïde situé sur l'axe z dont les coordonnées sont $x = y = 0$, $z = c$).

Pour $c = b$, on obtient à partir de la formule (3), $a = c$ et $\sigma(E = 0) = 4\pi c^2$. On retrouve bien le résultat connu pour la diffusion de particules lentes sur une sphère dure de rayon $R = c$.

Pour $c \gg b$, la formule (3) donne

$$a \approx \frac{c}{\ln(2c/b)}, \qquad \sigma(E = 0) = \frac{4\pi c^2}{\ln^2(2c/b)}.$$

1 Il est clair que la relation $a = C$ est valable pour la diffusion des particules avec $E = 0$ sur tout corps "dur", C étant dans ce cas la capacité électrostatique du conducteur. En particulier, pour la diffusion de particules sur un disque dur de rayon R, la section efficace de diffusion est égale à $\sigma(E = 0) = (16/\pi)R^2$ (la capacité du disque $C = 2R/\pi$).

13.27. D'après la formule donnant l'amplitude de diffusion (voir, par exemple, 13.1)

$$f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) dV, \tag{1}$$

pour un potentiel $U(r)$ ayant à grande distance le comportement donné dans l'énoncé, $f(\mathbf{k}_0, \mathbf{k})$ croît indéfiniment pour $q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = 2k \sin(\theta/2) \to 0$. En effet, à cause de la lente décroissance de la fonction sous l'intégrale dans (1) pour $r \to \infty$, avec $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \approx \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}$, la contribution dominante dans (1) pour des petites valeurs de q vient du domaine des grandes distances. Dans ce cas,

$$f \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_{r>R} \frac{\alpha}{r^n} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dV = -\frac{2m\alpha}{q\hbar^2} \int_R^\infty \frac{\sin qr}{r^{n-1}} dr \tag{2}$$

(la contribution du domaine $r < R$ pour $q \to 0$ reste finie et est négligeable par rapport à l'expression (2) qui diverge).

Il convient de récrire (2) sous la forme

$$f \approx -\frac{2m\alpha}{\hbar^2 q^{3-n}} \int_{qR}^\infty \frac{\sin x}{x^{n-1}} dx. \tag{3}$$

Pour $n < 3$, la borne inférieure dans cette intégrale ($qR \ll 1$) peut être remplacée par zéro, et comme

$$C_n = \int_0^\infty \frac{\sin x}{x^{n-1}} dx = \left(\sin\frac{\pi n}{2}\right) \Gamma(2-n) = -\frac{\pi \sin(\pi n/2)}{\Gamma(n-1)\sin(\pi n)}, \tag{4}$$

l'amplitude de diffusion pour les petites valeurs de q est égale à

$$f = \widetilde{C}_n / q^{3-n}, \qquad \widetilde{C}_n = \frac{m\alpha\pi}{\hbar^2 \Gamma(n-1)\cos(\pi n/2)}. \tag{5}$$

Lors de la diffusion de particules lentes ($E = 0$), l'expression (5) est valable pour tous les angles de diffusion et la section efficace de diffusion vaut

$$\begin{aligned} \sigma &= \int |f|^2 d\Omega = 2\pi \widetilde{C}_n^2 \int_0^\pi \frac{\sin\theta d\theta}{[4k^2 sin^2(\theta/2)]^{3-n}} \\ &= 2\pi \widetilde{C}_n^2 \left(\frac{\hbar^2}{4mE}\right)^{3-n} \int_{-1}^1 \frac{dz}{(1-z)^{3-n}} \propto E^{-(3-n)} \to \infty. \end{aligned}$$

13.28. Ce problème se résout de la même façon que le précédent. Toutefois, dans la formule (3) pour $n = 3$, on ne peut plus remplacer par zéro la borne inférieure d'intégration à cause de la divergence de l'intégrale en 0. Vu que, pour $x \ll 1$, $\sin x \approx x$, il est facile de calculer la partie divergente pour $q \to 0$ de l'amplitude de diffusion :

$$f \approx -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{qR}^\infty \frac{\sin x}{x^2} dx = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \left\{ \int_{qR}^{a \ll 1} \frac{dx}{x} + \int_a^\infty \frac{\sin x}{x^2} dx \right\} \approx \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \ln(qR).$$

Vu que $q = 2k\sin(\theta/2)$, la section efficace totale de diffusion de particules lentes est égale à

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega \approx \int \frac{4m^2\alpha^2}{\hbar^4} \ln^2(kR) d\Omega = \frac{16\pi m^2\alpha^2}{\hbar^4} \ln^2(kR) \to \infty.$$

13.29. En représentant la fonction propre commune des opérateurs $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{l}}^2$, $\widehat{l}_z$ sous la forme de $\Psi_{klm}(\mathbf{r}) = \chi_{kl}(r)Y_{lm}/\sqrt{r}$, on obtient pour χ_{kl} l'équation

$$\chi''_{kl} + \frac{1}{r}\chi'_{kl} + \left\{k^2 - \frac{1}{r^2}\left[(l+1/2)^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\right]\right\}\chi_{kl} = 0.$$

La solution de cette équation satisfaisant à la condition limite $\chi(0) = 0$:

$$\chi_{kl}(r) = CJ_\nu(kr),$$

où J_ν est la fonction de Bessel d'indice $\nu = \sqrt{(l+1/2)^2 + \dfrac{2m\alpha}{\hbar^2}}$ a, pour $r \to \infty$, le comportement asymptotique suivant :

$$\chi_{kl}(r) = C\sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin\left[kr - \frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{4}\right] \equiv C\sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin\left[kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right]. \tag{1}$$

A partir de (1), on trouve les déphasages :

$$\delta_l = -\frac{\pi\nu}{2} + \frac{\pi}{2}(l+1/2) = -\frac{\pi}{2}\left[\sqrt{(l+1/2)^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}} - (l+1/2)\right], \tag{2}$$

qui permettent de calculer l'amplitude de diffusion:

$$f(E,\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\mathrm{e}^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta). \tag{3}$$

a) Pour $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$, d'après (2), on obtient

$$\delta_l \approx -\frac{\pi m\alpha}{\hbar^2(2l+1)}, \qquad |\delta_l| \ll 1, \tag{4}$$

et, en développant dans l'expression (3) l'exponentielle au premier ordre, on obtient

$$f(E,\theta) = -\frac{\pi m\alpha}{k\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty} P_l(\cos\theta) = -\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2\sin(\theta/2)}. \tag{5}$$

Pour faire la somme de la série, on s'est servi de la fonction génératrice des polynômes de Legendre (en posant $z = \cos\theta$, $x = 1$) :

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+x^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} x^l P_l(z).$$

La section efficace de diffusion différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{\pi^2 m\alpha^2}{8\hbar^2 E \sin^2(\theta/2)} \tag{6}$$

est très différente du résultat obtenu en mécanique classique (voir [5]):

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{cl}} = \frac{\pi^2\alpha}{E}\frac{\pi-\theta}{\theta^2(2\pi-\theta)^2\sin\theta}. \tag{7}$$

Les expressions (5) et (6) coïncident, comme on s'y attend, avec le résultat obtenu dans l'approximation de Born (voir 13.4, d)).

b) Pour $m\alpha/\hbar^2 \gtrsim 1$, la série (3) avec les déphasages (2) ne peut pas être calculée pour un angle de diffusion quelconque. Il est facile de remarquer que, pour des angles de diffusion suffisamment petits, les expressions (5) et (6) demeurent valables. C'est lié au fait que, pour $\theta \to 0$, le module de l'amplitude de diffusion tend vers l'infini. Chaque terme dans la série (3) est borné, la divergence de l'amplitude signifie que dans la somme (3) les contributions principales viennent de grandes valeurs de l (l grand correspond à un angle de diffusion faible). Cependant, pour des l suffisamment grands, (4) devient valable et on en déduit les formules (5) et (6). De cette façon, pour des angles de diffusion suffisamment petits, indépendamment de la valeur du paramètre $m\alpha/\hbar^2$, l'amplitude de diffusion est donnée par l'expression obtenue dans l'approximation de Born. (Ce résultat est naturel, car pour la diffusion sous de petits angles, seules les grandes distances sont importantes. Pour les grandes distances, $U(r) = \alpha/r^2 \ll \hbar v/r$ et la condition de validité de l'approximation de Born est satisfaite).

c) Vu que

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

c'est-à-dire que cette somme est nulle pour $\theta \neq 0$, et comme $P_l(-1) = (-1)^l$, l'expression (3) pour $\theta = \pi$, compte tenu de (2), peut être écrite sous la forme

$$f(E, \theta = \pi) = \frac{1}{2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left[-i\pi\sqrt{(l+1/2)^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\right]. \tag{8}$$

Pour $m\alpha/\hbar^2 \gg 1$, la contribution principale vient des grandes valeurs[2] du moment cinétique $l \lesssim (m\alpha/\hbar^2)^{1/4}$ et pour lesquelles la sommation dans la formule (8) peut être remplacée par l'intégration :

$$f(E, \pi) \approx \frac{1}{k}\int_0^{\infty} l\exp\left[-i\pi\sqrt{l^2 + \frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\right] dl.$$

2 Pour des valeurs plus grandes de l, les termes de la somme (8) commencent à osciller rapidement et la partie correspondante de la somme est petite.

Avec le changement de variable $x = \sqrt{l^2 + 2m\alpha/\hbar^2}$, cette intégrale se transforme en

$$f(E,\pi) \approx \frac{1}{k}\int_{\sqrt{2m\alpha/\hbar^2}}^{\infty} x\exp(-i\pi x)dx, \tag{9}$$

et comme

$$\int_{x_0}^{\infty} xe^{-ax}dx = -\frac{\partial}{\partial a}\int_{x_0}^{\infty} e^{-ax}dx = \frac{(1+ax_0)}{a^2}e^{-ax_0}, \text{ pour } \quad \mathrm{Re}\, a \geq 0,$$

l'expression (9) de l'amplitude de diffusion vers l'arrière ($\theta = \pi$) est égale à

$$f(E,\pi) \approx \frac{-i\sqrt{2m\alpha}}{\pi\hbar k}\exp\left[-i\pi\sqrt{\frac{2m\alpha}{\hbar^2}}\right].$$

Dans ce cas, la section efficace de diffusion différentielle vers l'arrière, coïncide avec le résultat (7) de la mécanique classique pour $\theta = \pi$.

13.30. L'expression des déphasages dans l'approximation quasi classique est de la forme [1]

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

où r_0 est le point de rebroussement.

Dans ce problème, $U = 0$ sur tout le domaine d'intégration. L'intégrale de (1) se calcule par intégration par parties ($\tilde{l} \equiv l + 1/2$) :

$$\int_{r_0}^{\infty}\left[\sqrt{k^2 - \tilde{l}^2/r^2} - k\right]dr = r\left[\sqrt{k^2 - \tilde{l}^2/r^2} - k\right]\Bigg|_{r_0}^{\infty} +$$
$$\tilde{l}\int_{r_0}^{\infty}\frac{d(\tilde{l}/r)}{\sqrt{k^2 - \tilde{l}^2/r^2}} = -r_0\left(\sqrt{k^2 - \tilde{l}^2/r_0^2} - k\right) - \tilde{l}\arcsin\frac{\tilde{l}}{kr_0}.$$

On trouve donc,

$$\delta_l = (l+1/2)\left(\frac{\pi}{2} - \arcsin\frac{l+1/2}{kr_0}\right) - r_0\left(\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r_0^2}}\right). \tag{2}$$

Pour $l + 1/2 > kR$, on a $r_0 = \dfrac{l+1/2}{k}$, et donc d'après (2) :

$$\delta_l = 0 \qquad \text{pour } l > l_0 \equiv kR - 1/2. \tag{3}$$

Pour $l + 1/2 < kR$, on a $r_0 = R$ et

$$\delta_l = (l+1/2)\arccos\frac{l+1/2}{kR} - R\left(\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{R^2}}\right) \qquad \text{pour } l < l_0. \tag{4}$$

Pour $l > l_0$, un calcul exact donne des déphasages exponentiellement petits alors que l'approximation quasi classique donne des déphasages nuls.

L'expression (4) doit être précisée. Elle a été trouvée à partir de l'expression quasi classique (1) et n'est donc valable que si on peut, au voisinage du point de rebroussement, utiliser un développement linéaire du potentiel et raccorder la solution au voisinage du point de rebroussement à la solution quasi classique. Ce n'est pas le cas pour $r_0 = R$. Compte tenu des formules générales de l'approche quasi classique et des conditions de raccordement, on doit ajouter un terme complémentaire[3] égal à $(-\pi/4)$. De plus, les expressions (3) et (4) obtenues ne conviennent pas pour $l \approx l_0 \approx kR$, car dans ce cas il faut être plus vigilant dans le problème du raccordement des solutions au voisinage du point de rebroussement (on peut faire abstraction de ce fait dans les calculs ultérieurs).

Compte tenu de (3), l'amplitude de diffusion peut être écrite sous la forme

$$f(E,\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta). \tag{5}$$

La section efficace de diffusion totale, d'après le théorème optique, vaut

$$\sigma(E) = \frac{4\pi}{k}\ \mathrm{Im}\ f(E,\theta=0) = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)(1-\cos 2\delta_l). \tag{6}$$

Les déphasages (4) sont grands : $|\delta_l| \gg 1$ et varient d'une grandeur de l'ordre de l'unité si l'on change l en $l+1$. Les termes de la somme (6) contenant $\cos 2\delta_l$ oscillent rapidement et toute la partie correspondante de la somme est petite. En la négligeant, on obtient pour la section efficace totale l'expression ($l_0 \approx kR \gg 1$)

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1) = \frac{2\pi}{k^2}\frac{(2l_0+1)+1}{2}(l_0+1) \approx 2\pi R^2,$$

c'est-à-dire une valeur deux fois plus grande que la section efficace classique.

13.31. Utilisons les expressions (5) et (4) de la solution du problème précédent. Pour une valeur arbitraire de θ, les termes de la somme dans l'expression de l'amplitude de diffusion oscillent rapidement avec l à cause des oscillations des polynômes de Legendre, qui sont fonction de l pour une valeur fixée de θ (rappelons que dans le problème ce sont les grandes valeurs de l qui deviennent essentielles). Cependant, pour des petits angles de diffusion les oscillations des polynômes de Legendre sont moins importantes (pour $\theta = 0$ elles disparaissent complètement, car $P_l(1) \equiv 1$) ; et seuls les termes contenant le facteur $e^{2i\delta_l}$ oscillent.

En conséquence, en écrivant l'amplitude de diffusion sous la forme

$$f = f_{\text{dif}} + f_{\text{cl}}, \tag{1}$$

3 C'est le même "$-\pi/4$" qui a conduit à la modification de la règle de quantification de Bohr-Sommerfeld dans 9.2.

où[4]

$$f_{\text{dif}} = \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)P_l(\cos\theta), \qquad f_{\text{cl}} = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)\mathrm{e}^{2i\delta_l}P_l(\cos\theta), \tag{2}$$

on peut affirmer que pour des angles de diffusion suffisamment petits $f \approx f_{\text{dif}}$. En utilisant la formule connue (J_0 étant la fonction de Bessel)

$$P_l(\cos\theta) = J_0[(l+1/2)\theta], \qquad l \gg 1 \text{ et } \theta \ll 1,$$

on obtient

$$f_{\text{dif}} \approx \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)J_0[(l+1/2)\theta]. \tag{3}$$

Il n'est pas difficile de noter que les termes de la somme (3) varie lentement avec l et la somme peut être remplacée par une intégrale. Pour cela, utilisons la formule connue

$$\int xJ_0(x)dx = xJ_1(x),$$

qui donne ($l_0 \approx kR \gg 1$)

$$f_{\text{dif}} = \frac{i}{2k}\int_0^{l_0}(2l+1)J_0[(l+1/2)\theta]dl \approx \frac{iR}{\theta}J_1(kR\theta). \tag{4}$$

L'amplitude de la diffusion diffractive est une grandeur purement imaginaire. Cette amplitude, de même que la section efficace de diffusion différentielle, est une fonction oscillante de θ, l'écartement entre les zéros (ou les maximums) voisins de $|f_{\text{dif}}|$ étant de l'ordre de la grandeur $\Delta\theta \sim (kR)^{-1}$. Vu que

$$J_1(x) \approx \frac{x}{2} \text{ pour } x \ll 1 \text{ et } J_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin\left(x - \frac{\pi}{4}\right) \text{ pour } x \gg 1,$$

à partir de (4), on trouve

$$\left.\frac{d\sigma_{\text{dif}}}{d\Omega}\right|_{\theta \ll (kR)^{-1}} \approx \frac{(kR)^2}{4}R^2,$$

$$\left.\frac{d\sigma_{\text{dif}}}{d\Omega}\right|_{(kR)^{-1} \ll \theta \ll 1} \approx \frac{2R\sin^2(kR\theta - \pi/4)}{\pi k\theta^3}. \tag{5}$$

4 Précisons pourquoi on écrit ici l'amplitude de diffusion comme une somme des contributions diffractive et classique. Dans le domaine des petits angles (en fait $\theta \ll (kR)^{-1/3} \ll l$), $|f_{\text{dif}}| \gg |f_{\text{cl}}|$, et la contribution, dans ce cas, de la diffusion sous de tels angles ($\theta \lesssim (kR)^{-1}$) à la section efficace totale est égale à πR^2. Par contre, dans le domaine d'angles $\theta \gg (kR)^{-1/3}$ (θ peut être $\ll 1$) la partie f_{dif} est négligeable. La partie f_{cl} décrit dans ce cas la répartition isotrope des particules diffusées : $d\sigma/d\Omega \approx |f_{\text{cl}}|^2 \approx R^2/4$, de sorte que la section efficace de diffusion sous ces angles vaut aussi πR^2 (comme en mécanique classique). Enfin, dans le domaine d'angles $\theta \sim (kR)^{-1/3}$ les amplitudes f_{dif} et f_{cl} sont du même ordre de grandeur. Pour ces angles de diffusion on n'arrive pas à obtenir pour f_{cl} une expression simple ; quant à la contribution à la section efficace de ce domaine d'angles, il est négligeable par rapport à πR^2.

La valeur maximale de la section efficace différentielle est atteinte pour les angles $\theta \lesssim (kR)^{-1}$, ensuite, elle décroît rapidement avec θ pour $\theta > (kR)^{-1}$. Cette brusque diminution de $d\sigma/d\Omega$ s'explique par une forte compensation mutuelle d'un grand nombre de termes dans l'expression (1), due à l'oscillation des polynômes de Legendre. Compte tenu de la valeur de l'intégrale

$$\int_0^\infty \frac{J_1^2(x)}{x} dx = \frac{1}{2},$$

la section efficace totale de la diffusion diffractive est donnée par :

$$\sigma_{\text{dif}} = \int |f_{\text{dif}}|^2 d\Omega \approx 2\pi R^2 \int_0^\infty \frac{J_1^2(kR\theta)}{\theta} d\theta = 2\pi R^2 \int_0^\infty \frac{J_1^2(x)}{x} dx = \pi R^2, \qquad (6)$$

autrement dit, elle est égale à la moitié de la section efficace totale de diffusion (l'intégration dans (6) doit être effectuée sur le domaine où $|f_{\text{dif}}| \gg |f_{\text{cl}}|$, mais comme $|f_{\text{dif}}|^2$ n'est grand que pour $\theta \lesssim (kR)^{-1}$, la borne supérieure de l'intégrale peut être prise égale à l'infini).

13.32. Examinons la partie f_{cl} de l'amplitude de diffusion définie par la formule (2) du problème précédent :

$$f_{\text{cl}} = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos\theta), \qquad (1)$$

où δ_l est donné par la formule (4) du problème 13.30.

Comme dans l'expression (1), la contribution principale vient des $l \gg 1$ et puisque l'on s'intéresse aux angles de diffusion $\theta \gg l^{-1} \sim (kR)^{-1}$ (pour les angles $\theta \lesssim (kR)^{-1}$ on a à fortiori $|f_{\text{cl}}| \ll |f_{\text{dif}}|$, et f_{cl} n'a aucun intérêt particulier), en utilisant l'expression asymptotique des polynômes de Legendre

$$P_l(\cos\theta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi(l+1/2)}} \frac{\sin[(l+1/2)\theta + \pi/4]}{\sqrt{\sin\theta}},$$
$$\text{pour } l \gg 1, \qquad \theta \gg 1/l, \qquad (\pi - \theta) \gg 1/l,$$

on peut écrire (1) sous la forme

$$f_{\text{cl}} = -\frac{1}{2k\sqrt{\pi \sin\theta}} \sum_{l=0}^{l_0} \sqrt{2l+1} [e^{i\varphi_+(l)} - e^{i\varphi_-(l)}], \qquad (2)$$

où

$$\varphi_\pm(l) = 2\delta_l \pm [(l+1/2)\theta + \pi/4] = (2l+1) \arccos \frac{2l+1}{2kR}$$
$$-2\sqrt{k^2R^2 - (l+1/2)^2} \pm [(l+1/2)\theta + \pi/4]. \qquad (3)$$

A cause de l'oscillation rapide des exponentielles, la plupart des termes de la somme (2) s'annulent mutuellement.

La valeur de la somme est dominée essentiellement par les domaines de valeurs de l proches de celles pour lesquelles une des exponentielles possède un extremum en fonction de l. De la condition

$$\frac{\partial \varphi_{\pm}}{\partial l} = 2 \arccos \frac{2l+1}{2kR} \pm \theta = 0, \tag{4}$$

il résulte qu'il n'y a qu'un seul extremum, pour l'exponentielle de phase φ_-, la valeur extrémale $\bar{l}$ de la variable l étant égale à

$$\bar{l} + 1/2 = kR\cos(\theta/2), \tag{5}$$

ce qui correspond exactement à la relation classique entre le paramètre d'impact $\rho = M/p = \hbar(l+1/2)/\hbar k = (l+1/2)/k$ et l'angle de diffusion θ : $\rho = R\cos(\theta/2)$.

Compte tenu de (3)–(5), on obtient le développement en série de $\varphi_-(l)$ au voisinage du point d'extremum :

$$\begin{aligned} \varphi_-(l) &= \varphi_-(\bar{l}) + \frac{1}{2!}\varphi_-''(\bar{l})(l-\bar{l})^2 + \frac{1}{3!}\varphi_-'''(\bar{l})(l-\bar{l})^3 + \dots \\ &= \left(-2kR\sin\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4}\right) - \frac{(l-\bar{l})^2}{kR\sin(\theta/2)} - \frac{\cos(\theta/2)}{3(kR)^2\sin^3(\theta/2)}(l-\bar{l})^3 + \dots \end{aligned} \tag{6}$$

Dans le calcul de la somme (2) on peut négliger les termes avec la phase φ_+ qui n'a pas d'extremum ; quant à la somme restante, elle est dominée par une bande étroite de valeurs de l près du point d'extremum. La largeur de la bande $\Delta l = l - \bar{l}$ se définit par la condition selon laquelle la variation de phase de l'exponentielle

$$\Delta\varphi_- = \varphi_-(l) - \varphi_-(\bar{l})$$

doit satisfaire à l'inégalité $|\Delta\varphi_-| \lesssim 1$. La variation de phase $\Delta\varphi_-$ dans la bande indiquée est déterminée par le second terme de la formule (6) ; aussi, compte tenu de ce qui a été dit plus haut, l'expression (2) peut être écrite sous la forme[5]

$$f_{\rm cl} \approx \sqrt{\frac{R}{4\pi k\sin(\theta/2)}}\, e^{i\varphi_-(\bar{l})} \sum_{l=0}^{l_0} \exp\left[-\frac{i(l-\bar{l})^2}{kR\sin(\theta/2)}\right]. \tag{7}$$

La contribution principale à la somme (7) est apportée par les termes pour lesquels $|\Delta l| = |l - \bar{l}| \lesssim \sqrt{kR\sin(\theta/2)}$. Dans ce cas la variation $|\Delta\varphi_-|$ due au troisième terme de la formule (6) (qu'on a négligé) vaut

$$\frac{1}{3}\frac{\cos(\theta/2)}{(kR)^2\sin^3(\theta/2)}|\Delta l|^3 \lesssim \frac{1}{\sqrt{kR}}\frac{\cos(\theta/2)}{[\sin(\theta/2)]^{3/2}} \tag{8}$$

et la condition que la grandeur (8) soit petite comparée à l'unité, définit le domaine de validité du développement (6) et de l'expression (7) :

$$\sqrt{kR\theta^3} \gg 1, \text{ ou } \theta \gg (kR)^{-1/3} \tag{9}$$

5 Dans ce cas le facteur préexponentiel $\sqrt{2l+1}$ est sorti de sous le signe de somme avec sa valeur au point $l = \bar{l}$.

(cette condition[6] est plus stricte que la condition $\theta \gg l^{-1} \sim (kR)^{-1}$; toutefois, elle est vérifiée pour la plus grande partie du domaine d'angles qui nous intéresse). A l'aide de (5) et (9), on trouve sans peine $(l_0 - \bar{l}) \gg \sqrt{kR\sin(\theta/2)}$, et l'on peut faire dans (7) la somme jusqu'à l'infini. Si l'on remplace $l = 0$ par $l = -\infty$ à la borne inférieure et si l'on passe de la sommation à l'intégration, on obtient

$$f_{\text{cl}} \approx \sqrt{\frac{R}{4\pi k \sin(\theta/2)}} e^{i\varphi - (\bar{l})} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{i(l-\bar{l})^2}{kR\sin(\theta/2)}\right] dl = \frac{-iR}{2} e^{-2ikR\sin(\theta/2)} \quad (10)$$

(le remplacement de la sommation par l'intégration est correct, car le nombre de termes qui contribuent à la somme est grand $\sim \sqrt{kR\sin(\theta/2)} \gg 1$, et les termes de la somme ne varient presque pas avec l).

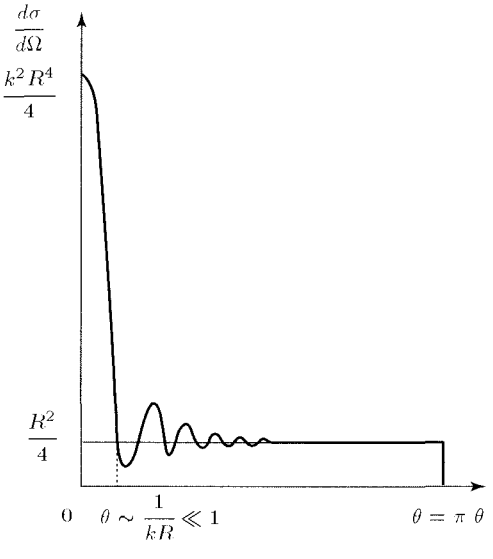

Figure 10

A partir de (10), on obtient la section efficace différentielle de diffusion dans le domaine $\theta \gg (kR)^{-1/3}$ et la section efficace totale de diffusion :

$$\frac{d\sigma_{\text{cl}}}{d\Omega} = |f_{\text{cl}}|^2 = \frac{R^2}{4},$$
$$\sigma_{\text{cl}} \approx \pi R^2, \quad (11)$$

qui coïncident avec le résultat de la mécanique classique. Pour conclure, la figure 10 illustre la dépendance de la section efficace différentielle $d\sigma_{\text{cl}}/d\Omega$ avec l'angle θ, pour la diffusion des particules rapides $kR \gg 1$ (on suppose en fait la condition plus stricte $(kR)^{1/3} \gg 1$) sur une sphère dure.

13.33. Pour obtenir la longueur de diffusion a, il faut résoudre l'équation de Schrödinger pour $E = 0$. La solution a la symétrie sphérique et son comportement asymptotique pour $r \to \infty$: $\Psi \approx 1 - a/r$ donne la valeur de a. En posant $\Psi = \chi(r)/r$, on obtient sans peine de l'équation de Schrödinger, la forme de χ et de $\Psi(r)$:

a) $$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{A}{r}\sin\left(\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}}r\right), & r < R, \\ 1 - \frac{a}{r}, & r > R, \end{cases}$$

b) $$\Psi(r) = \begin{cases} C, & r < R, \\ 1 - \frac{a}{r}, & r > R, \end{cases}$$

6 Un lecteur attentif verra qu'avec la restriction (9) imposée aux angles de diffusion, cette étude suppose que la condition $(\pi - \theta) \gg (kR)^{-1/2}$ soit également satisfaite (dans le cas contraire, la sortie du facteur préexponentiel $\sqrt{2\bar{l}+1}$, de la somme n'est plus justifiée). Cependant, le résultat final (10) est valable aussi pour $\theta \to \pi$. On le prouve facilement par un calcul analogue à celui mené lors de la résolution du problème 13.29, c).

Les conditions de raccordement des fonctions d'onde au point $r = R$ donnent :

$$\text{a)} \quad a = R\left(1 - \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mU_0R^2}}\,\tan\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}}\right) ;$$

$$\text{b)} \quad a = R\left(1 - \frac{1}{1 - 2mU_0R^2/\hbar^2}\right) \tag{1}$$

(pour a), au point $r = R$ la fonction χ et sa dérivée sont continues ; pour b), la fonction χ est continue, mais sa dérivée a un saut déterminé par la solution du problème 2.10 du Tome I).

Selon (1), pour certaines valeurs des paramètres du potentiel, ou plus précisément, du paramètre sans dimensions $\xi = 2mU_0R^2/\hbar^2$, la longueur de diffusion (et la section efficace totale $\sigma(E = 0) = 4\pi a^2$ devient infinie. Cela a lieu pour des valeurs du paramètre ξ égales à :
a) $\xi_n = \pi^2(n + 1/2)^2$, $n = 0, 1, \ldots$;
b) $\xi_0 = 1$,
c'est-à-dire, dans le cas a), pour les valeurs de ξ pour lesquelles apparaissent de nouveaux états liés, avec $l = 0$, quand la profondeur du puits augmente (voir le problème 4.34 du Tome I).

D'autre part, pour le cas a), pour des valeurs du paramètre ξ satisfaisant à la condition $\tan\sqrt{\xi} = \sqrt{\xi}$, on a au contraire, $a = 0$, c'est-à-dire que $\sigma(E = 0) = 0$ (la section efficace de diffusion des particules lentes est très faible).

13.34. En représentant la fonction d'onde d'état s ($l = 0$) sous la forme $\Psi = \chi(r)/r$ on obtient facilement, à partir de l'équation de Schrödinger la fonction χ (et Ψ) :

$$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{A}{r}\sin kr, & r < R, \\ \frac{1}{r}(S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > R, \end{cases}$$

où $S_0 = e^{2i\delta_0}$. A partir des conditions de raccordement des fonctions d'ondes pour un potentiel δ (voir 2.10 du Tome I), on obtient après des transformations algébriques

$$e^{2i\delta_0} = \frac{g(k) + ikR}{g(k) - ikR}, \tag{1}$$

où

$$g(k) = \frac{kR(kR - \tilde{\alpha}R\sin kR\,\cos kR)}{\tilde{\alpha}R\,\sin^2 kR} \qquad \left(\tilde{\alpha} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\right). \tag{2}$$

Pour des particules lentes $kR \ll 1$, la section efficace totale de diffusion se détermine pour, l'essentiel[7], à l'aide de la section efficace partielle $l = 0$:

$$\sigma \approx \sigma_{l=0} = 4\pi\left|\frac{S_0 - 1}{2ik}\right|^2 = \frac{4\pi R^2}{g(k)^2 + k^2R^2}, \tag{3}$$

7 Rappelons que la correction à l'expression (3), liée à la diffusion de l'onde p, est $\sigma_{l=1} \propto k^4$.

La valeur de la section efficace (3) et son comportement en fonction de l'énergie pour $kR \ll 1$ dépendent de

$$g(0) = -1 + \frac{1}{\tilde{\alpha} R} \equiv -1 + \frac{\hbar^2}{2m\alpha R}. \tag{4}$$

Si $|g(0)| \gtrsim 1$ la dépendance de (3) en k est "lente" et l'on peut la négliger, de sorte que dans ce cas

$$\sigma(E) \approx \sigma(E = 0) = 4\pi R^2 / g(0)^2. \tag{5}$$

Mais si $|g(0)| \ll 1$, le terme $k^2 R^2$ au dénominateur de l'expression (3) est très important, et dans ce cas[8]

$$\sigma(E) \approx \frac{2\pi\hbar^2}{m(\varepsilon + E)}, \tag{6}$$

où

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2mR^2} g^2(0) \ll \frac{\hbar^2}{2mR^2}, \tag{7}$$

est l'énergie du niveau réel (ou virtuel) de faible énergie de la particule, existant dans le potentiel pour $|g(0)| \ll 1$. On invite le lecteur à montrer à partir de la solution de l'équation de Schrödinger pour les états liés ($E < 0$) que si $|g(0)| \ll 1$, $g(0) < 0$, il y a, en effet, un état lié avec une énergie $E \approx -\varepsilon$ (voir, par exemple, 4.34 du Tome I ; de plus, il faut prendre en considération que les fonctions $I_{1/2}$ et $K_{1/2}$ sont des fonctions élémentaires).

13.35. A partir de la solution de l'équation de Schrödinger, on trouve la fonction d'onde

$$\Psi(r) = \begin{cases} \frac{A}{r} \sin \kappa r, & r < R \quad (\kappa = \sqrt{2m(E + U_0)/\hbar^2}), \\ \frac{1}{r}(S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > R, \end{cases}$$

où $S_0 = e^{2i\delta_0}$. De la condition de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée pour $r = R$ on trouve (il est plus commode de raccorder la fonction $\chi = \Psi r$ et non pas Ψ directement)

$$e^{2i\delta_0} = \frac{g(k) + ikR}{g(k) - ikR}, \tag{1}$$

où

$$g(k) = \frac{\kappa R \cos \kappa R + kR \sin kR \tan \kappa R}{\tan \kappa R \cos kR - \frac{\kappa}{k} \sin kR}. \tag{2}$$

8 On peut préciser cette expression, en tenant compte dans le développement de $g(k)$ du terme d'ordre k^2, c'est-à-dire en écrivant $g(k) \approx g(0) + Ck^2$.

La dépendance en énergie de la section efficace de diffusion des particules lentes $kR \ll 1$, est fonction de la valeur $g(0)$ (comparer au problème 13.35). Si $|g(0)| \gtrsim 1$ la section efficace dépend faiblement de l'énergie et vaut $\sigma(E) \approx 4\pi R^2 g^{-2}(0)$. Pour $|g(0)| \ll 1$, la dépendance en énergie de la section efficace prend la forme

$$\sigma(E) = \frac{2\pi\hbar^2}{m(\varepsilon + E)}, \tag{3}$$

où

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2mR^2} g^2(0) \ll \frac{\hbar^2}{2mR^2}. \tag{4}$$

La condition $|g(0)| \ll 1$, selon (2), correspond à un puits de potentiel dont les paramètres U_0, R satisfont à la condition

$$\sqrt{\frac{2mU_0R^2}{\hbar^2}} \approx (n + 1/2)\pi, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{5}$$

$$\left(g(0) = \frac{\kappa_0 R}{\tan \kappa_0 R - \kappa_0 R}, \qquad \kappa_0 = \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2}} \right).$$

Dans ce cas, ε est l'énergie d'un état lié ou virtuel dans le potentiel considéré, pour $|g(0)| \ll 1$.

13.36. L'équation de Schrödinger pour la fonction $\chi(r) = r\Psi_0(r)$ $(l = 0)$ et sa solution satisfaisant à la condition limite $\chi(0) = 0$ sont de la forme

$$\chi'' - \tilde{\alpha}\delta(r - R)\chi + k^2\chi = 0 \qquad (\tilde{\alpha} = 2m\alpha/\hbar^2),$$

$$\Psi(r) = \frac{\chi(r)}{r} = \begin{cases} \frac{A}{r}\sin kr, & r < R, \\ \frac{1}{r}(S_0 e^{ikr} - e^{-ikr}), & r > R. \end{cases}$$

A partir de la condition de raccordement de la fonction d'onde $\chi(r)$ pour $r = R$ (voir 2.10 du Tome I), il vient

$$S_0 = e^{2i\delta_0} = e^{-2ikR} \frac{\tilde{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR + ikR \sin kR}{\tilde{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR - ikR \sin kR}. \tag{1}$$

Pour $\tilde{\alpha}R \gg 1$ et $kR \sim 1$ (plus précisément, $kR \ll \tilde{\alpha}R$), on a, en général, $S_0 \approx e^{-2ikR}$, c'est-à-dire $\delta_0 \approx -kR$, ce qui correspond à la diffusion sur une sphère dure (voir 13.24, a)). Le cas des particules pour lesquelles $kR \approx n\pi$, $n = 1, 2, \ldots$, nécessite une étude spéciale. En représentant kR sous la forme de $kR = n\pi + \gamma$, $|\gamma| \ll 1$, on transforme sans peine le dénominateur de la fraction dans la formule (1) en

$$\tilde{\alpha}R \sin kR + kR \cos kR - ikR \sin kR \approx (-1)^n(\tilde{\alpha}R\gamma + n\pi - in\pi\gamma)$$

$$= (-1)^n(\tilde{\alpha}R - in\pi)\left(\gamma + \frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R - in\pi}\right)$$

$$\approx (-1)^n(\tilde{\alpha}R - in\pi)\left[kR - n\pi + \frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R} + i\left(\frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R}\right)^2\right],$$

et l'expression (1) devient

$$S_0 \approx \mathrm{e}^{-2ikR} \frac{kR - n\pi + \frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R} - i\left(\frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R}\right)^2}{kR - n\pi + \frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R} + i\left(\frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R}\right)^2}. \tag{2}$$

En multipliant le numérateur et le dénominateur de (2) par

$$\frac{\hbar^2}{2mR^2}\left(kR + n\pi - \frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R}\right) \approx \frac{\hbar^2 n\pi}{mR^2},$$

S_0 s'écrit sous une forme plus commode :

$$S_0 \equiv \mathrm{e}^{2i\delta_0^{(0)}} \frac{E - E_{n,0} - i\Gamma_n/2}{E - E_{n,0} + i\Gamma_n/2} = \mathrm{e}^{-2ikR} \frac{E - E_{n,0} - i\Gamma_n/2}{E - E_{n,0} + i\Gamma_n/2}, \tag{3}$$

où

$$E_{n,0} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mR^2}\left(1 - \frac{2}{\tilde{\alpha}R}\right), \qquad \Gamma_n = \frac{2\hbar^2 n^2 \pi^2}{mR^2} \frac{n\pi}{(\tilde{\alpha}R)^2} \ll E_{n,0}.$$

L'expression (3) est de la forme standard pour une diffusion résonnante sur un niveau quasi discret. La grandeur $\delta_0^{(0)} = -kR$ est le déphasage dit de diffusion potentielle (avec $l = 0$), tandis que $E_{n,0}$, et Γ_n définissent la position et la largeur des niveaux quasi discrets. Ainsi donc :

1) le déphasage de diffusion potentielle coïncide avec celui sur une sphère dure ;
2) la position $E_{n,0}$ des niveaux quasi discrets coïncide avec les niveaux d'énergie du spectre discret d'un puits sphérique infiniment profond de rayon R ;
3) la largeur du niveau déterminant la durée de vie de l'état quasi discret peut être écrite sous la forme

$$\Gamma_n = \frac{\hbar}{\tau_n} \equiv \hbar DN = \hbar \cdot 4\left(\frac{n\pi}{\tilde{\alpha}R}\right)^2 \cdot \frac{\hbar n\pi}{2mR^2},$$

où D est le facteur de pénétration de la barrière δ pour une particule d'énergie $E = \hbar^2 n^2 \pi^2 / 2mR^2$ (voir 2.47 du Tome I), et où N est le nombre de chocs de la particule contre la paroi par unité de temps :

$$N = \frac{v}{2R} = \frac{\hbar n\pi}{2mR^2}.$$

On a des résultats analogues pour la diffusion avec $l \neq 0$. Pour $kR \ll \tilde{\alpha}R$, la section efficace de diffusion $\sigma(E)$ sur un potentiel δ coïncide avec la section efficace de diffusion sur une sphère dure de même rayon à l'exception de bandes étroites ΔE aux voisinage des niveaux quasi discrets. Vu que

$$\sigma(E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(E) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left|\frac{S_l - 1}{2ik}\right|^2$$

et que, pour une énergie de la particule proche de celle d'un niveau s quasi discret, il ne se produit pas de diffusion avec $l = 0$ sur une sphère dure ($\delta_0^{(0)} \approx \pi n$), la différence

entre les sections efficaces de diffusion sur un potentiel sphérique en δ et sur une sphère dure au voisinage du niveau s quasi discret est égale à (fig. 11)

$$\Delta\sigma = \pi R^2 \frac{\Gamma_n^2}{n^2\pi^2[(E - E_{n,0})^2 + \Gamma_n^2/4]} > 0.$$

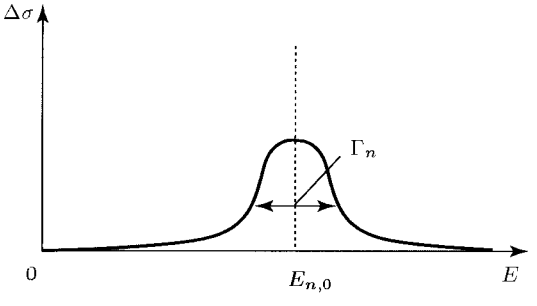

Figure 11

13.37. Avec $kR \gg 1$, $U_0 \ll E$, $\theta \ll 1$ (U_0 et R étant la grandeur caractéristique et le rayon du potentiel) dans l'expression

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

on peut utiliser l'expression quasi classique des déphasages [1]

$$\delta_l(k) \approx -\frac{m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} U\left(\sqrt{z^2 + \frac{(l+1/2)^2}{k^2}}\right)dz \tag{2}$$

et la relation

$$P_l(\cos\theta) \approx J_0((l+1/2)\theta), \qquad l \gg 1.$$

De plus, on peut remplacer la somme sur l par une intégrale, car la somme contient un très grand nombre de termes avec $l \sim kR$ qui varient peu dans le changement de l d'une unité. En effet,

$$J_0((l+1/2)\theta) \approx J_0(l\theta),$$
$$\Delta\delta_l \equiv \delta_{l+1} - \delta_l \sim \frac{\partial}{\partial l}\delta_l \sim \frac{m}{k\hbar^2}U_0\frac{l}{Rk^2} \sim \frac{mU_0}{k^2\hbar^2}, \text{ c'est-à-dire que } |\Delta\delta_l| \ll 1.$$

Compte tenu de ce qui a été dit plus haut, avec le changement de variable $\rho = M/p = \hbar(l+1/2)/\hbar k = (l+1/2)/k$, on obtient à partir de l'expression (1) une représentation de l'amplitude de diffusion plus commode pour certaines applications :

$$f(k,\theta) = ik\int_0^{\infty}\left\{1 - \exp\left[-\frac{im}{k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}U(\sqrt{z^2+\rho^2})dz\right]\right\}J_0(k\rho\theta)\rho d\rho. \tag{3}$$

En utilisant la formule

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-ix\cos\varphi}d\varphi$$

et en posant $x = k\rho\theta$, $x\cos\varphi \equiv \mathbf{q}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}$, $d^2\rho \equiv \rho d\rho d\varphi$, on trouve l'autre représentation équivalente à (3) de l'amplitude de diffusion donnée dans l'énoncé.

13.38. Il faut tenir compte de ce que dans les conditions de validité de l'approximation eikonale $kR \gg 1$, $U_0 \ll E$, la diffusion de particules s'effectue essentiellement sous de petits angles $\theta \sim (kR)^{-1}$. Ainsi la section efficace totale de diffusion s'écrit

$$\sigma(E) = \int |f|^2 d\Omega \approx 2\pi \int_{\theta \lesssim (kR)^{-1} \ll 1} |f|^2 \theta d\theta \approx 2\pi \int |f_{\text{eikon}}|^2 \theta d\theta. \qquad (1)$$

La borne supérieure d'intégration en θ peut être prise à l'infini, car dans l'approximation eikonale

$$f_{\text{eikon}}(k,\theta) = \int_0^\infty C(\rho) J_0(k\rho\theta)\rho d\rho,$$

où

$$C(\rho) = ik\left\{1 - \exp\left[-\frac{im}{k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2+\rho^2})dz\right]\right\}. \qquad (2)$$

L'amplitude de diffusion pour $\theta \gtrsim 1$ (dans ce domaine d'angles f_{eikon} peut être assimilée formellement à une fonction de θ n'ayant pas de sens physique) décroît rapidement avec θ à cause des oscillations rapides du cofacteur $J_0(k\rho\theta)$. La contribution de ce domaine à l'intégrale en θ est donc négligeable. En écrivant l'expression (1) sous la forme

$$\sigma(E) = 2\pi \iiint C(\rho)C^*(\rho')J_0(k\rho\theta)J_0(k\rho'\theta)\rho\rho' d\rho d\rho' \theta d\theta,$$

et en effectuant l'intégration sur θ à l'aide de la relation

$$\int_0^\infty J_0(\lambda\theta)J_0(\lambda'\theta)\theta d\theta = \frac{1}{\sqrt{\lambda\lambda'}}\delta(\lambda - \lambda'), \qquad \lambda = k\rho,$$

on obtient

$$\sigma(E) = \frac{2\pi}{k^2}\int_0^\infty \rho|C(\rho)|^2 d\rho = 4\pi\int_0^\infty \left\{1 - \cos\left[\frac{m}{k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2+\rho^2})dz\right]\right\}\rho d\rho$$

qui coïncide avec la valeur 4π Im $f_{\text{eikon}}(k, \theta = 0)/k$. Le théorème optique est donc bien vérifié.

13.39. Selon le théorème optique,

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\,\text{Im}\, f_{\text{eikon}}(k, \theta = 0) = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1 - \cos 2\delta_l). \qquad (1)$$

Pour $kR \gg 1$, la contribution principale dans cette somme vient des nombreux termes avec $l \sim kR$ (R étant le rayon du potentiel), les déphasages sont alors donnés par l'expression quasi classique

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

Pour $U \ll E$, on obtient à partir de l'expression (2), en développant en puissances de U la fonction sous l'intégrale,

$$\delta_l \approx -\frac{m}{k\hbar^2}\int_{r_0=(l+1/2)/k}^{\infty} \frac{rU(r)dr}{\sqrt{r^2-(l+1/2)^2/k^2}} = -\frac{m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{z^2+r_0^2})dz. \qquad (3)$$

Dans ce cas, la variation de δ_l, quand on remplace l par $(l+1)$, est de l'ordre de

$$|\Delta\delta_l| \sim \left|\frac{\partial}{\partial l}\delta_l\right| \sim \frac{m}{k\hbar^2}|U(r_0)|\frac{l}{Rk^2} \sim \frac{m|U(r_0)|}{\hbar^2k^2} \ll 1,$$

autrement dit, elle est petite et, dans (1), on peut remplacer la somme par une intégrale sur la variable $\rho = (l+1/2)/k$.

Pour $|U(r_0)| \gtrsim E$, les expressions (2) et (3) donnent, en général, des valeurs de δ_l différentes, mais elles possèdent, toutefois, une propriété commune : toutes les deux donnent $|\delta_l| \gg 1$ et $|\Delta\delta_l| = |\delta_{l+1} - \delta_l| \gtrsim 1$. Alors, la partie correspondante de la somme (1) comportant $\cos 2\delta_l$ est négligeable à cause des oscillations rapides des termes quelle que soit l'expression utilisée ((2) ou (3)). Donc, pour ces valeurs de l (quand $|U(r_0)| \gtrsim E$) on peut passer à l'intégration en ρ en utilisant les valeurs des déphasages sous la forme (3).

Compte tenu de ce qui a été dit plus haut sur le remplacement de la sommation sur l par l'intégration sur ρ, on obtient l'expression de la section efficace de diffusion de particules rapides $kR \gg 1$, donnée dans l'énoncé.

On comprend que, dans le cas de particules rapides, même si $|U(r_0)| \gtrsim E$, l'amplitude de diffusion possède toujours la forme eikonale lorsque les angles de diffusion sont suffisamment petits pour que les oscillations des polynômes de Legendre ne commencent pas à se manifester.

Pour la barrière (ou le puits) de potentiel donnée dans l'énoncé, la section efficace de diffusion vaut

$$\begin{aligned}\sigma(E) &= 4\pi\int_0^R \left[1-\cos\left(\frac{2mU_0}{k\hbar^2}\sqrt{R^2-\rho^2}\right)\right]\rho d\rho \\ &= 2\pi R^2\left[1-\frac{2}{\xi^2}(\xi\sin\xi+\cos\xi-1)\right] \qquad \left(\xi = \frac{2mU_0R}{k\hbar^2}\right) \qquad (4)\end{aligned}$$

(l'intégrale se calcule avec le changement de variable $x = \sqrt{R^2-\rho^2}$).

Pour $\xi \ll 1$, on retrouve à partir de (4) le résultat de l'approximation de Born $\sigma = \pi R^2 \dfrac{mU_0^2R^2}{\hbar^2E} \ll \pi R^2$, tandis que pour $\xi \gg 1$, on a $\sigma = 2\pi R^2$, ce qui est le résultat

connu pour la section efficace de diffusion de particules rapides sur une sphère dure (voir 13.4, e) et 13.30).

13.40. Pour un potentiel $U \approx \alpha/r^n$ avec $n > 2$, le rayon d'action R se détermine à partir de la relation $U(R) \sim \hbar^2/mR^2$, autrement dit $R \sim \sqrt{m\alpha/\hbar^2}$ pour $n = 4$. L'inégalité mentionnée dans l'énoncé signifie que les particules peuvent être considérées comme rapides, $kR \gg 1$, et pour le calcul de la section efficace de diffusion on peut se servir du résultat obtenu dans le problème précédent :

$$\sigma = 4\pi \int_0^\infty \left\{1 - \cos\left[\frac{m\alpha}{k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{(\rho^2+z^2)^2}\right]\right\}\rho d\rho. \tag{1}$$

Compte tenu de la valeur de l'intégrale

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{(\rho^2+z^2)^2} = -\frac{\partial}{\partial\rho^2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dz}{\rho^2+z^2} = -\frac{\partial}{\partial\rho^2}\frac{\pi}{\rho} = \frac{\pi}{2\rho^3},$$

l'expression (1), après le changement de variable $x = (\pi m\alpha/2k\hbar^2)\rho^{-3}$ et une intégration par parties s'écrit

$$\sigma = -2\pi\left(\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2}\right)^{2/3}\int_{x=0}^{\infty}(1-\cos x))d(x^{-2/3}) = 2\pi\left(\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2}\right)^{2/3}\int_0^\infty x^{-2/3}\sin x dx.$$

En écrivant dans cette intégrale $\sin x = (e^{ix} - e^{-ix})/2i$ et en déformant le contour d'intégration dans le plan de la variable complexe x de manière à ce qu'il passe suivant l'axe purement imaginaire, on obtient

$$\int_0^\infty x^{-2/3}\sin x dx = \frac{1}{2}\Gamma(1/3)$$

($\Gamma(z)$ est la fonction gamma). La section efficace totale prend donc la forme

$$\sigma = \pi\left(\frac{\pi m\alpha}{2k\hbar^2}\right)^{2/3}\Gamma(1/3).$$

13.41. Dans l'approximation eikonale,

$$f(k,\mathbf{q}_\perp) = \frac{ik}{2\pi}\iint\left\{1 - \exp\left[-\frac{im}{k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}U(\boldsymbol{\rho},z)dz\right]\right\}e^{-i\mathbf{q}_\perp\cdot\boldsymbol{\rho}}d^2\rho. \tag{1}$$

A partir de cette expression, en utilisant la transformation de Fourier, on obtient

$$\exp\left[-\frac{im}{k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}U(\boldsymbol{\rho},z)dz\right] = 1 + \frac{i}{2\pi k}\iint f(k,\boldsymbol{\kappa})e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\rho}}d^2\kappa. \tag{2}$$

En introduisant dans la formule (1) $U(r) = U_0(r) + U_0(|\mathbf{r}-\mathbf{a}|)$, on obtient aisément la relation cherchée :

$$\begin{aligned} f(k,\mathbf{q}_\perp) &= f_0(k,\mathbf{q}_\perp) + f_0(k,\mathbf{q}_\perp)e^{-i\mathbf{q}_\perp\cdot\mathbf{a}_\perp} + \frac{i}{2\pi k}\exp\left\{-\frac{i\mathbf{q}_\perp\cdot\mathbf{a}_\perp}{2}\right\} \\ &\times \int f_0\left(k,\boldsymbol{\kappa}_\perp + \frac{\mathbf{q}_\perp}{2}\right)f_0\left(k,-\boldsymbol{\kappa}_\perp + \frac{\mathbf{q}_\perp}{2}\right)e^{i\mathbf{q}_\perp\cdot\mathbf{a}_\perp}d^2\kappa_\perp \end{aligned}$$

où $\mathbf{a}_\perp$ est la composante du vecteur $\mathbf{a}$, perpendiculaire à la direction de l'impulsion des particules incidentes $\mathbf{n}_0$, c'est-à-dire $\mathbf{a} = a_\parallel \mathbf{n}_0 + \mathbf{a}_\perp$ (f ne dépend pas de la grandeur $a_\parallel$, mais la condition $|a_\parallel| \ll kR^2$, où R est le rayon d'action du centre de forces $U_0(r)$, doit être satisfaite pour que l'approximation eikonale soit valable).

13.42. L'amplitude de l'onde diffusée s'exprime à l'aide de la fonction d'onde exacte, comme pour la diffusion des particules sans spin (voir 13.1)

$$F(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{U} \Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0} dV, \tag{1}$$

(on a écrit F au lieu de f pour souligner le fait que maintenant F, comme $\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0}$, est une grandeur à deux composantes). En introduisant dans (1) la fonction d'onde non perturbée

$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}_0} \approx \Psi^{(0)}_{\mathbf{k}_0} = \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} \chi, \tag{2}$$

où χ est un spineur à deux composantes qui décrit l'état de spin de la particule incidente (avant la diffusion) avec $s = 1/2$ (dans (1) et (2), comme d'habitude, m, $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}_0$ sont la masse réduite et les vecteurs d'ondes du mouvement relatif), on obtient

$$F = \hat{f}\chi,$$

où $\hat{f}$ est l'amplitude de diffusion, qui est un opérateur (matrice) dans l'espace de spin ; dans l'approximation de Born, on a

$$\hat{f} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \{U_0(r) + U_1(r)\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{l}}\} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} dV. \tag{3}$$

L'expression (3) se transforme aisément en ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$)

$$\hat{f} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \widetilde{U}_0(q) + i\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{q} \frac{\partial \widetilde{U}_1(q)}{\partial q} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k}_0 \wedge \mathbf{k}, \tag{4}$$

où

$$\widetilde{U}_i(q) = \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U_i(r) dV. \tag{5}$$

On a utilisé les relations

$$-i \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_1(r)\mathbf{r} \wedge \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} dV \equiv \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}} U_1(r)\mathbf{r} \wedge \mathbf{k}_0 dV$$

$$= i\left[\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \cdot \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U_1(r)\right) dV \cdot \mathbf{k}_0\right] = i\left[\frac{\partial \widetilde{U}_1(q)}{\partial \mathbf{q}} \cdot \mathbf{k}_0\right],$$

$$\frac{\partial \widetilde{U}_1(q)}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial \widetilde{U}_1(q)}{\partial q} \frac{\mathbf{q}}{q}, \qquad \mathbf{q} \wedge \mathbf{k}_0 = \mathbf{k} \wedge \mathbf{k}_0.$$

13.43. Dans le système de coordonnées initial, on a un champ électrostatique de la forme $\mathbf{E} = Ze\mathbf{r}/r^3$ et le neutron a la vitesse $\mathbf{v} = \mathbf{p}/M$. Dans le système de

coordonnées lié au neutron un champ magnétique d'intensité $\mathbf{B} \approx \frac{1}{c}\mathbf{E} \wedge \mathbf{v}$ apparaît (on suppose $v \ll c$) et, l'énergie d'interaction est égale à

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = -\frac{Ze}{cr^3}\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{r} \wedge \mathbf{v} = -\frac{Ze}{cMr^3}\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{L}. \tag{1}$$

La généralisation à la mécanique quantique de la formule (1) donne la forme de l'opérateur hermitien représentant l'interaction du neutron avec le champ coulombien :

$$\widehat{U} = \beta\frac{Ze^2\hbar^2}{2M^2c^2}\frac{1}{r^3}\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \widehat{\mathbf{l}}. \tag{2}$$

(le moment magnétique du neutron est $\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \mu\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \equiv -\frac{\beta e\hbar}{2Mc}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}$, où $\beta \approx 1,91$).

En utilisant l'expression générale de l'amplitude de diffusion, obtenue dans le problème précédent (formule (3)), et la valeur de l'intégrale

$$\begin{aligned}\int \frac{\mathbf{r}}{r^3}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV &= = -\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{r}dV = \int \frac{1}{r}\boldsymbol{\nabla}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV \\ &= -i\mathbf{q}\int \frac{1}{r}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV = -\frac{4\pi i\mathbf{q}}{q^2},\end{aligned}$$

on obtient l'amplitude de diffusion :

$$F = \widehat{f}\chi = -i\frac{\beta Ze^2}{Mc^2q^2}\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k}_0 \wedge \mathbf{k}\chi = -i\frac{\beta Ze^2}{2Mc^2}\operatorname{cotan}\left(\frac{\theta}{2}\right)(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})\chi. \tag{3}$$

(on a introduit le vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{k}_0 \wedge \mathbf{k}/|\mathbf{k}_0 \wedge \mathbf{k}|$ de la normale au plan de diffusion).

La section efficace différentielle, sommée suivant les états de spin du neutron diffusé, est égale au produit scalaire $F^\dagger F$ (dans l'espace de spin). Vu que $[(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})\chi]^\dagger = \chi^\dagger(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})$ et $(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n})^2 = 1$, on obtient

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = F^\dagger F = \left(\frac{\beta Ze^2}{2Mc^2}\right)^2 \operatorname{cotan}^2\frac{\theta}{2}\chi^\dagger\chi = \left(\frac{\beta Ze^2}{2Mc^2}\right)^2 \operatorname{cotan}^2\frac{\theta}{2}. \tag{4}$$

On ne discutera pas les conditions de validité de l'expression (4) pour la diffusion du neutron dans le champ coulombien du noyau. Indiquons seulement que pour répondre à cette question, il faut prendre en compte la taille finie du noyau, son écrantage par les électrons atomiques, ainsi que l'existence d'une diffusion des neutrons par le noyau sous l'effet des forces nucléaires.

13.44. Comme on le sait [1], si l'on écrit l'amplitude de diffusion sous la forme

$$\widehat{f} = A(k,\theta) + B(k,\theta)(\widehat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) \qquad \left(\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}_0 \wedge \mathbf{k}}{|\mathbf{k}_0 \wedge \mathbf{k}|}\right), \tag{1}$$

la section efficace différentielle de diffusion de particules non polarisées, sommée sur les états de spin des particules diffusées, prend la forme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |A|^2 + |B|^2. \tag{2}$$

Dans l'approximation de Born (voir 13.42),

$$A = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\widetilde{U}_0(q), \qquad B = \frac{im}{2\pi\hbar^2}\frac{\partial\widetilde{U}_1(q)}{\partial q}k\cos\frac{\theta}{2}. \tag{3}$$

Selon (2) et (3), la section efficace totale vaut ($d\Omega = \frac{\pi}{k^2}dq^2$, $q_0^2 = 4k^2$)

$$\sigma = \int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{m^2}{4\pi k^2\hbar^4}\int_0^{q_0^2}\left\{|\widetilde{U}_0(q)|^2 + \left(k^2 - \frac{q^2}{4}\right)\left|\frac{\partial\widetilde{U}_1(q)}{\partial q}\right|^2\right\}dq^2. \tag{4}$$

Pour de grandes énergies, $kR_0 \gg 1$ et $kR_1 \gg 1$ (R_0 et R_1 étant les distances caractéristiques pour lesquelles les fonctions $U_0(r)$ et $U_1(r)$ ne sont pas nulles ; de plus, $\widetilde{U}_0(q)$ et $\widetilde{U}_1(q)$ ne sont sensiblement différents de zéro que pour $qR_0 \lesssim 1$ et $qR_1 \lesssim 1$), d'après (4) on a

$$\sigma(E) \approx \frac{C_0}{E} + C_1, \tag{5}$$

où

$$C_0 = \frac{m}{8\pi\hbar^2}\int_0^\infty|\widetilde{U}_0(q)|^2dq^2, \qquad C_1 = \frac{m^2}{4\pi\hbar^4}\int_0^\infty\left|\frac{\partial\widetilde{U}_1(q)}{\partial q}\right|^2dq^2.$$

(on a conservé dans la formule (5) les deux termes C_0/E et C_1, car pour des valeurs grandes mais finies de E, ils peuvent être du même ordre).

13.45. Vu que

$$\widehat{U}^\dagger = [U_0(r) + U_1(r)\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\widehat{\mathbf{l}}]^\dagger = U_0^*(r) + U_1^*(r)\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\widehat{\mathbf{l}},$$

l'hermiticité de l'hamiltonien $\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2M} + \widehat{U}$ exige que $U_0 = U_0^*$ et $U_1 = U_1^*$.

Comme on le sait [1], si avant la diffusion elles n'étaient pas polarisées, $\mathbf{P} = 0$, la polarisation des particules diffusées est égale à

$$\mathbf{P}' = \frac{2\mathrm{Re}\,(AB^*)}{|A|^2 + |B|^2}\mathbf{n}, \qquad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}_0\wedge\mathbf{k}}{|\mathbf{k}_0\wedge\mathbf{k}|} \tag{1}$$

(la représentation de l'amplitude de diffusion $\widehat{f}$ en termes des fonctions A, B et l'expression de ces fonctions en termes des transformées de Fourier $\widetilde{U}_0(q)$ et $\widetilde{U}_1(q)$ sont données dans la solution du problème précédent).

Les composantes de Fourier des fonctions réelles $U_{0,1}(r)$ sont également réelles. Donc A est une fonction réelle, tandis que B est purement imaginaire (dans l'approximation de Born) et, selon (1), $\mathbf{P}' = 0$.

13.46. Comme on le sait [1], la polarisation des particules diffusées vaut (**P** est le vecteur polarisation des particules avant la diffusion)

$$\mathbf{P}' = \frac{(|A|^2 - |B|^2)\mathbf{P} + 2|B|^2\mathbf{n}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}) + 2\mathrm{Im}\,(AB^*)\mathbf{n}\wedge\mathbf{P} + 2\mathbf{n}\mathrm{Re}\,(AB^*)}{|A|^2 + |B|^2 + 2\mathrm{Re}\,(AB^*)\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}}. \qquad (1)$$

Dans l'approximation de Born, la fonction A est réelle, tandis que B est purement imaginaire (voir problème précédent). Alors (1) prend la forme

$$\mathbf{P}' = \frac{(A^2 + B^2)\mathbf{P} - 2B^2\mathbf{n}(\mathbf{n}\cdot\mathbf{P}) + 2iAB\mathbf{n}\wedge\mathbf{P}}{A^2 - B^2} \qquad (B^2 < 0)$$

et, comme on s'en convainc sans peine, $(\mathbf{P}')^2 = \mathbf{P}^2$. La rotation du vecteur polarisation s'effectue autour de la normale **n** au plan de diffusion.

13.47. Pour des particules lentes, la diffusion n'est importante que pour l'état s ($l = 0$). Donc, l'amplitude de diffusion ne dépend pas de l'angle de diffusion et s'écrit sous la forme

$$\hat{f} = A + B(\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p). \qquad (1)$$

Il convient de représenter l'expression (1) sous la forme

$$\hat{f} = f_s\frac{1 - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_p}{4} + f_t\frac{3 + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_p}{4}, \qquad (2)$$

où f_s et f_t sont les amplitudes de diffusion des états singlet $S = 0$ et triplet $S = 1$ (associées aux valeurs propres de l'opérateur $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_n \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_p$ voir 5.18 du Tome I).

D'après l'énoncé, la diffusion dans des états s est de nature résonnante, d'où il vient

$$f_s = \frac{1}{-\kappa_1 - ik}, \qquad f_t = \frac{1}{-\kappa_2 - ik}$$

où

$$\kappa_1 = \sqrt{\frac{2m|\varepsilon_d|}{\hbar^2}} > 0, \qquad \kappa_2 = -\sqrt{\frac{2m|\varepsilon_{virt}|}{\hbar^2}} < 0,$$

$m = m_N/2$ étant la masse réduite du système (rappelons que le processus de diffusion est étudié, comme toujours, dans le système du centre d'inertie).

13.48. Selon la formule générale [1],

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{2mv^2}\right)^2 [Z - F(q)]^2\frac{d\Omega}{\sin^4(\theta/2)}\ ; \qquad (1)$$

en calculant pour l'atome d'hydrogène ($Z = 1$) le facteur de forme atomique dans l'état fondamental

$$F(q) = \int n(r)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV = \frac{1}{\pi a_0^3}\int e^{-2r/a_0 - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV = \frac{16}{(4 + q^2a_0^2)^2} \qquad (2)$$

($a_0 = \hbar^2/me^2$ étant le rayon de Bohr), on obtient

$$d\sigma = 4a_0^2 \frac{(8+q^2a_0^2)^2}{(4+q^2a_0^2)^4} d\Omega \qquad (q = 2k\sin(\theta/2)). \tag{3}$$

Comme $d\Omega = \dfrac{\pi}{k^2} dq^2$, la section efficace élastique totale est égale à

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2}\int_0^{4k^2} \frac{d\sigma}{d\Omega} dq^2 = \frac{4\pi}{k^2}\left[\frac{7}{12} - \frac{7+9k^2a_0^2+3k^4a_0^4}{12(1+k^2a_0^2)^3}\right] \approx \frac{7\pi a_0^2}{3(ka_0)^2} \tag{4}$$

(dans la formule (4) on a tenu compte de ce que la condition de validité de l'approximation de Born utilisée ici est $ka_0 \gg 1$).

13.49. Le problème se résout de façon analogue au précédent. D'après le problème 11.7, la densité d'électrons et le facteur de forme atomique de l'état fondamental de l'atome d'hélium sont donnés par

$$n(r) = \frac{2}{\pi a^3} e^{-2r/a} \qquad (a = a_0/Z_{\text{eff}} = 16a_0/27),$$

$$F(q) = \int n(r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dV == \frac{2}{\pi a^3}\int e^{-2r/a - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dV = \frac{32}{(4+q^2a^2)^2},$$

et les sections efficaces élastiques différentielle et totale sont de la forme ($ka_0 \gg 1$)

$$d\sigma = \frac{16a^4}{a_0^2}\frac{(8+q^2a^2)^2}{(4+q^2a^2)^4} d\Omega, \qquad \sigma = \frac{28\pi a^2}{3(ka_0)^2}.$$

(la section efficace totale diffère de la section efficace de diffusion par l'atome d'hydrogène du facteur $4(16/27)^2 \approx 1,40$).

13.50. En utilisant la formule générale [1]

$$d\sigma_n = 4\pi\left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \frac{dq^2}{q^4}\left|\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}\Psi_n^*\Psi_0 d\tau\right|^2,$$

on obtient d'abord la section efficace différentielle du processus. Il faut pour cela calculer l'élément matriciel de la grandeur $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ entre les fonctions d'onde des états $1s$ (Ψ_0) et $2s$ (Ψ_n) :

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}, \qquad \Psi_n = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} e^{-r/2}\left(1 - \frac{r}{2}\right)$$

(ici et dans la suite, on utilise les unités atomiques). Après intégration sur les angles (en coordonnées sphériques avec l'axe polaire le long du vecteur $\mathbf{q}$), on a

$$\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|0\rangle = \frac{2\pi}{iq}\int_0^\infty \Psi_0(r)\Psi_n(r)(e^{iqr} - e^{-iqr})r\,dr,$$

et, finalement, l'expression de l'élément matriciel

$$\langle n|e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}|0\rangle = \frac{4\sqrt{2}q^2}{(9/4+q^2)^3}$$

s'obtient en utilisant la formule (k étant un entier)

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^k dr = \frac{k!}{a^{k+1}} \qquad (\mathrm{Re}\ a > 0)$$

Ainsi

$$d\sigma_{2s} = \frac{4\pi}{v^2}\frac{32dq^2}{(9/4+q^2)^6} \tag{1}$$

et, en intégrant cette expression, on obtient la section efficace totale d'excitation de l'état $2s$ de l'atome d'hydrogène :

$$\sigma(1s \to 2s) = \int d\sigma_{2s} = \frac{\pi}{5v^2}\frac{2^{17}}{3^{10}}$$

(la borne inférieure d'intégration en q^2, égale à $q^2_{\min} \approx (9/64)v^2 \ll 1$, peut être remplacée par zéro, et la borne supérieure $q^2_{\max} \approx 4v^2 \gg 1$ par l'infini).

Notons que la section efficace calculée est près de 6 fois plus petite que celle de la diffusion élastique (voir 13.48).

13.51. Les formules générales de la théorie de la diffusion inélastique des électrons avec les atomes (dans l'approximation de Born) s'appliquent directement aux collisions entre des électrons et des noyaux : il faut seulement remplacer la sommation sur les électrons de l'atome par une sommation sur les protons du noyau (les interactions proton-électron et électron-électron ne diffèrent que par leur signe). La de départ de la section efficace différentielle du processus s'écrit

$$d\sigma = \left(\frac{e^2 m_e}{\hbar^2}\right)^2 \frac{4p'}{pq^4}\left|\int \sum_p e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_p}\Psi_n^*\Psi_0 d\tau\right|^2 d\Omega, \tag{1}$$

où Ψ_0, Ψ_n sont les fonctions d'onde de l'état initial et final du noyau, p, p' sont les impulsions des électrons avant et après la collision.

Dans la formule (1), $r_p \sim R_{noy} \sim 10^{-13}$ cm ; ainsi pour des électrons non relativistes $qr_p \lesssim kR_{noy} \ll 1$, l'exponentielle peut être développée en série :

$$\sum_p e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_p} \approx \sum_p \left(1 - i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_p - \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_p)^2}{2} + \dots\right). \tag{2}$$

Pour les deux premiers termes du développement (2) l'élément matriciel dans la formule (1) est nul (rappelons que les deux états considérés du noyau possèdent par

hypothèse un moment $J = 0$). Aussi

$$\langle n|\sum_{\mathrm{p}} \exp(-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\mathrm{p}})|0\rangle \approx -\frac{1}{2}\sum_{\mathrm{p}}\langle n|(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\mathrm{p}})^2|0\rangle$$

$$\equiv -\frac{1}{2}q_i q_k\langle n|\sum_{\mathrm{p}} x_{\mathrm{p}i}x_{\mathrm{p}k}|0\rangle = -\frac{1}{6}q_i q_k Q_0\delta_{ik} = -\frac{q^2 Q_0}{6}, \tag{3}$$

où

$$Q_0 = \langle n|\sum_{\mathrm{p}} r_{\mathrm{p}}^2|0\rangle \equiv \int \Psi_n^*\sum_{\mathrm{p}} r_{\mathrm{p}}^2\Psi_0 d\tau.$$

Finalement, d'après (1) et (3), on obtient

$$d\sigma = \frac{1}{9}\left(\frac{e^2 m_{\mathrm{e}}}{\hbar^2}\right)^2\frac{p'}{p}|Q_0|^2 d\Omega, \qquad \sigma = \frac{4\pi}{9}\left(\frac{e^2 m_{\mathrm{e}}}{\hbar^2}\right)^2\frac{p'}{p}|Q_0|^2.$$

Notons que la grandeur Q_0 détermine également la probabilité de transition monopolaire du noyau (voir 11.83).

13.52. On voit (par analogie avec la diffusion par les atomes d'électrons rapides) que la section efficace de diffusion dans ce problème est de la forme

$$d\sigma_n = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\frac{p'}{p}\left|\iint U\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\Psi_n^*\Psi_0 dV do_{\mathbf{n}}\right|^2 d\Omega, \tag{1}$$

où m est la masse de la particule chargée (pour simplifier, on suppose $m \ll M$, M étant la masse du rotateur) ; p, p' ses impulsions avant et après la collision ; Ψ_0, Ψ_n les fonctions d'onde de l'état initial et de l'état final du rotateur ; $do_{\mathbf{n}}$ l'élément d'angle solide dans la direction $\mathbf{q}$ du rotateur ; $U = -e(\mathbf{d}\cdot\mathbf{r})/r^3 = -ed(\mathbf{n}\cdot\mathbf{r})/r^3$ l'énergie d'interaction du rotateur (du dipôle électrique) avec la particule chargée, et e sa charge.

Compte tenu de la valeur de l'intégrale (voir 13.43)

$$\int \frac{\mathbf{r}}{r^3}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV = -4\pi i\frac{\mathbf{q}}{q^2},$$

récrivons l'expression (1) sous la forme

$$d\sigma_n = \frac{4m^2e^2d^2}{\hbar^4 q^4}\frac{p'}{p}\left|\int \Psi_n^*(\mathbf{n}\cdot\mathbf{q})\Psi_0 do_{\mathbf{n}}\right|^2 d\Omega. \tag{2}$$

Ici $\Psi_0 = Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$. En choisissant dans l'élément matriciel $\langle n|\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}|0\rangle$ la direction de l'axe de quantification (l'axe z) le long du vecteur $\mathbf{q}$, de sorte que $\mathbf{q}\cdot\mathbf{n} = q\cos\theta$ et compte tenu de la relation $\cos\theta Y_{00} = -\frac{i}{\sqrt{3}}Y_{10}$, on obtient

$$\langle n|\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}|0\rangle = -\frac{iq}{\sqrt{3}}\int \Psi_n^* Y_{10} do_{\mathbf{n}}.$$

En vertu de l'orthogonalité des fonctions propres du rotateur, Y_{lm}, cette expression n'est non nulle que si les nombres quantiques de l'état final du rotateur (après collision) valent : $l = 1$, $m = 0$; c'est-à-dire $\Psi_n = Y_{10}$. Alors

$$\langle l = 1, m = 0|\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}|0\rangle = -iq/\sqrt{3}$$

et les autres éléments matriciels sont nuls. Ainsi, au premier ordre du calcul des perturbations, on n'observe avec la collision que des diffusions inélastiques qui s'accompagnent du passage du rotateur dans le premier état excité. Alors l'expression (2) prend la forme

$$d\sigma(0 \to 1) = \frac{4m^2e^2d^2}{3\hbar^4q^2}\frac{p'}{p}d\Omega. \tag{3}$$

Comme $q^2 = (p^2 + p'^2 - 2pp'\cos\theta)/\hbar^2$, d'après (3), on a ($p'd\Omega = \pi\hbar^2p^{-1}dq^2$)

$$d\sigma(0 \to 1) = \frac{4\pi m^2e^2d^2}{3\hbar^2p^2}\frac{dq^2}{q^2}, \qquad \sigma(0 \to 1) = \frac{8\pi m^2e^2d^2}{3\hbar^2p^2}\ln\frac{p+p'}{p-p'}$$

(p' est donnée par la loi de conservation de l'énergie $p'^2/2m = p^2/2m - \hbar^2/I$).

13.53. Pour une grande distance entre la particule et l'atome ($r \gg a_0$ - le rayon de Bohr), l'énergie de leur interaction vaut

$$U(r) = \frac{1}{2}Ze\frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{r}}{r^3} = -\frac{\beta(Ze)^2}{2r^4}, \tag{1}$$

où Ze est la charge de la particule, β la polarisabilité de l'atome. La formule (1) est l'énergie d'interaction entre la charge de la particule et le moment dipolaire induit de l'atome $\mathbf{d} = \beta\mathbf{E} = -\beta Ze\mathbf{r}/r^3$; elle est valable si la vitesse relative de la particule et de l'atome est petite par rapport à celles des électrons atomiques (dans le cas contraire, le processus dominant est l'excitation de l'atome).

En supposant les particules pas trop lentes (de sorte que les grandes valeurs du moment $l \gg 1$ dominent, voir plus loin), utilisons l'expression quasi classique pour la section efficace de diffusion totale (voir 13.39)

$$\sigma = 4\pi\int_0^\infty \left\{1 - \cos\left[\frac{1}{\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2})dz\right]\right\}\rho d\rho. \tag{2}$$

On voit que, dans la formule (2), pour toutes les valeurs de r, on peut utiliser l'approximation (1) de $U(r)$. En effet, bien que pour $r \lesssim a_0$ l'expression (1) ne soit pas rigoureusement applicable, elle donne quand même un ordre de grandeur $U \sim e^2/a_0$ correct (rappelons que $\beta \sim a_0^3$). De plus, dans le domaine où $\rho \lesssim a_0$, l'argument du cosinus dans la formule (2) est grand (sa valeur est de l'ordre de $e^2/\hbar v \sim v_{at}/v \gg 1$, parce que $v_{at} \sim e^2/\hbar$), et la valeur de l'intégrale

$$\int_0^{r \lesssim a_0} \cos\left[\frac{1}{\hbar v}\int_{-\infty}^{\infty} U(\sqrt{\rho^2 + z^2})dz\right]\rho d\rho$$

est négligeable à cause des oscillations rapides de la fonction sous l'intégrale quelque soit l'expression utilisée pour $U(r)$, exacte ou approchée.

Les intégrales de la formule (2) pour $U = -\beta(Ze)^2/2r^4$ ont été calculées dans 13.40. En utilisant ce résultat on a

$$\sigma = \pi\Gamma(1/3)\left(\frac{\pi\beta Z^2e^2}{4\hbar v}\right)^{2/3}. \tag{3}$$

D'après (3), les dimensions caractéristiques du processus de diffusion sont

$$\rho \sim \sqrt{\sigma} \sim a_0\left(\frac{v_{at}}{v}\right)^{1/3} \gg a_0 \qquad (Z \sim 1, \beta \sim a_0^3), \tag{4}$$

et la condition de validité de la formule (2) qui exige que $l \gg 1$, devient

$$l \sim \frac{Mv\rho_0}{\hbar} \sim \frac{M}{m_e}\left(\frac{v}{v_{at}}\right)^{2/3} \gg 1, \text{ c'est-à-dire } \frac{v}{v_{at}} \gg \left(\frac{m_e}{M}\right)^{3/2}$$

(M étant la masse de la particule diffusée). Notons que l'estimation (4) peut être aussi obtenue directement à partir de la formule (2) car l'argument du cosinus pour $\rho \sim \rho_0$ est de l'ordre de l'unité).

Le résultat (3) donnant la section efficace de diffusion est donc valable pour des vitesses de la particule correspondant aux conditions

$$\left(\frac{m_e}{M}\right)^{3/2} v_{at} \ll v \ll v_{at}. \tag{5}$$

Par exemple, pour des particules légères (électrons) la formule (3) est inapplicable.

13.54. Pour des particules lentes ($kR \ll 1$), la diffusion dans l'état s domine. Dans ce cas,

$$f \approx f_0 = \frac{1}{2ik}(S_0 - 1) \equiv \frac{1}{2ik}(e^{2i\delta_0} - 1) \approx \frac{\delta_0}{k}. \tag{1}$$

Dans ce problème on peut appliquer l'approximation de Born. Aussi (rappelons que $qr \leq 2kR \ll 1$)

$$f \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(r)dV = -\frac{2mR^3}{3\hbar^2}(U_0 - iU_1) \tag{2}$$

et la section efficace élastique vaut

$$\sigma_{él} = 4\pi|f|^2 = \frac{16\pi m^2R^6}{9\hbar^4}(U_0^2 + U_1^2). \tag{3}$$

En comparant les expressions (1) et (2), on obtient

$$\text{Im } \delta_0 = \frac{2mR^3U_1}{3\hbar^2}k. \tag{4}$$

Cette grandeur définit la section efficace de diffusion inélastique des particules lentes

$$\sigma_{\text{in}} \approx \frac{\pi}{k^2}(1 - |S_0|^2) = \frac{\pi}{k^2}(1 - \mathrm{e}^{-4\operatorname{Im}\delta_0}) \approx \frac{4\pi \operatorname{Im}\delta_0}{k^2} = \frac{8\pi m R^3 U_1}{3k\hbar^2}. \tag{5}$$

en accord avec la loi en "$1/v$".

13.55. Dans l'expression de l'amplitude de diffusion élastique

$$f = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)(\mathrm{e}^{2i\delta_l} - 1)P_l(\cos\theta)$$

on peut écrire les déphasages sous la forme

$$\delta_l = \begin{cases} i\infty, & l < l_0 \approx kR \gg 1, \\ 0, & l > l_0, \end{cases} \tag{1}$$

et

$$S_l = \mathrm{e}^{2i\delta_l} = \begin{cases} 0, & l < l_0, \\ 1, & l > l_0. \end{cases} \tag{2}$$

Cette valeur des déphasages correspond à l'image physique suivante (le mouvement des particules est quasi classique, car $kR \gg 1$) : pour des paramètres d'impact de particules $\rho = l/k < R$ ces dernières sont "absorbées" par la sphère et pour $\rho > R$ elles se propagent sans diffusion. La diffusion élastique des particules est alors analogue à la diffraction de Fraunhofer (voir [6]) et est décrite par l'amplitude

$$f_{\text{dif}} = \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1)P_l(\cos\theta). \tag{3}$$

D'après le théorème optique, on a

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k}\operatorname{Im} f_{\text{dif}}(\theta = 0) = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1) \approx 2\pi R^2. \tag{4}$$

La section efficace inélastique (d'absorption) vaut

$$\sigma_{\text{in}} = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(1 - |S_l|^2) = \frac{\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{l_0}(2l+1) \approx \pi R^2. \tag{5}$$

La section efficace de la diffusion élastique

$$\sigma_{\text{él}} = \sigma_{\text{tot}} - \sigma_{\text{in}} \approx \pi R^2 \tag{6}$$

(voir également le problème suivant).

13.56. Le calcul de l'amplitude de diffusion donnée par la formule (3) du problème précédent a été effectué lors de la résolution du problème 13.31 ; on y a aussi discuté

les particularités essentielles de la diffusion de diffraction. En accord avec le résultat (6) du problème précédent, on trouve

$$\sigma_{\text{él}} \equiv \sigma_{\text{dif}} = \int |f_{\text{dif}}|^2 d\Omega \approx \pi R^2.$$

13.57. Les vitesses de l'électron et du proton dans l'état fondamental de l'atome d'hydrogène sont respectivement de l'ordre de $10^{-2}\ c$ et $10^{-5}\ c$ (c étant la vitesse de la lumière). Pour une vitesse relative du neutron et de l'atome d'hydrogène $v_0 \gg 10^{-5}\ c$, on peut négliger le mouvement du proton au sein de l'atome d'hydrogène (cela correspond à une énergie du neutron $\varepsilon_n \gg 10^{-2}$ eV). La durée de l'interaction neutron-proton est de l'ordre de $\tau_{\text{inter}} \sim R_{\text{noy}}/v_0 \sim 10^{-13}\ \text{cm}/v_0 \ll 10^{-18}$ s (si $v_0 \gg 10^{-5}\ c$). Cette durée est plus petite que le temps caractéristique de l'atome $\tau_{\text{at}} \sim R_{\text{at}}/v_{\text{at}} \sim 10^{-17}$ s ; ainsi l'état de l'électron ne varie pas durant la collision entre le proton et le neutron. On peut de même négliger le déplacement du proton au cours de la collision, vu que $l_{\text{dép}} \sim v_0 \tau_{\text{inter}} \sim R_{\text{noy}} \ll R_{\text{at}}$.

Compte tenu de ces estimations, on voit sans peine que l'amplitude de diffusion élastique du neutron sur le proton $f(E, q)$ est liée à l'amplitude $\tilde{f}(E, q)$ de diffusion élastique du neutron sur l'atome d'hydrogène par la relation

$$\tilde{f}(E, q) = f(E, q) a(q), \tag{1}$$

où $a(q)$ est l'amplitude de probabilité pour que l'atome d'hydrogène reste dans son état fondamental lors de la variation brusque de vitesse du noyau-proton de la valeur $\mathbf{v} = 0$ à $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{q}/M$ ($\hbar\mathbf{q}$ étant l'impulsion transmise lors du choc, M la masse du proton ; comparer à 11.77 et 11.78). En utilisant le résultat obtenu dans le problème 11.78, on obtient

$$a(q) = \int |\Psi_0(r)|^2 \exp\left(-\frac{i m_e \mathbf{v} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) dV = \left(1 + \frac{q^2 m_e^2 a_0^2}{4M^2}\right)^{-2}.$$

La relation entre les sections efficaces différentielles est donc :

$$\frac{d\sigma_{\text{nH}}}{d\Omega} = \frac{d\sigma_{\text{np}}}{d\Omega} \left(1 + \frac{q^2 m_e^2 a_0^2}{4M^2}\right)^{-4}.$$

Vu que $a(0) = 1$, en utilisant le théorème optique et la relation (1), on voit que les sections efficaces totales de diffusion sur le proton et sur l'atome d'hydrogène sont identiques.

13.58. La probabilité d'annihilation par unité de temps de la paire dans l'état fondamental du positronium est donnée par l'expression standard

$$dw_{\text{pos}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \Psi_f^* \widehat{V} \Psi_0(r) d\tau \right|^2 d\rho_f, \tag{1}$$

où $\widehat{V}$ est l'opérateur perturbation responsable de l'annihilation de la paire, Ψ_0 est la fonction d'onde de l'état fondamental du positronium valant

$$\Psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \qquad a = \frac{2\hbar^2}{e^2 m}, \tag{2}$$

(la masse réduite du système "électron + positon" vaut $m/2$) ; l'indice f caractérise les états finaux possibles du système de photons formés au cours de l'annihilation et $d\rho_f$ est la densité d'états finaux, l'énergie totale des photons étant $E \approx 2mc^2$ (à l'énergie de liaison du positronium près, beaucoup plus petite que mc^2).

L'expression analogue de la probabilité d'annihilation dans la collision d'un électron et d'un positon libres est

$$dw_{\text{ann}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \Psi_f^* \widehat{V} \Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) d\tau \right|^2 d\rho_f, \tag{3}$$

où $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ est la fonction d'onde du mouvement relatif libre de vecteur d'onde $\mathbf{k}$ de la paire.

En négligeant l'énergie cinétique de la paire par rapport à $2mc^2$, l'énergie des photons dans l'état final vaut $E = 2mc^2$. Ainsi les états finaux des photons créés par l'annihilation du positronium et de la paire libre sont les mêmes.

Comme on le sait [1], en normalisant la fonction d'onde $\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)}$ à l'unité du flux de densité :

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

l'expression (3) donne la section efficace différentielle du processus, c'est-à-dire

$$d\sigma_{\text{ann}} = \frac{2\pi}{\hbar v} \left| \Psi_f^* \widehat{V} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\tau \right|^2 d\rho_f. \tag{4}$$

L'intégration des expressions (1), (4) donne la probabilité totale de désintégration du positronium et la section efficace totale d'annihilation de la paire. Compte tenu de la petitesse du rayon d'action d'annihilation, on peut poser[8] dans ces expressions $r = 0$ et obtenir ainsi la relation cherchée

$$W_{\text{pos}} = \int dw_{\text{pos}} = \frac{1}{\pi a^3} (v\sigma_{\text{ann}}) \tag{5}$$

soit

$$\sigma_{\text{ann}} = \pi a^3 W_{\text{pos}}/v \tag{6}$$

en accord avec la loi en "$1/v$".

En utilisant les formules (5), (6), il faut tenir compte du fait que la valeur de la section efficace d'annihilation dépend du spin total du système "électron + positon" (voir, par exemple, [8]).

---

8 Il est plus correct de poser $r = 0$ dans l'argument de l'exponentielle de (4) lorsque $kR_{\text{ann}} \ll 1$ (R_{ann} étant le rayon d'action d'annihilation) ; d'autre part, on ne peut négliger l'interaction coulombienne dans la collision qu'à la condition que $v \gg e^2/\hbar$, de sorte que le domaine de validité de (5) et (6) est restreint par la condition $e^2/\hbar \ll v \ll \hbar/(mR_{\text{ann}})$.

13.59. Comme on le sait [1], selon le principe du bilan détaillé entre les sections efficaces de deux réactions inverses A $\leftrightarrow$ B, on a la relation[9] :

$$\frac{\overline{\sigma}_{A\to B}}{\overline{\sigma}_{B\to A}} = \frac{g_B p_B^2}{g_A p_A^2}, \tag{1}$$

où $\overline{\sigma}$ sont les sections efficaces totales des réactions A $\to$ B et B $\to$ A, moyennées suivant les directions des spins des particules dans l'état initial et sommées sur les directions des spins des particules dans l'état final ; g_A et g_B sont les poids statistiques liés aux spins et p_A, p_B sont les impulsions du mouvement relatif dans les états A et B, prises pour une même énergie totale dans le système du centre d'inertie.

Dans le cas considéré

$$\underset{(A)}{n + p} \leftrightarrow \underset{(B)}{d + \gamma}$$

on a $\overline{\sigma}_{A\to B} \equiv \sigma_{cap}$ (section efficace de capture) et $\overline{\sigma}_{B\to A} \equiv \sigma_{ph\text{-}dés}$ (section efficace de photodésintégration). Vu que le poids statistique de spin (de polarisation) d'une particule de spin s vaut $g_s = (2s + 1)$ (mais, en vertu des propriétés spécifiques du photon, dont la masse de repos est $m_\gamma = 0$ et le spin $s_\gamma = 1$, le photon n'a que deux états de polarisation indépendants et $g_\gamma = 2$), on a

$$g_A = (2s_p + 1)(2s_n + 1) = 4, \qquad g_B = g_\gamma(2s_d + 1) = 6. \tag{2}$$

Les impulsions du mouvement relatif $p_{A,B}$ figurant dans (1) sont égales aux impulsions des particules correspondantes dans le système du centre d'inertie : $p_A \equiv p_p = p_n$, $p_B \equiv p_\gamma = p_d$. En supposant que toutes les particules participant aux réactions étudiées sont non relativistes (à l'exception, bien sûr, du photon, pour lequel $E_\gamma \ll Mc^2$, M étant la masse du nucléon), on a, du fait de la conservation de l'énergie,

$$E_A = 2\frac{p_A^2}{2M} = E_B = E_\gamma + E_d - \varepsilon \approx \hbar\omega - \varepsilon, \tag{3}$$

où ε est l'énergie de liaison du deutéron, ω, la pulsation du photon. Dans (3), on a négligé E_d par rapport à E_γ (il est clair que pour un deutéron non relativiste, $E_d \ll E_\gamma$, pour des impulsions identiques du deutéron et du photon ; cela signifie que pour le système γ + d, le référentiel du centre d'inertie se confond pratiquement avec celui du deutéron au repos).

Puisque $p_\gamma = \hbar\omega/c$, selon (1)–(3), on obtient

$$\frac{\sigma_{cap}}{\sigma_{ph\text{-}dés}} = \frac{3}{2}\frac{\hbar\omega}{Mc^2}\frac{\hbar\omega}{\hbar\omega - \varepsilon}. \tag{4}$$

D'après (4), on voit que dans le cas non relativiste ($\hbar\omega \ll Mc^2$) on a, en général, $\sigma_{ph\text{-}dés} \gg \sigma_{cap}$. Par contre, dans la bande étroite de valeurs de $\hbar\omega$ au voisinage du seuil de la réaction γ + d $\to$ p + n ($\hbar\omega \approx \varepsilon$) on a, au contraire, $\sigma_{ph\text{-}dés} \ll \sigma_{cap}$.

9 On a cette relation non seulement pour les sections efficaces totales, mais également pour les sections efficaces différentielles $d\overline{\sigma}/d\Omega$.

Soulignons, en conclusion, que la relation (4) n'est pas liée à une hypothèse quelconque sur le mécanisme de la réaction mais est basée uniquement sur la symétrie des équations de la mécanique quantique par rapport au renversement du temps.

13.60. Le problème se résout de façon analogue au précédent[10]. Les sections efficaces des réactions inverses effet photoélectrique et recombinaison radiative, qui ont été moyennées selon les directions des spins,

$$\underset{(A)}{\gamma + H} \leftrightarrow \underset{(B)}{p + e}$$

sont liées par la relation

$$\frac{\sigma_{ph}(\omega)}{\sigma_{rec}(\varepsilon_e)} = \frac{p_e^2}{2p_\gamma^2} = \frac{\hbar\omega - |E_0|}{\hbar\omega}\frac{m_e c^2}{\hbar\omega}. \tag{1}$$

Pour obtenir (1), il faut tenir compte de ce que le référentiel du centre d'inertie des réactions étudiées coïncide avec ceux de l'atome H et du proton au repos, que le poids statistique de spin de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental $1s_{1/2}$ est égal à 2, comme celui de l'électron, et que les énergies du photon et de l'électron vérifient, en vertu de la loi de conservation de l'énergie, la relation

$$\hbar\omega + E_0 = \varepsilon_e = \frac{p_e^2}{2m_e},$$

où E_0 est l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène.

10 Les processus étudiés dans ces deux problèmes sont apparentés de par leur nature physique.

CHAPITRE 14

THÉORIE QUANTIQUE DU RAYONNEMENT

14.1. L'interaction d'une particule de charge (algébrique) e, sans spin avec un champ de radiation (quantifié par le champ électromagnétique) est de la forme (en représentation de Schrödinger)

$$\widehat{V} = -\frac{e}{mc}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}), \tag{1}$$

où $\widehat{\mathbf{A}}$ est l'opérateur potentiel vecteur,

$$\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}\right)^{1/2} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\widehat{a}_{\mathbf{k}\sigma} \mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \widehat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} \mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right) \tag{2}$$

($\widehat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$, $\widehat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ sont les opérateurs annihilation et création du photon avec un vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et une polarisation σ ; $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ est le vecteur polarisation du photon[1] ; la jauge est celle de Coulomb div $\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = 0$ avec $\mathbf{k} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = 0$).

L'interaction (1) est responsable des transitions entre les différents états du système "particule + photons" avec l'hamiltonien $\widehat{H}_0 = \widehat{H}_0^{\mathrm{P}} + \widehat{H}_0^{\gamma}$, où $\widehat{H}_0^{\mathrm{P}}$ est l'hamiltonien de la particule dans le champ extérieur (non quantifié) (dans ce problème, l'hamiltonien de l'atome d'hydrogène), $\widehat{H}_0^{\gamma}$ est l'hamiltonien des photons libres.

La probabilité différentielle de transition par unité de temps est définie par l'expression connue du calcul des perturbations

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|\widehat{V}|i\rangle|^2 d\rho_f \tag{3}$$

($d\rho_f$ est la densité d'états finaux).

Dans ce problème, la fonction d'onde de l'état initial est

$$\Psi_i = \Psi_{2p}(\mathbf{r})|0\rangle_{\gamma}.$$

1 Les vecteurs polarisation de base $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}$ sont choisis réels, ce qui correspond à des photons avec une polarisation linéaire.

où Ψ_{2p} est la fonction d'onde de l'état $2p$ de l'atome d'hydrogène (dans la suite, pour fixer les idées, on supposera que dans l'état initial $l_z = 0$ et $\Psi_{2p} \equiv \Psi_{n=2,l=1,m=0}$), $|0\rangle_\gamma$ est la fonction d'onde (plus précisément, le vecteur d'état) de l'état initial du système de photons dans la représentation en nombre d'occupation (cet état est le vide).

Comme on le sait, dans la majorité des cas, on étudie la probabilité des transitions pour lesquelles le nombre de photons varie d'une unité. En se limitant seulement à ces transitions, on obtient la fonction d'onde des états finaux possibles

$$\Psi_f = \Psi_0(r)|1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \ldots\rangle_\gamma,$$

où $\Psi_0 \equiv \Psi_{100}$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène, $|1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \ldots\rangle_\gamma$ la fonction d'onde de l'état avec un seul photon d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ et de polarisation σ. Pour les transitions étudiées, l'élément matriciel de la perturbation prend la forme ($\widehat{\mathbf{A}}^2$ décrit des transitions à deux photons)

$$\langle f|\widehat{V}|i\rangle = -\frac{e}{mc}\langle f|\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\cdot\widehat{\mathbf{p}}|i\rangle = -\frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\langle 100|\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}|210\rangle. \tag{4}$$

Ici, on a tenu compte du fait que parmi tous les termes de la somme (2), un seul contribue à l'élément matriciel, car

$$\langle 1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \ldots|\widehat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\sigma'}|0\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}, \qquad \langle 1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \ldots|\widehat{a}_{\mathbf{k}'\sigma'}|0\rangle = 0.$$

Pour chacune des deux polarisations indépendantes du photon, le nombre d'états vaut ($\omega_k = ck \equiv \omega$)

$$\frac{Vd^3k}{(2\pi)^3} = \frac{Vk^2dkd\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} = \frac{V\omega^2d\omega d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3c^3}$$

et la densité d'états finaux du système prend la forme

$$d\rho_f = \int \delta(E_i - E_f)\frac{V\omega^2d\omega d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3c^3} = \frac{V\omega_{21}^2d\Omega_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3\hbar c^3}$$

où

$$E_i = E_{n=2}, \qquad E_f = E_{n=1} + \hbar\omega, \qquad \omega = \omega_{21} = \frac{1}{\hbar}(E_2 - E_1) = \frac{3me^4}{8\hbar^3}.$$

Donc, l'expression (3) devient

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{e^2\omega_{21}}{2\pi\hbar m^2c^3}\left|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\int \Psi^*_{100}\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}\Psi_{210}d^3r\right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \tag{5}$$

L'intégrale dans l'expression (5), après la substitution $\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ (approximation dipolaire), s'écrit

$$\mathbf{p}_{12} = \int \Psi^*_{100}\widehat{\mathbf{p}}\Psi_{210}dV = -im\omega_{21}\int \Psi^*_{100}\widehat{\mathbf{r}}\Psi_{210}dV = -im\omega_{21}\mathbf{r}_{12}. \tag{6}$$

Dans (5), on effectue la somme sur les polarisations du photon à l'aide de la formule

$$\sum_{\sigma=1,2} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\mathbf{p}_{12}|^2 = \sum_{\sigma} (e_{\mathbf{k}\sigma})_i (e_{\mathbf{k}\sigma})_n (p_{12})_i (p_{12})_n^* = \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2}\right) (p_{12})_i (p_{12})_n^*, \tag{7}$$

et on intègre sur les angles du vecteur d'onde du photon en utilisant l'intégrale

$$\int k_i k_n d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{4\pi}{3} k^2 \delta_{in} \tag{8}$$

($\mathbf{k}$ étant le vecteur d'onde du photon, $ck = \omega_{21}$). Ainsi on obtient la probabilité totale de la transition (par unité de temps)[2] :

$$w = \int \sum_{\sigma} dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{21}^3}{\hbar c^3} |\mathbf{r}_{12}|^2. \tag{9}$$

En tenant compte de la forme explicite de la fonction d'onde ($a = \hbar^2/me^2$ étant le rayon de Bohr)

$$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}, \qquad \Psi_{210} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \frac{r}{2\sqrt{6a^5}} e^{-r/2a},$$

on trouve les composantes de l'élément matriciel vectoriel $\mathbf{r}_{12}$:

$$(\mathbf{r}_{12})_x = (\mathbf{r}_{12})_y = 0,$$
$$(\mathbf{r}_{12})_z = \frac{1}{4\pi\sqrt{2}a^4} \int (\cos^2\theta) r^4 e^{-3r/2} dr d\Omega = \frac{128\sqrt{2}}{243} a.$$

L'expression de la probabilité totale de la transition est donc

$$w = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega_{21}^3}{\hbar c^3} \cdot 32 \left(\frac{2}{3}\right)^{10} a^2 = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^4 \frac{c}{a}. \tag{10}$$

La durée de vie τ et la largeur du niveau Γ sont liées à w par les relations

$$\tau = 1/w, \qquad \Gamma = \hbar/\tau = \hbar w. \tag{11}$$

Pour l'atome d'hydrogène, selon (10) et (11), on a $w \approx 0{,}63 \times 10^9\ \mathrm{s}^{-1}$, $\tau \approx 1{,}60 \times 10^{-9}$ s, $\Gamma \approx 0{,}41 \times 10^{-6}$ eV.

La durée de vie du niveau $2p$ de l'atome muonique ($m_\mu \approx 207 m_e$) vaut $\approx 10^{-11}$ s. Cette valeur est beaucoup plus petite que la durée de vie du muon libre et permet de comprendre le fait que le lepton μ une fois capturé sur l'orbite atomique arrive, avant sa désintégration, par une série de transitions en cascades, à se placer sur le niveau fondamental.

---

2 Cette expression peut être écrite sous la forme $w_{E1} = \frac{4\omega_{21}^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{12}|^2$, qui constitue l'une des principales formules de la théorie du rayonnement dans l'approximation dipolaire.

14.2. Le problème se résout de façon analogue au précédent. Vu que le premier niveau excité de l'oscillateur possède le moment cinétique $l = 1$ (voir, par exemple, 4.23, 4.24, 4.25 du Tome I), sa durée de vie est définie par une transition dipolaire. Pour calculer la probabilité de transition, il faut utiliser la formule (9) du problème précédent, en y posant $\omega_{21} = \omega = \sqrt{k/m}$) et tenir compte de la forme explicite de la fonction d'onde des états initial et final de l'oscillateur ($a = \sqrt{\hbar/m\omega}$)

$$\Psi_1 = \Psi_{n_1=0,n_2=0,n_3=0} = \frac{1}{(\sqrt{\pi}a)^{3/2}} e^{-r^2/2a^2},$$

$$\Psi_2 = \Psi_{001} = \frac{1}{(\sqrt{\pi}a)^{3/2}} \frac{\sqrt{2}z}{a} e^{-r^2/2a^2} = \frac{1}{(\sqrt{\pi}a)^{3/2}} \frac{\sqrt{2}}{a} (\cos\theta) r e^{-r^2/2a^2},$$

dans le calcul de l'élément matriciel $\mathbf{r}_{12}$ (on suppose que dans l'état initial $l_z = 0$).

Une intégration élémentaire donne

$$(\mathbf{r}_{12})_x \equiv x_{12} = 0, \qquad (\mathbf{r}_{12})_y = 0,$$

$$(\mathbf{r}_{12})_z = \int \Psi_1^* z \Psi_2 dV = \frac{\sqrt{2}}{a} \frac{1}{(\sqrt{\pi}a)^3} \iiint z^2 e^{-(x^2+y^2+z^2)/a^2} dx dy dz = \frac{a}{\sqrt{2}},$$

et la probabilité totale de la transition (par unité de temps) s'écrit

$$w = \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega^3 a^2}{\hbar c^3} = \frac{2}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \left(\frac{\hbar\omega}{mc^2}\right) \omega$$

($w \ll \omega$, car $e^2/\hbar c \approx 1/137$ et $\hbar\omega \ll mc^2$).

La durée de vie du niveau est $\tau = 1/w$.

14.3. Dans l'approximation dipolaire, la probabilité de transition est $w \propto |\langle 1|\mathbf{d}|2\rangle|^2$.

a) L'opérateur moment dipolaire $\mathbf{d} = -e \sum_a \mathbf{r}_a$ est indépendant des variables de spin et, par suite, commute avec l'opérateur carré du spin total des électrons, $\widehat{\mathbf{S}}^2$. Si l'état initial correspond à une valeur déterminée du spin total S_2 (rappelons que la dégénérescence du niveau est égale à $(2S + 1)$), la fonction vectorielle $\mathbf{\Psi} = \mathbf{d}\Psi_2$ est aussi fonction propre de $\widehat{\mathbf{S}}^2$ correspondant à la même valeur propre S_2. Si la fonction d'onde de l'état final correspond à une valeur du spin total $S_1 \neq S_2$, on a $\langle 1|\mathbf{d}|2\rangle = 0$, en vertu de l'orthogonalité des fonctions propres de l'opérateur hermitien $\widehat{\mathbf{S}}^2$ correspondant à différentes valeurs propres et les transitions dipolaires sont interdites.

b) Comme on le sait, les fonctions d'onde des états stationnaires de l'atome sont (approximativement) des combinaisons déterminées de produits de fonctions d'onde d'électrons individuels $\psi_{n_r lm}(\mathbf{r})\chi_{s_z}$ dans un champ self-consistant (avec des nombres quantiques différents n_r, l, m, s_z). Dans ce cas, la fonction d'onde de tout état d'un terme contient un même nombre de fonctions d'onde monoélectroniques possédant les nombres quantiques donnés n_r, l (c'est-à-dire que le nombre d'électrons équivalents pour tous les états du terme concerné est le même). Donc

tous les états du terme possèdent la même parité $I = (-1)^{\sum_a l_a}$ (la somme est effectuée sur tous les électrons ; en fait, la valeur de la parité se détermine par les électrons des couches incomplètes).

Les éléments matriciels du moment dipolaire entre des états de même parité sont identiquement nuls (voir, par exemple, 1.21 du Tome I), ce qui démontre que les transitions dipolaires entre les différentes composantes de structure fine d'un même terme sont interdites.

14.4. La transition étudiée est de nature dipolaire. L'expression générale de la probabilité de transition dipolaire d'un photon de l'état initial i du spectre discret à l'état final f est de la forme

$$w_{if} = \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}|\mathbf{d}_{fi}|^2 \tag{1}$$

où $\mathbf{d}_{fi}$ est l'élément matriciel du moment dipolaire du système, $\hbar\omega = E_i - E_f$ l'énergie du photon émis.

Pour obtenir une estimation de w à partir de (1), il faut prendre $d_{fi} \sim ea$ et tenir compte de la valeur $\hbar\omega = \Delta E_{LS} = 7 \times 10^{-18}$ erg. Finalement, on obtient ($a \sim 10^{-8}$ cm, $e \approx 5 \times 10^{-10}$ UES CGS)

$$w_{if} \sim \frac{(\Delta E_{LS})^3 e^2 a^2}{\hbar^4 c^3} \sim 3 \times 10^{-10}\ \mathrm{s}^{-1}, \tag{2}$$

ce qui correspond à une durée de vie (par rapport à cette transition) $\tau = 1/w \approx 3 \times 10^9$ s ≈ 100 années (1 année $\approx 3{,}14 \times 10^7$ s).

14.5. Le problème se résout de façon analogue au problème 14.1. Dans l'expression $\widehat{V} = -\mathbf{d} \cdot \widehat{\mathbf{E}}_{\mathrm{rad}}(\mathbf{r})$, l'opérateur champ électrique des photons est de la forme

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{E}}_{\mathrm{rad}}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{c}\frac{d}{dt}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{c}\frac{i}{\hbar}[\widehat{H}_0^\gamma,\ \widehat{\mathbf{A}}]_- \\ &= i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\left(\widehat{a}_{\mathbf{k}\sigma}\mathrm{e}^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \widehat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right). \end{aligned} \tag{1}$$

On a utilisé les notations du problème 14.1 ; $\widehat{H}_0^\gamma$ est l'hamiltonien des photons libres

$$\widehat{H}_0^\gamma = \sum_{\mathbf{k},\sigma}\hbar\omega_k\widehat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}\widehat{a}_{\mathbf{k}\sigma},$$

$\mathbf{r}$ est le rayon vecteur du centre d'inertie du rotateur ; on néglige dans la suite le recul dû à l'émission du photon et l'on admet que le rotateur est localisé au point $\mathbf{r} = 0$ comme dans les problèmes du rayonnement de l'atome où l'on suppose habituellement que le noyau est localisé au point $\mathbf{R} = 0$).

La fonction d'onde de l'état initial du système (vide des photons et rotateur sur le premier niveau excité, dont le moment cinétique est $l = 1$) a pour expression

$$\Psi_i = Y_{10}(\theta, \varphi)|0\rangle_\gamma = -i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta|0\rangle_\gamma$$

(pour fixer les idées, on suppose $l_z = 0$). La fonction d'onde de l'état final est

$$\Psi_f = Y_{00}|1_{\mathbf{k},\sigma}, 0, \ldots\rangle_\gamma = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}|1_{\mathbf{k},\sigma}, 0, \ldots\rangle_\gamma$$

(rotateur dans l'état fondamental et un photon avec les nombres quantiques $\mathbf{k}, \sigma$; la valeur $k = \omega/c$ se détermine par la conservation de l'énergie $\hbar\omega = E_{l=1} - E_{l=0} = \hbar^2/I$, voir 4.3 du Tome I).

La probabilité différentielle de transition (par unité de temps) vaut (comparer à la solution du problème 14.1 ; $\mathbf{d} = d\mathbf{n}$, $\mathbf{n}$ étant le vecteur unitaire parallèle à l'axe du rotateur)

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\widehat{V}|i\rangle|^2 d\rho_f = \frac{d^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\left|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\int\frac{\sqrt{3}}{4\pi}\mathbf{n}\cos\theta d\Omega_{\mathbf{n}}\right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{2}$$

(ne pas confondre les éléments d'angles solides $d\Omega_{\mathbf{n}}$ et $d\Omega_{\mathbf{k}}$ donnant respectivement l'orientation de l'axe du rotateur et celle du photon émis !).

En introduisant la notation

$$\mathbf{a} \equiv \frac{\sqrt{3}}{4\pi}\int \mathbf{n}\cos\theta d\Omega_{\mathbf{n}}$$

et en utilisant la formule

$$|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\mathbf{a}|^2 = (e_{\mathbf{k}\sigma})_i(e_{\mathbf{k}\sigma})_j a_i a_j,$$

effectuons dans (2) la somme sur les polarisations du photon en recourant à la relation

$$\sum_{\sigma=1,2}(e_{\mathbf{k}\sigma})_i(e_{\mathbf{k}\sigma})_j = \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right).$$

On obtient alors

$$dw_{\mathbf{k}} = \sum_\sigma dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{d^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right)a_i a_j d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{3}$$

et, en intégrant suivant les directions du vecteur d'onde du photon (avec utilisation de la formule (8) du problème 14.1), on aboutit à la probabilité totale de transition

$$w = \int dw_{\mathbf{k}} = \frac{4}{3}\frac{d^2\omega^3}{\hbar c^3}|\mathbf{a}|^2 \tag{4}$$

(comme le vecteur $d\mathbf{a}$ est l'élément matriciel du moment dipolaire, la formule (4) se trouve en accord avec l'expression générale de la probabilité de rayonnement dipolaire).

Compte tenu de la valeur des composantes du vecteur $\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$, il est facile d'obtenir $a_x = a_y = 0$, $a_z = 1/\sqrt{3}$ et, finalement, l'expression de la probabilité de transition

$$w = \frac{4}{9}\frac{d^2\omega^3}{\hbar c^3} \qquad (\omega = \hbar/I). \tag{5}$$

14.6. En nous limitant à l'étude des transitions permises par l'approximation dipolaire, référons-nous à la formule générale donnant la probabilité de ces transitions (par unité de temps)

$$w_{if} = \frac{4}{3}\frac{\omega_{21}^3}{\hbar c^3}|\mathbf{d}_{12}|^2. \tag{1}$$

Dans ce problème, $\mathbf{d}_{12}$ est l'élément matriciel du moment dipolaire de la molécule entre les fonctions d'onde des états initial Ψ_2 et final Ψ_1 correspondant aux différents niveaux rotationnels d'un même terme. Les fonctions d'onde de ces états sont de la forme

$$\Psi = \Psi^{\text{él}}_{n,\Lambda=0}(\mathbf{R}, \xi_1, \xi_2, \ldots)\Psi^{\text{vib}}_v(R)Y_{KM}(\theta, \varphi)$$

(voir, par exemple, 11.60) avec les nombres quantiques n, $\Lambda = 0$, v des états initial et final identiques, et les nombres rotationnels (K, M) différents. En effectuant dans l'élément matriciel $\mathbf{d}_{12}$ l'intégration par rapport aux coordonnées des électrons ξ_a (y compris la somme sur les spins) et par rapport à la distance relative $\mathbf{R}$ entre les noyaux, de façon identique à 11.60, on obtient

$$\mathbf{d}_{12} = \int \Psi_1^* \mathbf{d}\Psi_2 d\tau = d\int Y^*_{K'M'}\mathbf{n}Y_{KM}d\Omega \tag{2}$$

($\mathbf{n}$ est le vecteur unité le long de l'axe passant par les noyaux, sa direction étant fixée par les angles θ, φ).

Vu que l'énergie de rotation de la molécule est donnée par $E_K = B_e K(K+1)$ ($B_e = \hbar^2/2I$ est la constante rotationnelle), on note aussitôt que la formule (1), compte tenu de (2), est identique à l'expression de la probabilité de rayonnement du rotateur.

L'intégrale (2) pour le premier niveau rotationnel excité avec $K = 1$ et $M = 0$ ($K' = 0$) a été calculée dans le problème précédent. L'expression finale de la probabilité de rayonnement est

$$w = \frac{4}{9}\frac{d^2\omega^3}{\hbar c^3} \qquad (\omega = \hbar/I = 2B_e/\hbar). \tag{3}$$

Pour avoir une estimation numérique de (3) on peut prendre $d \sim eR_0$, $I \sim MR_0^2 \sim 3M_\text{p}R_0^2$ (on suppose que la molécule comprend au moins un atome léger, de sorte que la masse réduite des noyaux $M \sim 3M_\text{p}$). Finalement, on obtient ($R_0 \sim 10^{-8}$ cm, $e \approx 5 \times 10^{-10}$ UES CGS, $3M_\text{p} \approx 5 \times 10^{-24}$ g)

$$w \sim \frac{e^2R_0^2}{c^3}\frac{\hbar^2}{I^3} \sim 10^{-2}\ \text{s}^{-1}. \tag{4}$$

14.7. L'interaction d'une particule avec le champ électromagnétique a la forme

$$\widehat{U} = -\widehat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \widehat{\mathbf{B}}_0 - \widehat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \widehat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) \tag{1}$$

où le sens du premier terme est évident, tandis que le second décrit l'interaction du moment magnétique de spin avec le champ de rayonnement. De plus, l'opérateur $\widehat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}$ est de la forme (à propos de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$ voir 14.1)

$$\widehat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}(\mathbf{r}) = \text{rot}\ \widehat{\mathbf{A}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}\right)^{1/2} (i\mathbf{k} \wedge \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}) \left(\widehat{a}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \widehat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right) ; \tag{2}$$

dans ces expressions $\mathbf{r}$ est le rayon vecteur de la particule. Si l'on néglige l'influence du mouvement de la particule sur le rayonnement, on ne doit considérer que le degré de liberté de spin, en supposant $\mathbf{r} = 0$. Dans ce cas le terme $\widehat{H}_0 = -\widehat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \widehat{\mathbf{B}}_0 = -\mu B_0 \widehat{\sigma}_z$ (l'axe z est dirigé le long du champ) est un hamiltonien non perturbé du système (du sous-système de spin). Ses fonctions propres et ses valeurs propres sont :

$$\Psi_1 = \chi_{1/2,1/2}, \qquad E_1^{(0)} = -\mu B_0 ; \qquad \Psi_2 = \chi_{1/2,-1/2}, \qquad E_2^{(0)} = \mu B_0. \tag{3}$$

En supposant $\mu > 0$, on remarque que $E_2^{(0)} > E_1^{(0)}$ et la perturbation $\widehat{V} = -\widehat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \widehat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}(0)$ peut provoquer une transition de l'état Ψ_2 vers l'état Ψ_1. Cette transition sera accompagnée par l'émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega = E_2^{(0)} - E_1^{(0)} = 2\mu B_0$.

L'expression de la probabilité différentielle de cette transition (par unité de temps), obtenue de façon absolument analogue à ce qui a été fait lors de la résolution du problème 14.1, est

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 d\rho_f = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} |(\mathbf{k} \wedge \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}) \cdot \Psi_1^* \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi_2|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \tag{4}$$

Récrivons cette expression sous la forme

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} \cdot \mathbf{a}_{12}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} (e_{\mathbf{k}\sigma})_i (e_{\mathbf{k}\sigma})_j (a_{12})_i (a_{12})_j^* d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{5}$$

où

$$\mathbf{a}_{12} = \mathbf{k} \wedge \Psi_1^* \widehat{\boldsymbol{\sigma}} \Psi_2 \equiv \mathbf{k} \wedge \boldsymbol{\sigma}_{12}.$$

Effectuons, d'abord ,dans (5) la somme sur les polarisations du photon (voir 14.1) :

$$dw_{\mathbf{k}} = \sum_{\sigma} dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} |\mathbf{a}_{12}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{\mu^2\omega}{2\pi\hbar c} \left\{k^2 |\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2 - (\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{12})(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{12})^*\right\} d\Omega_{\mathbf{k}},$$

puis l'intégration sur toutes les directions du vecteur d'onde du photon :

$$w = \int dw_{\mathbf{k}} = \frac{4\mu^2\omega^3}{3\hbar c^3} |\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2$$

(on a écrit $(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{12})(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{12})^* = k_i k_n (\sigma_{12})_i (\sigma_{12})_n^*$ et utilisé la formule (8) du problème 14.1).

Compte tenu de la forme explicite des fonctions Ψ_1 et Ψ_2 et des matrices de Pauli, on obtient

$$(\boldsymbol{\sigma}_{12})_x = 1, \qquad (\boldsymbol{\sigma}_{12})_y = -i, \qquad (\boldsymbol{\sigma}_{12})_z = 0$$

et, finalement, l'expression de la probabilité totale d'émission d'un photon

$$w = \frac{8\mu^2\omega^3}{3\hbar c^3} = \frac{64\mu^5 B_0^3}{3\hbar^4 c^3}.$$

14.8. L'interaction de l'électron avec le champ de rayonnement est

$$\widehat{V} = \frac{|e|}{mc}\widehat{\mathbf{A}}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2 + \frac{|e|\hbar}{2mc}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\widehat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}, \tag{1}$$

(le dernier terme de (1) est l'interaction du moment magnétique de spin, valant $-|e|\hbar/2mc$, avec le champ de rayonnement ; la forme explicite des opérateurs $\widehat{\mathbf{A}}$ et $\widehat{\mathbf{B}}_{rad}$ est donnée dans la solution des problèmes 14.1 et 14.7).

L'élément matriciel de la perturbation (1) d'une transition à 1 photon de l'état $2s_{1/2}$ vers l'état $1s_{1/2}$ est de la forme (comparer aux solutions des problèmes 14.1 et 14.7)

$$\begin{aligned}\langle f|\widehat{V}|i\rangle &= \langle f|\frac{|e|}{mc}\widehat{\mathbf{A}}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{|e|\hbar}{2mc}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\widehat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}|i\rangle \\ &= \frac{|e|}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\langle\Psi_1|\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{i\hbar}{2}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\wedge\mathbf{k})|\Psi_2\rangle,\end{aligned} \tag{2}$$

où

$$\begin{aligned}\Psi_1 = \Psi_{100}\chi_1 &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a}\chi_1, \\ \Psi_2 = \Psi_{200}\chi_2 &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/2a}\left(1 - \frac{r}{2a}\right)\chi_2\end{aligned}$$

(Ψ_{nlm} est la fonction d'onde de l'atome d'hydrogène, $\chi_{1,2}$ sont les fonctions de spin de l'électron ; on suppose que dans l'état initial $s_z = j_z = +1/2$).

En tenant compte de la symétrie sphérique des fonctions d'onde Ψ_1 et Ψ_2, on obtient sans peine

$$\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\langle\Psi_1|\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}|\Psi_2\rangle = 0.$$

De fait, l'élément matriciel vectoriel $\langle\Psi_1|\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}|\Psi_2\rangle$ ne dépend que du seul vecteur $\mathbf{k}$ et, par suite, est proportionnel à $\mathbf{k}$, mais $\mathbf{k}\cdot\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma} = 0$. Donc, l'expression (2) prend la forme

$$\langle f|\widehat{V}|i\rangle = -\frac{i|e|\hbar}{2m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\langle\Psi_{100}|\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\Psi_{200}\rangle\,\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\langle\chi_1|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\wedge\mathbf{k})|\chi_2\rangle. \tag{3}$$

Pour calculer l'élément matriciel de la fonction exponentielle $\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, développons-la en série ($|\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}| \lesssim ka \ll 1$) :

$$\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = 1 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \frac{(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2}{2} + \ldots$$

Les deux premiers termes du développement donnent zéro (le premier à cause de l'orthogonalité des fonctions d'onde, le second du fait que la fonction sous l'intégrale est impaire), de sorte que

$$\langle\Psi_{100}|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\Psi_{200}\rangle \approx -\frac{1}{2}\int \Psi^*_{100}\Psi_{200}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2 dV. \tag{4}$$

En écrivant $(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2 = k_i k_k x_i x_k$ et compte tenu de la relation

$$\int x_i x_k d\Omega = \frac{4\pi}{3} r^2 \delta_{ik},$$

on transforme l'intégrale (4) en

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{100}|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|\Psi_{200}\rangle &\approx -\frac{2\pi k^2}{3}\int_0^\infty r^4 \Psi^*_{100}\Psi_{200} dr \\ &= -\frac{k^2}{3a^3\sqrt{2}}\int_0^\infty e^{-3r/2a}\left(1-\frac{r}{2a}\right) r^4 dr = \frac{2^8\sqrt{2}}{3^6}k^2a^2. \end{aligned}\tag{5}$$

Compte tenu des relations (3) et (5) et en introduisant la notation $\boldsymbol{\sigma}_{12} \equiv \langle\chi_1|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}|\chi_2\rangle$, on obtient la probabilité différentielle de rayonnement du photon sous la forme

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\widehat{V}|i\rangle|^2 d\rho_f = \frac{|V_{fi}|^2}{(2\pi)^2\hbar^2c^3}V\omega^2 d\Omega_{\mathbf{k}} = \frac{2^{14}e^2\hbar a^4\omega^5}{3^{12}\pi m^2c^7}|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{12}\wedge\mathbf{k}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{6}$$
$$(\hbar\omega = \hbar kc = E_{n=2} - E_{n=1} = 3e^2/8a).$$

On effectue ensuite la somme sur les polarisations du photon et l'intégration sur les directions de son vecteur d'onde (comme lors de la résolution des problèmes 14.1 et 14.7) et on obtient

$$w = \frac{2^{17}\omega^7 e^2\hbar a^4}{3^{13}m^2c^9}|\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2 = \frac{1}{3^6\cdot 2^4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^9 \frac{mc^4}{\hbar^3}|\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2. \tag{7}$$

La valeur de l'expression (7) dépend de l'état de spin de l'électron décrit par le spineur χ_1. Pour obtenir la probabilité totale de transition $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$, il faut trouver les probabilités $w^{(1,2)}$ des transitions vers les deux états finaux indépendants avec $j_z = s_z = \pm 1/2$, pour lesquels

$$\chi_1^{(1)} = \chi_{1/2,1/2}, \qquad \chi_1^{(2)} = \chi_{1/2,-1/2},$$

et prendre leur somme, c'est-à-dire $w = w^{(1)} + w^{(2)}$.

Un calcul élémentaire donne

$$\boldsymbol{\sigma}_{12} \equiv ((\sigma_{12})_x, (\sigma_{12})_y, (\sigma_{12})_z) = \chi_1^*\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_2 = \begin{cases} (0,0,1) & \text{pour } \chi_1 = \chi_1^{(1)}, \\ (1,i,0) & \text{pour } \chi_1 = \chi_1^{(2)}, \end{cases}$$

et la probabilité totale est égale à

$$w = \frac{1}{3^5\cdot 2^4}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^9 \frac{mc^4}{\hbar^3} \approx 0{,}62\times 10^{-6}\ \mathrm{s}^{-1}, \tag{8}$$

en accord avec la durée de vie du niveau $2s_{1/2}$ (par rapport à la transition considérée) $\tau = 1/w \approx 18$ jours.

La comparaison des résultats de ce problème et de 14.4 avec la probabilité de transition à deux photons $w = 8\ \mathrm{s}^{-1}$ montre que, dans ce cas, les transitions à un photon ont une probabilité beaucoup plus faible (de plusieurs ordres de grandeur) que les transitions à deux photons ; autrement dit elles sont fortement occultées.

Dans les conditions de 14.4, la raison de cette occultation est évidente : la faible valeur de la pulsation du photon émis ($w \propto \omega^3$!).

L'occultation de la transition à un photon $2s_{1/2} \to 1s_{1/2}$, qui est une transition dipolaire magnétique, s'explique par le fait qu'en négligeant le déphasage ($\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$) elle se trouve interdite à cause de l'orthogonalité des parties spatiales de la fonction d'onde, comme on l'a noté plus haut. Il faut remarquer la faiblesse de l'élément matriciel (dont l'ordre de grandeur est $k^2a^2 \sim \alpha^2$ et, donc, $\alpha^4 \sim 10^{-9}$ dans l'expression de la probabilité de transition) provenant du développement de l'exponentielle qui s'avère être du même ordre de grandeur que les corrections relativistes à la fonction d'onde. La prise en compte de ces corrections augmente la valeur de la probabilité (8) d'un facteur 10 environ ; ce problème ne doit donc être considéré que d'un point de vue pédagogique.

14.9. Dans l'état fondamental de l'atome d'hydrogène dont le noyau est le proton, le niveau triplet $S = 1$ de la structure hyperfine est supérieur au niveau singulet $S = 0$ (la différence d'énergies $\Delta E_{\mathrm{HFS}} = 1420$ MHz $\approx 9{,}4 \times 10^{-18}$ erg). Les fonctions d'onde de ces états sont de la forme (pour fixer les idées, prenons $S_z = 0$ pour l'état triplet)

$$\Psi_1 = \Psi_{100}(r)\chi_{S=0,S_z=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\chi^{\mathrm{e}}_{1/2,1/2}\chi^{\mathrm{p}}_{1/2,-1/2} - \chi^{\mathrm{e}}_{1/2,-1/2}\chi^{\mathrm{p}}_{1/2,1/2}\}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a},$$
$$\Psi_2 = \Psi_{100}(r)\chi_{S=1,S_z=0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\chi^{\mathrm{e}}_{1/2,1/2}\chi^{\mathrm{p}}_{1/2,-1/2} + \chi^{\mathrm{e}}_{1/2,-1/2}\chi^{\mathrm{p}}_{1/2,1/2}\}\frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\mathrm{e}^{-r/a}. \tag{1}$$

Sous l'effet de l'interaction avec le champ de rayonnement

$$\widehat{V} = \frac{|e|}{mc}\widehat{\mathbf{A}}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2 + \frac{|e|\hbar}{2mc}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{e}}\cdot\widehat{\mathbf{B}}_{\mathrm{rad}}, \tag{2}$$

et une transition à un photon est possible de l'état triplet vers l'état singulet (dans l'expression (2), on a négligé l'interaction du moment magnétique du proton avec le champ de rayonnement, vu qu'elle est $M_{\mathrm{p}}/m_{\mathrm{e}} \approx 10^3$ fois plus faible que celle de l'électron).

La solution de ce problème est identique à celle du problème précédent (à laquelle nous renvoyons le lecteur pour les détails).

L'élément matriciel de la perturbation (2) pour une transition à un photon entre les états (1) est de la forme

$$\langle f|\widehat{V}|i\rangle = -\frac{i|e|\hbar}{2m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\langle 100|\mathrm{e}^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|100\rangle\,\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\langle\chi_1|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{e}}\wedge\mathbf{k})|\chi_2\rangle$$

(χ_1 et χ_2 sont les fonctions de spin du système "électron + proton" dans les états initial et final). En substituant $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ et en calculant les composantes du vecteur $\boldsymbol{\sigma}_{12} = \langle\chi_1|\widehat{\boldsymbol{\sigma}}_e|\chi_2\rangle = (0,0,1)$, on obtient

$$\langle f|\widehat{V}|i\rangle = -\frac{i|e|\hbar}{2m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega_k}}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{12}\wedge\mathbf{k}).$$

La probabilité différentielle de transition (par unité de temps)

$$dw_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\widehat{V}|i\rangle|^2 d\rho_f = \frac{e^2\hbar\omega}{8\pi m^2c^3}|\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{12}\wedge\mathbf{k}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}} \tag{3}$$

($\hbar\omega = \Delta E_{\text{HFS}}$). Après avoir effectué la somme de l'expression (3) sur les polarisations du photon et l'intégrale sur les directions de son vecteur d'onde, on obtient la probabilité totale de la transition :

$$w = \frac{e^2\hbar\omega k^2|\boldsymbol{\sigma}_{12}|^2}{3m^2c^3} = \frac{1}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\frac{(\Delta E_{\text{HFS}})^3}{m^2c^4\hbar} \approx 2{,}9\times10^{-15}\ \text{s}^{-1},$$

ce qui correspond à une durée de vie du niveau triplet $\tau = 1/w \approx 10^7$ années.

14.10. Les probabilités de transitions électromagnétiques à un photon (par unité de temps) de diverses multipolarités pour des états atomiques pas trop excités sont en ordre de grandeur égales à

a) $w_{E1} \sim \dfrac{d_{12}^2\omega^3}{\hbar c^3} \sim \dfrac{e^2a^2\omega^3}{\hbar c^3}$ (dipolaire électrique, ou transition $E1$) ; (1)

b) $w_{M1} \sim \dfrac{\mu_{12}^2\omega^3}{\hbar c^3} \sim \alpha^2\dfrac{e^2a^2\omega^3}{\hbar c^3}$ (dipolaire magnétique, $M1$) ; (2)

c) $w_{E2} \sim \dfrac{Q_{12}^2\omega^5}{\hbar c^5} \sim \left(\dfrac{\omega a}{c}\right)^2\dfrac{e^2a^2\omega^3}{\hbar c^3}$ (quadrupolaire électrique, $E2$), (3)

où $d_{12} \sim ea$, $\mu_{12} \sim e\hbar/mc$, $Q_{12} \sim ea^2$ sont les valeurs caractéristiques des éléments matriciels des moments dipolaire, magnétique, quadrupolaire ($a = \hbar^2/me^2$). Pour les transitions entre les niveaux de termes différents $\hbar\omega \sim e^2/a$ et $\omega a/c \sim e^2/\hbar c$. Alors, d'après (2) et (3), les probabilités des transitions $M1$ et $E2$ sont de même ordre de grandeur (si les transitions ne sont pas interdites par les règles de sélection) et $\alpha^{-2} \sim 10^4$ fois plus faibles que la probabilité de transition $E1$.

La particularité des transitions entre les niveaux de structure fine d'un même terme s'explique par les raisons suivantes. D'abord, ces niveaux ont la même parité et les transitions $E1$ entre eux sont interdites (voir 14.3, b). Ensuite, pour ces transitions, $\hbar\omega$ est de l'ordre de grandeur de l'intervalle de structure fine, c'est-à-dire $\hbar\omega \sim \alpha^2E_{\text{at}} \sim \alpha^2e^2/a$, et la comparaison de (2) et (3) montre que, dans ce cas, la probabilité de transition $E2$ est $\alpha^{-4} \sim 10^8$ fois plus faible que celle de $M1$. Donc, la transition quadrupolaire subit une très forte atténuation et les transitions dominantes sont les transitions dipolaires magnétiques. Vu que, pour ces transitions, la règle de sélection exige que $|\Delta J| = 0, 1$, et l'énergie des niveaux de structure fine varie de façon monotone avec J, les transitions dominantes $M1$ s'effectuent entre les niveaux

de structure fine voisins. Une estimation grossière de la probabilité de transition, selon (2), avec $\hbar\omega \sim \alpha^2 e^2/a$, donne

$$w \sim \alpha^2 \frac{e^2 a^2}{\hbar^4 c^3} \alpha^6 \frac{e^6}{a^3} = \alpha^{12} \frac{c}{a} \sim 10^{-7}\ \mathrm{s}^{-1}.$$

14.11. Cherchons la forme de la fonction d'onde d'état d'un photon avec $J = 0$ en représentation $\mathbf{p}$ (en vertu des propriétés spécifiques du photon, il n'existe pas pour ce dernier de fonction d'onde en représentation $\mathbf{r}$ au sens habituel, c'est-à-dire comme amplitude de probabilité).

La fonction d'onde $\Phi_{J=0}$ cherchée ne doit dépendre que du vecteur impulsion $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ et de la polarisation $\mathbf{e}$ du photon (en outre, il est clair que la dépendance par rapport au vecteur $\mathbf{e}$ est linéaire) et doit constituer un scalaire, c'est-à-dire ne pas varier avec les rotations du système de coordonnées, puisque $J = 0$. La forme la plus générale de cette fonction[3] est :

$$\Phi_{J=0} = f(k)\, \mathbf{e} \cdot \mathbf{k} \tag{1}$$

($f(k)$ est une fonction quelconque). Toutefois, la fonction d'onde du photon doit satisfaire à la condition de transversalité de sa polarisation. Cela signifie que l'amplitude de probabilité de polarisation longitudinale, correspondant à $\mathbf{e} \parallel \mathbf{k}$, doit être nulle. En posant dans l'expression (1) $\mathbf{e} = \mathbf{k}$ et en exigeant que dans ce cas $\Phi_{J=0} = 0$, on obtient sans peine : $\Phi_{J=0} = f(k)\, k^2 = 0$, c'est-à-dire que $f(k) \equiv 0$. Donc, $\Phi_{J=0} \equiv 0$, de sorte qu'il n'existe pas d'états du photon avec $J = 0$.

L'absence d'états du photon avec $J = 0$, explique le fait que les transitions "$0 \to 0$" du système avec émission d'un seul photon sont strictement interdites et que cette interdiction est, en fait, liée à la transversalité de la polarisation du photon.

14.12. La fonction d'onde du système avec $J = 1$, de parité positive $P = +1$ est une combinaison linéaire des composantes d'un vecteur axial $\mathbf{a}$ (dans l'inversion des coordonnées $\widehat{R}\mathbf{a} = +\mathbf{a}$). Ce vecteur axial doit s'exprimer en fonction des vecteurs suivants caractérisant le système : $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ ($\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0$ dans le système du centre de masse), $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ (vecteurs polarisation des photons). En outre, la dépendance de $\mathbf{a}$ par rapport à $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ doit être linéaire. La forme la plus générale de ce vecteur axial est :

$$\begin{aligned}\mathbf{a} = {} & f_1(k)\, (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2) \cdot \mathbf{k})\, \mathbf{k} + f_2(k)\, \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \\ & + f_3(k)\, (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\, \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{k} + f_4(k)\, (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\, \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{k}\end{aligned} \tag{1}$$

où $f_{1,2,3,4}(k)$ sont des fonctions scalaires quelconques.

Avec la permutation des variables de photons ($\mathbf{k}_1 \leftrightarrow \mathbf{k}_2$, $\mathbf{e}_1 \leftrightarrow \mathbf{e}_2$ et $\mathbf{k} \to -\mathbf{k}$) l'expression (1) se transforme de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\mathbf{a} \to \mathbf{a}' = {} & -f_1(k)\, (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2) \cdot \mathbf{k})\mathbf{k} - f_2(k)\, \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 \\ & + f_3(k)\, (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\, \mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{k} + f_4(k)\, (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\, \mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{k}\end{aligned} \tag{2}$$

3 Habituellement, l'état du photon est décrit en termes de composantes de Fourier du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{k}, t)$ en utilisant la jauge $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{k}, t) = 0$, $\mathbf{A}_0(\mathbf{k}, t) = 0$. La relation entre ce mode de description du photon et celui utilisé dans 14.11 et 14.12 est donnée par $\Phi \equiv e_\alpha A_\alpha$.

mais comme les photons sont des bosons identiques, on doit avoir $\mathbf{a}' = \mathbf{a}$ et la comparaison de (1) et (2) entraîne que $f_1 = f_2 = 0$, $f_3 = f_4$. Donc,

$$\mathbf{a} = f_3(k)\,\{(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{k} + (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{k}\}\,. \tag{3}$$

Maintenant, tenons compte de la condition de transversalité de la polarisation des photons qui exige que, pour les photons longitudinaux ($\mathbf{e}_{1,2} \propto \mathbf{k}_{1,2} \propto \mathbf{k}$), la fonction d'onde (et le vecteur $\mathbf{a}$) soit nulle (voir problème précédent). Si l'on pose dans (3), $\mathbf{e}_1 = \mathbf{k}$ et si l'on exige que la condition $\mathbf{a} = 0$ soit remplie, on obtient $f_3(k) = 0$ soit $\mathbf{a} \equiv 0$, ce qui démontre l'absence d'états du système à deux photons avec $J = 1$ et $P = +1$.

Pour les états de photons avec $J = 1$ et parité $P = -1$, la fonction d'onde représente une combinaison linéaire des composantes d'un vecteur polaire $\mathbf{v}$ (dans l'inversion des coordonnées $\widehat{R}\mathbf{v} = -\mathbf{v}$). La forme la plus générale de ce vecteur est

$$\begin{aligned}\mathbf{v} = {} & g_1(k)\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)\,\mathbf{k} + g_2(k)\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\,(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{k} \\ & + g_3(k)\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{e}_2 + g_4(k)\,(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{e}_1\,.\end{aligned} \tag{4}$$

Avec la permutation des variables des deux photons, l'expression (4) se transforme de la façon suivante :

$$\begin{aligned}\mathbf{v} \to \mathbf{v}' = {} & -g_1(k)\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)\mathbf{k} - g_2(k)\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\,(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{k} \\ & - g_3(k)\,(\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{e}_1 - g_4(k)\,(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{k})\,\mathbf{e}_2.\end{aligned} \tag{5}$$

La condition de symétrie de la fonction d'onde exigeant que $\mathbf{v} = \mathbf{v}'$ donne $g_1 = g_2 = 0$, $g_3 = -g_4$, tandis que la condition de transversalité des photons entraîne que $g_3 = 0$, c'est-à-dire $\mathbf{v} \equiv 0$, ce qui démontre l'absence d'états avec $J = 1$ et $P = -1$.

Le corollaire de ce problème est le fait que les désintégrations des particules de spin $s = 1$ (*mésons vectoriels*) en deux photons sont interdites.

14.13. Cherchons la probabilité de transition (par unité de temps) du système "particule + photon" de l'état décrit par la fonction d'onde

$$\Psi_i = |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}/\hbar}\,; \qquad \mathbf{p}_1 = 0, \qquad E_i = \hbar\omega_1, \tag{1}$$

vers l'état décrit par la fonction d'onde

$$\Psi_f = |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}/\hbar}\,; \qquad E_f = \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \hbar\omega_2, \tag{2}$$

sous l'effet de la perturbation

$$\widehat{V} = -\frac{e}{mc}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) \tag{3}$$

(la forme explicite de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$ et les notations utilisées ont été présentées dans le problème 14.1).

Le processus étudié s'effectue au second ordre du calcul des perturbations suivant le paramètre "e" (en fait, le paramètre du développement est $e^2/\hbar c$). Selon la formule générale,

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi} + \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu}\right|^2 d\rho_f . \tag{4}$$

En outre, dans les éléments matriciels $V_{f\nu}$ et $V_{\nu i}$ figurant dans la somme sur les états intermédiaires ν, on doit se limiter au premier terme de l'expression (3) (la prise en compte du second terme donnerait des termes du quatrième ordre en "e"), mais comme $\widehat{\mathbf{p}}\Psi_i \equiv 0$, ces éléments matriciels sont nuls, comme toute la somme de la formule (4) dans son ensemble. Ainsi la probabilité de transition est entièrement définie par l'élément matriciel V_{fi} valant

$$\begin{aligned}
\langle f|\widehat{V}|i\rangle &= \frac{e^2}{2mc^2}\langle f|\widehat{\mathbf{A}}\cdot\widehat{\mathbf{A}}|i\rangle \\
&= \frac{2\pi\hbar e^2}{mV^2\sqrt{\omega_1\omega_2}}\,\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2\int \mathrm{e}^{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}/\hbar + i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r} - i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}/\hbar - i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}} d^3r \\
&= \frac{2\pi\hbar e^2}{mV\sqrt{\omega_1\omega_2}}\,\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2\,\delta_{\mathbf{p}_1+\hbar\mathbf{k}_1,\mathbf{p}_2+\hbar\mathbf{k}_2}
\end{aligned} \tag{5}$$

(on a utilisé les notations $\mathbf{e}_1$ au lieu de $\mathbf{e}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}$, etc.).

La présence dans (5) du facteur $\delta_{\mathbf{p}_1+\hbar\mathbf{k}_1,\mathbf{p}_2+\hbar\mathbf{k}_2}$ exprime la loi de conservation de l'impulsion au cours de la diffusion et signifie que l'état final du système est complètement défini par les nombres quantiques $\mathbf{k}_2$, σ_2 du photon (dans ce cas, l'état de la particule, défini de façon univoque par son impulsion, est régi par la loi de conservation de l'impulsion). C'est pourquoi en déterminant la densité d'états finaux, il ne faut tenir compte que des états du photon. En négligeant l'énergie de recul de la particule ($p_2 \sim \hbar k_{1,2} \ll mc$, $E_2 = \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} \sim \hbar^2 k_{1,2}^2/m \equiv \hbar k_{1,2} c \frac{\hbar k_{1,2}}{mc} \ll \hbar\omega_{1,2}$), on obtient, comme dans 14.1 ($E_f \approx \hbar\omega_2$),

$$d\rho_f = \frac{V\omega^2 d\Omega_2}{(2\pi)^3\hbar c^3} \qquad (\omega_1 \approx \omega_2 \equiv \omega)$$

et l'expression (4) devient

$$dw = \frac{e^4}{m^2c^3V}|\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2|^2 d\Omega_2 . \tag{6}$$

En utilisant la relation $d\sigma = dw/j = dw/\rho c = V dw/c$ ($\rho = 1/V$ étant la densité volumique du nombre de photons), on aboutit à la section efficace différentielle de la diffusion élastique de photons par une particule chargée.

On écrit ensuite $(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)^2 \equiv e_{1i}e_{1k}e_{2i}e_{2k}$ et, dans la formule (6), on calcule la valeur moyenne sur les polarisations des photons incidents et la somme sur les polarisations des photons diffusés à l'aide des relations

$$\overline{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n} \equiv \frac{1}{2}\sum_\sigma (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n = \frac{1}{2}\left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2}\right) ;$$

on obtient finalement les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion des photons non polarisés (θ est l'angle de diffusion) :

$$d\sigma = \frac{e^4}{2m^2c^4}(1+\cos^2\theta)d\Omega, \tag{7}$$

$$\sigma = \frac{8\pi}{3}\frac{e^4}{m^2c^4} \equiv \frac{8\pi}{3}r_0^2. \tag{8}$$

Ici $r_0 = e^2/mc^2$ est le rayon classique de la particule chargée.

Les expressions (7) et (8) ne contiennent pas la constante de Planck et coïncident avec les résultats correspondants de l'électrodynamique classique.

14.14. La transition de l'état initial, décrit par la fonction d'onde

$$\Psi_i = |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_i = \hbar\omega_1,$$

à l'état final, décrit par la fonction d'onde

$$\Psi_f = |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}|1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = \hbar\omega_2,$$

sous l'effet de la perturbation

$$\widehat{V} = -\widehat{\mathbf{d}}\cdot\widehat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(0) = -d\,\mathbf{n}\cdot\widehat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(0),$$

$$\widehat{\mathbf{E}}_{\text{rad}}(0) = i\sum_{\mathbf{k},\sigma}\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_k}{V}}\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}(\widehat{a}_{\mathbf{k}\sigma} - \widehat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma})$$

(voir 14.5 ; on ne considère que le degré de liberté interne du rotateur localisé en $\mathbf{r} = 0$) s'effectue au second ordre du calcul des perturbations et sa probabilité (par unité de temps) est définie par la formule générale ($V_{fi} \equiv 0$)

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\sum_{\substack{\nu \\ \nu\neq i}}\frac{\langle f|\widehat{V}|\nu\rangle\langle\nu|\widehat{V}|i\rangle}{E_i - E_\nu}\right|^2 d\rho_f. \tag{1}$$

On remarque aussitôt que la contribution non nulle à la somme dans (1) n'est donnée que par les états intermédiaires suivants :

1) $\Psi_\nu = Y_{1m}(\theta,\varphi)|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle$, $E_\nu = \dfrac{\hbar^2}{I} + \hbar\omega_1 + \hbar\omega_2$,

2) $\Psi_\nu = Y_{1m}(\theta,\varphi)|0, 0, \ldots\rangle$, $E_\nu = \dfrac{\hbar^2}{I}$,

dans lesquels le rotateur se trouve sur le premier niveau excité avec $l = 1$ (dans les autres cas, l'élément matriciel de la perturbation $\widehat{V} \propto d\,\mathbf{n}$ est nul). Compte tenu de ce que $E_l = \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$, $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$ (les pulsations des photons incident et diffusé sont identiques), en utilisant l'expression

$$d\rho_f = \frac{V\omega^2 d\Omega_2}{(2\pi)^3\hbar c^3},$$

on obtient, selon (1),

$$dw = \frac{\omega^4 d^4}{Vc^3} \times \left| \sum_{m=-1}^{1} \langle l=0, m=0|n_i|1,m\rangle\langle 1,m|n_k|0,0\rangle \left[\frac{e_{1k}e_{2i}}{\hbar\omega - \hbar^2/I} + \frac{e_{1i}e_{2k}}{-\hbar\omega - \hbar^2/I} \right] \right|^2 d\Omega_2. \tag{2}$$

On calcule ensuite la somme sur m dans (2) :

$$\sum_m \langle 0,0|n_i|1,m\rangle\langle 1,m|n_k|0,0\rangle = \sum_{l,m} \langle 0,0|n_i|l,m\rangle\langle l,m|n_k|0,0\rangle$$

$$= \langle 0,0|n_i n_k|0,0\rangle = \frac{1}{4\pi}\int n_i n_k \Omega = \frac{1}{3}\delta_{ik} \tag{3}$$

(la somme peut être considérée sur toutes les valeurs de l et m, car pour $l \neq 1$, on a $\langle l \neq 1, m|n_k|0,0\rangle \equiv 0$; on a tenu compte dans (3) du fait que les harmoniques sphériques forment un système complet $\sum\limits_{l,m} |l,m\rangle\langle l,m| = 1$).

Compte tenu de (3), l'expression (2) prend la forme

$$dw = \frac{4}{9}\frac{\omega^4 d^4}{Vc^3}(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \left[\frac{\hbar^2/I}{\hbar^2\omega^2 - (\hbar^2/I)^2} \right]^2 d\Omega_2. \tag{4}$$

On écrit ensuite $(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \equiv e_{1i}e_{1k}e_{2i}e_{2k}$ et on calcule, dans (4), la valeur moyenne sur les polarisations du photon initial et la somme sur les polarisations du photon diffusé à l'aide des relations

$$\overline{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n} \equiv \frac{1}{2}\sum_\sigma (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n = \frac{1}{2}\left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2}\right),$$

Finalement, on obtient (θ est l'angle de diffusion) :

$$dw = \frac{2}{9}\frac{\omega^4 d^4}{Vc^3}\left[\frac{I}{\hbar^2 - \omega^2 I^2}\right]^2 (1 + \cos^2\theta)\, d\Omega.$$

Compte tenu de la relation entre la section efficace et la probabilité $d\sigma = dw/j$, où $j = \rho c = c/V$ ($\rho = 1/V$ étant la densité volumique du nombre de photons), on obtient les sections efficaces différentielle et totale de la diffusion élastique des photons par le rotateur

$$d\sigma = \frac{2\omega^4 d^4}{9c^4}\left[\frac{I}{\hbar^2 - \omega^2 I^2}\right]^2 (1 + \cos^2\theta) d\Omega,$$

$$\sigma = \frac{32\pi\omega^4 d^4}{27c^4}\left[\frac{I}{\hbar^2 - \omega^2 I^2}\right]^2. \tag{5}$$

Selon (5), on a les cas limites

$$\sigma(\omega) \approx \frac{32\pi\omega^4 d^4 I^2}{27\hbar^4 c^4} \quad \text{pour } \omega I \ll \hbar,$$

$$\sigma(\omega) \approx \frac{32\pi d^4}{27 I^2 c^4} \quad \text{pour } \omega I \gg \hbar.$$

Pour $\hbar\omega \to \hbar^2/I$, la section efficace de diffusion croît indéfiniment, traduisant ainsi sa nature résonnante. Toutefois, pour ces pulsations du photon, les formules (5) ne peuvent pas être directement appliquées, car, dans le calcul, il faut tenir compte de la largeur naturelle du niveau excité du rotateur (avec $l = 1$).

Voir également le problème 14.17.

14.15. Cherchons la probabilité de transition (par unité de temps) du système "oscillateur + photon" de l'état initial décrit par la fonction d'onde

$$\Psi_i = \Psi_{000}(r)|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_i = \hbar\omega_1 + 3\hbar\omega_0/2,$$

à l'état final

$$\Psi_f = \Psi_{000}(r)|1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = \hbar\omega_2 + 3\hbar\omega_0/2,$$

($\Psi_{n_1n_2n_3}$ sont les fonctions propres de l'hamiltonien de l'oscillateur correspondant aux valeurs propres $E_N = \hbar\omega_0(N + 3/2)$, $N = (n_1 + n_2 + n_3)$, voir 4.23 du Tome I) sous l'effet de la perturbation

$$\widehat{V} = -\frac{e}{mc}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}) \tag{1}$$

(la forme explicite de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$ est donnée dans 14.1). La transition s'effectue au second ordre du calcul des perturbations suivant le paramètre "e" (plus précisément, le paramètre du développement est $e^2/\hbar c$) et sa probabilité se calcule suivant la formule générale

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi} + \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu}\right|^2 d\rho_f. \tag{2}$$

En outre, la valeur de l'élément matriciel V_{fi} se détermine par le second terme de l'expression (1) ($\sim e^2$), tandis que le calcul des éléments $V_{f\nu}$ et $V_{\nu i}$ n'exige que le recours au premier terme de (1).

Utilisons l'approximation dipolaire, c'est-à-dire remplaçons les facteurs exponentiels dans $\widehat{\mathbf{A}}$ par 1 : $\mathrm{e}^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ (pour cela, il faut que $\hbar k_1 \ll p_0 = \sqrt{\hbar m\omega_0}$). On obtient ($\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$)

$$V_{fi} = \frac{2\pi\hbar e^2}{Vm\omega}\,\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2. \tag{3}$$

Dans la somme de (2), il y a deux types d'états intermédiaires $|\nu\rangle$ qui donnent une contribution non nulle. Leurs fonctions d'onde et les énergies correspondantes sont :

$$\begin{aligned} &\Psi_\nu = \Psi_{n_1n_2n_3}|0, 0, \ldots\rangle, && E_\nu = \hbar\omega_0(N + 3/2), \\ &\Psi_\nu = \Psi_{n_1n_2n_3}|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, && E_\nu = 2\hbar\omega + \hbar\omega_0(N + 3/2). \end{aligned}$$

En utilisant la forme connue des éléments matriciels de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$, on obtient aisément (dans l'approximation dipolaire)

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{2\pi e^2}{V m^2 \omega} \sum_{n_1 n_2 n_3} \langle 0,0,0|\widehat{p}_j|n_1,n_2,n_3\rangle\langle n_1,n_2,n_3|\widehat{p}_k|0,0,0\rangle \left\{ \frac{e_{1k}e_{2j}}{\omega - N\omega_0} + \frac{e_{1j}e_{2k}}{-\omega - N\omega_0} \right\}. \tag{4}$$

Comme $\Psi_{n_1 n_2 n_3} = \Psi^{\text{osc}}_{n_1}(x)\Psi^{\text{osc}}_{n_2}(y)\Psi^{\text{osc}}_{n_3}(z)$ et l'élément matriciel d'impulsion de l'oscillateur linéaire $\langle m|\widehat{p}|n\rangle$ n'est non nul que pour $|m-n| = 1$, dans la somme (4), il ne reste que des termes pour lesquels $N = (n_1 + n_2 + n_3) = 1$ (l'élément matriciel de la composante $\widehat{p}_x \equiv \widehat{p}_1$ de (4) est non nul seulement pour $n_1 = 1$, $n_2 = n_3 = 0$, $\widehat{p}_y \equiv \widehat{p}_2$ pour $n_2 = 1$, $n_1 = n_3 = 0$ et de même pour $\widehat{p}_z$). Alors, on obtient

$$\sum_{n_1 n_2 n_3} \langle 0,0,0|\widehat{p}_j|n_1,n_2,n_3\rangle\langle n_1,n_2,n_3|\widehat{p}_k|0,0,0\rangle = |\langle 1|\widehat{p}|0\rangle|^2 \delta_{jk} = \frac{\hbar m\omega_0}{2}\delta_{jk},$$

où $\langle 1|\widehat{p}|0\rangle = -\langle 0|\widehat{p}|1\rangle = i\sqrt{\hbar m\omega_0/2}$ est l'élément matriciel d'impulsion de l'oscillateur linéaire.

Ainsi l'expression (2) prend la forme

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} e^4 \left(\frac{2\pi\hbar}{mV\omega}\right)^2 \frac{\omega^4 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2} d\rho_f. \tag{5}$$

On écrit ensuite $(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2 \equiv e_{1i}e_{1k}e_{2i}e_{2k}$ et on calcule, dans (5), la valeur moyenne sur les polarisations du photon initial et la somme sur les polarisations du photon diffusé à l'aide des relations

$$\overline{(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n} \equiv \frac{1}{2}\sum_\sigma (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n = \frac{1}{2}\left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2}\right).$$

Finalement, on obtient (θ étant l'angle de diffusion)

$$dw = \frac{4\pi^3 \hbar e^4 \omega^2}{m^2 V^2 (\omega_0^2 - \omega^2)^2} (1 + \cos^2\theta) d\rho_f.$$

Etant donné que $d\rho_f = \dfrac{V\omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}$ et en utilisant la relation entre la section efficace et la probabilité du processus ($\rho = 1/V$ étant la densité du nombre de photons) : $d\sigma = dw/j = dw/\rho c = V dw/c$, on obtient l'expression définitive des sections efficaces différentielle et totale de la diffusion élastique du photon par l'oscillateur chargé :

$$d\sigma = \frac{e^4\omega^4(1 + \cos^2\theta)}{2m^2c^4(\omega_0^2 - \omega^2)^2} d\Omega, \tag{6}$$

$$\sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3} \frac{e^4\omega^4}{m^2c^4(\omega_0^2 - \omega^2)^2}. \tag{7}$$

Les expressions obtenues (6) et (7) ne contiennent pas la constante de Planck et coïncident avec les résultats correspondants de l'électrodynamique classique.

14.16. En ne considérant que le degré de liberté de spin, on peut supposer que la particule est localisée au point $\mathbf{r} = 0$. Cherchons la probabilité de transition de l'état initial

$$\Psi_i = \chi_1 |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_i = \hbar\omega_1, \tag{1}$$

à l'état final

$$\Psi_f = \chi_2 |1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = \hbar\omega_2, \tag{2}$$

(χ_1 et χ_2 sont les spineurs correspondants) sous l'effet de la perturbation (voir 14.7)

$$\hat{V} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \hat{\mathbf{B}}_{\text{rad}}(0) = -i\mu\hat{\boldsymbol{\sigma}} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k}} \, (\mathbf{k} \wedge \mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma}) \, (\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma} - \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\sigma}). \tag{3}$$

Le calcul de la transition s'effectue au second ordre du calcul des perturbations et sa probabilité s'obtient suivant la formule générale

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} \right|^2 d\rho_f. \tag{4}$$

Dans ce problème, la somme sur les états intermédiaires $|\nu\rangle$ comprend quatre termes correspondant aux états décrits par les fonctions d'onde

$$\begin{aligned} &\Psi_\nu = \chi_{s_z} |0, 0, \ldots\rangle, && E_\nu = 0, \\ &\Psi_\nu = \chi_{s_z} |1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, && E_\nu = 2\hbar\omega, \end{aligned}$$

avec $\chi_{s_z} = \chi_{1/2,1/2}$ ou $\chi_{s_z} = \chi_{1/2,-1/2}$; on a également tenu compte de l'égalité entre les énergies (pulsations) des photons : $\omega_1 = \omega_2 = \omega$.

On voit aussitôt que la somme dans (4) s'écrit

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{2\pi c^2 \mu^2}{V\omega^2} \sum_{s_z} \Big\{ (\chi_2^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{k}_2)\chi_{s_z})(\chi^*_{s_z} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{k}_1)\chi_1) - (\chi_2^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{k}_1)\chi_{s_z})(\chi^*_{s_z} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{k}_2)\chi_1) \Big\}. \tag{5}$$

Pour effectuer la somme sur s_z il faut écrire la première partie de l'expression (5) sous forme explicite (ainsi, le premier terme dans l'accolade est égal à

$$\chi^*_{2\alpha} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \cdot (\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{k}_2) \chi_{s_z,\beta} \chi^*_{s_z,\gamma} \boldsymbol{\sigma}_{\gamma\delta} \cdot (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{k}_1) \chi_{1\delta},$$

et le second terme s'écrit de façon analogue) et utiliser la relation

$$\sum_{s_z} \chi_{s_z,\beta} \chi^*_{s_z,\gamma} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_\beta \otimes (1 \;\; 0)_\gamma + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_\beta \otimes (0 \;\; 1)_\gamma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}_{\beta\gamma} = \delta_{\beta\gamma}.$$

Finalement, l'expression (5) est égale à

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{2\pi c^2 \mu^2}{V\omega^2} \chi_2^* \{\hat{\sigma}_i a_{2i} \hat{\sigma}_k a_{1k} - \hat{\sigma}_k a_{1k} \hat{\sigma}_i a_{2i}\} \chi_1 \tag{6}$$

où on a introduit les notations

$$\mathbf{a}_{1,2} = \mathbf{e}_{1,2} \wedge \mathbf{k}_{1,2}, \text{ soit } (\mathbf{a}_{1,2})_i = \varepsilon_{ikl} (\mathbf{e}_{1,2})_k (\mathbf{k}_{1,2})_l. \tag{7}$$

Compte tenu de la propriété des matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_k - \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_i = 2i\varepsilon_{ikl} \hat{\sigma}_l,$$

l'expression (6) peut être simplifiée:

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{4i\pi c^2 \mu^2}{V\omega^2} a_{2i} a_{1k} \varepsilon_{ikl} \chi_2^* \hat{\sigma}_l \chi_1. \tag{8}$$

Comme $d\rho_f = \dfrac{V\omega^2 d\Omega_2}{(2\pi)^3 \hbar c^3}$, d'après (4), (8) et la formule liant la probabilité à la section efficace du processus :

$$d\sigma = dw/j = dw/\rho c = V dw/c$$

($\rho = 1/V$ est la densité du nombre de photons), on obtient la section efficace différentielle de diffusion des photons par le moment magnétique sous la forme

$$d\sigma = \frac{4\mu^4}{\hbar^2 \omega^2} |\varepsilon_{ikl} a_{2i} a_{1k} \chi_2^* \hat{\sigma}_l \chi_1|^2 d\Omega_2. \tag{9}$$

Calculons, dans (9), la valeur moyenne sur les polarisations des photons incidents et la somme sur les polarisations des photons diffusés. Pour cela, représentons le carré du module de l'élément matriciel dans (9) sous la forme

$$|(\sigma_l)_{21} \varepsilon_{ikl} a_{2i} a_{1k}|^2 = (\sigma_l)_{21} (\sigma_t)_{21}^* \varepsilon_{ikl} \varepsilon_{mnt} a_{2i} a_{1k} a_{2m} a_{1n}.$$

Compte tenu de (7), on obtient

$$\begin{aligned} \overline{a_{1k} a_{1n}} &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1} \varepsilon_{ksp} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1})_s k_{1p} \varepsilon_{nuw} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}_1 \sigma_1})_u k_{1w} = \\ &= \frac{1}{2} k_{1p} k_{1w} \varepsilon_{ksp} \varepsilon_{nuw} \left(\delta_{su} - \frac{k_{1s} k_{1u}}{k^2} \right) = \frac{1}{2} \varepsilon_{kps} \varepsilon_{nws} k_{1p} k_{1w}, \end{aligned}$$

et de façon analogue

$$\sum_{\sigma_2} a_{2i} a_{2m} = \varepsilon_{ips} \varepsilon_{mws} k_{2p} k_{2w}.$$

Effectuons ensuite l'intégration sur les angles de diffusion du photon

$$\int k_{2p}k_{2w}d\Omega_2 = \frac{4\pi}{3}k^2\delta_{pw},$$
$$\int \sum_{\sigma_2} a_{2i}a_{2m}d\Omega_2 = \frac{4\pi}{3}k^2\varepsilon_{ips}\varepsilon_{mps} = \frac{8\pi}{3}k^2\delta_{mi}.$$

Finalement, on obtient la section efficace de diffusion sous la forme

$$\sigma = \frac{16\pi}{3}\frac{\mu^4}{\hbar^2c^2}(\sigma_l)_{21}(\sigma_t)^*_{21}\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{int}\varepsilon_{kps}\varepsilon_{nws}k_{1p}k_{1w}$$

soit, en tenant compte de la relation connue $\varepsilon_{ikl}\varepsilon_{int} = \delta_{kn}\delta_{lt} - \delta_{kt}\delta_{ln}$

$$\sigma = \frac{16\pi}{3}\frac{\mu^4}{\hbar^2c^2}(\sigma_l)_{21}(\sigma_t)^*_{21}\{\delta_{lt}k^2 + k_{1t}k_{1l}\}. \tag{10}$$

L'expression (10) dépend de l'état du spin de la particule avant et après la diffusion. Selon l'énoncé, $\mathbf{k}_1 = (0, 0, k)$, $\chi_1 = \chi_{1/2,1/2}$, et si $\chi_2 = \chi_{1/2,1/2}$ (diffusion sans variation de l'orientation du spin), alors $(\boldsymbol{\sigma})_{21} = (0, 0, 1)$ et la section efficace de diffusion vaut

$$\sigma_{\uparrow\uparrow} = \frac{16\pi}{3}\frac{\mu^4}{\hbar^2c^2}2k^2 = \frac{32\pi}{3}\frac{\mu^4\omega^2}{\hbar^2c^4}. \tag{11}$$

En cas de retournement du spin ("spin-flip") $\chi_2 = \chi_{1/2,-1/2}$, on a $(\boldsymbol{\sigma})_{21} = (1, i, 0)$ et la section efficace de diffusion vaut

$$\sigma_{\uparrow\downarrow} = \frac{32\pi}{3}\frac{\mu^4\omega^2}{\hbar^2c^4} = \sigma_{\uparrow\uparrow}. \tag{12}$$

La somme des expressions (11) et (12) est la section efficace totale de diffusion des photons par le moment magnétique d'une particule de spin $s = 1/2$.

Pour une particule de spin quelconque s, on a $\widehat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{\mu}{s}\widehat{\mathbf{s}}$. On invite le lecteur à montrer par lui-même, en effectuant les transformations nécessaires dans la solution qui vient d'être donnée du problème, que la section efficace totale de diffusion des photons sur des particules non polarisées vaut dans ce cas

$$\sigma = \frac{16\pi}{9}\frac{\mu^4\omega^2}{\hbar^2c^4}\frac{(s+1)}{s},$$

ce qui, pour $s \gg 1$, coïncide avec le résultat de l'électrodynamique classique pour la section efficace de diffusion d'une onde électromagnétique par un moment magnétique, moyennée sur les différentes orientations du moment, dans l'hypothèse de leur équiprobabilité:

$$\sigma_{\text{cl}} = \frac{16\pi}{9}\left(\frac{\kappa\mu\omega}{c^2}\right)^2$$

(κ étant le rapport gyromagnétique $\boldsymbol{\mu} = \kappa\mathbf{M}$, et $\mathbf{M}$ le moment cinétique de la particule).

14.17. La solution peut être obtenue à l'aide de transformations simples utilisées lors de la résolution du problème 14.14. Vu que les éléments matriciels $\langle L, M|\mathbf{n}|L', M'\rangle$ sont nuls pour $|L-L'| \neq 1$, alors au second ordre du calcul des perturbations, outre la diffusion élastique, on observe la diffusion inélastique des photons au cours de laquelle ne sont excités que les états du rotateur avec $L = 2$. Les fonctions d'onde des états finaux possibles sont de la forme

$$\Psi_f = Y_{2M}|1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = 3\hbar^2/I + \hbar\omega_2 = \hbar\omega_1,$$

De façon absolument identique à ce qui a été fait dans la résolution du problème 14.14 (il ne faut tenir compte que de la différence entre les pulsations des photons incidents ω_1 et diffusés ω_2), on obtient

$$d\sigma_M = \frac{\omega_1\omega_2^3 d^4}{c^4}\,|\langle 2, M|n_i n_k|0, 0\rangle e_{1i}e_{2k}|^2 \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)}\right]^2 d\Omega_2. \tag{1}$$

L'expression (1) dépend de la valeur de M. Si l'on ne s'intéresse pas à l'état du rotateur après le choc, il faut calculer, dans (1), la somme sur M. Pour cela, on écrit

$$|\langle 2, M|n_i n_k|0, 0\rangle e_{1i}e_{2k}|^2 = e_{1i}e_{2k}e_{1l}e_{2m}\langle 0, 0|n_l n_m|2, M\rangle\langle 2, M|n_i n_k|0, 0\rangle$$

et on utilise la relation

$$\begin{aligned}
&\sum_M \langle 0, 0|n_l n_m|2, M\rangle\langle 2, M|n_i n_k|0, 0\rangle \\
&\quad \equiv \sum_{LM} \langle 0, 0|n_l n_m|L, M\rangle\langle L, M|n_i n_k|0, 0\rangle - \langle 0, 0|n_l n_m|0, 0\rangle\langle 0, 0|n_i n_k|0, 0\rangle \\
&\quad = \langle 0, 0|n_l n_m n_i n_k|0, 0\rangle - \langle 0, 0|n_l n_m|0, 0\rangle\langle 0, 0|n_i n_k|0, 0\rangle \\
&\quad = \frac{1}{45}\{3\delta_{il}\delta_{km} + 3\delta_{im}\delta_{kl} - 2\delta_{ik}\delta_{lm}\}.
\end{aligned}$$

En établissant cette relation, on a tenu compte de ce que les termes de la somme sur L et M sont non nuls seulement pour $L = 2$ et $L = 0$ et on a utilisé le fait que le système des harmoniques sphériques est complet $\sum\limits_{LM} |L, M\rangle\langle L, M| = 1$, ainsi que les valeurs connues des intégrales :

$$\begin{aligned}
\langle 0, 0|n_i n_k|0, 0\rangle &= \frac{1}{4\pi}\int n_i n_k d\Omega = \frac{1}{3}\delta_{ik}, \\
\langle 0, 0|n_l n_m n_i n_k|0, 0\rangle &= \frac{1}{4\pi}\int n_i n_k n_l n_m d\Omega = \frac{1}{15}\{\delta_{ik}\delta_{lm} + \delta_{il}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}\}.
\end{aligned}$$

Finalement, on obtient la section efficace différentielle de diffusion inélastique des photons en sommant sur tous les états possibles du rotateur correspondant au niveau avec $L = 2$:

$$d\sigma = \sum_M d\sigma_M = \frac{\omega_1\omega_2^3 d^4}{45c^4}\left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)}\right]^2 [3 + (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2)^2] d\Omega_2,$$

qui une fois moyennée et sommée sur les polarisations des photons (respectivement avant et après la diffusion), prend la forme

$$d\sigma = \frac{\omega_1 \omega_2^3 d^4}{90c^4} \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)} \right]^2 (13 + \cos^2\theta) d\Omega_2 \tag{2}$$

et donne l'expression suivante de la section efficace totale de diffusion inélastique :

$$\sigma_{\text{inél}} = \int d\sigma = \frac{16\pi}{27} \frac{\omega_1 \omega_2^3 d^4}{c^4} \left[\frac{I}{(\hbar + I\omega_2)(\hbar - I\omega_1)} \right]^2 . \tag{3}$$

Dans les cas limites, la formule (3) donne

$$\sigma_{\text{inél}} \approx \frac{4\pi}{9} \frac{d^4 I}{\hbar^3 c^4} \left(\omega_1 - \frac{3\hbar}{I} \right)^3 \to 0, \qquad \hbar\omega_1 \to 3\hbar^2/I \tag{4}$$

(c'est-à-dire près du seuil), et

$$\sigma_{\text{inél}} \approx \frac{16\pi}{27} \frac{d^4}{I^2 c^4}, \qquad \omega_1 \approx \omega_2 \gg \hbar/I. \tag{5}$$

L'expression (5) ne contient pas la constante de Planck, de même que la section efficace de diffusion élastique des photons $\sigma_{\text{él}}$ obtenue dans 14.14. La section efficace totale de diffusion

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{él}} + \sigma_{\text{inél}} = \frac{16\pi}{9} \frac{d^4}{I^2 c^4} \tag{6}$$

coïncide avec le résultat de l'électrodynamique classique.

14.18. Dans la démonstration, il faut tenir compte du fait que le système des fonctions propres de l'hamiltonien est complet $\sum_m |m\rangle\langle m| = 1$, des égalités $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$ et $x_{mn} = (x_{nm})^*$ ainsi que des relations

$$\omega_{mn} x_{mn} = \frac{1}{\hbar} \langle m|[\widehat{H}, \widehat{x}]|n\rangle = -\frac{i}{\mu} \langle m|\widehat{p}_x|n\rangle,$$

$$\omega_{mn}^2 x_{mn} = -\frac{i\omega_{mn}}{\mu} \langle m|\widehat{p}_x|n\rangle = -\frac{i}{\mu\hbar} \langle m|[\widehat{H}, \widehat{p}_x]|n\rangle = \frac{1}{\mu} \langle m|\frac{\partial U}{\partial x}|n\rangle.$$

a) $\sum_m |\langle m|x|n\rangle|^2 \equiv \sum_m \langle n|x|m\rangle\langle m|x|n\rangle = \langle n|x^2|n\rangle$

b) $\sum_m \omega_{mn} |\langle m|x|n\rangle|^2 \equiv \frac{i}{2\mu} \sum_m \{\langle n|\widehat{p}_x|m\rangle\langle m|x|n\rangle - \langle n|x|m\rangle\langle m|\widehat{p}_x|n\rangle\}$

$$= \frac{i}{2\mu} \langle n|\widehat{p}_x\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{p}_x|n\rangle = \frac{\hbar}{2\mu}\langle n|n\rangle = \frac{\hbar}{2\mu} ;$$

c) $\sum_m \omega_{mn}^2 |\langle m|x|n\rangle|^2 \equiv \frac{1}{\mu^2} \sum_m \langle n|\widehat{p}_x|m\rangle\langle m|\widehat{p}_x|n\rangle = \frac{1}{\mu^2} \langle n|\widehat{p}_x^2|n\rangle$;

d) $\sum_m \omega_{mn}^3 |\langle m|x|n\rangle|^2 = -\frac{i}{2\mu^2} \sum_m \{\langle n|\frac{\partial U}{\partial x}|m\rangle\langle m|\widehat{p}_x|n\rangle - \langle n|\widehat{p}_x|m\rangle\langle m|\frac{\partial U}{\partial x}|n\rangle\}$

$$= \frac{i}{2\mu^2} \langle n|[\widehat{p}_x, \frac{\partial U}{\partial x}]|n\rangle = \frac{\hbar}{2\mu^2} \langle n|\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}|n\rangle.$$

Les relations obtenues sont également valables pour les composantes y et z de $\mathbf{r}$. Si le potentiel $U(r)$ est central et si l'état $|n\rangle$ correspond au moment $l = 0$, c'est-à-dire est de symétrie sphérique, alors les seconds membres de toutes les relations sont les mêmes pour les trois composantes (en vertu de l'équivalence de toutes les directions) et on peut les écrire sous une forme plus symétrique :

a) $\frac{1}{3}\langle n|r^2|n\rangle$;

c) $\frac{1}{3\mu^2}\langle n|\widehat{\mathbf{p}}^2|n\rangle$;

d) $\frac{\hbar}{6\mu^2}\langle n|(\Delta U)|n\rangle$.

14.19. Les fonctions d'onde des états initial et final du système "atome + photon" sont de la forme

$$\Psi_i = \Psi_0|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_i = E_0 + \hbar\omega_1,$$
$$\Psi_f = \Psi_0|1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = E_0 + \hbar\omega_2$$

(Ψ_0 est la fonction d'onde de l'atome). La transition est réalisée sous l'effet de la perturbation

$$\widehat{V} = \sum_{a=1}^{Z} \frac{|e|}{mc}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_a)\cdot\widehat{\mathbf{p}}_a + \frac{e^2}{2mc^2}\sum_{a=1}^{Z}\widehat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}_a) \tag{1}$$

(la somme est effectuée sur tous les électrons de l'atome).

La probabilité de transition (par unité de temps) est différente de zéro au second ordre du calcul des perturbations suivant le paramètre "e" et, selon la formule générale, vaut

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{fi} + \sum_{\substack{\nu \\ \nu\neq i}} \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu}\right|^2 d\rho_f. \tag{2}$$

Dans ce cas, la valeur de l'élément matriciel V_{fi} s'établit au moyen du deuxième terme de l'expression (1) ($\sim c^2$) ; quant au calcul des éléments $V_{f\nu}$ et $V_{\nu i}$, on doit se limiter à la première somme de (1).

En recourant à l'approximation dipolaire, c'est-à-dire en remplaçant les facteurs exponentiels figurant dans l'expression de $\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ par une unité : $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ (cette approximation est valable car $k = \omega/c \to 0$), on obtient

$$V_{fi} = \frac{2\pi Z\hbar e^2}{Vm\omega}\,\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2 \tag{3}$$

(Z est le nombre d'électrons ; on a tenu compte de ce que $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega$).

Les contributions non nulles à la somme sur les états intermédiaires $|\nu\rangle$ dans (2) proviennent des états de deux types. Leurs fonctions d'onde et les énergies correspondantes sont :

$$\Psi_\nu = \Psi_n|0, 0, \ldots\rangle, \qquad E_\nu = E_n,$$
$$\Psi_\nu = \Psi_n|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 1_{\mathbf{k}_2\sigma_2}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_\nu = E_n + 2\hbar\omega$$

(Ψ_n et E_n sont les fonctions d'onde et les énergies des états atomiques).

Compte tenu de la forme connue des éléments matriciels de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$, la somme s'écrit (dans l'approximation dipolaire)

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{2\pi e^2}{V m^2 \omega} \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \sum_{a=1}^{Z} \sum_{b=1}^{Z} \langle 0|\widehat{p}_{ai}|n\rangle\langle n|\widehat{p}_{bk}|0\rangle \times \left\{ \frac{e_{1k} e_{2i}}{\omega + \omega_{0n}} + \frac{e_{1i} e_{2k}}{\omega_{0n} - \omega} \right\} \tag{4}$$

où $\omega_{0n} = (E_0 - E_n)/\hbar$.

En utilisant la relation $\langle 0|\widehat{\mathbf{p}}_a|n\rangle = im\omega_{0n}\langle 0|\mathbf{r}_a|n\rangle$ et en introduisant l'opérateur moment dipolaire de l'atome $\mathbf{d} = -e \sum_{a=1}^{Z} \mathbf{r}_a$, l'expression (4) peut être écrite sous la forme

$$\frac{2\pi}{V\omega} \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \omega_{0n}^2 \langle 0|d_i|n\rangle\langle n|d_k|0\rangle \left\{ \frac{e_{1k} e_{2i}}{\omega + \omega_{0n}} + \frac{e_{1i} e_{2k}}{\omega_{0n} - \omega} \right\}. \tag{5}$$

Les deux sommes de l'expression (5) possèdent la structure tensorielle suivante :

$$\sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \frac{\omega_{0n}^2 \langle 0|d_i|n\rangle\langle n|d_k|0\rangle}{\omega_{0n} \pm \omega} = A_\pm(\omega)\delta_{ik} \tag{6}$$

(on a tenu compte de ce que l'état considéré de l'atome a un moment $J = 0$ et est de symétrie sphérique ; la somme sur les états atomiques, comprenant la somme sur les projections du moment sur l'axe de quantification, conserve cette symétrie). Après avoir effectué une convolution sur les indices i et k dans (6), on obtient

$$A_\pm(\omega) = \frac{1}{3} \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \frac{\omega_{0n}^2 \langle 0|d_i|n\rangle\langle n|d_i|0\rangle}{\omega_{0n} \pm \omega} = \frac{1}{3} \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \frac{\omega_{0n}^2 |\mathbf{d}_{0n}|^2}{\omega_{0n} \pm \omega}, \tag{7}$$

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{2\pi}{V\omega} \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 [A_+(\omega) + A_-(\omega)]. \tag{8}$$

Si l'on fait, dans (8), un développement en puissances de ω, on obtient

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = \frac{4\pi \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2}{3V\omega} \left\{ \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \omega_{0n} |\mathbf{d}_{0n}|^2 + \omega^2 \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \frac{|\mathbf{d}_{0n}|^2}{\omega_{0n}} \right\}. \tag{9}$$

En appliquant "la règle des sommes" et la formule générale donnant la polarisabilité de l'atome β_0 :

$$\sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \omega_{0n} |\mathbf{d}_{0n}|^2 = -\frac{3Ze^2\hbar}{2m}, \qquad \beta_0 = \frac{2}{3} \sum_{\substack{n \\ n \neq 0}} \frac{|\mathbf{d}_{0n}|^2}{\hbar\omega_{0n}}$$

("la règle des sommes" pour un seul électron a été en fait obtenue dans le problème précédent, voir 14.18, b) ; sa généralisation au cas de Z électrons est immédiate), on note que l'expression (2) prend la forme (il faut également tenir compte de la formule (3))

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left[\frac{2\pi\hbar\omega\beta_0}{V}(\mathbf{e}_1\cdot\mathbf{e}_2)\right]^2 d\rho_f. \tag{10}$$

En passant de la probabilité à la section efficace, en calculant la valeur moyenne sur les polarisations des photons incidents et la sommant sur les polarisations des photons diffusés (voir 14.13), on obtient les sections efficaces différentielle et totale de diffusion :

$$d\sigma = \frac{\omega^4\beta_0^2}{2c^4}(1+\cos^2\theta)d\Omega, \qquad \sigma(\omega) = \frac{8\pi}{3}\frac{\beta_0^2}{c^4}\omega^4. \tag{11}$$

Ces expressions coïncident avec les résultats de l'électrodynamique classique.

14.20. Le système "atome hydrogénoïde + photon" se trouve dans l'état décrit par la fonction d'onde ($a = \hbar^2/Ze^2m$)

$$\Psi_i = \Psi_0(r)|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle = \frac{\mathrm{e}^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}|1_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, 0, \ldots\rangle,$$
$$E_i = \hbar\omega - \frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2}. \tag{1}$$

Du fait de l'absorption du photon par l'électron sous l'effet de la perturbation

$$\widehat{V} = \frac{e}{mc}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}), \tag{2}$$

le système peut passer dans un état où l'on n'a qu'un seul électron dans le champ coulombien du noyau. Vu que l'énergie de l'électron vaut dans ce cas $\varepsilon_e = E_i = \hbar\omega - I \gg I = m(Ze^2)^2/2\hbar^2$, on peut négliger l'action du champ du noyau sur l'électron et choisir la fonction d'onde des états finaux possibles sous la forme

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}|0, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{3}$$

(pour être plus précis, il faut que $\dfrac{Ze^2}{\hbar v_e} = \alpha Z\dfrac{c}{v_e} \ll 1$). La probabilité de transition (par unité de temps) se détermine par la formule générale

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\, d\rho_f. \tag{4}$$

Compte tenu de la forme explicite de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}$ donnée dans 14.1, on obtient

$$V_{fi} = \frac{e}{mc}(\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\cdot\widehat{\mathbf{p}})_{fi} = \frac{e}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V^2\omega}}\frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}}{\sqrt{\pi a^3}}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\widehat{\mathbf{p}}\,\mathrm{e}^{-r/a}d^3r. \tag{5}$$

Pour calculer l'intégrale dans (5), utilisons d'abord l'hermiticité de $\widehat{\mathbf{p}}$ et faisons agir cet opérateur sur l'exponentielle située à sa gauche ; l'intégrale ainsi obtenue se calcule en coordonnées sphériques avec l'axe polaire le long du vecteur $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{p}/\hbar - \mathbf{k}$:

$$\int e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}e^{-r/a}d^3r = \hbar\boldsymbol{\kappa}\int e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}-r/a}d^3r = \frac{8\pi a^3\hbar\boldsymbol{\kappa}}{(1+a^2\kappa^2)^2}. \tag{6}$$

Compte tenu de l'expression de la densité d'états finaux

$$d\rho_f = \int \delta\left(\hbar\omega - I - \frac{p^2}{2m}\right)\frac{Vpdp^2d\Omega}{2(2\pi\hbar)^3} = \frac{Vmp}{(2\pi\hbar)^3}d\Omega \tag{7}$$

et de la relation entre la probabilité et la section efficace du processus

$$d\sigma = dw/j = dw/\rho c = V\,dw/c \tag{8}$$

($\rho = 1/V$ étant la densité du nombre de photons), on obtient, selon (4)–(8), la section efficace différentielle de l'effet photoélectrique :

$$d\sigma = \frac{32e^2a^3}{m\omega c}\frac{(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\cdot\mathbf{p})^2\hbar^5 p}{[\hbar^2 + a^2(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})^2]^4}d\Omega. \tag{9}$$

Comme $\varepsilon_e = pv/2 \approx \hbar kc \ll mc^2$ ($v \ll c$), $p \gg \hbar k$. Compte tenu de cette relation et de la relation $pa \gg \hbar$ dans (9), on calcule ensuite la valeur moyenne sur les polarisations du photon à l'aide de la relation

$$\overline{(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\cdot\mathbf{p})^2} = \frac{1}{2}\sum_\sigma (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i(\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n p_i p_n = \frac{1}{2}p_i p_n\left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2}\right) = \frac{p^2}{2}\sin^2\theta,$$

et on obtient la section efficace différentielle pour les photons non polarisés

$$d\sigma = \frac{16e^2\hbar^5\sin^2\theta d\Omega}{m\omega c a^5 p^5} = 32Z^5\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left(\frac{\hbar^2}{mc^2}\right)^2\left(\frac{I_0}{\hbar\omega}\right)^{7/2}\sin^2\theta d\Omega \tag{10}$$

et la section efficace totale de l'effet photoélectrique

$$\sigma = \frac{256\pi}{3}Z^5\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)\left(\frac{\hbar^2}{mc^2}\right)^2\left(\frac{I_0}{\hbar\omega}\right)^{7/2} \tag{11}$$

($I_0 = I/Z^2 = 13{,}6$ eV est le potentiel d'ionisation de l'atome d'hydrogène).

La valeur numérique de (11) pour $Z = 1$ et $\hbar\omega \approx 5$ keV est $0{,}6 \times 10^{-25}$ cm^2. L'expression (11), multipliée par deux (deux électrons K), peut être utilisée pour le calcul approché de la section efficace de l'effet photoélectrique sur des atomes différents de l'atome hydrogénoïde (la contribution des autres électrons dans des états excités est plus petite que celle des électrons K : les électrons excités sont moins fortement attachés au noyau ; les électrons libres ne peuvent pas absorber de photons).

14.21. La solution de ce problème peut être obtenue par des transformations simples utilisées lors de la solution du problème précédent[4]. La permutation entre les états initial et final ne modifie pas la valeur de $|V_{fi}|^2$ (vu l'hermiticité de $\widehat{V}$). Il faut procéder aux modifications suivantes :

4 Notons que les sections efficaces de l'effet photoélectrique et du processus de recombinaison radiative sont liées par la relation simple du bilan détaillé (voir 13.60).

a) dans l'expression de la densité d'états finaux

$$d\rho_f = \frac{V\omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3} \qquad (\hbar\omega \approx \varepsilon_e + I \approx \varepsilon_e) \ ;$$

b) dans la relation entre la probabilité et la section efficace :

$$d\sigma = \frac{dw}{j} = \frac{dw}{\rho_e v_e} = \frac{V dw}{v_e}$$

c) remplacer la valeur moyenne sur les polarisations du photon par une somme (ce qui introduit un facteur 2 complémentaire).

Après ces transformations dans les formules correspondantes du problème précédent, on obtient les sections efficaces différentielle et totale de recombinaison de l'électron sur le niveau fondamental d'un atome hydrogénoïde :

$$d\sigma_{\text{rec}}^{(0)} = 16Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{\varepsilon_e}\right)^{5/2} \sin^2\theta d\Omega, \tag{1}$$

$$\sigma_{\text{rec}}^{(0)} = \frac{128\pi}{3} Z^5 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \left(\frac{\hbar^2}{me^2}\right)^2 \left(\frac{I_0}{\varepsilon_e}\right)^{5/2}. \tag{2}$$

Notons que les sections efficaces de recombinaison de l'électron (rapide) sur les niveaux excités d'un atome hydrogénoïde sont beaucoup plus petites et que leur prise en compte donne une section efficace totale de recombinaison ne différant de celle trouvée dans (2) que de 20 %.

14.22. Le processus de photodésintégration du deutéron est analogue à l'effet photoélectrique et le calcul de la section efficace de ce processus est tout à fait analogue à celui effectué lors de la résolution du problème 14.20. Donc, en prenant pour modèle la solution de ce problème, on ne fera qu'indiquer les modifications à apporter aux formules permettant de trouver la section efficace de photodésintégration.

La fonction d'onde $\Psi_0(r)$ doit être remplacée par la fonction d'onde du deutéron

$$\Psi_0(r) = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \frac{e^{-r/a}}{r} \qquad E_i = \hbar\omega - \varepsilon_0, \tag{1}$$

($\varepsilon_0 = \dfrac{\hbar^2}{2\mu a^2} = \dfrac{\hbar^2}{Ma^2}$ est l'énergie de liaison du deutéron, M la masse du nucléon, $\mu = M/2$ la masse réduite du système composé d'un proton et d'un neutron). Dans l'expression (2) du problème 14.20, il faut effectuer des substitutions suivantes : $e \to -e$, $m \to M$, $\mathbf{r} \to \mathbf{r}_p = \mathbf{r}/2$.

La forme de la fonction d'onde Ψ_f reste la même ; toutefois, on a maintenant $E_f = p^2/2\mu = p^2/M$.

Les changements dans les formules (5) et (6) ne sont en fait dus qu'à la variation de la forme de la fonction d'onde $\Psi_0(r)$. En particulier, la formule (6) doit être remplacée par l'expression

$$\int e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \widehat{\mathbf{p}} \frac{1}{r} e^{-r/a} d^3r = \frac{4\pi a^2 \mathbf{p}}{1 + p^2a^2/\hbar^2}$$

(en prenant en considération la nature dipolaire de l'approximation, on a négligé le terme $i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}/2$ dans l'exponentielle).

La densité d'états finaux est de la forme

$$d\rho_f = \int \delta\left(\hbar\omega - \varepsilon_0 - \frac{p^2}{M}\right)\frac{Vd^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{VMp}{2(2\pi\hbar)^3}d\Omega, \qquad p = \sqrt{M(\hbar\omega - \varepsilon_0)}$$

et, à la différence de 14.20, on ne suppose plus $\hbar\omega \gg \varepsilon_0$.

Finalement, on obtient l'expression suivante de la section efficace différentielle du processus de photodésintégration du deutéron :

$$d\sigma = 2\frac{c^2}{\hbar c}\frac{\hbar^2 p(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})^2 d\Omega}{M^3\omega[\hbar^2/Ma^2 + p^2/M]^2 a} = 2\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\sqrt{\varepsilon_0}\hbar^2 p(\mathbf{e}\cdot\mathbf{p})^2 d\Omega}{M^{5/2}(\hbar\omega)^3}$$

qui, après le calcul de la valeur moyenne sur les polarisations du photon, prend la forme

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{\hbar^2\sqrt{\varepsilon_0}p^3\sin^2\theta}{M^{5/2}(\hbar\omega)^3}d\Omega.$$

La section efficace totale de photodésintégration vaut

$$\sigma = \frac{8\pi}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\hbar^2\sqrt{\varepsilon_0}p^3}{M^{5/2}(\hbar\omega)^3} = \frac{8\pi}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\hbar^2}{M}\frac{\sqrt{\varepsilon_0}(\hbar\omega - \varepsilon_0)^{3/2}}{(\hbar\omega)^3}.$$

Notons en conclusion que, dans la solution du problème, on a considéré les nucléons comme des particules sans spin. Or, il est facile de comprendre que la prise en compte du spin ne modifie pas les résultats obtenus (naturellement, dans les conditions où les états de spin du proton et du neutron ne sont pas fixés, autrement dit que la somme est effectuée sur les polarisations des nucléons).

14.23. L'état initial du système électron libre et vide de photons est décrit par la fonction d'onde

$$\Psi_i = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}/\hbar}|0,0,\ldots\rangle, \qquad E_i = \frac{p_1^2}{2m}. \tag{1}$$

Sous l'effet de la perturbation

$$\widehat{V} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{e}{mc}\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{2mc^2}\widehat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}), \tag{2}$$

il peut se produire une diffusion de l'électron s'accompagnant de l'émission d'un photon. Les fonctions d'onde des états finaux possibles prennent la forme

$$\Psi_f = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}/\hbar}|1_{\mathbf{k}\sigma},0,\ldots\rangle, \qquad E_f = \frac{p_2^2}{2m} + \hbar\omega. \tag{3}$$

La probabilité de cette transition (par unité de temps), au second ordre du calcul des perturbations, se définit à l'aide de la formule générale

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu}V_{\nu i}}{E_i - E_\nu}\right|^2 d\rho_f. \tag{4}$$

Notons que l'élément matriciel V_{fi} n'est pas nul dès le premier ordre à cause du second terme de (2) ; cependant, il contient le facteur $\delta_{\mathbf{p}_1,\mathbf{p}_2+\hbar\mathbf{k}}$ exprimant la loi de conservation de l'impulsion dans l'émission d'un photon par un électron libre. Or, la comparaison de cette loi à celle de la conservation de l'énergie conduit, comme on le sait bien, à l'impossibilité d'émission d'un photon par un électron libre ; ainsi l'interaction de l'électron avec le champ extérieur, décrite par le premier terme de (2) et aboutissant à la transmission d'une impulsion au noyau, constitue l'élément essentiel du processus étudié ; le dernier terme de (2) ($\sim e^2$) ne donne au second ordre aucune contribution à l'amplitude du processus.

Les états intermédiaires ν dans (4) apportant une contribution non nulle sont décrits par les fonctions d'onde de deux types :

$$\begin{aligned} \Psi_{\nu_1} &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} |1_{\mathbf{k}\sigma}, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} + \hbar\omega, \\ \Psi_{\nu_2} &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}} |0, 0, \ldots\rangle, \qquad E_f = \frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}, \end{aligned} \tag{5}$$

la somme sur ν_1 et ν_2 se réduit alors à la somme sur tous les vecteurs d'onde possibles $\boldsymbol{\kappa}$ de l'électron dans l'état intermédiaire.

Compte tenu de la forme explicite de la fonction d'onde et de l'opérateur $\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ (voir 14.1), on obtient les éléments matriciels intervenant dans l'expression (4) :

$$\begin{aligned} (\widehat{V})_{\nu_1 i} &= \frac{e}{mc}(\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\cdot\widehat{\mathbf{p}})_{\nu_1 i} = \frac{e}{mV}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}}\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\int e^{-i(\boldsymbol{\kappa}+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}\widehat{\mathbf{p}}e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}}dV \\ &= \frac{e\hbar}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}}\,(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\cdot\mathbf{k}_1)\,\delta_{\mathbf{k}_1,\boldsymbol{\kappa}+\mathbf{k}}, \\ (\widehat{V})_{\nu_2 i} &= -Ze^2\left(\frac{1}{r}\right)_{\nu_2 i} = -\frac{Ze^2}{V}\int\frac{1}{r}e^{i(\mathbf{k}_1-\boldsymbol{\kappa})\cdot\mathbf{r}}dV = -\frac{4\pi Ze^2}{V(\mathbf{k}_1-\boldsymbol{\kappa})^2}, \\ (\widehat{V})_{f\nu_1} &= -Ze^2\left(\frac{1}{r}\right)_{f\nu_1} = -\frac{Ze^2}{V}\int\frac{1}{r}e^{i(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_2)\cdot\mathbf{r}}dV = -\frac{4\pi Ze^2}{V(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_2)^2}, \\ (\widehat{V})_{f\nu_2} &= \frac{e}{mc}(\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\cdot\widehat{\mathbf{p}})_{f\nu_2} = \frac{e}{mV}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}}\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\int e^{-i(\mathbf{k}_2+\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}\,\widehat{\mathbf{p}}\,e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}}dV \\ &= \frac{e\hbar}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}}\,(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\cdot\boldsymbol{\kappa})\,\delta_{\boldsymbol{\kappa},\mathbf{k}_2+\mathbf{k}} \qquad (\mathbf{p}_{1,2} = \hbar\mathbf{k}_{1,2}). \end{aligned} \tag{6}$$

La présence dans les éléments matriciels de facteurs de la forme $\delta_{\mathbf{k}_1,\boldsymbol{\kappa}+\mathbf{k}}$ permet d'effectuer la somme sur les états intermédiaires (dans la somme sur les états de type ν_1 seul le terme avec $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}$ est non nul et pour les états de type ν_2, seul le terme avec $\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}$ est non nul) :

$$\sum_{\substack{\nu \\ \nu \neq i}} \frac{V_{f\nu} V_{\nu i}}{E_i - E_\nu} = -\frac{4\pi Z e^2}{q^2} \frac{e\hbar}{mV} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V\omega}}$$

$$\times \left\{ \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma} \cdot \mathbf{k}_1}{\hbar^2 k_1^2/2m - \hbar^2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})^2/2m - \hbar\omega} + \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma} \cdot \mathbf{k}_2}{\hbar^2 k_1^2/2m - \hbar^2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k})^2/2m} \right\} \tag{7}$$

($\hbar\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k})$ est l'impulsion transmise au noyau).

La densité d'états finaux vaut

$$d\rho_f = \int \delta(E_f - E_i) \frac{V d^3k_2}{(2\pi)^3} \frac{V d^3k}{(2\pi)^3} =$$

$$= \int \delta\left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} + \hbar\omega - \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \right) \frac{V^2\omega^2 m k_2}{(2\pi)^6 \hbar^2 c^3} \, d\Omega_\gamma \, d\Omega_2 \, d\omega \, d\left(\frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \right) =$$

$$= \frac{mV^2\omega^2 k_2}{(2\pi)^6 \hbar^2 c^3} d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega, \qquad \left(k_2 = \sqrt{k_1^2 - 2m\omega/\hbar} \right). \tag{8}$$

D'après (4), (7), (8) et la relation entre la probabilité et la section efficace du processus :

$$d\sigma = \frac{dw}{j} = \frac{dw}{\rho v_1} = \frac{mV\,dw}{\hbar k_1},$$

on obtient la section efficace différentielle du rayonnement de freinage :

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{(Ze^2)^2}{\pi^2 q^4} \frac{\omega k_2}{k_1 c^2}$$

$$\times \left| \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma} \cdot \mathbf{k}_1}{\hbar^2 k_1^2/2m - \hbar^2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})^2/2m - \hbar\omega} + \frac{\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma} \cdot \mathbf{k}_2}{\hbar^2 k_1^2/2m - \hbar^2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k})^2/2m} \right|^2 d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega. \tag{9}$$

Vu que l'électron n'est pas relativiste et $\hbar\omega \ll mc^2$, on a

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})^2}{2m} - \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}}{m} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega \approx -\hbar\omega. \tag{10}$$

En effet,

$$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}}{m} \leq \frac{\hbar^2 k_1 k}{m} = \frac{\hbar\omega v_1}{m} \ll \hbar\omega, \qquad \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\omega^2}{2mc^2} = \hbar\omega \frac{\hbar\omega}{2mc^2} \ll \hbar\omega.$$

De façon analogue

$$\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k})^2}{2m} \approx \hbar\omega, \qquad \mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 - \mathbf{k} \approx \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2. \tag{11}$$

Compte tenu de (10) et (11), l'expression (9) prend la forme

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{(Ze^2)^2 k_2}{\pi^2 q^4 \hbar^2 \omega c^2 k_1}|\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\cdot\mathbf{q}|^2 d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega. \tag{12}$$

La formule (12) fournit l'information la plus complète sur le rayonnement de freinage. En nous limitant à l'étude de la composition spectrale du rayonnement de freinage, procédons aux transformations suivantes.

En négligeant la polarisation des photons émis, effectuons dans (12) la somme sur leurs deux polarisations indépendantes à l'aide de la relation

$$\sum_\sigma (\mathbf{e}_{\mathbf{k},\sigma}\cdot\mathbf{q})^2 = \sum_\sigma (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_i (\mathbf{e}_{\mathbf{k}\sigma})_n q_i q_n = q_i q_n \left(\delta_{in} - \frac{k_i k_n}{k^2}\right).$$

Alors

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c}\frac{(Ze^2)^2 k_2}{\pi^2 q^4 \hbar^2 \omega c^2 k_1}\left(q^2 - \frac{(\mathbf{q}\cdot\mathbf{k})^2}{k^2}\right) d\Omega_\gamma d\Omega_2 d\omega. \tag{13}$$

Si l'on ne s'intéresse pas à la distribution angulaire des photons émis, on peut faire, dans (13), l'intégration sur les directions de leur vecteur d'onde (pour cela, on choisit l'axe polaire le long du vecteur $\mathbf{q}$) :

$$d\sigma = \frac{8}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{(Ze^2)^2}{\pi q^2}\frac{k_2}{\hbar^2 \omega c^2 k_1} d\Omega_2 d\omega. \tag{14}$$

En effectuant dans l'expression (14) l'intégration sur les angles des électrons diffusés (on choisit l'axe polaire le long du vecteur $\mathbf{k}_1$, $q^2 = k_1^2 + k_2^2 - 2k_1 k_2 \cos\theta$), on obtient la section efficace différentielle du rayonnement de freinage en fonction de la pulsation des photons émis (c'est-à-dire la répartition spectrale des photons) :

$$d\sigma = \frac{8}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{(Ze^2)^2}{mc^2 \omega E_1} \ln\left[\frac{(\sqrt{E_1} + \sqrt{E_1 - \hbar\omega})^2}{\hbar\omega}\right] d\omega \tag{15}$$

(E_1 est l'énergie des électrons incidents). La section efficace totale du rayonnement de freinage est infinie.

Vu que, dans la résolution du problème, l'action du champ du noyau a été assimilée à une perturbation, les expressions obtenues sont valables si $Ze^2/\hbar v_2 \ll 1$. En particulier, les résultats obtenus ne sont pas valables si presque toute l'énergie de l'électron incident est transmise au photon émis.

CHAPITRE 15

EQUATIONS D'ONDE RELATIVISTES

15.1. La solution générale de l'équation de Klein-Gordon peut être représentée sous la forme d'une superposition[1]

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi^{(+)}(\mathbf{r},t) + \Psi^{(-)}(\mathbf{r},t), \qquad \Psi^{(\pm)} = \int a^{(\pm)}(\mathbf{k})\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}(\mathbf{r},t)\, d^3k, \tag{1}$$

de solutions particulières de cette équation formant un système complet[2] :

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} = \mathrm{e}^{\pm i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega(k)t)}, \qquad \omega(k) = \sqrt{\mathbf{k}^2c^2 + m^2c^4/\hbar^2} > 0. \tag{2}$$

La fonction $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ décrit la particule avec l'impulsion $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ et l'énergie $\varepsilon = \hbar\omega \geq mc^2$. La fonction $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ correspond formellement à l'énergie $\varepsilon' = -\hbar\omega \leq -mc^2$ et à l'impulsion $-\hbar\mathbf{k}$. Cette dernière solution, après avoir effectué l'opération de conjugaison de charge, constitue la fonction d'onde de l'antiparticule d'énergie $\varepsilon = \hbar\omega \geq mc^2$ et d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ (voir 15.2).

En nous limitant dans l'expression (1) aux superpositions $\Psi^{(+)}$, $\Psi^{(-)}$ ne contenant que les fonctions $\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}$ ou bien $\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ (soulignons encore une fois que seules ces solutions de l'équation de Klein-Gordon décrivent les états physiquement réalisables d'une particule libre sans spin !), portons ces fonctions $\Psi^{(\pm)}$ dans l'expression de Q donnée dans l'énoncé. Une intégration élémentaire donne

$$Q^{(\pm)} = \pm\frac{(2\pi)^3\hbar}{mc^2}\int \omega(k)|a^{(\pm)}(\mathbf{k})|^2\, d^3k, \tag{3}$$

où on a utilisé la relation

$$\int \mathrm{e}^{\pm i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}}\, d^3r = (2\pi)^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}').$$

---

1 Il faut souligner que la solution générale (1) de l'équation de Klein-Gordon a un sens formel, vu qu'elle ne décrit aucun état à une particule. Les états à une particule ne sont décrits que par les fonctions $\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)$ et $\Psi^{(-)}(\mathbf{r},t)$ séparément (voir 15.2).

2 Faire attention à la notation utilisée pour la fonction d'onde $\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}$.

D'après (3), $Q^{(\pm)}$ a un signe déterminé (mais différent pour les fonctions $\Psi^{(\pm)}$).

Soulignons que bien que $Q^{(+)}$ et $Q^{(-)}$ possèdent des signes déterminés, les expressions correspondantes sous l'intégrale, $\rho^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$, n'ont pas, en général, cette propriété ; $\rho^{(+)}$ et $-\rho^{(-)}$ ne peuvent pas être interprétés comme des densités de probabilité.

Pour des particules chargées, on peut donner aux grandeurs $\rho^{(+)}$ et $\rho^{(-)}$ une interprétation très simple en les associant à la densité volumique de charge. Pour une particule de charge e, l'expression $e\rho^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ avec la normalisation $Q^{(+)} = 1$ peut être assimilée à la densité de charge dans un état à une particule. La grandeur $e\rho^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ est la densité de charge de l'antiparticule ; la normalisation $Q^{(-)} = -1$ donne automatiquement les signes opposés des charges de la particule et de l'antiparticule correspondante.

Pour les particules neutres, il n'y pas, en général, d'interprétation évidente des grandeurs $\rho^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$. Toutefois, il ne faut pas voir ici un défaut de la théorie, vu que les caractéristiques spatiales locales d'une particule sont dénuées, dans le cas relativiste, de sens physique profond. Cela est lié au fait que la localisation d'une particule dans un petit domaine de l'espace nécessite l'application de forts champs extérieurs. Mais, dans de tels champs, de nouvelles particules peuvent apparaître et le problème cesse automatiquement d'être un problème à une particule. Pour cette raison, dans les théories relativistes, le sens physique de la fonction d'onde de la particule comme de l'amplitude de probabilité ne se conserve qu'en représentation $\mathbf{p}$ (et non en représentation $\mathbf{r}$!).

La grandeur $\rho^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ peut d'ailleurs être interprétée comme la densité de probabilité d'une particule (et, respectivement, $-\rho^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ de l'antiparticule) si l'on calcule la valeur moyenne par rapport à un volume spatial pas trop petit.

15.2. L'invariance de l'équation de Klein-Gordon pour une particule libre

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4)\Psi(\mathbf{r}, t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi(\mathbf{r}, t) \tag{1}$$

par rapport à la transformation $\widehat{C}$ signifie que si $\Psi(\mathbf{r}, t)$ est la solution de l'équation (1), $\Psi_c = \widehat{C}\Psi$ l'est également. En effectuant dans (1) la conjugaison complexe, on se convainc de façon évidente de l'invariance étudiée de l'équation.

Comme $\widehat{C}^2 = 1$, selon l'énoncé, la solution générale de l'équation de Klein-Gordon peut être écrite sous la forme

$$\Psi = \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \Psi^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) + \widehat{C}\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r}, t), \tag{2}$$

(les fonctions $\Psi^{(+)}$ et $\Psi^{(-)}$ sont définies dans le problème précédent ; notons que les signes " $\pm$ " montrent la nature de la dépendance temporelle des fonctions d'onde correspondant aux énergies ou pulsations positives (+) ou négatives (−)). Cette solution inclut aussi bien les fonctions d'onde de la particule $\Psi^{(+)}$ que de l'antiparticule $\Psi_c^{(+)}$ et ne décrit aucun état physique à une particule. L'expression (2) n'a pas d'interprétation au sens du principe de superposition habituel, car, dans cette relation, une partie des solutions, décrivant l'antiparticule, subit une transformation antilinéaire.

Notons que le sens physique de la transformation $\widehat{C}$, interprétée comme une conjugaison de charge de particules sans spin, apparaît dans l'étude non pas des particules libres mais des particules chargées dans un champ électromagnétique extérieur qui agit différemment sur les particules et les antiparticules (voir 15.3).

A partir de la relation $\Psi_c = \widehat{C}\Psi = \Psi^*$ on obtient

$$\Psi_{c,\varepsilon} = \Psi_{-\varepsilon}, \qquad \Psi_{c,\mathbf{p}} = \Psi_{-\mathbf{p}}, \qquad \Psi_{c,m} = \Psi_{-m}, \qquad \Psi_{c,l} = \Psi_l.$$

En effet, si $\Psi \propto \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ est la fonction propre de l'opérateur $\widehat{\mathbf{p}}$ correspondant à la valeur propre $\hbar\mathbf{k}$, la fonction de charge opposée $\Psi_c \propto \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ correspond à la valeur propre $-\hbar\mathbf{k}$, etc.

15.3.

a) Pour une particule de charge e dans un champ électromagnétique extérieur, l'équation de Klein-Gordon

$$\left\{c^2\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right\}\Psi = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right)^2\Psi \tag{1}$$

s'écrit, après la conjugaison complexe,

$$\left\{c^2\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right\}\Psi_c = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)^2\Psi_c \tag{2}$$

qui représente l'équation de Klein-Gordon pour une particule de charge $-e$ et de même masse m.

b) Après avoir effectué, dans (1), simultanément la transformation $\widehat{C}$ de la fonction Ψ et la transition à un certain nouveau champ électromagnétique $\mathbf{A} \to \mathbf{A}_c$, $\varphi \to \varphi_c$ on passe à l'équation

$$\left\{c^2\left(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\mathbf{A}_c\right)^2 + m^2c^4\right\}\Psi_c = \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi_c\right)^2\Psi_c \tag{3}$$

qui pour $\mathbf{A}_c = -\mathbf{A}$, $\varphi_c = -\varphi$ est de la même forme que l'équation (1).

c) Etudions un champ électromagnétique constant (les potentiels $\mathbf{A}$, φ ne dépendent pas du temps). L'équation (1) possède, dans ce cas, des solutions stationnaires de la forme $\Psi_\varepsilon = e^{-i\varepsilon t/\hbar}\psi(\mathbf{r})$. Parmi ces solutions, il y a des solutions correspondant aux valeurs positives et négatives de l'énergie ε de la particule (comparer au cas d'une particule libre lorsqu'on introduit adiabatiquement un champ). Les solutions correspondant à $\varepsilon > 0$ ont le même sens que dans le cas d'une particule libre : elles décrivent les états possibles de la particule (il en est de même pour le cas d'une superposition quelconque $\Psi^{(+)}$ de ces solutions particulières). Les solutions pour $\varepsilon < 0$, de même qu'une superposition quelconque de telles solutions $\Psi^{(-)}$, n'ont pas de sens physique direct ; mais la fonction $\Psi_c^{(+)} = \widehat{C}\Psi^{(-)} \equiv \Psi^{(-)*}$, considérée comme fonction d'onde de l'antiparticule, a un sens physique. En effet, $\Psi_c^{(+)}$ possède une dépendance temporelle correcte et satisfait à l'équation

de Klein-Gordon (2) d'une particule de charge $-e$ opposée à celle de la particule dont la fonction d'onde est $\Psi^{(+)}$. Donc, la solution générale de l'équation de Klein-Gordon d'une particule dans un champ électromagnétique, comme dans le cas d'une particule libre, est de la forme

$$\Psi = \Psi^{(+)} + \Psi^{(-)} = \Psi^{(+)} + \widehat{C}\Psi_c^{(+)}.$$

L'interprétation donnée plus haut de la transformation $\widehat{C}$ comme celle de conjugaison de charge réalisant la transition de la particule à l'antiparticule est basée sur le résultat obtenu au point a) de la solution. De ce point de vue, l'invariance de l'équation de Klein-Gordon établie au point b) traduit sa symétrie par rapport au remplacement d'une particule par son antiparticule : à tout état de la particule décrit par la fonction d'onde $\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ correspond un état absolument identique de l'antiparticule avec la fonction d'onde $\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t)$ (dans ce cas, il faut intervertir le signe des potentiels du champ électromagnétique lors du passage à l'antiparticule, en accord avec le sens physique de la conjugaison de charge).

15.4. Compte tenu de la forme de l'opérateur de conjugaison de charge $\widehat{C}$ pour des particules sans spin $\Psi_c = \widehat{C}\Psi \equiv \Psi^*$ (voir 15.2 et 15.3) et en effectuant dans l'équation

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 + 2mc^2 U)\Psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi \tag{1}$$

la conjugaison complexe, on obtient une équation absolument identique pour la fonction de charge opposée[3] :

$$(-\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4 + 2mc^2 U)\Psi_c = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi_c \tag{2}$$

c'est-à-dire que l'équation de Klein-Gordon pour une particule dans un champ scalaire est invariante par rapport à la conjugaison de charge (notons que lors du passage de (1) à (2) le champ scalaire extérieur n'a pas varié, contrairement au champ électromagnétique pour lequel, pour assurer la symétrie de charge, il fallait mettre le signe moins devant les potentiels).

Les équations (1) et (2) sont de forme identique, sauf que la première décrit la particule et la seconde, l'antiparticule. Si la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ décrit dans le champ U un état de particule physiquement réalisable, un état absolument analogue, décrit par la fonction d'onde $\Psi_c \equiv \Psi$ est également possible pour l'antiparticule dans le même champ, ce qui démontre le caractère identique de l'action du champ scalaire sur la particule et son antiparticule.

15.5. La parité intrinsèque d'une particule sans spin est définie par la transformation de sa fonction d'onde dans la réflexion des coordonnées $\widehat{P}\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \pm\Psi(\mathbf{r}, t)$ et vaut respectivement $+1$ et -1 pour les fonctions scalaire et pseudo-scalaire.

3 $U(\mathbf{r}, t)$ est une fonction réelle analogue à un potentiel réel dans le cas non relativiste.

Les fonctions d'onde de la particule et de son antiparticule sont liées aux différentes solutions particulières de l'équation de Klein-Gordon pour une même fonction $\Psi(\mathbf{r}, t)$ (scalaire ou pseudo-scalaire) qu'on peut écrire sous la forme (voir 15.2)

$$\Psi = \Psi^{(+)} + \Psi^{(-)} = \Psi^{(+)} + \widehat{C}\Psi_c^{(+)}.$$

où $\Psi_c^{(+)} = \widehat{C}\Psi^{(-)} \equiv \Psi^{(-)*}$. Les fonctions $\Psi^{(+)}$ et $\Psi_c^{(+)}$ décrivent respectivement les états de la particule et de l'antiparticule.

Les fonctions $\Psi^{(+)}$ et $\Psi^{(-)}$ se comportent de la même façon lors de la réflexion des coordonnées (c'est-à-dire qu'elles sont, toutes les deux, scalaires ou pseudo-scalaires) ; il en est de même évidemment des fonctions $\Psi^{(-)}$ et $\Psi_c^{(+)}$ (la conjugaison complexe ne modifie pas la nature scalaire ou pseudo-scalaire de la fonction). Donc, les fonctions $\Psi^{(+)}$ et $\Psi_c^{(+)}$ se comportent de la même façon lors de la réflexion des coordonnées, ce qui démontre l'identité des parités intrinsèques d'une particule sans spin et de son antiparticule.

Il faut souligner que, pour les particules relativistes, les parités intrinsèques des bosons peuvent être, en principe, déterminées sur la base de la loi de conservation de la parité, car il est possible d'avoir des processus de création et d'absorption des bosons séparément. Dans le cas non relativiste, au contraire, le nombre de particules (de chaque espèce) ne varie pas, et, par suite, la parité intrinsèque du système reste toujours la même. Donc, il est impossible de distinguer la nature de la fonction d'onde par rapport à la réflexion des coordonnées, et, pour simplifier, on suppose que la fonction d'onde est scalaire.

Pour les particules de spin quelconque, les parités intrinsèques de la particule et de l'antiparticule sont les mêmes pour les bosons et opposées pour les fermions.

15.6. En mécanique quantique non relativiste, l'orthogonalité et la normalisation de la fonction propre de l'opérateur hermitien se définissent par la relation

$$\int \Psi_{f'}^*(\mathbf{r})\Psi_f(\mathbf{r})dV = \delta(f - f') \qquad (\text{ou } \delta_{f'f} \text{ pour un spectre discret}), \tag{1}$$

dont la forme est étroitement liée à la conservation au cours du temps de la norme de la fonction d'onde $\int |\Psi|^2 dV$.

Pour l'équation de Klein-Gordon, c'est la grandeur

$$Q = \frac{i\hbar}{2mc^2} \int \left\{ \Psi^* \frac{\partial}{\partial t}\Psi - \left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right)\Psi \right\} dV \tag{2}$$

qui se conserve au cours du temps, et c'est justement cette expression qui doit être utilisée pour la normalisation de la fonction d'onde.

Représentons la fonction d'onde $\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon}$ sous la forme

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} = C^{(\pm)} e^{\pm i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t)/\hbar}, \qquad \varepsilon(k) = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} \geq mc^2, \tag{3}$$

où $\Psi_{\mathbf{p}}^{(+)}$ décrit la particule d'impulsion $\mathbf{p}$ et d'énergie ε, tandis que $\Psi_{\mathbf{p}}^{(-)}$ correspond de façon formelle à l'impulsion $-\mathbf{p}$ et à l'énergie $-\varepsilon$, et décrit l'antiparticule d'impulsion $\mathbf{p}$ et d'énergie ε (voir 15.2).

En remplaçant, dans (2), les fonctions Ψ et Ψ^* par, respectivement, les fonctions d'onde $\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}$ et $\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*}$, on voit que l'intégrale est proportionnelle à $\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')$. C'est la généralisation, dans le cas relativiste, de la propriété d'orthogonalité (1). En choisissant dans (3) $C^{(\pm)}(p) = \sqrt{\dfrac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3\varepsilon(p)}}$ on obtient la condition d'orthonormalisation du système de fonctions sous la forme

$$\frac{i\hbar}{2mc^2}\int\left\{\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*}\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)} - \left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*}\right)\Psi_{\mathbf{p}}^{(\pm)}\right\}dV = \pm\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),$$

$$\frac{i\hbar}{2mc^2}\int\left\{\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*}\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathbf{p}}^{(\mp)} - \left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\mathbf{p}'}^{(\pm)*}\right)\Psi_{\mathbf{p}}^{(\mp)}\right\}dV = 0.$$

15.7. Si la solution $\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)$ de l'équation de Klein-Gordon qui décrit l'état physique d'une particule est représentée sous forme d'une superposition de fonctions (comparer aux solutions des problèmes 15.1 et 15.6)

$$\Psi_{\mathbf{p}}^{(+)} = \sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3\varepsilon(p)}}\,e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\varepsilon t)/\hbar}$$

et comme

$$\Psi^{(+)} = \int a^{(+)}(\mathbf{p})\Psi_{\mathbf{p}}^{(+)}(\mathbf{r},t)d^3p = \int\sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3\varepsilon(p)}}\,a^{(+)}(\mathbf{p})e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\varepsilon t)/\hbar}d^3p \qquad (1)$$

la grandeur $Q^{(+)}$, constante dans le temps, peut être représentée sous la forme

$$Q^{(+)} = \frac{i\hbar}{2mc^2}\int\left\{\Psi^{(+)*}\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{(+)} - \left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{(+)*}\right)\Psi^{(+)}\right\}dV = \int|a^{(+)}(\mathbf{p})|^2d^3p. \qquad (2)$$

Par analogie avec le cas non relativiste, la fonction $a^{(+)}(\mathbf{p})$ (plus précisément, $a^{(+)}(\mathbf{p},t) = a^{(+)}(\mathbf{p})e^{-i\varepsilon t/\hbar}$) doit être assimilée à la fonction d'onde de la particule en représentation $\mathbf{p}$ avec la normalisation $Q^{(+)} = 1$.

De façon analogue, on peut introduire la fonction d'onde de l'antiparticule en représentation $\mathbf{p}$, en utilisant le développement de la solution $\Psi^{(-)}(\mathbf{r},t)$ de l'équation de Klein-Gordon sur les fonctions $\Psi_{\mathbf{p}}^{(-)} \equiv \Psi_{\mathbf{p}}^{(+)*}$:

$$\Psi^{(-)} = \int a^{(-)}(\mathbf{p})\Psi_{\mathbf{p}}^{(-)}(\mathbf{r},t)d^3p = \int\sqrt{\frac{mc^2}{(2\pi\hbar)^3\varepsilon(p)}}\,a^{(-)}(\mathbf{p})e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\varepsilon t)/\hbar}d^3p$$

ainsi que la relation de la fonction d'onde de l'antiparticule $\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r},t)$ avec $\Psi^{(-)}$: $\Psi_c^{(+)} \equiv \widehat{C}\Psi^{(-)} \equiv \Psi^{(-)*}$ (voir 15.2). On voit que la fonction d'onde de l'antiparticule en représentation $\mathbf{p}$ a la forme $a^{(+)}(\mathbf{p},t) = a^{(-)*}(\mathbf{p})e^{-i\varepsilon t/\hbar}$, et la condition de normalisation ($\int|a_c^{(+)}(\mathbf{p},t)|^2d^3p = 1$) est équivalente à $Q^{(-)} = -1$.

Notons que la relation entre les fonctions scalaires (ou pseudo-scalaires) $\Psi^{(+)}$, $\Psi_c^{(+)}$ et les fonctions d'onde de la particule et de l'antiparticule en représentation $\mathbf{p}$ diffère

du cas non relativiste par la présence du facteur complémentaire $\sqrt{mc^2/\varepsilon(p)}$ dans le développement de $\Psi^{(+)}$ et $\Psi_c^{(+)}$ en ondes planes. C'est justement cette circonstance qui ne permet pas d'interpréter, dans le cas relativiste, les fonctions d'onde en représentation $\mathbf{r}$ comme des amplitudes de probabilité. On aurait pu penser que l'introduction de la fonction

$$\widetilde{\Psi}^{(+)}(\mathbf{r},t) = \int a^{(+)}(\mathbf{p},t)\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tag{3}$$

(et, de façon analogue, celle de la fonction $\widetilde{\Psi}_c^{(+)}$ pour l'antiparticule) comme fonction d'onde de la particule en représentation $\mathbf{r}$ lèverait cette difficulté. Mais bien que cette fonction satisfasse à l'équation de Klein-Gordon et que l'intégrale $\int|\widetilde{\Psi}^{(+)}|^2dV$ se conserve dans le temps (exactement comme dans le cas non relativiste), l'assimilation de la grandeur $\widetilde{\rho} = |\widetilde{\Psi}^{(+)}|^2$ à la densité de probabilité présente tout de même de sérieuses difficultés, car on viole l'équation de conservation $\operatorname{div}\mathbf{j} + \dfrac{\partial}{\partial t}\rho = 0$. De plus, l'introduction de cette fonction pour décrire un état de la particule rencontre de grands obstacles sous l'aspect purement théorique aussi, vu qu'elle ne possède aucune propriété particulière par rapport à la transformation de Lorentz. En effet, en prenant en considération le résultat du problème 1.51 et la relation $\varepsilon(p) = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$, on a, selon (1) et (3),

$$\widetilde{\Psi}^{(+)}(\mathbf{r},t) = \left(\frac{-\hbar^2\Delta + m^2c^2}{m^2c^2}\right)^{1/4}\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t).$$

c'est-à-dire que la relation entre $\widetilde{\Psi}^{(+)}$ et la fonction scalaire $\Psi^{(+)}$ se fait par un opérateur non local démuni de propriétés simples par rapport à la transformation de Lorentz.

15.8. Un état quelconque d'une particule libre est décrit par la solution $\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)$ de l'équation de Klein-Gordon constituant une superposition de solutions particulières correspondant à des énergies positives (voir 15.1). La fonction $\Psi^{(+)}$ peut être écrite sous la forme

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t) = \int\sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(p)}}a^{(+)}(\mathbf{p},t)\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tag{1}$$

où

$$a^{(+)}(\mathbf{p},t) = a^{(+)}(\mathbf{p})\mathrm{e}^{-i\varepsilon t/\hbar} \tag{2}$$

est la fonction d'onde d'une particule en représentation $\mathbf{p}$ au sens habituel de la mécanique quantique (voir 15.7). Avec la normalisation

$$\int|a^{(+)}(\mathbf{p},t)|^2d^3p = 1 \tag{3}$$

la valeur moyenne de l'énergie de la particule est donnée par

$$\overline{\varepsilon} = \int\varepsilon(p)\,|a^{(+)}(\mathbf{p},t)|^2\,d^3p = \int a^{(+)*}(\mathbf{p},t)\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}\,a^{(+)}(\mathbf{p},t)\,d^3p. \tag{4}$$

Selon (1), on a

$$\sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(p)}}a^{(+)}(\mathbf{p},t)=\int\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \tag{5}$$

En utilisant (5), récrivons (4) sous la forme

$$\begin{aligned}\overline{\varepsilon}&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3mc^2}\int(p^2c^2+m^2c^4)\Psi^{(+)*}(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}\Psi^{(+)}(\mathbf{r}',t)\,d^3p\,d^3r'\,d^3r\\&=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3mc^2}\int\Psi^{(+)*}(\mathbf{r},t)(-\hbar^2c^2\Delta+m^2c^4)\mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}\Psi^{(+)}(\mathbf{r}',t)\,d^3p\,d^3r'\,d^3r\end{aligned} \tag{6}$$

(noter l'ordre des facteurs dans la dernière intégrale).

Après l'intégration sur $\mathbf{p}$ dans (6), et compte tenu de la formule

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar}d^3p=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),$$

on intègre par rapport à $\mathbf{r}'$:

$$\overline{\varepsilon}=\frac{1}{mc^2}\int\Psi^{(+)*}(\mathbf{r},t)(-\hbar^2c^2\Delta+m^2c^4)\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)d^3r. \tag{7}$$

On peut obtenir une autre expression pour $\overline{\varepsilon}$, équivalente à (7), si l'on utilise la relation découlant de (2) et (5) :

$$-i\frac{\sqrt{\varepsilon}}{\hbar}a^{(+)}(\mathbf{p},t)=\frac{\partial}{\partial t}\frac{a^{(+)}(\mathbf{p},t)}{\sqrt{\varepsilon}}=\frac{1}{\sqrt{mc^2}}\int\mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{(+)}\frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}. \tag{8}$$

D'après (8) et (4), on obtient

$$\overline{\varepsilon}=\frac{\hbar^2}{mc^2}\int\left(\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{(+)*}(\mathbf{r},t)\right)\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t)d^3r. \tag{9}$$

Les expressions (7), (9) pour $\overline{\varepsilon}$ supposent la normalisation (3) correspondant à la condition

$$\int|a^{(+)}(\mathbf{p},t)|^2d^3p=\frac{ih}{2mc^2}\int\left\{\Psi^{(+)*}\frac{\partial\Psi^{(+)}}{\partial t}-\frac{\partial\Psi^{(+)*}}{\partial t}\Psi^{(+)}\right\}d^3r=1. \tag{10}$$

L'étude menée se transpose directement au cas d'une antiparticule si l'on utilise pour la description de son état la fonction conjuguée de charge $\Psi_c^{(+)}(\mathbf{r},t)$.

Notons que, selon (7) et (9), l'expression de l'énergie moyenne d'une particule sans spin peut être écrite sous la forme

$$\overline{\varepsilon}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\left\{\frac{\partial\Psi^{(+)*}}{c\partial t}\frac{\partial\Psi^{(+)}}{c\partial t}+\boldsymbol{\nabla}\Psi^{(+)*}\cdot\boldsymbol{\nabla}\Psi^{(+)}+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}|\Psi^{(+)}|^2\right\}d^3r,$$

qui est analogue (à un facteur de normalisation près) à l'énergie du champ scalaire (pseudo-scalaire) classique satisfaisant à l'équation d'onde

$$\left(-\Delta + \frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} + \kappa^2\right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0.$$

L'énergie de ce champ est $E = \int T_{00} d^3r$, où T_{00} est la densité d'énergie du champ qui constitue la composante du tenseur énergie-impulsion et dont la forme est [1]

$$T_{00} \propto \left[\frac{\partial \Psi^*}{c\partial t}\frac{\partial \Psi}{c\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\Psi^* \cdot \boldsymbol{\nabla}\Psi + \kappa^2 \Psi^* \Psi\right].$$

15.9. Le problème se résout de façon analogue au précédent. La valeur moyenne de l'impulsion est donnée par l'expression

$$\overline{\mathbf{p}} = \int \mathbf{p} |a^{(+)}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p = \int a^{(+)*}(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) d^3p. \tag{1}$$

En utilisant les relations (voir les formules (5) et (8) du problème 15.8)

$$\sqrt{\frac{mc^2}{\varepsilon(p)}} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) = \int \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}},$$

$$-\frac{i}{\hbar}\sqrt{mc^2 \varepsilon} a^{(+)}(\mathbf{p}, t) = \int \mathrm{e}^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) \frac{d^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}},$$

l'expression (1) se transforme en

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{p}} &= \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t)\, \mathbf{p}\, \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}', t)\, d^3p\, d^3r'\, d^3r \\ &= \frac{\hbar^2}{(2\pi\hbar)^3 mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathrm{e}^{i\mathbf{p}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}', t)\, d^3p\, d^3r'\, d^3r. \end{aligned} \tag{2}$$

L'intégration dans (2) se fait d'abord par rapport à $\mathbf{p}$ (elle donne un facteur proportionnel à $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$) et, ensuite, par rapport à $\mathbf{r}'$, et l'on obtient l'expression cherchée

$$\overline{\mathbf{p}} = \frac{\hbar^2}{mc^2} \int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) d^3r. \tag{3}$$

On voit que l'expression (3) peut être écrite sous une forme plus symétrique

$$\overline{\mathbf{p}} = -\frac{\hbar^2}{2mc^2} \int \left\{ \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial t} \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial \mathbf{r}} \right\} d^3r. \tag{4}$$

L'expression (4) de l'impulsion moyenne d'une particule sans spin a, à un facteur de normalisation près, la forme de l'impulsion d'un champ scalaire classique (comparer à la remarque analogue relative à l'énergie du problème précédent). Les composantes de

l'impulsion du champ sont définies par l'expression $P_i = \int T_{i0} d^3r$, où T_{i0} est la densité d'impulsion du champ qui constitue les composantes du tenseur énergie-impulsion avec

$$T_{i0} \propto -\left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x_i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\frac{\partial \Psi}{\partial x_i}\right].$$

15.10. Le problème se résout de façon analogue aux deux problèmes précédents. En partant de la relation

$$\bar{\mathbf{l}} = \int a^{(+)*}\,\hat{\mathbf{l}}\,a^{(+)} d^3p = -i\int a^{(+)*}(\mathbf{p},t)\,\mathbf{p}\wedge\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{p}}\,a^{(+)}(\mathbf{p},t)\,d^3p$$

et en utilisant les transformations identiques à celles décrites dans les solutions de ces problèmes, on peut obtenir l'expression cherchée :

$$\bar{\mathbf{l}} = \frac{h}{mc^2}\int \Psi^{(+)*}(\mathbf{r},t)\left(\mathbf{r}\wedge\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\right)\frac{\partial}{\partial t}\Psi^{(+)}(\mathbf{r},t) d^3r,$$

ou sous une forme plus symétrique :

$$\bar{\mathbf{l}} = -\frac{\hbar}{2mc^2}\int \mathbf{r}\wedge\left\{\frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial \mathbf{r}}\frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^{(+)*}}{\partial t}\frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial \mathbf{r}}\right\} d^3r.$$

C'est la forme du moment $\mathbf{L}$ d'un champ scalaire classique (comparer avec la remarque relativement à l'énergie et à l'impulsion des problèmes précédents). Dans ce cas, l'expression de la densité de moment $\boldsymbol{\lambda}$ du champ peut être représentée sous la forme

$$\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{h}\,\mathbf{r}\wedge\boldsymbol{\pi},$$

où $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{r},t)$ est la densité d'impulsion du champ (voir problème précédent).

15.11. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde sont solutions de l'équation stationnaire de Klein-Gordon pour une particule dans un champ magnétique

$$\left\{c^2\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right\}\Psi = \varepsilon^2\Psi \tag{1}$$

(e est la charge de la particule, $\mathbf{B} = \text{rot}\,\mathbf{A}$). Cette équation peut être obtenue à partir de l'équation de Schrödinger non relativiste par substitution de $(\varepsilon^2 - m^2c^4)/2mc^2$ à E

$$\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2\Psi = E\Psi. \tag{2}$$

En utilisant le résultat connu de la solution de l'équation (2) pour un champ magnétique homogène (voir 6.4 et 6.6 du Tome I où la solution a été obtenue pour différentes jauges du potentiel vecteur), on obtient

$$\varepsilon^2_{p_z n} = m^2c^4 + p_z^2c^2 + 2mc^2\hbar\omega(n+1/2), \qquad n = 0,1,\ldots, \qquad \omega = |e|B_0/mc > 0,$$

d'où

$$\varepsilon_{p_z n} = \pm\sqrt{m^2c^4 + p_z^2c^2 + 2mc^2\hbar\omega(n+1/2)}. \tag{3}$$

L'interprétation de deux valeurs de $\varepsilon_{p_z n}$ qui ne diffèrent que par leur signe est identique à celle faite pour le cas de la particule libre. L'une, $\varepsilon_{p_z n} > mc^2$, représente les niveaux d'énergie de la particule (dont la charge est e), tandis que l'autre, $\varepsilon_{p_z n} < -mc^2$, correspond à l'antiparticule (de charge $-e$), l'énergie de l'antiparticule étant $(-\varepsilon) > mc^2$. Les spectres d'énergie de la particule et de l'antiparticule sont les mêmes (ce fait est évident a priori, car l'expression (3) ne dépend pas du signe de e ; or laquelle des deux particules, de charge $+e$ ou $-e$, est considérée comme particule et l'autre comme antiparticule est une question de convention).

Il s'ensuit de la formule (3), comme dans le cas non relativiste, que le spectre d'énergie du mouvement transversal est discret ; toutefois la distance entre les niveaux voisins dépend maintenant de la composante longitudinale de l'impulsion, les niveaux n'étant plus équidistants.

15.12. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes des états stationnaires sont solutions de l'équation

$$[-\hbar^2 c^2 \Delta + 2mc^2 U(r)]\Psi = (\varepsilon^2 - m^2 c^4)\Psi, \tag{1}$$

qui est l'équation de Schrödinger habituelle dans laquelle l'énergie E est remplacée par $(\varepsilon^2 - m^2 c^4)/2mc^2$.

Pour les états avec le moment cinétique $l = 0$, la fonction d'onde a une symétrie sphérique. En procédant à la substitution de la fonction $R(r) = r\Psi(r)$, l'équation (1) devient

$$-\frac{d^2}{dr^2}R + \frac{2m}{\hbar^2}U(r)R = \frac{\varepsilon^2 - m^2 c^4}{\hbar^2 c^2}R, \tag{2}$$

La solution de l'équation (2) pour le potentiel considéré $U(r)$ avec $(\varepsilon^2 - m^2 c^4) < 0$ est de la forme $(R(0) = 0)$

$$R(r) = \begin{cases} A \sin \sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - \kappa^2}\, r, & r < a, \\ B\mathrm{e}^{-\kappa r}, & r > a, \end{cases}$$

où

$$\kappa = \sqrt{(m^2 c^4 - \varepsilon^2)/\hbar^2 c^2} > 0, \tag{3}$$

(dans le domaine d'énergies $\varepsilon^2 > m^2 c^4$, le spectre est continu et, dans un état stationnaire, la particule n'est pas localisée dans un domaine limité de l'espace).

La condition de continuité pour la fonction R et sa dérivée au point $r = a$ donne une équation transcendante

$$\tan \sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - \kappa_n^2 a^2} = -\frac{1}{\kappa_n a}\sqrt{\frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} - \kappa_n^2 a^2}, \tag{4}$$

définissant le spectre d'énergie pour les états s liés.

Les principales particularités du spectre apparaissent sans peine si l'on considère la relation de ce problème avec celui des niveaux du spectre discret d'une particule non relativiste dans un puits de potentiel sphérique rectangulaire :

1) dans un puits d'une faible profondeur, il n'y a pas d'états liés et ces derniers n'apparaissent que si $U_0 a^2 > \pi^2 \hbar^2 / 8m$;
2) si la profondeur du puits (en fait le paramètre $U_0 a^2$) augmente, de nouveaux états liés apparaissent, tandis que pour les niveaux déjà existants la valeur de $(m^2c^4 - \varepsilon_n^2)$ augmente (traduisant l'accroissement de $|E_n|$ avec la profondeur du puits dans le cas non relativiste), c'est-à-dire que ε_n^2 diminue si la profondeur du puits augmente ;
3) pour une certaine valeur critique des paramètres du puits, l'énergie (plus précisément ε_0^2) du niveau le plus bas prend la valeur $\varepsilon_0^2 = 0$; en posant dans (3) et (4) $\varepsilon_{n=0}^2 = 0$, on obtient l'équation déterminant les paramètres critiques :

$$\tan\left\{\frac{mca}{\hbar}\sqrt{\frac{2U_{0\mathrm{cr}}}{mc^2} - 1}\right\} = -\sqrt{\frac{2U_{0\mathrm{cr}}}{mc^2} - 1}, \tag{5}$$

D'après (5), la valeur $U_{0\mathrm{cr}}$ dépend de la largeur du puits a, mais en tout cas $U_{0\mathrm{cr}} > mc^2/2$. Dans les cas limites :

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad a \gg \hbar/mc : U_{0\mathrm{cr}} \approx \frac{mc^2}{2} + \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \\ &\text{b)} \quad a \ll \hbar/mc : U_{0\mathrm{cr}} \approx mc^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{8m^2a^2c^2} \gg mc^2 \end{aligned} \tag{6}$$

(les expressions (6) déterminent la plus petite racine $U_{0\mathrm{cr}}$ de l'équation (5) ; quant aux autres racines, elles correspondent aux zéros de ε_n^2 pour $n \geq 1$).

Si les paramètres du puits dépassent les valeurs critiques, la solution formelle de l'équation (4) donne, évidemment, $\varepsilon_0^2 < 0$, c'est-à-dire l'énergie ε_0 devient une grandeur imaginaire témoignant ainsi de l'instabilité de la procédure même du problème.

Pour comprendre les causes de l'apparition de cette instabilité, il faut prendre en compte le fait suivant. La solution du problème permet de trouver la grandeur ε_n^2, de sorte que $\varepsilon_n = \pm\sqrt{\varepsilon_n^2}$. Les deux valeurs de l'énergie différant par le signe doivent être interprétées de la même façon que dans le cas de la particule libre : l'une d'elles, $\varepsilon_n > 0$, donne les niveaux d'énergie de la particule, l'autre, $\varepsilon_n < 0$, correspond à l'antiparticule dont l'énergie vaut $-\varepsilon_n > 0$. En effet, avec la diminution de la profondeur du puits tous les niveaux $\varepsilon_n > 0$ montent vers le haut et passent en un continuum $\varepsilon \geq mc^2$, tandis que les niveaux $\varepsilon_n < 0$ rejoignent le continuum $\varepsilon < -mc^2$. Donc, le spectre d'énergie de la particule et le spectre de l'antiparticule sont les mêmes dans le potentiel, c'est-à-dire que le potentiel agit sur ces dernières de la même façon (contrairement, par exemple, au champ électrostatique ; comparer à 15.4).

Pour les valeurs critiques des paramètres du puits, l'énergie de l'état fondamental de la particule et de l'antiparticule prend la valeur $\varepsilon_0 = 0$. Il est alors possible de créer spontanément des paires "particule+ antiparticule" (ou de particules solitaires si elles sont neutres), et ce fait justement est la raison de l'apparition d'instabilité dans la solution du problème à une seule particule, mentionnée plus haut.

Ainsi, pour une particule relativiste dans un champ suffisamment intense, le traitement du problème à une particule n'a plus de sens physique. La situation est la même pour des champs peu intenses s'ils varient très rapidement dans le temps, de sorte que les composantes de Fourier du "potentiel" $U(\omega)$, correspondant aux pulsations $\omega \gtrsim mc^2/\hbar$ sont très différentes de zéro. De façon formelle, la non validité

de l'approche à une particule est liée ici à l'impossibilité de "séparer" les solutions de l'équation d'onde en parties indépendantes de pulsations positives et négatives (à cause des transitions entre elles). Rappelons que cette séparation est indispensable pour pouvoir interpréter des solutions de l'équation d'onde relativiste.

15.13. Les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde correspondantes des états stationnaires sont solutions de l'équation de Klein-Gordon

$$\{-\hbar^2c^2\Delta + m^2c^4\}\Psi = \left(\varepsilon + \frac{Ze^2}{r}\right)^2 \Psi. \tag{1}$$

Compte tenu de la symétrie sphérique du problème, on recherche la solution de l'équation sous la forme $\Psi(r) = R_l(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Il s'ensuit de (1)

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2[(l+1/2)^2 - 1/4]}{2mr^2} - \frac{Ze^2\varepsilon}{mc^2r} - \frac{Z^2e^4}{2mc^2r^2}\right\} R = \frac{\varepsilon^2 - m^2c^4}{2mc^2}R. \tag{2}$$

L'équation (2) a une forme analogue à l'équation de Schrödinger pour la partie radiale $\widetilde{R}$ de la fonction d'onde d'un état stationnaire ($\Psi_{n_r lm} = \widetilde{R}_{n_r l}Y_{lm}$) d'un atome hydrogénoïde en théorie non relativiste :

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2[(l+1/2)^2 - 1/4]}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}\right\} \widetilde{R}_{n_r l} = E_{n_r l}\widetilde{R}_{n_r l}$$

que l'on obtient après des substitutions formelles ($\alpha = e^2/\hbar c$)

$$Z \to \frac{Z\varepsilon}{mc^2}, \qquad (l+1/2)^2 \to (l+1/2)^2 - Z^2\alpha^2, \qquad E_{n_r l} \to \frac{\varepsilon^2 - m^2c^4}{2mc^2}. \tag{3}$$

En utilisant l'expression connue des niveaux d'énergie de l'atome hydrogénoïde non relativiste

$$E_{n_r l} \equiv E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2n^2} = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2(n_r + 1/2 + l + 1/2)^2} \tag{4}$$

et en y effectuant les substitutions (3), on obtient

$$(\varepsilon^2 - m^2c^4)[n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - Z^2\alpha^2}] = -Z^2\alpha^2\varepsilon^2,$$

d'où

$$\varepsilon_{n_r l} = mc^2\left\{1 - \frac{Z^2\alpha^2}{Z^2\alpha^2 + \left[n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - Z^2\alpha^2}\right]^2}\right\}^{1/2} \tag{5}$$

(de façon formelle, dans le second membre de (5) il aurait fallu introduire deux signes "$\pm$". Mais la solution avec le signe "$-$" n'a pas d'interprétation physique : la formule (4) ne change pas si l'on passe de Z à $-Z$, mais elle ne correspond pas à un état

lié car le potentiel devient répulsif et les états du spectre discret n'existent pas ; de même le potentiel coulombien de (2) pour $\varepsilon < 0$ est aussi répulsif).

Pour $Z\alpha \ll 1$, il s'ensuit de (5)

$$E_{n,l} \equiv \varepsilon_{n,l} - mc^2 \approx -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2} - (Z\alpha)^2 \frac{m(Ze^2)^2}{\hbar^2 n^3}\left(\frac{1}{2l+1} - \frac{3}{8n}\right). \tag{6}$$

Le second terme de (6) est une correction relativiste au résultat de la théorie non relativiste. Comme on le voit, la prise en compte d'effets relativistes lève la dégénérescence "accidentelle" des niveaux dans le champ coulombien.

Pour $Z\alpha > 1/2$, la formule (5) fournit des énergies complexes (d'abord pour les états s et, ensuite, pour les autres valeurs de l), ce qui est le signe d'instabilité dans ce problème. Ce fait s'explique facilement si l'on remarque que le terme $-Z^2e^4/2mc^2r^2$ figurant dans l'équation (2) peut être considéré en langage de la théorie non relativiste comme une partie d'un potentiel attractif. Pour $Z\alpha > 1/2$, cette attraction devient si forte qu'il se produit une chute sur le centre (voir [1]). Cependant, lorsqu'on prend en compte la taille finie du noyau, cette instabilité liée à la chute sur le centre disparaît[4].

15.14. En écrivant la fonction d'onde $\widetilde{\Psi}(\mathbf{r}, t)$, satisfaisant à l'équation de Klein-Gordon, sous la forme $\widetilde{\Psi} = \exp\left(-\frac{imc^2 t}{\hbar}\right)\Psi$, la fonction Ψ est solution de l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi - \frac{\hbar^2}{2mc^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi. \tag{1}$$

Le cofacteur exponentiel dans la fonction d'onde correspond à la représentation de l'énergie de la particule sous la forme $\varepsilon = mc^2 + E$. Pour les états stationnaires

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_E}{\partial t} = E\Psi_E, \qquad \frac{\hbar^2}{2mc^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi_E = -\frac{E^2}{2mc^2}\Psi_E.$$

Etant donné que la solution générale est une superposition de fonctions d'onde Ψ_E et, pour les particules non relativistes $E \ll mc^2$, le deuxième terme du second membre de l'équation (1) est petit par rapport au premier (pour éviter des malentendus, soulignons que la solution considérée de l'équation de Klein-Gordon est une superposition de solutions particulières correspondant à $\varepsilon \geq mc^2$). En négligeant ce terme petit, on obtient l'équation de Schrödinger d'une particule libre à l'approximation d'ordre zéro

$$\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}\Psi_0 = i\hbar\frac{\partial\Psi_0}{\partial t}. \tag{2}$$

4 Toutefois, pour un noyau de rayon fini R, l'augmentation de sa charge conduit, pour une certaine valeur Z_{cr} (dépendant du rayon R) à l'apparition d'une nouvelle instabilité dans le système étudié dont la cause physique est analogue à celle analysée au problème précédent : dans un champ électrostatique suffisamment intense (comme au sein d'un champ scalaire) il devient énergétiquement possible de créer spontanément des paires "particule + antiparticule", de sorte que le problème à une seule particule perd son sens physique.

Pour déterminer la correction relativiste à l'équation (2), représentons la fonction d'onde Ψ, solution de (1), sous la forme $\Psi = \Psi_0 + \Psi_1$ où $|\Psi_1| \ll |\Psi_0|$ et écrivons l'équation (1) de la façon suivante :

$$\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}(\Psi_0 + \Psi_1) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\Psi_0 + \Psi_1) = -\frac{\hbar^2}{2mc^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\Psi_0 + \Psi_1). \tag{3}$$

Le second membre de cette équation peut être transformé avec la précision exigée en

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\Psi_0 + \Psi_1) \approx \frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi_0 = -\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}\right)^2\Psi_0 \approx -\frac{1}{4m^2\hbar^2}\widehat{\mathbf{p}}^4(\Psi_0 + \Psi_1).$$

Compte tenu de cette équation, l'équation (3) prend la forme

$$\left(\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}\right)\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi. \tag{4}$$

L'équation (4) a la forme d'une équation de Schrödinger avec l'hamiltonien

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}$$

qui est une généralisation quantique naturelle de la formule

$$H = \sqrt{\widehat{\mathbf{p}}^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \approx \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{\widehat{\mathbf{p}}^4}{8m^3c^2}$$

de la théorie classique.

15.15. L'équation stationnaire de Klein-Gordon

$$\left[c^2\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^4\right]\Psi = (\varepsilon - e\varphi)^2\Psi$$

pour $|e\varphi| \ll mc^2$ et $|E| \ll mc^2$ ($\varepsilon = mc^2 + E$) peut être écrite sous la forme

$$\left[\frac{\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m} + e\varphi - E\right]\Psi = \frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2}\Psi \tag{1}$$

où le second membre est beaucoup plus petit que chacun des termes du premier membre. En négligeant le second membre, on obtient à l'approximation zéro l'équation de Schrödinger de la théorie non relativiste.

Pour trouver la correction relativiste à l'équation de Schrödinger représentons dans (1) la fonction d'onde sous la forme $\Psi = \Psi_0 + \Psi_1$ où Ψ_0 est la solution de l'équation de Schrödinger et Ψ_1 décrit les effets relativistes, de sorte que $|\Psi_1| \ll |\Psi_0|$. Dans ce cas, le second membre de l'équation (1) peut être transformé avec la précision cherchée en

$$\frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2}(\Psi_0 + \Psi_1) \approx \frac{(E - e\varphi)^2}{2mc^2}\Psi_0 = \frac{1}{2mc^2}\left[\frac{\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m}\right]^2\Psi_0$$

$$\approx \frac{\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^4}{8m^3c^2}(\Psi_0 + \Psi_1)$$

Ainsi l'équation (1) devient

$$\left\{\frac{\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m}-\frac{\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^4}{8m^3c^2}+e\varphi\right\}\Psi=E\Psi.$$

Autrement dit, c'est une équation aux fonctions propres et valeurs propres de l'hamiltonien $\widehat{H}$ qui est la généralisation quantique de l'expression

$$H=\sqrt{\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2c^2+m^2c^4}+e\varphi-mc^2\approx\frac{\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2}{2m}-\frac{\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^4}{8m^3c^2}+e\varphi$$

de la théorie classique.

15.16. Limitons-nous au cas des faibles énergies, c'est-à-dire $\varepsilon=mc^2+E$, où $|E|\ll mc^2$. L'équation stationnaire de Klein-Gordon

$$\{-\hbar^2c^2\Delta+m^2c^4\}\Psi=(\varepsilon-e\varphi)^2\Psi.$$

peut alors être écrite sous la forme

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+e\varphi-\frac{(e\varphi)^2}{2mc^2}+\frac{E}{mc^2}e\varphi-\frac{E^2}{2mc^2}\right\}\Psi=E\Psi,$$

analogue à l'équation de Schrödinger avec le potentiel effectif

$$U_{\text{eff}}=e\varphi+\frac{eE}{mc^2}\varphi-\frac{(e\varphi)^2}{2mc^2}-\frac{E^2}{2mc^2}\approx e\varphi-\frac{(e\varphi)^2}{2mc^2}.$$

Si $|e\varphi|>2mc^2$, alors dans le domaine correspondant de l'espace $U_{\text{eff}}<0$, c'est-à-dire que l'interaction de la particule et du champ est attractive quel que soit le signe de sa charge.

15.17. Comme pour les particules non relativistes, on a $d\sigma=|f|^2d\Omega$, où f est l'amplitude de diffusion définie par la forme asymptotique ($r\to\infty$) de la solution $\Psi^{(+)}_{\mathbf{p}_0}$ de l'équation stationnaire de Klein-Gordon

$$\left\{-\frac{h^2}{2m}\Delta+\frac{Zee_1\varepsilon}{mc^2r}-\frac{(Zee_1)^2}{2mc^2r^2}\right\}\Psi^{(+)}_{\mathbf{p}_0}=\frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}\Psi^{(+)}_{\mathbf{p}_0},$$
$$\Psi^{(+)}_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r})\underset{r\to\infty}{\approx}\exp\left(i\frac{\mathbf{p}_0\cdot\mathbf{r}}{h}\right)+\frac{f}{r}e^{ikr},\qquad\left(\varepsilon=\sqrt{\mathbf{p}_0^2c^2+m^2c^4}\right).\tag{1}$$

L'équation est écrite sous la forme d'une équation de Schrödinger avec le potentiel effectif (dépendant de l'énergie totale ε de la particule)

$$U_{\text{eff}}=\frac{Zee_1\varepsilon}{mc^2r}-\frac{(Zee_1)^2}{2mc^2r^2}.\tag{2}$$

Ainsi de nombreux résultats de la théorie de la diffusion des particules non relativistes se transposent directement au cas relativiste. En particulier, cela est vrai

pour la détermination de l'amplitude de diffusion par le calcul des perturbations ; l'approximation de Born fournit l'expression

$$f_{\text{B}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U_{\text{eff}} \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \qquad \left(\mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}-\mathbf{p}_0}{\hbar}, q = \frac{2p_0}{\hbar}\sin\frac{\theta}{2}\right). \tag{3}$$

Une certaine précaution doit être prise en établissant les conditions de validité de l'approximation de Born : l'analogie mentionnée plus haut entre les équations (1) et l'équation de Schrödinger utilise comme caractéristique des particules libres (pour $r \to \infty$) la grandeur d'impulsion (et non pas de vitesse ou d'énergie !). De sorte que les conditions connues de validité de l'approximation de Born en théorie non relativiste se généralisent au cas relativiste de la façon suivante :

$$|U_{\text{eff}}| \ll \frac{\hbar p}{ma}, \qquad |U_{\text{eff}}| \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}. \tag{4}$$

Pour le premier terme de l'expression (2) la première des conditions (4) exige que soit satisfaite l'inégalité

$$\left|\frac{Zee_1\varepsilon}{mc^2 r}\right| \ll \frac{\hbar p}{ma}, \quad \text{ou} \quad \frac{Ze^2}{\hbar c} \ll \frac{v}{c} \quad (v\varepsilon = pc^2, |e_1| \sim e) \tag{5}$$

(autrement dit, le calcul des perturbations n'est pas valable pour des valeurs de Z suffisamment grandes, il faut que $Z \ll 137$).

La validité du calcul des perturbations pour le second terme de (2) est limitée par la deuxième inégalité de (4) exigeant que

$$\frac{(Zee_1)^2}{mc^2r^2} \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad \text{ou} \quad \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 \ll 1 \tag{6}$$

C'est une condition plus faible que la précédente (5).

On voit que dans le calcul de l'amplitude de diffusion suivant les formules (2) et (3) on peut négliger le second terme de (2). En effet, d'après (5) et (6), le paramètre du calcul des perturbations utilisé pour le développement est $Z\alpha$. Dans ce cas, le second terme de (2) donne une contribution à l'amplitude de diffusion de l'ordre de $(Z\alpha)^2$, c'est-à-dire identique à la contribution du premier terme au second ordre du calcul des perturbations (ce dernier n'étant pas calculé, la prise en compte du second terme constitue donc un excès de précision).

Compte tenu de ce qui vient d'être dit, ainsi que de la valeur de l'intégrale

$$\int \frac{1}{r}\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r = \frac{4\pi}{q^2},$$

on obtient l'amplitude et la section efficace différentielle de diffusion :

$$f_{\text{B}} = -\frac{2Zee_1\varepsilon}{\hbar^2c^2q^2}, \qquad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \approx \left(\frac{Zee_1}{2v_0p_0}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}.$$

15.18. L'amplitude de diffusion d'une particule chargée sans spin dans un champ électrostatique $\varphi(r)$, dans l'approximation de Born, a pour expression

$$f_{\text{B}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U_{\text{eff}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r, \tag{1}$$

où

$$U_{\text{eff}} = \frac{e\varepsilon}{mc^2}\varphi(r) - \frac{(e\varphi(r))^2}{2mc^2} \tag{2}$$

(pour la discussion générale des formules (1) et (2) voir le problème précédent).

Dans le cas ultra-relativiste $\varepsilon \approx pc \to \infty$, on peut négliger le second terme de (2), et alors

$$f_{\text{B}} \approx -\frac{ep}{2\pi\hbar^2 c}\int \varphi(r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \equiv -\frac{ep}{2\pi\hbar^2 c}\widetilde{\varphi}(q). \tag{3}$$

Donc,

$$\sigma = \int |f|^2 d\Omega = \frac{e^2}{4\pi\hbar^2 c^2}\int_0^{4p^2/\hbar^2} |\widetilde{\varphi}(q)|^2 dq^2 \tag{4}$$

(rappelons que $d\Omega = -2\pi d\cos\theta = \frac{\pi\hbar^2}{p^2}dq^2$).

Pour $p \to \infty$, la limite supérieure dans l'intégrale (3) peut être prise égale à l'infini (intégrale convergente) et la section efficace de diffusion $\sigma(\varepsilon)$ pour $\varepsilon \to \infty$ tend vers une constante (en théorie non relativiste $\sigma \propto E^{-1} \to 0$ pour $E \to \infty$; voir 13.9).

La validité de l'approximation de Born dans ce problème est définie par la première des expressions (4) du problème précédent et exige $|e\varphi_0| \ll \hbar c/a$ (φ_0 et a sont la grandeur caractéristique et le rayon d'action du potentiel).

Notons que la validité du résultat obtenu implique que le potentiel, pour $r \to \infty$, doit décroître plus vite que r^{-2} ; sinon, la section efficace de diffusion devient infinie, comme dans la théorie non relativiste, à cause de la divergence de l'intégrale dans (3) à la limite inférieure.

15.19. L'équation d'onde stationnaire pour une particule relativiste sans spin dans un potentiel constant peut être écrite sous la forme

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right\}\Psi = \frac{\mathbf{p}_0^2}{2m}\Psi \qquad (c^2\mathbf{p}_0^2 = \varepsilon^2 - m^2c^4),$$

qui est identique à l'équation de Schrödinger non relativiste.

Vu que l'interprétation de la fonction d'onde d'une particule libre sous forme d'onde plane est identique dans les théories relativiste et non relativiste, l'approche générale du problème de diffusion en théorie non relativiste, se basant sur la résolution de l'équation d'onde stationnaire possédant la forme asymptotique exigée à des grandes

distances ("onde plane + onde divergente"), se transpose directement au cas relativiste. L'amplitude de diffusion, à l'approximation de Born, est donnée par la même expression que dans le cas non relativiste :

$$f_{\text{B}} = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int U(r)\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}dV \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\widetilde{U}(q).$$

Donc, la section efficace de diffusion (comparer à 13.6)

$$\sigma = \frac{m^2}{4\pi\hbar^2 p_0^2}\int_0^{4p_0^2/\hbar^2} |\widetilde{U}(q)|^2 dq^2$$

pour $\varepsilon \to \infty$ est définie par l'expression ($p_0 \approx \varepsilon/c$)

$$\sigma(\varepsilon) \approx \frac{m^2c^2}{4\pi\hbar^2\varepsilon^2}\int_0^{\infty} |\widetilde{U}(q)|^2 dq^2 \propto \frac{1}{\varepsilon^2}.$$

La condition de validité de l'approximation de Born est $|U_0| \ll \hbar p_0/ma$, où U_0 et a sont des grandeurs caractéristiques du "potentiel" et de son rayon.

15.20. L'hamiltonien de la particule est $\widehat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta$. Pour trouver les commutateurs, il est utile de tenir compte du résultat du problème 1.9 du Tome I, ainsi que du fait que deux opérateurs, dont l'un ($\widehat{\mathbf{p}}$, $\widehat{\mathbf{l}}$, etc.) agit sur les variables spatiales et l'autre ($\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\Sigma}$, etc.) sur les variables de spin, commutent entre eux.

1) $[\widehat{\mathbf{p}}, \widehat{H}] = 0$;

2) $[\widehat{l}_i, \widehat{H}] = [\widehat{l}_i, c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}}] = c\alpha_k[\widehat{l}_i, \widehat{p}_k] = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k\widehat{p}_l \neq 0$;

3) $[\widehat{\mathbf{l}}^2, \widehat{H}] = [\widehat{l}_i\widehat{l}_i, \widehat{H}] = \widehat{l}_i[\widehat{l}_i, \widehat{H}] + [\widehat{l}_i, \widehat{H}]\widehat{l}_i = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k(\widehat{l}_i\widehat{p}_l + \widehat{p}_l\widehat{l}_i) \neq 0$;

4) comme $[\Sigma_i, \alpha_k] = \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}$
$= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i\sigma_k - \sigma_k\sigma_i \\ \sigma_i\sigma_k - \sigma_k\sigma_i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l \\ 2i\varepsilon_{ikl}\sigma_l & 0 \end{pmatrix} = 2i\varepsilon_{ikl}\alpha_l,$
et $[\Sigma_i, \beta] = 0$
on a $[\widehat{s}_i, \widehat{H}] = \frac{c}{2}[\Sigma_i, \alpha_k]\widehat{p}_k = ic\varepsilon_{ikl}\alpha_l\widehat{p}_k \equiv -ic\varepsilon_{ikl}\alpha_k\widehat{p}_l$;

5) $\boldsymbol{\Sigma}^2 = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}^2 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = 3,$
$\widehat{\mathbf{s}}^2 = \frac{1}{4}\boldsymbol{\Sigma}^2 = \frac{3}{4}$ et commute avec $\widehat{H}$.

En utilisant des commutateurs 1), 2), 4), on trouve sans peine les commutateurs 6), 7), 8) :

6) $[\widehat{j}_i, \widehat{H}] = 0$;

7) $[\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{H}] = [\hat{j}_i \hat{j}_i, \hat{H}] = 0$;

8) $[\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = [\Sigma_i, \hat{H}]\hat{p}_i + \Sigma_i[\hat{p}_i, \hat{H}] = 2ic\varepsilon_{ikl}\alpha_l \hat{p}_k \hat{p}_i = 0$;

9) $\hat{R}\hat{\mathbf{p}} = -\hat{\mathbf{p}}\hat{R}$, on a $[\hat{R}, \hat{H}] = [\hat{R}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = -2c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}\hat{R} \neq 0$;

10) $[\hat{P}, mc^2\beta] = 0$, $[\hat{P}, \hat{H}] = [\beta\hat{R}, c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}] = c\beta\hat{R}\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}}\beta\hat{R} = 0$;

11) $[\gamma_5, \hat{H}] = 2mc^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ et pour une particule de masse $m = 0$ ce commutateur devient nul.

Dans le cas non relativiste, les neuf premiers opérateurs commutent avec l'hamiltonien de la particule libre $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$ (le dixième opérateur est la généralisation de l'opérateur réflexion au cas relativiste d'une particule de spin $s = 1/2$).

La commutativité de l'opérateur $\hat{\mathbf{p}}$ avec $\hat{H}$ traduit l'homogénéité de l'espace, de même que la commutativité de $\hat{\mathbf{j}}$ avec $\hat{H}$ traduit son isotropie. Séparément, les opérateurs $\hat{\mathbf{s}}$ et $\hat{\mathbf{l}}$ ne commutent pas avec $\hat{H}$. Cela signifie que, dans le cas relativiste, il existe une certaine corrélation entre l'état de spin possible de la particule et son mouvement orbital. La commutativité de $\hat{P}$ avec $\hat{H}$ est la manifestation de l'indiscernabilité dans l'espace des directions de "droite" et de "gauche".

15.21. Etant donné la commutativité de l'hamiltonien $\hat{H} = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta)$ avec $\hat{\mathbf{p}}$, il existe des états dans lesquels l'énergie et l'impulsion de la particule possèdent simultanément des valeurs déterminées. La fonction d'onde de ces états est

$$\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon}(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{p}, \varepsilon) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon t)\right]. \tag{1}$$

L'équation stationnaire de Dirac est de la forme

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + mc^2\beta)u(\mathbf{p}, \varepsilon) = \varepsilon u(\mathbf{p}, \varepsilon)$$

ou pour des spineurs à deux éléments

$$u(\mathbf{p}, \varepsilon) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \qquad \begin{aligned} c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi + mc^2\varphi &= \varepsilon\varphi \\ c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi - mc^2\chi &= \varepsilon\chi \end{aligned} \tag{2}$$

La seconde des équations (2) donne

$$\chi = \frac{c}{\varepsilon + mc^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi, \tag{3}$$

tandis que la première, compte tenu de (3) et de l'égalité $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$ donne

$$\frac{c^2\mathbf{p}^2}{\varepsilon + mc^2}\varphi = (\varepsilon - mc^2)\varphi,$$

d'où $\varepsilon^2 - m^2c^4 = \mathbf{p}^2c^2$, $\varepsilon = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$ (sinon, on n'a qu'une solution triviale $\chi = \varphi \equiv 0$). En outre, le spineur φ reste indéterminé et peut être choisi de façon

arbitraire (et ceci de deux manières différentes pour chacune des deux valeurs de ε). Donc, pour une impulsion donnée $\mathbf{p}$, il existe quatre solutions indépendantes de l'équation de Dirac de la forme (1) pour lesquelles les bispineurs $u(\mathbf{p}, \varepsilon)$ sont égaux à

$$u(\mathbf{p}, \varepsilon = E) = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + mc^2}\varphi_1 \end{pmatrix}, \qquad u(\mathbf{p}, \varepsilon = -E) = \begin{pmatrix} \varphi_2 \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{-E + mc^2}\varphi_2 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

où $E = +\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ (soulignons que le second des bispineurs (4) correspond à une énergie négative de la particule).

Comme l'équation de Klein-Gordon, l'équation de Dirac possède des solutions correspondant à une énergie négative de la particule. L'interprétation de ces solutions est identique à celle de l'équation de Klein-Gordon : la fonction obtenue par action de l'opérateur de conjugaison de charge sur la fonction d'onde de la particule avec une énergie négative est la fonction d'onde de l'antiparticule (voir 15.27).

Pour établir la forme du spineur φ, (et la fonction d'onde (1)) et obtenir un système complet des fonctions, utilisons la commutativité de l'opérateur hermitien $\widehat{\Lambda} = \boldsymbol{\Sigma} \cdot \widehat{\mathbf{p}}$ avec les opérateurs $\widehat{H}$ et $\widehat{\mathbf{p}}$. De l'équation $\widehat{\Lambda}\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda} = \Lambda\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda}$, où

$$\Psi_{\mathbf{p}\varepsilon\Lambda} = u(\mathbf{p}, \varepsilon, \Lambda) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon t)\right], \qquad u(\mathbf{p}, \varepsilon, \Lambda) = \begin{pmatrix} \varphi_\Lambda \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\varphi_\Lambda \end{pmatrix},$$

il s'ensuit

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi_\Lambda = \Lambda\varphi_\Lambda, \qquad \text{ou} \qquad \left(\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \cdot \mathbf{n}\right)\varphi_\Lambda = \lambda\varphi_\Lambda, \qquad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}, \qquad \Lambda = 2\lambda|\mathbf{p}|. \tag{5}$$

La solution de l'équation (5) est bien connue dans la théorie non relativiste du spin (voir 5.12, 5.14 et 5.36 du Tome I). Les états de la particule avec une valeur déterminée λ (les valeurs propres de λ sont $\pm 1/2$) s'appellent les états hélicoïdaux.

15.22. Introduisons dans les expressions connues

$$\mathbf{j} = c\Psi^*\boldsymbol{\alpha}\Psi \equiv ic\overline{\Psi}\boldsymbol{\gamma}\Psi, \qquad \rho = \Psi^*\Psi \equiv \overline{\Psi}\beta\Psi \tag{1}$$

la forme la plus générale de la fonction d'onde d'état d'une particule de Dirac avec l'impulsion $\mathbf{p}$ déterminée (et avec l'énergie $\varepsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} \geq mc^2$)

$$\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon}(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{p}, \varepsilon) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon t)\right], \tag{2}$$

où le bispineur u vaut (voir le problème précédent)

$$u = N\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = N\begin{pmatrix} \varphi \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\varphi \end{pmatrix}, \qquad N = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}}. \tag{3}$$

La valeur de N est choisie pour que la norme du bispineur u coïncide avec celle du spineur φ, c'est-à-dire $u^*u = \varphi^*\varphi$. Rappelons que

$$u^* = N(\varphi^*, \chi^*) = N\left(\varphi^*, \varphi^*\frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\right), \qquad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2,$$

on obtient

$$\rho = \Psi^* \Psi = u^* u = \varphi^* \varphi, \tag{4}$$

$$\mathbf{j} = c\Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi = c u^* \boldsymbol{\alpha} u = cN^2 \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}$$

$$= cN^2 \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} \frac{c\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{\varepsilon + mc^2} \varphi \\ \boldsymbol{\sigma} \varphi \end{pmatrix} = \frac{c^2 N^2}{\varepsilon + mc^2} \varphi^* [\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \boldsymbol{\sigma}] \varphi. \tag{5}$$

L'expression (5) peut être simplifiée si l'on utilise la relation $\sigma_i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\sigma_i = (\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i) p_k = 2\delta_{ik} p_k = 2p_i$, de sorte que

$$\mathbf{j} = \frac{2c^2 N^2 \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi^* \varphi = \frac{c^2 \mathbf{p}}{\varepsilon} \varphi^* \varphi = \mathbf{v} \varphi^* \varphi = \rho \mathbf{v}, \tag{6}$$

où $\mathbf{v}$ est la vitesse d'une particule relativiste classique d'impulsion $\mathbf{p}$.

15.23. La fonction d'onde de l'état considéré est de la forme

$$\Psi = u(\mathbf{p}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon t) \right],$$

où le bispineur $u(\mathbf{p})$ vaut

$$u(\mathbf{p}) = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = N \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix}, \qquad N = \sqrt{\frac{\varepsilon + mc^2}{2\varepsilon}}.$$

(voir 15.21 ; on a utilisé la norme $u^* u = \varphi^* \varphi = 1$).

La valeur moyenne du vecteur de spin (avec $\mathbf{p} = (0, 0, p)$) a pour expression

$$\begin{aligned} \overline{\mathbf{s}} &= \frac{\frac{1}{2} u^* \boldsymbol{\Sigma} u}{u^* u} = \frac{N^2}{2} \left(\varphi^*, \varphi^* \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi \end{pmatrix} \\ &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \boldsymbol{\sigma} + \frac{c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \right\} \varphi = \\ &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \boldsymbol{\sigma} + \frac{p^2 c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \sigma_z \boldsymbol{\sigma} \sigma_z \right\} \varphi. \end{aligned} \tag{1}$$

Vu que $\sigma_z^2 = 1$, $\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y$ et $\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x$ on obtient, selon (1),

$$\begin{aligned} \overline{s_x} &= \frac{N^2}{2} \varphi^* \left\{ \sigma_x - \frac{p^2 c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \sigma_x \right\} \varphi = \frac{mc^2}{2\varepsilon} \varphi^* \sigma_x \varphi, \\ \overline{s_y} &= \frac{mc^2}{2\varepsilon} \varphi^* \sigma_y \varphi, \qquad \overline{s_z} = \frac{1}{2} \varphi^* \sigma_z \varphi \end{aligned} \tag{2}$$

(en théorie non relativiste $\overline{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \varphi^* \boldsymbol{\sigma} \varphi$).

Selon (2), $|\overline{s_x}|, |\overline{s_y}| \leq mc^2/2\varepsilon$, de sorte que, dans un système ultra-relativiste, $\varepsilon \gg mc^2$ on a $\overline{s_x}, \overline{s_y} \to 0$, c'est-à-dire que le vecteur de spin moyen est dirigé suivant l'axe z qui est parallèle à l'impulsion de la particule (si, évidemment, $\varphi^* \sigma_z \varphi \neq 0$).

Les limites imposées aux valeurs $\overline{s_x}$ et $\overline{s_y}$ signifient que les états de spin possibles d'une particule dépendent de son impulsion. Ce fait est le corollaire direct de l'équation de Dirac et est lié à la noncommutativité des opérateurs de spin et de l'hamiltonien.

15.24. Pour la transformation unitaire étudiée on trouve ($\widehat{U}^\dagger = \widehat{U}$, $\widehat{U}^\dagger\widehat{U} = \widehat{U}\widehat{U}^\dagger = 1$)

$$\beta' = \widehat{U}\beta\widehat{U}^\dagger = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \widehat{U}\boldsymbol{\Sigma}\widehat{U}^\dagger = \boldsymbol{\Sigma},$$

$$\boldsymbol{\alpha}' = \widehat{U}\boldsymbol{\alpha}\widehat{U}^\dagger = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}.$$

De cette façon, les opérateurs de spin dans les représentations nouvelle et initiale sont de la même forme, tandis que l'équation de Dirac dans la nouvelle représentation

$$(c\boldsymbol{\alpha}'\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta')\Psi' = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi', \qquad \Psi' = \widehat{U}\Psi$$

écrite avec deux spineurs $\Psi' = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$, prend la forme

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\xi = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\xi + mc^2\eta, \qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\eta = -c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\eta + mc^2\xi.$$

15.25. Dans le système de référence K, où la particule est au repos et $\varepsilon = mc^2$, son état de spin est décrit par le bispineur $u(0) = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ 0 \end{pmatrix}$, où φ_0 est un spineur.

Dans le système K', en mouvement par rapport au système K avec la vitesse $-\mathbf{v}$, la particule possède une vitesse $\mathbf{v}$ et une impulsion $\mathbf{p} = m\mathbf{v}/\sqrt{1-(v/c)^2}$, tandis que son état de spin est décrit par le bispineur $u(\mathbf{p})$ qui s'exprime en fonction de $u(O)$ selon la formule connue de la transformation de Lorentz pour les bispineurs :

$$u(\mathbf{p}) \equiv u' = \widehat{S}u(0), \tag{1}$$

$$\widehat{S} = \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{n}\theta\right) = \operatorname{ch}\frac{\theta}{2} - \operatorname{sh}\frac{\theta}{2}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{n} \qquad (\operatorname{th}\theta = v/c), \tag{2}$$

$\mathbf{n} = -\mathbf{v}/v$ est le vecteur unitaire de la vitesse du système K' par rapport à K.

Utilisons les relations ($\operatorname{th}\theta = v/c$)

$$\operatorname{th}\frac{\theta}{2} = \frac{\operatorname{th}\theta}{1+\sqrt{1-\operatorname{th}^2\theta}} = \frac{v/c}{1+\sqrt{1-(v/c)^2}} = \frac{pc}{\varepsilon(p)+mc^2},$$

$$\operatorname{ch}\frac{\theta}{2} = \sqrt{\frac{1+\operatorname{ch}\theta}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{\sqrt{1-\operatorname{th}^2\theta}}\right)} = \sqrt{\frac{\varepsilon(p)+mc^2}{2mc^2}}$$

et, selon (1) et (2), on obtient

$$u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} (\operatorname{ch}\frac{\theta}{2})\,\varphi_0 \\ (\operatorname{sh}\frac{\theta}{2})\,\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{v}}{v}\varphi_0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{\varepsilon+mc^2}{2mc^2}}\begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon+mc^2}\varphi_0 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

L'expression (3) du bispineur $u(\mathbf{p})$ est en accord avec la solution générale de l'équation de Dirac trouvée dans 15.21. En ce sens, l'élément essentiel du problème est l'établissement du fait que le spineur φ dans le bispineur $u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ est le même dans tous les systèmes d'inertie (à la norme près) et vaut φ_0.

En utilisant la norme $\varphi_0^* \varphi_0 = 1$, on obtient le vecteur de spin moyen de la particule dans le système K', où son impulsion est $\mathbf{p}$:

$$\overline{\mathbf{s}}_{\mathbf{p}} = \frac{\frac{1}{2} u^* \boldsymbol{\Sigma} u}{u^* u} = \frac{\varepsilon + mc^2}{4\varepsilon} \varphi_0^* \left\{ \boldsymbol{\sigma} + \frac{c^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \right\} \varphi_0.$$

Sa relation avec le vecteur de spin moyen dans le système propre de la particule $\overline{\mathbf{s}}_0 = \frac{1}{2} \varphi_0^* \boldsymbol{\sigma} \varphi_0$ s'établit facilement si l'on choisit l'axe z le long du vecteur $\mathbf{p}$:

$$\overline{s}_{x,\mathbf{p}} = \frac{mc^2}{\varepsilon} \overline{s}_{x,0}, \qquad \overline{s}_{y,\mathbf{p}} = \frac{mc^2}{\varepsilon} \overline{s}_{y,0}, \qquad \overline{s}_{x,\mathbf{p}} = \overline{s}_{z,0} \tag{4}$$

(comparer à la solution du problème 15.23).

15.26. Étant donné que

$$\Psi_{\mathbf{p},\lambda} = u_\lambda(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \varepsilon t) \right],$$

$$u_\lambda(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi_\lambda \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \varphi_\lambda \end{pmatrix}, \qquad u_\lambda^* = \left(\varphi_\lambda^*, \varphi_\lambda^* \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2} \right),$$

on obtient

$$\Psi_{\lambda'}^* \Psi_\lambda = u_{\lambda'}^* u_\lambda = \varphi_{\lambda'}^* \left[1 + \frac{c^2 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2}{(\varepsilon + mc^2)^2} \right] \varphi_\lambda = \frac{2\varepsilon}{\varepsilon + mc^2} \varphi_{\lambda'}^* \varphi_\lambda \propto \delta_{\lambda\lambda'},$$

d'où s'ensuit l'orthogonalité des états de spin de la particule correspondant à des valeurs différentes de λ.

Les réponses aux questions posées dans l'énoncé deviennent évidentes si l'on tient compte du résultat obtenu dans le problème précédent. Selon ce dernier, le spineur φ dans le bispineur $u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ décrivant le même état physique de la particule (d'une impulsion déterminée), dans différents systèmes d'inertie, est, au facteur de normalisation près, identique dans tous les systèmes de référence. Dans le système propre de la particule, le bispineur est de la forme $u(0) = \begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$ et donc, $u_\lambda(0) = \begin{pmatrix} \varphi_\lambda \\ 0 \end{pmatrix}$. Mais dans le système propre de la particule, l'équation $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \varphi_\lambda = \lambda \varphi_\lambda$ est équivalente à

$$(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}) u_\lambda(0) = \lambda u_\lambda(0) \tag{1}$$

c'est-à-dire constitue une équation aux fonctions propres de l'opérateur $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} = 2\mathbf{S} \cdot \mathbf{n}$ (deux fois la projection du spin sur l'axe dirigé le long du vecteur $\mathbf{n}$). Ainsi, le sens

évident du vecteur $\mathbf{n}$ est clair non pas dans le système de référence où l'impulsion de la particule vaut $\mathbf{p}$, mais dans le système où elle est au repos, en déterminant la direction selon laquelle la projection du spin de la particule possède une valeur déterminée égale à $\lambda/2$.

Le vecteur $1/2\varphi_0^*\boldsymbol{\sigma}\varphi_0$ définit le vecteur de spin moyen dans le système propre de la particule. Pour éviter tout malentendu, soulignons qu'on étudie dans ce problème les états de la particule avec une valeur déterminée de l'impulsion, donc on peut parler du système propre de la particule.

Pour ce problème de classification suivant le nombre quantique λ des états de spin de la particule avec une impulsion déterminée on peut donner une forme covariante. Introduisons pour cela l'opérateur $\widehat{\lambda} = i\gamma_5\widehat{\nu} \equiv i\gamma_5(\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nu} + \gamma_4\nu_4)$, où $\nu_i = (\boldsymbol{\nu}, \nu_4)$ est un certain quadrivecteur unitaire (c'est-à-dire $\nu_i^2 = \boldsymbol{\nu}^2 + \nu_4^2 = 1$) orthogonal au quadrivecteur impulsion de la particule $p_i = (\mathbf{p}, i\varepsilon/c)$: $\nu_i p_i = 0$. On laisse au lecteur le soin de se convaincre que l'équation aux fonctions propres

$$\widehat{\lambda}u_\lambda(\mathbf{p}) = \lambda u_\lambda(\mathbf{p}) \tag{2}$$

est équivalente à l'équation $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n})\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$ où la relation du vecteur tridimensionnel $\mathbf{n}$ avec le quadrivecteur ν_i est définie par la condition que, dans le système propre de la particule, $\nu_i = (\mathbf{n}, 0)$.

15.27. La solution de l'équation de Dirac, correspondant à des valeurs déterminées de l'impulsion $\mathbf{p}$ et de l'énergie ε ($\varepsilon = \pm\sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4}$) de la particule (voir 15.21),

$$\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varphi_{\mathbf{p}} \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon + mc^2}\varphi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t)\right] = \begin{pmatrix} \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon - mc^2}\chi_{\mathbf{p}} \\ \chi_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t)\right] \tag{1}$$

pour $\varepsilon \geq mc^2$ a le sens physique de la fonction d'onde d'une particule avec l'impulsion $\mathbf{p}$ et l'énergie ε. Pour $\varepsilon \leq -mc^2$, la solution (1) (notons-la $\Psi^{(-)}_{-\mathbf{p}}$) de même que la superposition de telles solutions $\Psi^{(-)}$ [5] n'a plus le sens concret de fonction d'onde d'un état quelconque de la particule. Cette solution décrit l'antiparticule, et la fonction d'onde de l'antiparticule $\Psi_c^{(+)}$ s'obtient par la conjugaison de charge $\widehat{C}$ de la fonction $\Psi^{(-)}$: $\Psi_c^{(+)} = \widehat{C}\Psi^{(-)}$. Comme on le sait, cette transformation, avec le choix standard des matrices de Dirac, s'écrit comme

$$\Psi_c^{(+)} = \widehat{C}\Psi^{(-)} \equiv \gamma_2\gamma_4\overline{\Psi^{(-)}} = \gamma_2\gamma_4(\Psi^{(-)*}\beta), \tag{2}$$

soit de façon plus détaillée en indiquant les indices bispinoriels :

$$\begin{aligned}(\Psi_c^{(+)})_\alpha &= (\gamma_2\gamma_4)_{\alpha\delta}(\Psi^{(-)*}\beta)_\delta = (\gamma_2\gamma_4)_{\alpha\delta}(\Psi^{(-)*})_\mu\beta_{\mu\delta} \\ &= (\gamma_2\gamma_4)_{\alpha\delta}\beta_{\delta\mu}(\Psi^{(-)*})_\mu = (\gamma_2\gamma_4\beta)_{\alpha\mu}(\Psi^{(-)*})_\mu = (\gamma_2)_{\alpha\mu}(\Psi^{(-)*})_\mu\end{aligned} \tag{3}$$

(on a tenu compte dans (3) de ce que $\beta \equiv \gamma_4$, $\beta^2 = 1$, $\beta_{\delta\mu} = \beta_{\mu\delta}$).

5 Notons la correspondance de ces notations avec celles utilisées auparavant pour la particule sans spin (voir 15.1).

En utilisant les relations

$$\Psi^{(-)*}_{-\mathbf{p}} = \begin{pmatrix} \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon - mc^2}\chi^*_{\mathbf{p}} \\ \chi^*_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t)\right], \qquad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\sigma}^* = (\sigma_1, -\sigma_2, \sigma_3), \qquad \sigma_2\boldsymbol{\sigma}^* = -\boldsymbol{\sigma}\sigma_2,$$

on obtient, selon (3), la fonction d'onde de l'état de l'antiparticule correspondant à la solution "non physique" (c'est-à-dire pour $\varepsilon \leq -mc^2$) de l'équation de Dirac sous la forme (1) :

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)}_c &= \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_2 \\ i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon - mc^2}\chi^*_{\mathbf{p}} \\ \chi^*_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t)\right] \\ &= \begin{pmatrix} -i\sigma_2\chi^*_{\mathbf{p}} \\ -i\dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon - mc^2}\sigma_2\chi^*_{\mathbf{p}} \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - \varepsilon t)\right] \end{aligned} \tag{4}$$

Dans cet état, l'antiparticule possède l'impulsion $\mathbf{p}' = -\mathbf{p}$ et l'énergie $\varepsilon' = -\varepsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2c^2 + m^2c^4} \geq mc^2$. Notant $\varphi_{c\,;\mathbf{p}'} \equiv -i\sigma_2\chi^*_{-\mathbf{p}'}$, récrivons (4) sous la forme

$$\Psi^{(+)}_{c\,;\mathbf{p}',\varepsilon'} = \begin{pmatrix} \varphi_{c\,;\mathbf{p}'} \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}'}{\varepsilon' + mc^2}\varphi_{c\,;\mathbf{p}'} \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - \varepsilon' t)\right], \tag{5}$$

qui par sa forme coïncide avec la fonction d'onde analogue de la particule (avec l'impulsion $\mathbf{p}'$ et l'énergie ε'). La fonction d'onde de l'antiparticule avec une hélicité déterminée $\Psi^{(+)}_{c\,;\mathbf{p}',\varepsilon',\lambda}$ satisfait à l'équation

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{n}'\Psi^{(+)}_{c\,;\mathbf{p}',\varepsilon',\lambda} = \lambda\Psi^{(+)}_{c\,;\mathbf{p}',\varepsilon',\lambda}, \qquad \mathbf{n}' = \mathbf{p}'/|\mathbf{p}'|,$$

d'où on obtient

$$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}'\varphi_{c\,;\mathbf{p}',\lambda} = \lambda\varphi_{c\,;\mathbf{p}',\lambda}. \tag{6}$$

Compte tenu de la relation établie plus haut entre le spineur $\varphi_{c\,;\mathbf{p}'}$ dans la fonction d'onde de l'antiparticule avec le spineur $\chi_{\mathbf{p}}$ dans la solution $\Psi^{(-)}_{-\mathbf{p}}$ de l'équation de Dirac ($\varphi_{c\,;\mathbf{p}'} = -i\sigma_2\chi^*_{-\mathbf{p}'}$), on note que l'équation (6) est équivalente à l'équation

$$-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}'\chi_{-\mathbf{p}',\lambda} = \lambda\chi_{-\mathbf{p}',\lambda}, \qquad \text{soit} \qquad \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}\chi_{\mathbf{p},\lambda} = \lambda\chi_{\mathbf{p},\lambda} \tag{7}$$

Cela signifie que, pour la conjugaison de charge $\Psi^{(+)}_c = \widehat{C}\Psi^{(-)}$, le nombre quantique λ (hélicité) conserve sa valeur (tandis que l'impulsion et l'énergie changent de signe).

15.28. La commutativité de l'opérateur hermitien $\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ avec

$$\widehat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} = c\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}\widehat{\mathbf{p}}$$

est évidente : $[\gamma_5, \widehat{H}] = 0$.

Pour comprendre le sens physique des valeurs propres μ de l'opérateur γ_5, cherchons les fonctions propres communes $\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu}$ des opérateurs $\widehat{H}$, $\widehat{\mathbf{p}}$ et γ_5 qui commutent entre eux. Ces fonctions sont de la forme (comparer à 15.21)

$$\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu} = \begin{pmatrix} \varphi_{\mathbf{p},\mu} \\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon}\varphi_{\mathbf{p},\mu} \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-\varepsilon t)\right], \qquad \varepsilon = \pm pc, \tag{1}$$

De plus, il s'ensuit de l'équation $\gamma_5\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu} = \mu\Psi_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu}$ que

$$-\frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon}\varphi_{\mathbf{p},\mu} = \mu\varphi_{\mathbf{p},\mu}, \qquad -\varphi_{\mathbf{p},\mu} = \mu\frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}}{\varepsilon}\varphi_{\mathbf{p},\mu}, \tag{2}$$

d'où $\mu^2 = 1$, c'est-à-dire les valeurs propres sont égales à $\mu = \pm 1$.

La fonction (1), pour $\varepsilon = pc > 0$ (notons-la $\Psi^{(+)}_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu}$), est la fonction d'onde de la particule avec l'impulsion $\mathbf{p}$ et l'énergie $\varepsilon = pc$. Alors l'équation (2) peut être écrite sous la forme

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}\varphi_{\mathbf{p},\mu} = -\mu\varphi_{\mathbf{p},\mu}, \qquad \boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{n}\Psi^{(+)}_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu} = -\mu\Psi^{(+)}_{\mathbf{p},\varepsilon,\mu}, \qquad \mathbf{n} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|,$$

d'où on voit le sens physique des valeurs propres μ : la grandeur $\lambda = -1/2\mu$ est l'hélicité de la particule, c'est-à-dire la projection du spin sur la direction de l'impulsion.

Pour $\varepsilon = -pc < 0$, on a pour la fonction (1) (notons-la $\Psi^{(-)}_{-\mathbf{p},\mu}$)

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}\varphi_{\mathbf{p},\mu} = \mu\varphi_{\mathbf{p},\mu}, \qquad \boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{n}\Psi^{(-)}_{-\mathbf{p},\mu} = \mu\Psi^{(-)}_{-\mathbf{p},\mu},$$

de sorte que l'hélicité est ici donnée par $\lambda = 1/2\mu$. Pour $\varepsilon < 0$, la fonction d'onde $\Psi^{(+)}_{c\,;\mathbf{p},\mu} = \widehat{C}\Psi^{(-)}_{-\mathbf{p},\mu} = \gamma_2\Psi^{(-)*}_{-\mathbf{p},\mu}$ décrit l'état de l'antiparticule avec l'énergie $\varepsilon' = pc > 0$, l'impulsion $\mathbf{p}$ et l'hélicité $\lambda = 1/2\mu$ (voir le problème précédent).

15.29. Vu que $\widehat{P}^2_{\pm} = \widehat{P}_{\pm}$, les opérateurs hermitiens $\widehat{P}_{\pm}$ sont des projecteurs (voir 1.35 du Tome I).

Compte tenu de la relation établie dans le problème précédent entre les valeurs propres de l'opérateur γ_5 avec l'hélicité, on voit que l'opérateur $\widehat{P}_+$ est le projecteur sur l'état avec l'hélicité $\lambda_1 = -1/2$ pour la particule et avec l'hélicité $\lambda_2 = 1/2$ pour l'antiparticule. Pour l'opérateur $\widehat{P}_-$, les signes de l'hélicité sont inversés. Pour éviter tout malentendu, soulignons que, dans ce problème, on étudie l'action des opérateurs $\widehat{P}_{\pm}$ sur la fonction constituant la solution de l'équation de Dirac avec $m = 0$: $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$, c'est-à-dire que, pour l'antiparticule, il ne s'agit pas de sa fonction d'onde $\Psi^{(+)}_c$ mais de la solution $\Psi^{(-)}$ de l'équation de Dirac. Il faut avoir en vue que la relation $\widehat{P}_{\pm}\Psi = \widetilde{\Psi}$ prend avec la conjugaison de charge la forme $\widehat{P}_{\mp}\Psi_c = \widetilde{\Psi}_c$ autrement dit $\widehat{P}_+$ devient $\widehat{P}_-$ et vice versa : cela est lié à l'égalité $\widehat{C}\gamma_5 = -\gamma_5\widehat{C}$.

15.30. Les équations de Dirac pour des spineurs à deux éléments avec $m = 0$ prennent la forme ($\boldsymbol{\sigma} = 2\widehat{\mathbf{s}} \equiv \widehat{\mathbf{s}}/s$)

$$i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\chi \equiv \frac{c}{s}\widehat{\mathbf{s}}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\chi, \qquad i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\varphi \equiv \frac{c}{s}\widehat{\mathbf{s}}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\varphi. \tag{1}$$

Elles contiennent deux spineurs φ et χ qui décrivent les propriétés de spin de la particule avec $s = 1/2$ par rapport à une rotation purement spatiale du système de coordonnées et qui se transforment de façon indépendante lors de cette transformation (mais pas lors d'une transformation de Lorentz).

La généralisation naturelle des équations (1) pour une particule de spin arbitraire s consiste dans l'identification dans ces équations de φ et χ à deux fonctions de spin correspondant au spin s et possédant chacune $2s + 1$ composantes ; dans ce cas, par $\widehat{\mathbf{s}}$ il faut entendre l'opérateur du spin de grandeur s (dont la forme en représentation s_z est bien connu).

Pour le spin $s = 1$, il est commode d'utiliser non pas la représentation s_z mais la représentation vectorielle dans laquelle les composantes de la fonction de spin sont les composantes cartésiennes du vecteur (voir les problèmes du paragraphe 4, chapitre 3 du Tome I), tandis que les opérateurs composantes du spin se déterminent par les relations

$$\widehat{s}_i a_k \equiv -i\varepsilon_{ikl} a_l .$$

De plus, $\widehat{\mathbf{s}} \cdot \widehat{\mathbf{p}} a_k = \widehat{s}_i \widehat{p}_i a_k = -\hbar \varepsilon_{ikl} \frac{\partial}{\partial x_i} a_l \equiv \hbar (\text{rot } \mathbf{a})_k$, c'est-à-dire $(\widehat{\mathbf{s}} \cdot \widehat{\mathbf{p}})\mathbf{a} = \hbar \,\text{rot}\, \mathbf{a}$, et, en identifiant dans les équations (1) φ et χ respectivement aux vecteurs $\mathbf{E}$ et $i\mathbf{B}$, récrivons-les sous la forme

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{E} = \text{rot } \mathbf{B}, \qquad -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{E},$$

constituant une partie du système d'équations de Maxwell. Les deux autres équations : div $\mathbf{E} = 0$, div $\mathbf{B} = 0$ sont des conditions supplémentaires auxquelles satisfont les vecteurs $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$.

On trouvera l'exposé détaillé de la mécanique quantique du photon dans [8].

15.31. La densité de courant et la densité de charge d'une particule de Dirac sont de la forme

$$\mathbf{j} = ec\Psi^* \boldsymbol{\alpha} \Psi \equiv iec\overline{\Psi}\boldsymbol{\gamma}\Psi, \qquad \rho = e\Psi^*\Psi \equiv e\overline{\Psi}\gamma_4\Psi. \tag{1}$$

Soulignons que les expressions (1) sont valables aussi bien pour une particule libre que pour une particule se trouvant dans un champ électromagnétique extérieur (bien que les composantes du potentiel électromagnétique $\mathbf{A}$ et A_0 n'interviennent pas dans (1) de façon explicite !).

Dans la limite non relativiste (l'énergie de la particule $\varepsilon \approx mc^2$), le spineur χ dans le bispineur $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$, satisfaisant à l'équation

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \varphi - mc^2 \chi + eA_0 \chi,$$

vaut approximativement ($i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} \approx mc^2 \chi$)

$$\chi \approx \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \varphi,$$

c'est-à-dire $|\chi| \ll |\varphi|$, de sorte que

$$\Psi \approx \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Donc,

$$\Psi^* = \left(\varphi^*, \left[\frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi\right]^*\right) = \left(\varphi^*, \frac{1}{2mc}\left(-\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi^* \cdot \boldsymbol{\sigma}\right). \tag{3}$$

Utilisant (2) et (3), on obtient, selon (1), aux termes d'ordre $(1/c)^2$ près

$$\begin{aligned} \rho &= e\Psi^*\Psi \approx e\varphi\varphi^*, \qquad (4) \\ \mathbf{j} &= ec\Psi^* \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \Psi \\ &= ec\left(\varphi^*, \frac{1}{2mc}\left(\left(-\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi^* \cdot \boldsymbol{\sigma}\right)\right) \begin{pmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi \\ \boldsymbol{\sigma}\varphi \end{pmatrix} \\ &= \frac{e}{2m}\left\{\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right)\varphi - \left(\left(\widehat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi^* \cdot \boldsymbol{\sigma}\right)\boldsymbol{\sigma}\varphi\right\}. \qquad (5) \end{aligned}$$

Utilisant la relation $\sigma_i\sigma_k = \delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\sigma_l$, l'expression (5) se simplifie :

$$\begin{aligned} j_i &= \frac{e}{2m}\left\{\varphi^*\sigma_i\sigma_k\left(\widehat{p}_k - \frac{e}{c}A_k\right)\varphi - \left(\left(\widehat{p}_k + \frac{e}{c}A_k\right)\varphi^*\right)\sigma_k\sigma_i\varphi\right\} \\ &= \frac{e}{2m}\left\{\varphi^*\widehat{p}_i\varphi - (\widehat{p}_i\varphi^*)\varphi - \frac{2e}{c}A_i\varphi^*\varphi + i\varepsilon_{ikl}[\varphi^*\sigma_l\widehat{p}_k\varphi + (\widehat{p}_k\varphi^*)\sigma_l\varphi]\right\}, \end{aligned}$$

et comme

$$\varepsilon_{ikl}\left[\varphi^*\sigma_l\frac{\partial}{\partial x_k}\varphi + \left(\frac{\partial}{\partial x_k}\varphi^*\right)\sigma_l\varphi\right] \equiv \varepsilon_{ikl}\frac{\partial}{\partial x_k}\varphi^*\sigma_l\varphi \equiv \{\mathrm{rot}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi)\}_i,$$

on obtient

$$\mathbf{j} = -\frac{ie\hbar}{2m}[\varphi^*\boldsymbol{\nabla}\varphi - (\boldsymbol{\nabla}\varphi)^*\varphi] - \frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\varphi^*\varphi + \frac{e\hbar}{2m}\mathrm{rot}(\varphi^*\boldsymbol{\sigma}\varphi). \tag{6}$$

Les expressions (4) et (6) coïncident avec les formules de la théorie non relativiste de la densité de charge et du courant d'une particule de spin $s = 1/2$, possédant une charge e et un moment magnétique de spin $\mu = e\hbar/2mc$ (voir [1]).

15.32. Compte tenu de la forme explicite des matrices de Dirac et du tenseur

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & B_z & -B_y & -iE_x \\ -B_z & 0 & B_x & -iE_y \\ B_y & -B_x & 0 & -iE_z \\ iE_x & iE_y & iE_z & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{matrix} F_{4i} = -F_{i4} = iE_i, \\ F_{ik} = \varepsilon_{ikl}B_l, \\ i,k = 1,2,3 \end{matrix}$$

l'hamiltonien du problème se transforme en

$$\widehat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \widehat{\mathbf{p}} - \kappa\beta\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} + i\kappa\beta\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E} + mc^2\beta. \tag{1}$$

L'équation $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\Psi = \widehat{H}\Psi$ écrite en termes de spineurs à deux éléments φ et χ dans la fonction d'onde bispinorielle $\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ est de la forme

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\chi + mc^2\varphi + i\kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}\chi - \kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\varphi, \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi &= c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}\varphi - mc^2\chi - i\kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}\varphi + \kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\chi. \end{aligned} \tag{2}$$

Pour passer à la limite non relativiste, quand l'énergie de la particule $\varepsilon \approx mc^2$, il faut, comme d'habitude, dégager de la fonction d'onde le facteur $\exp(-imc^2t/\hbar)$, c'est-à-dire l'écrire sous la forme $\Psi = \exp(-imc^2t/\hbar)\widetilde{\Psi} = \exp(-imc^2t/\hbar)\begin{pmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{pmatrix}$ et tenir compte de l'inégalité

$$\left|i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\Psi}\right| \sim |E\widetilde{\Psi}| \ll mc^2|\widetilde{\Psi}| \tag{3}$$

dans l'expression

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \mathrm{e}^{-imc^2t/\hbar}\left[mc^2\widetilde{\Psi} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{\Psi}\right]$$

(E étant la grandeur caractéristique d'énergie d'une particule non relativiste). La seconde équation de (2) prend alors la forme

$$2mc^2\tilde{\chi} - \kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\tilde{\chi} + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\chi} = (c\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}} - i\kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E})\tilde{\varphi}. \tag{4}$$

Compte tenu de (3) et de l'inégalité $|\kappa B| \ll mc^2$ il s'ensuit de (4) que

$$\tilde{\chi} \approx \frac{1}{2mc}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}} - \frac{i\kappa}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}\right)\tilde{\varphi} \tag{5}$$

d'où, comme dans le cas d'une particule libre non relativiste, $|\tilde{\chi}| \ll |\tilde{\varphi}|$.

Reportant (5) dans la première équation de (2) (en séparant au préalable le facteur $\exp(-imc^2t/\hbar)$, on obtient

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi} = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + \frac{i\kappa}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}} - \frac{i\kappa}{c}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}\right)\tilde{\varphi} - \kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\tilde{\varphi}. \tag{6}$$

En utilisant la relation $\sigma_i\sigma_k = \delta_{ik} + i\varepsilon_{ikl}\sigma_l$ et en écrivant $\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}} = \sigma_i\widehat{p}_i$ et $\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E} = \sigma_kE_k$, il vient

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E}) - (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}}) = \widehat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{E} - \mathbf{E}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + i\widehat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{E}\cdot\boldsymbol{\sigma} - i\mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{7}$$

avec

$$\begin{aligned} &\widehat{\mathbf{p}}\cdot\mathbf{E} - \mathbf{E}\cdot\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\,\mathrm{div}\mathbf{E}, \\ &\widehat{\mathbf{p}}\wedge\mathbf{E} - \mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}} = -i\hbar\,\mathrm{rot}\mathbf{E} - 2\mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}} = -2\mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}} \end{aligned} \tag{8}$$

Compte tenu des égalités $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\widehat{\mathbf{p}})^2=\widehat{\mathbf{p}}^2$, (7) et (8) et en négligeant le terme proportionnel à $(E/c)^2$, écrivons (6) sous la forme

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}=\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}\tilde{\varphi}-\kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}\tilde{\varphi}+\frac{\kappa}{mc}\left(-\frac{\hbar}{2}\mathrm{div}\mathbf{E}-\mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\tilde{\varphi}. \tag{9}$$

En tenant compte de la petitesse du spineur $\tilde{\chi}$ par rapport à $\tilde{\varphi}$ et en le négligeant, on peut se borner dans la limite non relativiste à la description de la particule de spin $s=1/2$ par un seul spineur $\tilde{\varphi}$ (comme cela se fait dans la théorie non relativiste). Alors, l'équation (9) est une équation de Schrödinger avec l'hamiltonien

$$\widehat{H}=\frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m}-\kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}+\frac{\kappa}{mc}\left(-\frac{\hbar}{2}\mathrm{div}\mathbf{E}-\mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right). \tag{10}$$

L'absence dans $\widehat{H}$ du terme de la forme de eA_0 témoigne du fait que la particule est neutre (A_0 est le potentiel scalaire du champ électrostatique extérieur), tandis que la présence du terme $-\kappa\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}$ indique que la particule possède un moment magnétique valant $\mu\equiv\kappa$.

Le dernier, troisième terme de (10), décrit l'interaction spin-orbite. De plus, le terme $-\dfrac{\kappa}{mc}\mathbf{E}\wedge\widehat{\mathbf{p}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ de cette interaction est la généralisation quantique de l'énergie d'interaction du dipôle magnétique classique en mouvement dans le champ électrostatique (voir 13.43).

L'hamiltonien (1) (et sa limite non relativiste (10)) est utilisé pour la description du neutron dans un champ électromagnétique. L'expression $\dfrac{i\mu'}{2}\beta\gamma_\tau\gamma_\nu F_{\tau\nu}$ est aussi utilisée pour la description de l'interaction avec le champ électromagnétique du moment magnétique *anomal*[6] μ' de particules chargées de spin $s=1/2$. Alors l'interaction de la partie normale du moment magnétique valant $e\hbar/2mc$ (comme de la charge e de la particule avec le champ) se décrit, comme on le sait, par l'expression $-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}+cA_0$.

15.33. Le spectre d'énergie et les bispineurs adéquats se déterminent à partir de la solution de l'équation de Dirac dans un champ magnétique (e est la charge de la particule)

$$\left[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)+mc^2\beta\right]u=\varepsilon u,\qquad \Psi_\varepsilon(\mathbf{r},t)=u\mathrm{e}^{-i\varepsilon t/\hbar}\equiv\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}\mathrm{e}^{-i\varepsilon t/\hbar},$$

6 Pour une particule de spin $s=1/2$, possédant une charge e et un moment magnétique μ, la "séparation" de ce dernier en parties normale et anomale est régie par la relation

$$\mu=\mu_{\mathrm{norm}}+\mu_{\mathrm{anom}},\qquad \mu_{\mathrm{norm}}=\frac{eh}{2mc},\qquad \mu_{\mathrm{anom}}\equiv\mu'=\mu-\frac{e\hbar}{2mc}.$$

Ainsi, l'équation d'onde relativiste de cette particule dans un champ électromagnétique est

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\left\{e\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\widehat{\mathbf{p}}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)+mc^2\beta+eA_0+\frac{i\mu'}{2}\beta\gamma_\tau\gamma_\nu F_{\tau\nu}\right\}\Psi.$$

soit

$$(\varepsilon - mc^2)\varphi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\chi,$$
$$(\varepsilon + mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi, \tag{1}$$

En éliminant le spineur χ du système (1), il vient

$$(\varepsilon^2 - m^2c^4)\varphi = c^2\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right)^2 \varphi. \tag{2}$$

Etant donné que (voir, par exemple, 6.22 du Tome I)

$$\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\right)^2 = \left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{c}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \qquad (\mathbf{B} = \text{ rot } \mathbf{A}),$$

l'équation (2) peut être écrite sous la forme

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\widehat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}\right\}\varphi = \frac{\varepsilon^2 - m^2c^4}{2mc^2}\varphi, \tag{3}$$

qui ne diffère que par la substitution de $(\varepsilon^2 - m^2c^4)/2mc^2$ à E de l'équation de Pauli pour une particule de spin $s = 1/2$, possédant une charge e et un moment magnétique $\mu = e\hbar/2mc$. Cette équation dans le cas d'un champ magnétique homogène $\mathbf{B}_0$ a été résolue dans 6.21 du Tome I. Avec la jauge du potentiel vecteur $\mathbf{A} = (0, B_0x, 0)$, la solution de l'équation (3) est

$$\varepsilon^2_{np_z\sigma_z} - m^2c^4 = 2mc^2\left[\hbar\omega_0(n + 1/2) - \frac{e\hbar B_0}{2mc}\sigma_z + \frac{p_z^2}{2m}\right], \qquad n = 0, 1, \ldots$$
$$\varphi_{np_yp_z\sigma_z} = Ce^{i(p_yy + p_zz)/\hbar}\exp\left[-\frac{1}{2a^2}\left(x - \frac{cp_y}{eB_0}\right)^2\right]H_n\left(\frac{1}{a}\left(x - \frac{cp_y}{eB_0}\right)\right)\varphi_{\sigma_z} \tag{4}$$

avec $\omega_0 = \dfrac{|e|\hbar B_0}{mc}$ et $a = \sqrt{\dfrac{\hbar c}{|e|B_0}}$. Ici, le spineur constant φ_{σ_z} est une fonction propre de l'opérateur $\widehat{\sigma}_z$ correspondant aux valeurs propres $\sigma_z = \pm 1$ (rappelons que l'axe z est dirigé le long de $\mathbf{B}_0$).

La seconde des équations (1) définit le spineur $\chi_{np_yp_z\sigma_z}$ et ainsi la fonction d'onde $\Psi_{np_yp_z\sigma_z}$ d'états stationnaires.

Le nombre quantique $s_z = (1/2)\sigma_z$ en théorie non relativiste définit la projection du spin de la particule sur l'axe z. Dans le cas relativiste, σ_z perd ce sens car le spineur $\chi_{np_yp_z\sigma_z}$ n'est plus fonction propre de $\widehat{\sigma}_z$ et, donc, la fonction d'onde $\Psi_{np_yp_z\sigma_z}$ n'est plus la fonction propre de l'opérateur $\widehat{s}_z = (1/2)\Sigma_z$.

Selon (4), aux nombres quantiques donnés n, p_z, σ_z correspondent deux valeurs de l'énergie opposées. L'une d'elles, $\varepsilon \geq mc^2$, représente le spectre d'énergie de la particule ; l'autre, $\varepsilon \leq -mc^2$, correspond à l'antiparticule possédant une énergie positive (comparer au cas d'une particule libre étudié dans 15.27). Ainsi les spectres

d'énergie dans le champ magnétique de la particule et de l'antiparticule sont identiques ; c'est un résultat physique évident (comparer au cas d'une particule sans spin étudié dans 15.11).

15.34. L'hamiltonien de la particule de Dirac dans un champ électrostatique extérieur a pour expression :

$$\widehat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + e_1A_0(r) \equiv \widehat{H}_0 + \widehat{V}, \qquad \widehat{V} = e_1A_0 = \frac{Zee_1}{r}.$$

La perturbation $\widehat{V}$ provoque des transitions entre les différents états d'une particule libre.

La fonction d'onde de l'état initial de la particule, avec une impulsion $\mathbf{p}_1$, est normée de façon à avoir une densité de flux unité (voir 15.22) :

$$\Psi_i = \sqrt{\frac{\varepsilon+mc^2}{2\varepsilon}}\begin{pmatrix}\varphi_i\\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}_1}{\varepsilon+mc^2}\varphi_i\end{pmatrix}\sqrt{\frac{1}{v}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_1\cdot\mathbf{r}-\varepsilon t)\right], \qquad \mathbf{j} = \Psi_i^*\boldsymbol{\alpha}\Psi_i = \frac{\mathbf{v}}{v} \tag{1}$$

(ε et $\mathbf{v}$ sont l'énergie et la vitesse de la particule), tandis que la fonction d'onde de l'état final, avec une impulsion $\mathbf{p}_2$, est normée de façon à avoir une densité de probabilité unité :

$$\Psi_f = \sqrt{\frac{\varepsilon+mc^2}{2\varepsilon}}\begin{pmatrix}\varphi_f\\ \frac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}_2}{\varepsilon+mc^2}\varphi_f\end{pmatrix}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_2\cdot\mathbf{r}-\varepsilon t)\right], \qquad \rho = \Psi_f^*\Psi_f = 1 \tag{2}$$

(les spineurs φ_i et φ_f dans (1), (2) sont normés à l'unité : $|\varphi_{i,f}|^2 = 1$, l'énergie de la particule dans les états initial et final est la même).

La probabilité différentielle de transition par unité de temps, au premier ordre du calcul des perturbations, définit la section efficace différentielle de diffusion [1] :

$$d\sigma = dw = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2 d\rho_f \tag{3}$$

où la densité d'états finals vaut

$$d\rho_f = \int\delta(\varepsilon_f-\varepsilon_i)\frac{d^3p_f}{(2\pi\hbar)^3} \equiv \int\delta(\varepsilon-\varepsilon_2)\frac{p_2\varepsilon_2 d\varepsilon_2 d\Omega_2}{(2\pi\hbar)^3c^2} \equiv \frac{p\varepsilon d\Omega}{(2\pi\hbar)^3c^2} \tag{4}$$

et l'élément matriciel de la perturbation a pour expression ($\mathbf{q} = (\mathbf{p}_2-\mathbf{p}_1)/\hbar$)

$$V_{fi} = \int\Psi_f^*\widehat{V}\Psi_i d^3r = \frac{Zee_1(\varepsilon+mc^2)}{2\varepsilon\sqrt{v}}\int\frac{\mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{r}d^3r\varphi_f^*\left[1+\frac{c^2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}_2)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}_1)}{(\varepsilon+mc^2)^2}\right]\varphi_i \tag{5}$$

En utilisant la relation (θ étant l'angle de diffusion)

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}_2)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}_1) &= p_{2i}p_{1k}\sigma_i\sigma_k = p_{2i}p_{1k}(\delta_{ik}+i\varepsilon_{ikl}\sigma_l)\\ &= \mathbf{p}_1\cdot\mathbf{p}_2 + i\mathbf{p}_2\wedge\mathbf{p}_1\cdot\boldsymbol{\sigma} = p^2\cos\theta - ip^2\sin\theta\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu},\\ \boldsymbol{\nu} &= \frac{\mathbf{p}_1\wedge\mathbf{p}_2}{|\mathbf{p}_1\wedge\mathbf{p}_2|}, \qquad \boldsymbol{\nu}^2 = 1,\end{aligned}$$

ainsi que la valeur de l'intégrale

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}}{r} d^3r = \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2} = \frac{\pi\hbar^2}{p^2 \sin^2(\theta/2)},$$

écrivons (5) sous une forme plus commode :

$$V_{fi} = \frac{\pi Z e e_1 \hbar^2}{2\varepsilon p^2 \sqrt{v}(\varepsilon + mc^2) \sin^2(\theta/2)} \varphi_f^* \{(\varepsilon + mc^2)^2 + p^2c^2 \cos\theta - ip^2c^2 \sin\theta\, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu}\}\varphi_i. \quad (6)$$

Les expressions (3), (4) et (6) définissent la section efficace différentielle de diffusion. Celle-ci dépend de l'énergie de la particule, de l'angle de diffusion, ainsi que des états de spin de la particule avant et après la diffusion décrits par les spineurs φ_i et φ_f. En négligeant les effets de polarisation accompagnant la diffusion, effectuons dans la section efficace différentielle le calcul de la valeur moyenne sur les états de spin de la particule du faisceau incident (en le supposant non polarisé), ainsi que la somme sur les états de spin de la particule diffusée (on indique cette opération plus bas par un trait au-dessus de l'élément matriciel). En utilisant la relation connue de la théorie non relativiste (voir [1])

$$\overline{|\varphi_f^*(f_1 + if_2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu})\varphi_i|^2} = |f_1|^2 + |f_2|^2.$$

on obtient

$$\overline{|\varphi_f^*((\varepsilon + mc^2)^2 + p^2c^2\cos\theta - ip^2c^2\sin\theta\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu})\varphi_i|^2} = 4\varepsilon^2(\varepsilon + mc^2)^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\sin^2(\theta/2)\right)$$

et, finalement, l'expression de la section efficace différentielle de diffusion :

$$d\sigma \equiv \overline{d\sigma} = \frac{(Zee_1)^2}{4p^2v^2 \sin^4(\theta/2)} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\sin^2(\theta/2)\right) d\Omega. \quad (7)$$

A la limite non relativiste, $v/c \ll 1$, $p \approx mv$, l'expression (7) devient la formule de Rutherford.

Indiquons la condition de validité du résultat obtenu : $|Zee_1| \ll \hbar v$.

15.35. L'expression de la section efficace différentielle de diffusion peut être obtenue directement à partir de la formule (7) du problème précédent si l'on y effectue une substitution

$$\frac{\pi Z e e_1 \hbar^2}{p^2 \sin^2(\theta/2)} = \int \frac{Zee_1}{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \to e_1 \int A_0(r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r \equiv e_1 \widetilde{A}_0(q),$$

de sorte que

$$d\sigma = \frac{c_1^2 p^2 \widetilde{A}_0^2(q)}{4\pi^2 \hbar^4 v^2} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\sin^2(\theta/2)\right) d\Omega. \quad (1)$$

Utilisant les relations $\hbar^2 q^2 = 2p^2(1-\cos\theta)$ et $d\Omega = \frac{\pi\hbar^2}{p^2}dq^2$, on obtient la section efficace totale :

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{e_1^2}{4\pi\hbar^2 v^2}\int_0^{4p^2/\hbar^2} \widetilde{A}_0^2(q)\left(1-\frac{\hbar^2 v^2}{4p^2c^2}q^2\right)dq^2. \tag{2}$$

Pour $\varepsilon \to \infty$ on a $p \approx \varepsilon/c$, $v \approx c$. Compte tenu de ce que, dans l'intégrale (2), est essentiel le domaine des valeurs $q^2 \lesssim R^{-2}$, où R est le rayon du potentiel $A_0(r)$, on en déduit que, pour $\varepsilon \to \infty$, la section efficace de diffusion tend vers une valeur constante :

$$\lim_{\varepsilon\to\infty}\sigma(\varepsilon) = \sigma_0 = \frac{e_1^2}{4\pi\hbar^2c^2}\int_0^{\infty}\widetilde{A}_0^2(q)dq^2. \tag{3}$$

Notons que la convergence de l'intégrale dans (3) à la limite inférieure ($q^2 \to 0$) suppose une décroissance suffisamment rapide du potentiel $A_0(r)$ pour $r \to \infty$, notamment $|A_0(r)| < B/r^2$ (de même que dans le cas non relativiste ; autrement la section efficace de diffusion totale devient infinie).

15.36. Utilisant la relation

$$-\hbar^2c^2\Delta - \varepsilon^2 + m^2c^4 \equiv (c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta - \varepsilon)(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + \varepsilon)$$

et la forme connue des fonctions de Green d'une particule libre, solutions de l'équation de Schrödinger

$$(-\Delta - k^2)g^{(\pm)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \qquad g^{(\pm)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$

on obtient

$$\begin{aligned}&(-\hbar^2c^2\Delta - \hbar^2c^2k^2)\frac{1}{4\pi\hbar^2c^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\\ &\equiv (c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta - \varepsilon)(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + \varepsilon)\frac{1}{4\pi\hbar^2c^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned}$$

On en déduit l'expression des fonctions de Green cherchées :

$$\widehat{G}_{\varepsilon}^{(\pm)}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi\hbar^2c^2}(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + \varepsilon)\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$

ou, avec l'indication explicite des indices bispinoriels,

$$\widehat{G}_{\varepsilon\ ;\alpha\beta}^{(\pm)} = \frac{1}{4\pi\hbar^2c^2}(-i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\nabla} + mc^2\beta + \varepsilon)_{\alpha\beta}\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|},$$

En utilisant la relation

$$-\hbar^2c^2\Delta - \varepsilon^2 + m^2c^4 \equiv (ic\widehat{p} + mc^2)(-ic\widehat{p} + mc^2)$$

de façon absolument analogue, on obtient la forme des fonctions de Green :

$$\widehat{f}_{\varepsilon}^{(\pm)} = \frac{-ic\widehat{p} + mc^2}{4\pi\hbar^2c^2}\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{-\hbar c\boldsymbol{\gamma}\cdot\boldsymbol{\nabla} + \varepsilon\gamma_4 + mc^2}{4\pi\hbar^2c^2}\frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

15.37. Après avoir écrit l'équation de Dirac sous la forme (e_1 étant la charge de la particule)

$$(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta - \varepsilon)\Psi(\mathbf{r}) = (e_1\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A} - e_1A_0)\Psi(\mathbf{r})$$

et en utilisant la fonction de Green $\widehat{G}_{\varepsilon}^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ trouvée dans le problème précédent, représentons-la sous forme d'une équation intégrale :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \Psi_0(\mathbf{r}) + \int \widehat{G}_{\varepsilon}^{(+)}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\big[e_1\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')\big]\Psi(\mathbf{r}')dV',$$

où Ψ_0 est la solution générale de l'équation de Dirac pour une particule libre d'énergie ε. Choisissant pour Ψ_0 la fonction d'onde d'état de la particule avec une impulsion donnée $\mathbf{p}_1 = \hbar\mathbf{k}_1$, on obtient l'équation

$$\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}) = u_1(\mathbf{p}_1)e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} + \frac{1}{4\pi\hbar^2c^2}(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + \varepsilon)$$
$$\times\int\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\big[e_1\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')\big]\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}')dV'. \qquad (1)$$

Pour $r\to\infty$, le second terme du deuxième membre de (1) prend la forme (comparer à la solution du problème 13.1)

$$\frac{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}} + mc^2\beta + \varepsilon}{4\pi\hbar^2c^2}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\int\exp\left\{-ik\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r}\right\}\big[e_1\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')\big]\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}')dV'\right).$$

Dans cette expression l'opérateur impulsion ne doit agir que sur le facteur e^{ikr} : $\widehat{\mathbf{p}}e^{ikr} = \hbar k\dfrac{\mathbf{r}}{r}e^{ikr}$; l'action de $\widehat{\mathbf{p}}$ sur les autres facteurs, $1/r$ et $\exp\left\{-ik\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r}\right\}$, donne des termes asymptotiquement négligeables qui décroissent, pour $r\to\infty$, comme r^{-2}.

L'équation (1), pour $r\to\infty$, devient

$$\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}) = u_1(\mathbf{p}_1)e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} + F\frac{e^{ikr}}{r},$$

où le bispineur

$$F = \frac{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}}_2 + mc^2\beta + \varepsilon}{4\pi\hbar^2c^2}\int\exp\{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{r}'\}\big[e_1\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')\big]\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}')dV' \qquad (2)$$

avec $\mathbf{p}_2 = \hbar\mathbf{k}_2 = \hbar k\mathbf{r}/r$ représente l'amplitude de l'onde diffusée (comparer à 13.1).

L'approximation de Born consiste à remplacer dans (2) la fonction d'onde exacte $\Psi_{\mathbf{k}_1}^{(+)}(\mathbf{r}')$ par sa valeur non perturbée $u_1(\mathbf{p}_1)e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}}$. Posant ($\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$), on obtient

$$F \approx F_{\text{B}} \equiv \widehat{F}_{\text{B}}u_1(\mathbf{p}_1),$$
$$\widehat{F}_{\text{B}} = \frac{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}}_2 + mc^2\beta + \varepsilon}{4\pi\hbar^2c^2}\int e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'}\big[e_1\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}') - e_1A_0(\mathbf{r}')\big]dV'. \qquad (3)$$

L'opérateur (matrice) $\widehat{F}_{\text{B}}$ est la matrice de diffusion à l'approximation de Born. Ses éléments matriciels $u_2^*(\mathbf{p}_2)\widehat{F}_{\text{B}}u_1(\mathbf{p}_1)$ avec la normalisation des bispineurs $u_{1,2}^*u_{1,2} = 1$ définissent la section efficace différentielle correspondante :

$$d\sigma_{12} = |u_2^*(\mathbf{p}_2)\widehat{F}_{\text{B}}u_1(\mathbf{p}_1)|^2 d\Omega_2 \tag{4}$$

(soulignons que l'expression (4) dépend des états de spin des particules avant et après la diffusion décrits par les bispineurs correspondants). Si l'état de spin de la particule diffusée n'est pas fixé, la section efficace différentielle est alors, conformément au sens de l'amplitude de diffusion bispinorielle, définie par l'expression $d\sigma = F^*Fd\Omega_2$.

L'expression (4) où $\widehat{F}_{\text{B}}$ est déterminé par la formule (3) peut être simplifiée si l'on tient compte de ce que, selon l'équation de Dirac, on a

$$(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}}_2 + mc^2\beta)u(\mathbf{p}_2) = \varepsilon u(\mathbf{p}_2), \qquad u^*(\mathbf{p}_2)(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\widehat{\mathbf{p}}_2 + mc^2\beta) = \varepsilon u^*(\mathbf{p}_2)$$

On en déduit alors que

$$u_2^*(\mathbf{p}_2)\widehat{F}_{\text{B}}u_1(\mathbf{p}_1) \equiv u_2^*(\mathbf{p}_2)\widehat{G}_{\text{B}}u_1(\mathbf{p}_1), \tag{5}$$

avec

$$\widehat{G}_{\text{B}} = \frac{e_1\varepsilon}{2\pi\hbar^2c^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\big[\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{r}) - A_0(\mathbf{r})\big]dV. \tag{6}$$

La section efficace différentielle

$$d\sigma_{12} = |u_2^*(\mathbf{p}_2)\widehat{G}_{\text{B}}u_1(\mathbf{p}_1)|^2 d\Omega_2 \tag{7}$$

(soulignons que (7) est identique à (4))

pour un champ purement électrostatique est décrite par l'expression

$$d\sigma_{12} = \left|\frac{e_1\varepsilon}{2\pi\hbar^2c^2}\int \mathrm{e}^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}A_0(\mathbf{r})dV u_2^*(\mathbf{p}_2)u_1(\mathbf{p}_1)\right|^2 d\Omega_2. \tag{8}$$

On voit que (8) coïncide avec les résultats pour la section efficace différentielle de diffusion obtenus dans 15.34 et 15.35, tandis que le calcul effectué d'après la formule (8) de la section efficace différentielle de particules non polarisées dans un champ coulombien $A_0 = Ze/r$ ne fait que reprendre la partie correspondante de la solution du problème 15.34.

CHAPITRE 16

LOIS DE CONSERVATION

16.1. On a

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0 \quad \text{et} \quad \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = Q_0 \quad \text{avec} \quad \varepsilon_a = mv_a^2/2 = p_a^2/2m. \tag{1}$$

L'énergie cinétique totale des 2-ème et 3-ème particules peut s'écrire sous la forme

$$\varepsilon_{23} \equiv \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mu v_{\text{rel}}^2}{2} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{4m} + \frac{m(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_3)^2}{4} \tag{2}$$

où $\mathbf{P} = \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = -\mathbf{p}_1$, $M = 2m$ est la masse totale et $\mu = m/2$ est la masse réduite des deux particules.

Selon (1) et (2) on a

$$\frac{3\mathbf{p}_1^2}{4m} + \frac{m(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_3)^2}{4} = Q_0, \qquad \varepsilon_1 = \frac{2}{3}\left[Q_0 - \frac{m(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_3)^2}{4}\right], \tag{3}$$

de sorte que l'énergie cinétique de la 1-ère particule est d'autant plus grande que la vitesse relative des deux autres est plus petite.

L'expression (3) détermine l'intervalle des valeurs possibles de l'énergie de la 1-ère (et donc des deux autres) particule $0 \leq \varepsilon_a \leq 2/3Q_0$ (soulignons que si l'énergie d'une des particules est égale à l'énergie maximale possible $2/3Q_0$, les deux autres particules ont alors à la même vitesse).

16.2. On a

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0, \qquad \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = Q_0 \equiv h. \tag{1}$$

Il est clair que la loi de conservation de l'impulsion ne peut être satisfaite que si ($p_a = \sqrt{2m\varepsilon_a} \geq 0$)

$$|p_2 - p_3| \leq p_1 \leq p_2 + p_3, \tag{2}$$

de sorte que (1) et (2) définissent les valeurs possibles pour les énergies des particules produites lors de la désintégration (et donc de l'ensemble des points à l'intérieur du triangle auxquels on peut faire correspondre une désintégration).

Introduisons le système de coordonnées représenté sur la fig. 12 (le point O est au centre du triangle). Soit le point C (de coordonnées x, y) le point correspondant à une désintégration autorisée par la cinématique.

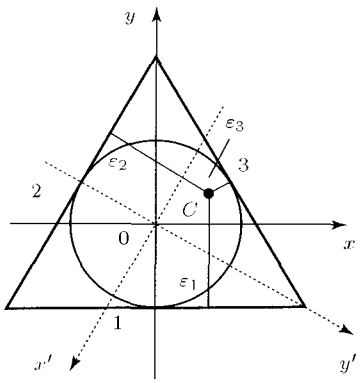

Figure 12

On obtient alors

$$\varepsilon_1 = \frac{h}{3} + y, \quad \varepsilon_2 = \frac{h}{3} + \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y,$$
$$\varepsilon_3 = \frac{h}{3} - \frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y. \tag{3}$$

La valeur de ε_1 est évidente et de façon analogue, en introduisant le système de coordonnées x', y' (voir figure), on trouve $\varepsilon_2 = \dfrac{h}{3} + y'$ et, en utilisant les formules de transformation des coordonnées par une rotation (dans ce cas, une rotation d'angle $2\pi/3$), on trouve la valeur de ε_2 donnée dans (3).

A partir de (2) on obtient $p_2^2 + p_3^2 - 2p_2p_3 \leq p_1^2 \leq p_2^2 + p_3^2 + 2p_2p_3$ qui compte tenu de (1), s'écrit $-2\sqrt{\varepsilon_2\varepsilon_3} \leq 2\varepsilon_1 - Q_0 \leq 2\sqrt{\varepsilon_2\varepsilon_3}$, d'où

$$(2\varepsilon_1 - Q_0)^2 \leq 4\varepsilon_2\varepsilon_3. \tag{4}$$

En substituant dans (4) les valeurs des énergie obtenues dans (3), on obtient $x^2 + y^2 \leq h^2/9 = Q_0^2/9$, qui est l'équation du cercle inscrit dans le triangle (son rayon vaut $h/3 = Q_0/3$).

16.3. Soient $\mathbf{p}_a = m_a\mathbf{v}_a$, $E_a = m_a v_a^2/2$ et $\mathbf{p}_b$, E_b les impulsions et les énergies des particules a et b dans un système de référence K.

Dans le système K', se déplaçant à la vitesse $\mathbf{V}$ par rapport au système K, on a

$$\mathbf{p}'_a = m_a(\mathbf{v}_a - \mathbf{V}), \qquad \mathbf{p}'_b = m_b(\mathbf{v}_b - \mathbf{V}),$$
$$E'_a = \tfrac{m_a}{2}(\mathbf{v}_a - \mathbf{V})^2, \qquad E'_b = \frac{m_b}{2}(\mathbf{v}_b - \mathbf{V})^2.$$

Un simple calcul montre que

$$s' \equiv (\mathbf{p}'_a + \mathbf{p}'_b)^2 + 2(m_a + m_b)(E'_a + E'_b) = s,$$

c'est-à-dire que s est, en fait, une grandeur invariante par rapport aux transformations galiléennes.

Dans le système où la particule A est au repos, on a $\mathbf{p}_a + \mathbf{p}_b = 0$, de sorte que $s = 2(m_a + m_b)(E_{a,0} + E_{b,0}) = 2MQ_0$.

16.4. Le problème peut être résolu de façon analogue au précédent. On peut aussi se passer de calculs si l'on remarque que $s + t = 0$.

16.5. Représentons l'énergie cinétique de la particule a avant le choc sous la forme

$$E_a = \frac{m_a \mathbf{v}_a^2}{2} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mu v_{rel}^2}{2}, \tag{1}$$

où $M = m_a + m_b$, où μ est la masse réduite $\mathbf{P} = m_a \mathbf{v}_a$ l'impulsion totale du système et où $\mathbf{v}_{rel} = \mathbf{v}_a$. Alors,

$$E_a = \frac{\mu v_{rel}^2}{2} \frac{m_a}{\mu} = \frac{\mu v_{rel}^2}{2} \left(1 + \frac{m_a}{m_b}\right). \tag{2}$$

Compte tenu du fait que l'impulsion d'un système isolé et, donc, l'énergie cinétique du mouvement de translation du centre de masse $E_{c.m.} = \mathbf{P}^2/2M$ se conservent, on voit que l'excitation de la particule b ne peut s'effectuer qu'aux dépens d'une partie de l'énergie E égale à $\mu \mathbf{v}_{rel}^2/2$ (le second terme dans (1)). La condition $\mu \mathbf{v}_{rel}^2/2 \geq Q_0$, selon (2), détermine alors les valeurs E_a pour lesquelles l'excitation peut se produire :

$$E_a \geq \left(1 + \frac{m_a}{m_b}\right) Q_0 = E_{seuil}.$$

Cas limites :
a) $E_{seuil} \approx Q_0$ pour $m_a \ll m_b$;
b) $E_{seuil} \approx (m_a/m_b) Q_0 \gg Q_0$ pour $m_a \gg m_b$.

16.6. Compte tenu du diagramme obtenu pour une diffusion élastique (voir [5]), on voit aussitôt que dans ce cas, le diagramme a la forme donnée sur la figure 13 :

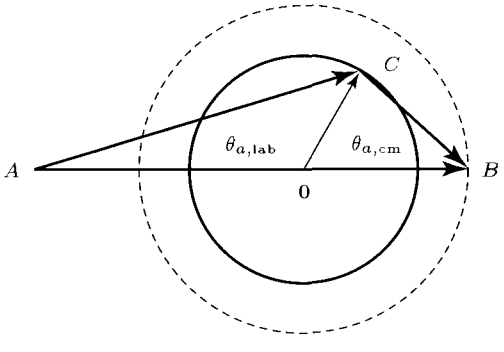

Figure 13

1) $\overrightarrow{AB} = \mathbf{p}_0 = m_a \mathbf{v}_a$ est l'impulsion de la particule a avant le choc dans le système du laboratoire (c'est également l'impulsion totale du système) ;

2) $\overrightarrow{OB} = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b} \mathbf{v}_a$ est l'impulsion de la particule a avant le choc dans le système du centre de masse ;

3) $\overrightarrow{OC}$ est l'impulsion de la particule a après le choc dans le système du centre de masse ;

4) $\overrightarrow{AC}$ est l'impulsion de la particule a après le choc dans le système du laboratoire ;

5) $\overrightarrow{CB}$ est l'impulsion de la particule b après le choc dans le système du laboratoire.

Le point C est situé sur le cercle dont le rayon OC vaut la valeur de l'impulsion des particules dans le système du centre de masse après le choc :

$$\begin{aligned} OC &= \sqrt{(OB)^2 - 2\mu Q_0}, \\ \text{où } \mu &= \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}. \end{aligned}$$

Cette relation vient de la loi de conservation de l'énergie, qui, dans le système du centre de masse, prend la forme

$$T_i = T_f + Q_0$$

où T_i et T_f sont les énergies cinétiques du mouvement relatif avant et après le choc :

$$T_i = \frac{OB^2}{2\mu} \quad \text{et} \quad T_f = \frac{OC^2}{2\mu}$$

Dans une collision élastique $Q_0 = 0$, de sorte que $OC = OB$ et lorsque l'on passe d'une collision élastique à une collision inélastique, on modifie la valeur du rayon du cercle OC.

La figure décrit le cas de $m_a > m_b$; pour $m_a < m_b$ le point A se trouve à l'intérieur du cercle de rayon OB.

Si au cours du choc, au lieu d'une excitation de la particule, on a passage d'un état excitée à un état énergétique inférieur, on a $Q_0 < 0$. Dans ce cas le rayon OC est plus grand que OB, et, comme on le constate, il se peut que la particule b (au repos avant le choc) ait après la collision une direction opposée à celle du mouvement de la particule incidente a.

16.7. L'invariance galiléenne des grandeurs s, t, u peut s'établir par un calcul direct (comparer à la solution du problème 16.3).

Dans le système du centre de masse $\mathbf{p}_a = -\mathbf{p}_b$. Alors $p_a = \sqrt{2\mu E_0}$ (μ étant la masse réduite), $\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p}'_a = p_a^2 \cos\theta$, où E_0 est l'énergie cinétique du mouvement relatif des particules et θ est l'angle de diffusion dans le système du centre de masse. On trouve aussitôt

$$\begin{aligned} s &= 2(m_a + m_b)E_0, \qquad t = -4\mu E_0(1 - \cos\theta), \\ u &= -4\mu E_0(1 + \cos\theta) - 2\frac{(m_a - m_b)^2}{m_a + m_b}E_0, \end{aligned}$$

de plus, $s + t + u = 0$.

16.8. Compte tenu du résultat du problème 16.3, on voit que pour le premier des mécanismes de réaction proposés la grandeur s a une valeur bien déterminée $s_R = 2MQ_0$ ($M = m_a + m_b$ est la masse de la particule R), de sorte que la distribution en s a la forme

$$dw = C\delta(s - s_R)ds. \tag{1}$$

Pour le second mécanisme il faut s'attendre à ce que la distribution en s soit plus étalée (fig. 14).

Il est connu que la valeur de l'énergie du système susceptible de se désintégrer (particule instable) n'est pas déterminée mais a une largeur de l'ordre de $\Gamma = \hbar/\tau$ (τ étant la durée de vie de la particule). L'énergie de désintégration Q_0 est donc aussi comprise dans un intervalle de largeur Γ et la prise en compte de ce fait conduit à un certain élargissement de la distribution δ (1) représentée sur la figure 14 par une ligne discontinue.

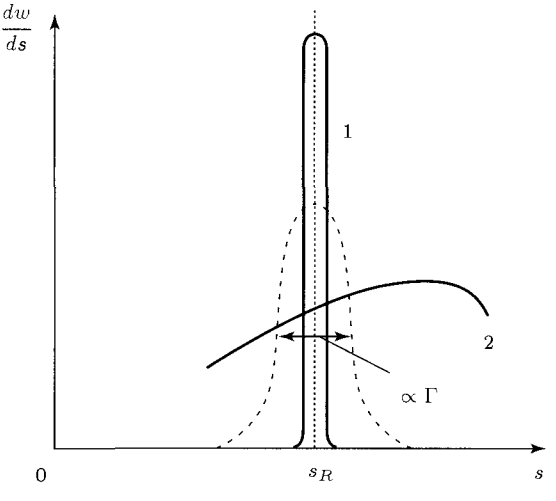

Figure 14

L'observation expérimentale directe des particules à très courte durée de vie (on a, par exemple, $\tau \sim 10^{-23}$ s pour des particules dites de résonance étudiées en physique des particules élémentaires) s'avère souvent impossible (elles parcourent de très petites distances entre le point de création et le point de désintégration). Toutefois l'existence de corrélation impulsion-énergie pour les produits de désintégration permet d'identifier ces particules instables et d'étudier leurs propriétés (il n'est pas difficile alors de généraliser cette étude pour des désintégrations à trois particules ou plus et de tenir compte de la nature relativiste de la cinématique des processus).

16.9. Soit $x \to x' = x'(x)$ une transformation des coordonnées x (pour abréger, on les note par une seule lettre) du système.

L'opérateur $\widehat{O}$ associé à cette transformation est défini par la condition

$$\Psi'(x) = \widehat{O}\Psi(x) \equiv \Psi(x'), \tag{1}$$

où $\Psi(x)$ est une fonction d'onde quelconque.

Faisons agir par l'opérateur $\widehat{O}$ sur la fonction $\widehat{H}\Psi(x)$, où $\widehat{H}\left(x, \dfrac{\partial}{\partial x}\right)$ est l'hamiltonien du système. En utilisant (1), on obtient

$$\widehat{O}\widehat{H}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x) = \widehat{H}\left(x', \frac{\partial}{\partial x'}\right)\Psi(x') = \widehat{H}\left(x', \frac{\partial}{\partial x'}\right)\widehat{O}\Psi(x),$$

ou

$$\left\{\widehat{O}\widehat{H}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) - \widehat{H}\left(x', \frac{\partial}{\partial x'}\right)\widehat{O}\right\}\Psi(x) = 0,$$

et étant donné que la fonction d'onde $\Psi(x)$ est arbitraire, on trouve

$$\widehat{O}\widehat{H}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) - \widehat{H}\left(x', \frac{\partial}{\partial x'}\right)\widehat{O} = 0. \tag{2}$$

L'invariance de l'hamiltonien par rapport à la transformation considérée signifie que $\widehat{H}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) = \widehat{H}\left(x', \frac{\partial}{\partial x'}\right)$. La relation (2) montre alors que $\widehat{O}$ commute avec $\widehat{H}$.

a) Pour une translation, l'opérateur $\widehat{O}$ est de la forme $\widehat{O} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{a}\cdot\widehat{\mathbf{P}}\right)$ (voir 1.12, b du Tome I). Sa commutativité avec $\widehat{H}$ est équivalente à la condition $[\widehat{\mathbf{P}}, \widehat{H}] = 0$ correspondant à la conservation de l'impulsion du système $\left(\widehat{\mathbf{P}} = \sum\limits_n \mathbf{p}_n\right)$.

b) Pour une rotation du système de coordonnées, on a $\widehat{O} = \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}})$, où $\widehat{\mathbf{L}}$ est l'opérateur moment orbital total du système de particules (voir 3.1 du Tome I). La commutativité de $\widehat{O}$ avec $\widehat{H}$, équivalente à la condition $[\widehat{\mathbf{L}}, \widehat{H}] = 0$, correspond à la conservation du moment orbital du système.

c) Pour une réflexion des coordonnées, $\widehat{O}\Psi(\mathbf{r}_n) = \Psi(-\mathbf{r}_n)$ et la commutativité de $\widehat{O}$ avec $\widehat{H}$ signifie que la parité est conservée.

L'hamiltonien d'un système isolé de particules sans spin (pour les particules avec spin voir plus bas) est invariable relativement aux transformations étudiées plus haut et cela est lié aux propriétés de l'espace libre : son homogénéité, l'isotropie et l'équivalence droit-gauche (il est vrai que cette dernière équivalence et donc la loi de conservation de la parité sont perturbées les interactions dites faibles).

Un potentiel extérieur peut perturber ces propriétés et l'hamiltonien du système de particules peut alors ne plus posséder un degré de symétrie aussi élevé que celui du système isolé. Cependant certains éléments de symétrie ainsi que les constantes du mouvement correspondantes peuvent être préservés dans ce cas également (voir problème suivant).

En ce qui concerne la rotation d'un système de particules avec spin on doit faire la remarque suivante : en présence d'interaction dépendant du spin (interaction spin-orbite, forces tensorielles), l'hamiltonien du système n'est plus invariant par rapport à la transformation de rotation des seules coordonnées spatiales, décrite par l'opérateur $\widehat{O} = \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{\mathbf{L}})$. L'isotropie de l'espace se manifeste dans ce cas par la commutativité de l'opérateur moment total du système $\widehat{\mathbf{J}} = \widehat{\mathbf{L}} + \widehat{\mathbf{S}}$ avec l'hamiltonien, ce système correspondant à l'invariance de l'hamiltonien du système par rapport à la transformation réalisée par l'opérateur $\widehat{R}_{\boldsymbol{\varphi}_0} = \exp(i\boldsymbol{\varphi}_0 \cdot \widehat{J})$.

16.10. Selon le problème précédent, la présence dans le système de constantes du mouvement (impulsion $\mathbf{P}$, moment $\mathbf{L}$, parité P) est liée aux propriétés d'invariance

de l'hamiltonien du système par rapport aux translations, rotations et réflexions de coordonnées (c'est ainsi que l'invariance de l'hamiltonien par rapport à la translation suivant une certaine direction donne lieu à la conservation de la projection de l'impulsion totale du système sur cette direction, etc.).

L'hamiltonien d'un système de N particules dans un potentiel extérieur a la forme

$$\begin{aligned} \widehat{H} &= -\sum_{n=1}^{N} \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_n + U_{\text{int}}(\ldots, |\mathbf{r}_{n_1} - \mathbf{r}_{n_1}|, \ldots) \\ &+ U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) \equiv \widehat{H}_0 + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t), \end{aligned} \tag{1}$$

où U_{int} est l'énergie potentielle d'interaction des particules du système entre elles.

L'hamiltonien du système en l'absence de potentiel extérieur, $\widehat{H}_0$, présente la plus haute symétrie : il est invariant par rapport à une translation quelconque, à une rotation et à une réflexion de coordonnées (les opérateurs $\widehat{\mathbf{P}}$, $\widehat{\mathbf{L}}$, $\widehat{P}$ commutent avec $\widehat{H}_0$ et sont des constantes du mouvement). Le potentiel extérieur perturbe (partiellement ou complètement) cette symétrie, de sorte que c'est la symétrie du potentiel extérieur

$$U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N, t) = \sum_n U_n(\mathbf{r}_n)$$

qui détermine la symétrie de l'hamiltonien (1).

A son tour, la symétrie U_{ext} est définie de façon univoque par la nature de la symétrie des sources du potentiel extérieur et pour la déterminer il faut choisir un système de coordonnées adapté à la symétrie du système physique étudié. Or la symétrie du système se traduit par l'indépendance de U_{ext} par rapport à certaines coordonnées (par exemple, de l'angle azimutal autour d'un axe de symétrie, etc.).

Etant donné les considérations exposées plus haut, la forme explicite des opérateurs projection de l'impulsion et du moment sur un axe (par exemple, sur l'axe z) :

$$\widehat{P}_z = -i\hbar \sum_n \frac{\partial}{\partial z_n}, \qquad \widehat{L}_z = -i \sum_n \frac{\partial}{\partial \varphi_n},$$

où φ est l'angle azimutal dans le plan perpendiculaire à l'axe z ainsi que la conservation de l'énergie du système pour $\frac{\partial}{\partial t} U_{\text{ext}} = 0$, on aboutit aux conclusions suivantes sur les constantes du mouvement.

1) Les constantes du mouvement sont E, P_x, P_y, P_z, L_x, L_y, L_z et P.

   Vu que, pour un système isolé, les mouvements relatif et du centre de masse sont indépendants, les lois de conservation de E, $\mathbf{L}$, P peuvent être précisés : elles se conservent non seulement pour le mouvement du système dans son ensemble, mais également pour chacun des deux mouvements.

2) Le système possède une symétrie axiale par rapport à l'axe du cylindre, l'axe z, et est invariant par translation suivant cette direction. Donc, en coordonnées cylindriques,

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(\rho_n)$$

et les constantes du mouvement sont E, P_z, L_z et P.

3) Le système est invariant par rapport à toute translation suivant une direction parallèle au plan x, y créant le potentiel extérieur, possède une symétrie azimutale par rapport à l'axe z perpendiculaire au plan x, y et une symétrie de miroir par rapport à ce plan ; donc,

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(|z_n|)$$

Les constantes du mouvement sont E, P_x, P_y, L_z et P.

4) Le système possède une symétrie centrale par rapport au centre de la sphère ;

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(|\mathbf{r}_n|)$$

($r = 0$ est le centre de la sphère). Les constantes du mouvement sont E, L_x, L_y, L_z, $\mathbf{L}^2$ et P.

5) Le système est invariant par rapport à la translation dans la direction y limitant le demi-plan x, y créant le potentiel extérieur et possède une symétrie de miroir par rapport à ce plan, de sorte que

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(x_n, |z_n|).$$

Les constantes du mouvement sont E et P_y.

6) Le système possède une symétrie axiale par rapport à l'axe z passant par les points, sources du potentiel extérieur ;

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n).$$

Les constantes du mouvement sont E et L_z.

Dans le cas particulier, quand les points portent une même charge : $U_n = U_n(\rho_n, |z_n|)$, et, la parité P se conserve aussi.

7) Si la direction des forces agissant sur les particules est fonction du temps, le système ne possède aucune intégrale mécanique de mouvement. Si, par contre, ce sont les intensités des forces qui dépendent du temps et non pas leur direction (commune pour toutes les particules du système), alors, en choisissant l'axe z le long de cette direction, on a

$$U_{\text{ext}} = \sum_n F_n(t) z_n,$$

et, donc, les constantes du mouvement sont P_x, P_y et L_z.

8) La symétrie du système est celle du cas 2) :

$$U_{\text{ext}} = f(t) \sum_n U_n(\rho_n).$$

Les constantes du mouvement sont P_z, L_z et P.

9) En choisissant les axes x, y, z le long des axes principaux de l'ellipsoïde, il vient

$$U_{\text{ext}} = \sum_n (|x_n|, |y_n|, |z_n|).$$

Les constantes du mouvement sont E et P. Pour une ellipsoïde de révolution, son axe de rotation z est un axe de symétrie axiale et L_z est une constante du mouvement.

10) L'axe de l'hélice est l'axe z, le pas de l'hélice est a, l'angle de rotation autour de l'axe est φ.

La fonction

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n, \varphi_n)$$

est invariante par rapport à la transformation

$$\varphi_n \to \varphi_n + \delta\alpha, \qquad z_n \to z_n + \frac{a}{2\pi}\delta\alpha$$

(de sorte que pour $\delta\alpha = 2\pi$, on a $\delta z_n = a$) pour des ρ_n fixés :

$$\delta U_{\text{ext}} = \sum_n \left\{ \frac{\partial U_{\text{ext}}}{\partial \varphi_n}\delta\alpha + \frac{\partial U_{\text{ext}}}{\partial z_n}\delta z_n \right\} = \delta\alpha \left\{ \sum_n \frac{\partial}{\partial \varphi_n} + \frac{a}{2\pi}\sum_n \frac{\partial}{\partial z_n} \right\} U_{\text{ext}} = 0.$$

Cela signifie que l'opérateur U_{ext} (et, par suite, l'hamiltonien $\hat{H}$) commute avec l'opérateur

$$\sum_n \frac{\partial}{\partial \varphi_n} + \frac{a}{2\pi}\sum_n \frac{\partial}{\partial z_n} = \frac{i}{\hbar}(\hbar\hat{L}_z + \frac{a}{2\pi}\hat{P}_z).$$

Par conséquent, les constantes du mouvement sont la combinaison $L_z + \dfrac{a}{2\pi\hbar}P_z$ ainsi que (comme $\frac{\partial}{\partial t}U_{\text{ext}} = 0$) l'énergie E.

11) En choisissant l'axe z le long de l'axe du cône, on a pour un cône à une nappe

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(\rho_n, z_n)$$

et les constantes du mouvement sont E et L_z.

Pour un cône à deux nappes

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(\rho_n, |z_n|)$$

et il y a de plus comme constante du mouvement la parité P.

12) L'axe du tore est l'axe z et le plan équatorial du tore est $z = 0$, alors

$$U_{\text{ext}} = \sum_n U_n(\rho_n, |z_n|).$$

Les constantes du mouvement sont E, L_z et P.

16.11. En utilisant la règle de dérivation par rapport au temps d'un produit d'opérateurs (voir 7.1 du Tome I)

$$\frac{d}{dt}(\hat{f}_1\hat{f}_2) = \left(\frac{d}{dt}\hat{f}_1\right)\hat{f}_2 + \hat{f}_1\frac{d}{dt}\hat{f}_2.$$

et compte tenu de ce que d'après l'énoncé $\frac{d}{dt}\hat{f}_1 = \frac{d}{dt}\hat{f}_2 = 0$, on obtient $\frac{d}{dt}(\hat{f}_1\hat{f}_2) = 0$; de façon analogue, on a $\frac{d}{dt}(\hat{f}_2\hat{f}_1) = 0$. De cette façon, $\hat{f}_1\hat{f}_2$ et $\hat{f}_2\hat{f}_1$, comme les combinaisons données dans l'énoncé du problème de ces opérateurs (ces derniers étant des opérateurs hermitiens si $\hat{f}_1$ et $\hat{f}_2$ le sont) sont des intégrales du mouvement.

16.12. L'assertion de ce problème est le corollaire direct du résultat obtenu dans le problème précédent, car $\widehat{P}_y = i[\widehat{P}_x, \widehat{J}_z] = i(\widehat{P}_x\widehat{J}_z - \widehat{J}_z\widehat{P}_x)$. La commutativité de $\widehat{P}_x$ avec l'hamiltonien du système $\widehat{H}$ (P_x est une constante du mouvement) signifie que, pour ce système, l'espace est homogène dans la direction x ; de même la commutativité de $\widehat{J}_z$ avec $\widehat{H}$ témoigne de la symétrie axiale par rapport à l'axe z (donc les propriétés mécaniques du système ne varient pas lors des translations suivant l'axe x et des rotations autour de l'axe z).

Comme on s'en aperçoit aussitôt, le système est donc aussi homogène par rapport à toute direction du plan x, y (et non pas uniquement suivant l'axe x), ce qui aboutit à la conservation de $\widehat{P}_x$ et de $\widehat{P}_y$.

La symétrie étudiée dans ce problème est, par exemple, celle d'un système de particules en interaction se trouvant dans le potentiel d'un plan homogène infini (du plan x, y), voir problème 16.10, 3).

16.13. L'assertion du problème est le corollaire direct du résultat obtenu dans le problème 16.11, vu que $\widehat{J}_z = -i(\widehat{J}_x\widehat{J}_y - \widehat{J}_y\widehat{J}_x)$. Sa relation avec les propriétés de symétrie du système peut être précisée (comparer avec le problème précédent) : la conservation de $\widehat{J}_x$ et de $\widehat{J}_y$ est liée à la commutativité de ces opérateurs avec l'hamiltonien du système et vient de la symétrie axiale du système par rapport aux axes x et y. L'existence dans le système d'une symétrie axiale par rapport à deux axes différents qui se croisent entraîne automatiquement sa symétrie axiale par rapport à tout autre axe présentant un point commun avec les deux axes mentionnés plus haut, et entraîne donc la symétrie centrale du système (invariance dans les rotations autour d'un axe quelconque passant par le centre de symétrie).

16.14. Dans les deux cas, les constantes du mouvement sont l'énergie E, les projections du moment total de la particule $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$ et, donc, le carré du moment $\mathbf{j}^2$. En outre, dans le cas a) parité P est une constante du mouvement.

Vu que les fonctions propres de l'hamiltonien peuvent être choisies comme fonctions propres des opérateurs commutant avec lui et entre eux, on voit que les fonctions d'onde indépendantes des états stationnaires de la particule prennent dans le cas a) la forme

$$\Psi_{Ejl_{1,2}j_z} = f(r)\Psi_{jlj_z}, \qquad l_{1,2} = j \pm 1/2,$$

où Ψ_{jlj_z} sont les fonctions d'onde spin-angulaires d'une particule avec un spin $s = 1/2$ (voir 5.41, 5.42 du Tome I) ; alors la parité de l'état est $P = (-1)^{l_{1,2}}$, et l'équation de Schrödinger se réduit à une équation unidimensionnelle de la fonction $f(r)$.

Dans le cas b), les fonctions d'onde des états stationnaires sont de la forme

$$\Psi_{Ejj_z} = f_1(r)\Psi_{j,l=j+1/2,j_z} + f_2(r)\Psi_{j,l=j-1/2,j_z},$$

et l'équation de Schrödinger se réduit à un système de deux équations différentielles linéaires pour des fonctions $f_1(r)$ et $f_1(r)$.

16.15. L'hamiltonien de la particule $\widehat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m - \mu_0 \mathbf{B} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ prend dans le cas a) la forme

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\} - \mu_0 B(\rho)\hat{\sigma}_z,$$

et les constantes du mouvement sont E, p_z, l_z, s_z et P.

Dans le cas b),

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\} - \mu_0 B(\rho)(-\sin\varphi\hat{\sigma}_x + \cos\varphi\hat{\sigma}_y),$$

et les constantes du mouvement sont E, p_z et $j_z = l_z + s_z$.

16.16. Compte tenu de la forme de l'hamiltonien $\widehat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m - \mathbf{F}_0 \cdot \mathbf{r}$ on obtient

$$\frac{d}{dt}\widehat{\mathbf{G}} = \frac{\partial}{\partial t}\widehat{\mathbf{G}} + \frac{i}{\hbar}[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{G}}] = -\mathbf{F}_0 - \frac{i}{\hbar}[\mathbf{F}_0 \cdot \mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}] = 0.$$

La valeur moyenne de l'opérateur $\widehat{\mathbf{G}}$, constante du mouvement, est indépendante du temps, de sorte que

$$\langle\widehat{\mathbf{G}}\rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t)\widehat{\mathbf{G}}\Psi(\mathbf{r}, t)dV = \langle\hat{\mathbf{p}}(t)\rangle - \mathbf{F}_0 t = \text{ cte } \equiv \mathbf{p}_0,$$

autrement dit $\langle\widehat{\mathbf{G}}\rangle$ est égal à l'impulsion moyenne de la particule à l'instant $t = 0$.

Le résultat de ce problème est une généralisation du résultat de la mécanique classique selon lequel, dans un champ homogène le vecteur $\mathbf{p}_0 = \mathbf{p}(t) - \mathbf{F}_0 t$ (soit $\mathbf{v}(t) = \mathbf{p}(0) + \mathbf{F}_0 t/m$) est une constante du mouvement et est égale à l'impulsion de la particule à $t = 0$.

16.17. Le spin du pion est $J_\pi = 0$, de sorte que le moment total J de deux pions dans le système du centre de masse (c'est également le système où la particule A^0 est au repos) coïncide avec le moment L de leur mouvement relatif, $J = L$, et ce même moment (on a conservation du moment) est égal au spin de la particule A^0 : $J_A = J = L$.

La parité du système des deux pions (dans le système du centre de masse) est

$$P_{2\pi} = (-1)^L P_\pi P_\pi = (-1)^L = (-1)^{J_A}$$

où $(-1)^L$ est la parité due au mouvement orbital de la paire, $P_\pi^2 = +1$ (bien que la parité intrinsèque du pion soit $P_\pi = -1$). En raison de la conservation de la parité, la parité intrinsèque P_A de la particule A^0 doit être égale à $P_A = P_{2\pi} = (-1)^{J_A}$.

La relation établie entre le spin et la parité de la particule A^0 (il est évident que $J_A = L$ est un entier) pour la désintégration de la particule $A^0 \to \pi^+\pi^-$ est la seule restriction imposée venant de la conservation de la parité.

Dans le cas de la désintégration $A^0 \to 2\pi^0$, il y a une restriction supplémentaire liée à l'identité des deux pions. En effet, la fonction d'onde de deux π_0 doit être symétrique par rapport à la permutation de leurs coordonnées spatiales. Mais, dans le système du centre de masse de deux π^0, la permutation des coordonnées est équivalente à la réflexion des coordonnées. Dans cette réflexion, la fonction d'onde est multipliée par $(-1)^L$, de sorte que l'invariance de la fonction d'onde restreint les valeurs possibles de L : $L = 0, 2, 4, \ldots$ Donc, la particule A^0 doit posséder une valeur paire du spin et une parité positive.

Les nombres quantiques J_A^p possibles sont donc :
a) $0^+, 1^-, 2^+, 3^-, \ldots$;
b) $0^+, 2^+, 4^+, \ldots$

Si la particule A^0 se trouve dans un état avec une valeur déterminée $J_z = M$, on aura pour les pions produits lors de la désintégration $L_z = M$. $J = L$ et $J_z = M$ définissent de façon unique la dépendance angulaire de la fonction d'onde des deux pions sous la forme $Y_{LM}(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, $\mathbf{p}$ étant l'impulsion relative des pions). La distribution angulaire des produits de désintégration $A^0 \to 2\pi^0$ est donc de la forme

$$\frac{dw}{d\Omega} = |Y_{LM}(\mathbf{n})|^2.$$

16.18. Supposons que la particule V ait une valeur définie m de la projection du spin sur l'axe z. En raison de la conservation du moment, les pions produits lors de la désintégration possèdent un moment de mouvement relatif $L = J_V = 1$ (le spin du pion est 0) et $L_z = m$, de sorte que la dépendance angulaire de leur fonction d'onde est définie de façon unique et a la forme $Y_{1m}(\mathbf{n})$ ($\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$).

Pour une particule V dans un état décrit par la fonction d'onde de spin de la forme $\chi = \sum_m c_m \chi_m$ ($\sum_m |c_m|^2 = 1$), la dépendance angulaire de la fonction d'onde des pions produits lors de la désintégration a la forme $\Psi = \sum_m c_m Y_{1m}$, de sorte que leur distribution angulaire est donnée par

$$\frac{dw}{d\Omega} = \left| \sum_m c_m Y_{1m}(\mathbf{n}) \right|^2 = \sum_{m,m'} c_m c_{m'}^* Y_{1m}(\mathbf{n}) Y_{1m'}^*(\mathbf{n}). \tag{1}$$

En passant dans l'expression (1) à la matrice densité de polarisation

$$c_m c_{m'}^* \to \rho_{mm'} = \overline{c_m c_{m'}^*}$$

et en utilisant la forme explicite des harmoniques sphériques

$$Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad Y_{1,\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

on obtient la distribution angulaire des pions produits lors de la désintégration $V \to 2\pi$:

$$\begin{aligned}\frac{dw}{d\Omega} &= \frac{3}{8\pi}\{(\rho_{11}+\rho_{-1,-1})\sin^2\theta + 2\rho_{00}\cos^2\theta - 2\ \mathrm{Re}\ \rho_{1,-1}\cos 2\varphi\sin^2\theta \\ &+ 2\ \mathrm{Im}\ \rho_{1,-1}\sin 2\varphi\sin^2\theta - \sqrt{2}\ \mathrm{Re}\ \rho_{10}\cos\varphi\sin 2\theta + \sqrt{2}\ \mathrm{Im}\ \rho_{10}\sin\varphi\sin 2\theta \\ &+ \sqrt{2}\ \mathrm{Re}\ \rho_{-10}\cos\varphi\sin 2\theta + +\sqrt{2}\ \mathrm{Im}\ \rho_{-10}\sin\varphi\sin 2\theta\Big\},\end{aligned}$$

où θ, φ sont les angles polaire et azimutal déterminant la direction de l'impulsion de l'un des pions. On a de plus $\rho_{11} + \rho_{00} + \rho_{-1,-1} = 1$.

16.19. Le moment total J et la parité P du système initial $\pi^-\mathrm{d}$ sont égaux à $J = 1$ et $P = P_\pi$. Vu que le moment est conservé, les deux neutrons dans l'état final ont aussi un moment total $J = 1$ (dans le système du centre de masse), et comme pour ces derniers $J = L + S$ (L étant le moment cinétique du mouvement relatif, S le spin total), les valeurs suivantes des nombres quantiques L, S sont possibles :

$$\begin{array}{llll} 1) & \mathrm{L} = 0, & \mathrm{S} = 1\ ; \\ 2) & \mathrm{L} = 1, & \mathrm{S} = 0\ ; \\ 3) & \mathrm{L} = 1, & \mathrm{S} = 1\ ; \\ 4) & \mathrm{L} = 2, & \mathrm{S} = 1\ . \end{array} \qquad (1)$$

On note toutefois que la condition d'antisymétrie de la fonction d'onde du système des deux neutrons leur interdit de se trouver dans les états avec les nombres quantiques 1), 2) et 4) de (1). En effet, les fonctions de spin avec $S = 1$ et $S = 0$ sont respectivement symétriques et antisymétriques par rapport à la permutation des variables de spin des deux neutrons (voir 5.17 du Tome I), tandis que la symétrie des fonctions spatiales pour un L donné coïncide avec la parité de ces fonctions $(-1)^L$ (puisque la permutation des coordonnées est équivalente à leur réflexion par rapport au centre de masse). Donc, la fonction d'onde antisymétrique par rapport à la permutation des variables de spin et d'espace des deux neutrons a les nombres quantiques $L = 1$ et $S = 1$. La parité de cet état est négative, et la conservation de la parité dans ce processus permet de conclure que la parité intrinsèque du pion est négative, c'est-à-dire que le pion est une particule pseudo-scalaire.

16.20. Comme le spin du pion vaut zéro, le moment total J du système de pions coïncide avec leur moment orbital L et comme le moment est conservé, $L = J_\tau = 0$. Selon 10.17, la parité orbitale de l'état du système de trois particules avec $L = 0$ est positive et, comme la parité intrinsèque d'un pion (et, en général, d'un nombre impair de pions) est négative, on conclut que la parité du système de trois pions avec un moment nul est négative. La particule τ doit avoir la même parité intrinsèque si, lors de la désintégration $\tau \to 3\pi$, la parité est conservée. Alors, la particule τ ne peut

évidemment pas se désintégrer en deux pions (comparer à 16.17). Donc, l'existence de canaux de désintégrations en deux et trois pions d'une particule de spin $J = 0$ traduit la violation de la conservation de la parité dans ces désintégrations (plus précisément, dans l'une d'elles). L'expérience a montré que les mésons K peuvent se désintégrer en deux et en trois pions et donc qu'il y a violation de la parité.

16.21. Pour résoudre ce problème, il faut tout d'abord établir la forme de la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde du système πN avec un moment $J = 1/2$. Etant donné que le spin et la parité sont $J^P_\pi = 0^-$ pour le pion et $J^P_{\rm N} = (1/2)^+$ pour le nucléon, on remarque que pour une valeur donnée J du moment total du système πN, le moment orbital L du mouvement relatif peut prendre deux valeurs : $L = J \pm 1/2$. La parité du système πN vaut $P_{\pi{\rm N}} = P_\pi P_{\rm N}(-1)^L = -(-1)^L$, de sorte qu'en fixant J et $P_{\pi{\rm N}}$ on détermine de façon unique L.

On trouve alors que dans le cas a) (c'est-à-dire pour $P_{\rm B} = -1$), $L = 0$, de sorte que la dépendance spatiale de la fonction d'onde du système πN ne dépend pas des angles et que sa dépendance spin-angulaire prend une forme triviale :

$$\Psi_{\pi{\rm N}} = \chi_{\rm N} \tag{1}$$

le spineur $\chi_{\rm N}$ décrivant l'état de spin du nucléon coïncide avec le spineur $\chi_{\rm B}$ qui décrit l'état de spin de la particule B (plus précisément, $\chi_{\rm N} = {\rm e}^{i\alpha}\chi_{\rm B}$). Ceci découle de la conservation du moment dans la désintégration :

$$\chi^*_{\rm B}\widehat{\mathbf{J}}\chi_{\rm B} \equiv \frac{1}{2}\chi^*_{\rm B}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\rm B} = \Psi^*_{\pi{\rm N}}\widehat{\mathbf{J}}\Psi_{\pi{\rm N}} \equiv \chi^*_{\rm N}\left(\widehat{\mathbf{L}} + \frac{1}{2}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\right)\chi_{\rm N} = \frac{1}{2}\chi^*_{\rm N}\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\chi_{\rm N}$$

Etant donné que la fonction d'onde ne dépend pas des angles, la distribution angulaire des produits de désintégration est isotrope.

Dans le cas b), on a $L = 1$. La forme de la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde se déduit du résultat obtenu dans le problème 5.38 du Tome I :

$$\Psi_{\pi{\rm N}} = C(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})\chi, \qquad \mathbf{n} = \mathbf{p}/p, \tag{2}$$

avec $\chi = {\rm e}^{i\alpha}\chi_{\rm B}$. La distribution angulaire des produits de désintégration est donnée par l'expression

$$\frac{dw}{d\Omega} \propto \Psi^*_{\pi{\rm N}}\Psi_{\pi{\rm N}} = |C|^2\chi^*_{\rm B}(\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})^2\chi_{\rm B} = |C|^2\chi^*_{\rm B}\chi_{\rm B} = |C|^2 = \text{ cte},$$

c'est-à-dire que comme dans le cas a), elle est isotrope.

Enfin dans le cas c), comme il n'y a pas conservation de la parité, la parité du système πN n'a pas de valeur déterminée, et la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde est une superposition des fonctions d'onde (1) et (2) :

$$\Psi_{\pi{\rm N}} = (a + b\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})\chi_{\rm B},$$

tandis que la distribution angulaire des produits de désintégration a la forme

$$\begin{aligned}\frac{dw}{d\Omega} &\propto \Psi^*_{\pi{\rm N}}\Psi_{\pi{\rm N}} = \chi^*_{\rm B}(a^* + b^*\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})(a + b\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})\chi_{\rm B} \\ &= \chi^*_{\rm B}(|a|^2 + |b|^2 + 2\ {\rm Re}\ ab^*\widehat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{n})\chi_{\rm B} \propto \left(1 + \frac{2\ {\rm Re}\ ab^*}{|a|^2 + |b|^2}\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{\rm B}\cdot\mathbf{n}\right).\end{aligned}$$

La propriété caractéristique de cette distribution est l'asymétrie "avant-arrière" des particules produites lors de la désintégration par rapport au vecteur de polarisation $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_B$ de la particule B. L'existence de cette corrélation entre la direction du vecteur axial $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_B$ et la direction du vecteur polaire $\mathbf{n}$, non invariante par rapport à la réflexion des coordonnées, est justement la manifestation de la non-conservation de la parité dans ce processus.

16.22. Pour la désintégration A $\to 2\pi$, on ne peut pas le faire. Ceci vient du fait que pour un système de deux pions (et, en général pour un système composé de deux particules de spin nul) il y a une relation univoque entre le moment J du système et la parité $P_{2\pi} = (-1)^J$ (comparer à 16.17). Donc sur la base de l'analyse de la seule distribution angulaire des pions, on ne peut pas distinguer la désintégration d'une particule A de spin J et de parité $P = (-1)^J$ en deux pions avec conservation de la parité de la désintégration d'une particule de parité opposée $(-1)^{J+1}$ et sans conservation de parité.

Pour la désintégration B $\to \pi$N, c'est possible. Dans ce cas, la non-conservation de la parité dans la désintégration se manifeste dans le fait que le système πN ne présente pas, en général, de parité bien déterminée. Donc, dans la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde des produits de désintégration on a deux termes

$$\Psi_{\pi N} = \Psi_{\pi N}^{(+)} + \Psi_{\pi N}^{(-)},$$

correspondant aux différentes parités (± 1). L'interférence de ces termes donne lieu à l'asymétrie de la distribution angulaire des produits de désintégration :

$$\frac{dw}{d\Omega} \propto \Psi_{\pi N}^* \Psi_{\pi N} = \left(\Psi_{\pi N}^{(+)*} + \Psi_{\pi N}^{(-)*}\right)\left(\Psi_{\pi N}^{(+)} + \Psi_{\pi N}^{(-)}\right),$$

qui se manifeste dans la différence entre les probabilités de production vers l'avant et vers l'arrière de particules par rapport au vecteur $\langle \mathbf{J}_B \rangle$ qui est le vecteur de spin moyen de la particule qui se désintègre. Un exemple de cette asymétrie est donné par la désintégration d'une particule de spin $J = 1/2$ étudié dans le problème précédent.

16.23. Les états de spin des photons γ se déterminent par leurs vecteurs de polarisation $\mathbf{e}_1$ et $\mathbf{e}_2$ satisfaisant à la condition de transversalité $\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{p}_1 = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{p}_2 = 0$, $\mathbf{p}_{1,2} = \pm \mathbf{p}/2$, où $\mathbf{p}$ est l'impulsion relative des photons dans leur système du centre de masse (qui est en même temps le système propre de la particule qui se désintègre).

D'après l'énoncé, les photons γ possèdent un moment total nul, leur fonction d'onde ne doit pas varier dans les rotations et, en vertu de la conservation de la parité lors de la désintégration, doit rester une fonction pseudo-scalaire dans la désintégration d'une particule pseudo-scalaire et scalaire dans la désintégration d'une particule scalaire.

Ces conditions définissent de façon unique la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde des photons γ sous la forme :

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \Psi_{2\gamma}(0^-) = C(\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2) \cdot \mathbf{p} \ ; \\ &\text{b)} \quad \Psi_{2\gamma}(0^+) = C(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2), \end{aligned} \tag{1}$$

d'où la démonstration du problème.

Notons que la forme établie (1) de la fonction d'onde d'un système de deux photons qui sont des bosons identiques est en accord avec la condition de symétrie de leur fonction d'onde par rapport à la permutation des particules au cours de laquelle $\mathbf{e}_1 \to \mathbf{e}_2$, $\mathbf{e}_2 \to \mathbf{e}_1$, $\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ (car $\mathbf{p} = \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$).

16.24. Faisons d'abord une étude générale en prenant en compte le spin du nucléon. Admettons qu'avant la collision le nucléon a une valeur déterminée $s_z = \pm 1/2$ de la projection du spin sur l'axe z dirigé le long de l'impulsion du pion incident. Il est évident que, d'après l'énoncé, la projection du moment total J_z, constituant une constante du mouvement, vaut $J_z = s_z$, car la projection du moment cinétique du mouvement relatif L_z sur la direction de l'impulsion est nulle (voir le problème 3.8 du Tome I). Donc, dans l'état final, la projection du spin de la particule B vaut également $J_{\mathrm{B}z} = s_z$ (il est essentiel, ici, de ne considérer que les événements pour lesquels la particule B se propage dans la même direction que le pion incident ou dans la direction opposé, car autrement, dans l'état final, $L'_z \neq 0$). Il est clair qu'en passant au système propre de la particule B (la vitesse du système étant dirigée suivant l'axe z) la valeur $J_{\mathrm{B}z}$, de la projection de son spin est conservée. Donc, dans son système propre, la particule sera caractérisée par la valeur $J_{\mathrm{B}z} = s_z$ de la projection de son spin.

Dans la désintégration B $\to \pi$ N, la dépendance spin-angulaire de la fonction d'onde du système πN se détermine de façon unique par les conditions suivantes : le moment du système vaut J_{B}, la projection du moment est s_z et la parité du système est égale à la parité P_{B} de la particule B. Les fonctions correspondantes $\Psi_{J_{\mathrm{B}} l J_z = s_z}$ ont été obtenues dans les problème 5.41 et 5.42 du Tome I, la valeur $l = J_{\mathrm{B}} \pm 1/2$ est définie par la conservation de la parité dans la désintégration : $P_{\mathrm{B}} = P_\pi P_{\mathrm{N}}(-1)^l = -(-1)^l$. La distribution angulaire des produits de désintégration est égale à $dw = |\Psi_{J_{\mathrm{B}} l s_z}|^2 d\Omega$. Dans le cas où le nucléon n'est pas polarisé, on doit calculer la valeur moyenne sur s_z :

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{1}{2}\{|\Psi_{J_{\mathrm{B}},l,1/2}|^2 + |\Psi_{J_{\mathrm{B}},l,-1/2}|^2\}.$$

Pour $J_{\mathrm{B}} \gg 1$, on peut négliger le spin du nucléon et considérer la désintégration B $\to \pi$ N comme une désintégration en deux particules sans spin. Alors J_{B} doit être considéré comme entier (c'est-à-dire on remplace J_{B} par $J_{\mathrm{B}} + 1/2$), tandis que $J_{\mathrm{B}z} = s_z = \pm 1/2$ est remplacé par $J_{\mathrm{B}z} = 0$. La distribution angulaire des produits de désintégration prend alors la forme

$$\frac{dw}{d\Omega} \approx |Y_{J_{\mathrm{B}},0}(\mathbf{n})|^2 = \frac{2J_{\mathrm{B}} + 1}{4\pi} |P_{J_{\mathrm{B}}}(\cos\theta)|^2. \tag{1}$$

En reportant dans (1) l'expression asymptotique des polynômes de Legendre

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

et en remplaçant le facteur qui oscille rapidement $\sin^2[(J_{\mathrm{B}} + 1/2)\theta + \pi/4]$ par sa valeur moyenne égale à $1/2$, on obtient la distribution cherchée :

$$\frac{dw}{d\Omega} \approx \frac{1}{2\pi^2 \sin\theta} \qquad \left(\int dw = 1\right).$$

16.25. Notons par l'indice i les particules dans l'état initial et par f celles dans l'état final, de sorte que

$$q_{i,f} = \frac{1}{2}Y_{i,f} + T_{3\,i,f}. \tag{1}$$

La loi de conservation de la charge s'écrit $\sum\limits_i q_i = \sum\limits_f q_f$, et celle de l'isospin (plus précisément, de sa projection T_3) $\sum\limits_i T_{3i} = \sum\limits_f T_{3f}$. Alors, d'après (1), on obtient $\sum\limits_i Y_i = \sum\limits_f Y_f$ qui montre que l'on a conservation de l'hypercharge.

16.26. L'opérateur dans l'espace d'isospin doit s'exprimer en fonction des opérateurs suivants : l'opérateur unité 1, les opérateurs composantes de l'isospin du nucléon $\hat{\tau}_i$ et du pion $\hat{t}_k$. Comme les opérateurs $\hat{\boldsymbol{\tau}}$, $\hat{\mathbf{t}}$ sont des opérateurs vectoriels dans l'espace d'isospin et que l'opérateur recherché doit être un scalaire, écrivons d'abord toutes les combinaisons scalaires possibles de ces opérateurs :

$$1, \hat{\boldsymbol{\tau}}^2, (\hat{\boldsymbol{\tau}}^2)^2, \ldots, \hat{\mathbf{t}}^2, (\hat{\mathbf{t}}^2)^2, \ldots, (\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}), (\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}})^2, \ldots \tag{1}$$

Les opérateurs $\hat{\boldsymbol{\tau}}^2 = 1/2 \cdot (1 + 1/2) = 3/4$ et $\hat{\mathbf{t}}^2 = 2$ sont multiples de l'opérateur unité (comme d'ailleurs leurs puissances) et ne sont donc pas linéairement indépendant de l'opérateur unité. De plus, on remarque que les valeurs propres de l'opérateur $\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}$ sont

$$\text{Valeurs propres de } \hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}} = \begin{cases} -1 & \text{dans l'état avec } T = 1/2, \\ 1/2 & \text{dans l'état avec } T = 3/2, \end{cases} \tag{2}$$

où T est la valeur de l'isospin total du système πN (voir le problème 3.34 du Tome I). Vu que l'opérateur $(\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}})$ n'a que deux valeurs propres différentes, selon le problème 1.27 du Tome I, on a

$$(\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}})^2 = \frac{1}{2}(1 - \hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}),$$

de sorte que $(\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}})^n$ pour $n \geq 2$ s'exprime en fonction de 1 et de $\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}$.

Ainsi, de tous les opérateurs isoscalaires (1), seuls 1 et $\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}$ sont linéairement indépendants, de sorte que

$$\widehat{U} = \widehat{V}_1 + \widehat{V}_2(\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}), \tag{3}$$

où $\widehat{V}_1$ et $\widehat{V}_2$ sont des opérateurs indépendants des variables d'isospin.

Compte tenu de (2) et (3), on trouve les opérateurs $\widehat{U}(T)$ de l'interaction pion-nucléon pour des états ayant une valeur déterminée de $T = 1/2, 3/2$ de l'isospin total :

$$\widehat{U}(T = 1/2) = \widehat{V}_1 - \widehat{V}_2, \qquad \widehat{U}(T = 3/2) = \widehat{V}_1 + \frac{1}{2}\widehat{V}_2,$$

et on peut écrire l'opérateur (3) en fonction de $\widehat{U}(T)$:

$$\widehat{U} = \frac{\widehat{U}(T = 1/2) + 2\widehat{U}(T = 3/2)}{3} - \frac{2[\widehat{U}(T = 1/2) - \widehat{U}(T = 3/2)]}{3}(\hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \hat{\mathbf{t}}).$$

16.27. Le problème se résout d'une façon analogue au problème précédent. La seule différence est la forme de l'opérateur $(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2)$ ($\hat{\mathbf{t}}_1$ et $\hat{\mathbf{t}}_2$ sont les opérateurs d'isospin des deux pions) qui a ici trois valeurs propres différentes :

$$\text{Valeurs propres } \hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2 \quad = \quad \begin{cases} 1 & \text{dans l'état avec } T = 2, \\ -1 & \text{dans l'état avec } T = 1, \\ -2 & \text{dans l'état avec } T = 0, \end{cases}$$

de sorte que les opérateurs linéairement indépendants sont 1, $\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2$ et $(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2)^2$ ($(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2)^3 = 2 + (\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2) - 2(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2)^2$). Ainsi l'opérateur de l'interaction $\pi\pi$ a dans l'espace d'isospin la forme

$$\hat{U} \quad = \quad \hat{V}_1 + \hat{V}_2(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2) + \hat{V}_3(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2)^2.$$

Les opérateurs représentant l'interaction des pions dans les états ayant une valeur déterminée de l'isospin sont :

$$\begin{aligned} \hat{U}(T=0) &= \hat{V}_1 - 2\hat{V}_2 + 4\hat{V}_3, \\ \hat{U}(T=1) &= \hat{V}_1 - \hat{V}_2 + \hat{V}_3, \\ \hat{U}(T=2) &= \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3. \end{aligned}$$

Finalement,

$$\begin{aligned} \hat{U} \quad = \quad & \frac{-\hat{U}(T=0) + 3\hat{U}(T=1) + \hat{U}(T=2)}{3} - \frac{\hat{U}(T=1) - \hat{U}(T=2)}{2}(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2) \\ + \quad & \frac{2\hat{U}(T=0) - 3\hat{U}(T=1) + \hat{U}(T=2)}{6}(\hat{\mathbf{t}}_1 \cdot \hat{\mathbf{t}}_2)^2. \end{aligned}$$

16.28. Compte tenu du fait que pour le pion l'opérateur charge est lié à la composante t_3 de l'isospin par la relation $\hat{q}_\pi = e\hat{t}_3$ ($e > 0$), on voit que l'opérateur recherché représentant l'interaction coulombienne entre de deux pions est de la forme

$$\hat{V}_{\text{coul}} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}\hat{t}_3^{(1)}\hat{t}_3^{(2)}.$$

16.29. Compte tenu de la relation entre les opérateurs charge du pion et du nucléon et les composantes t_3 de l'isospin ($e > 0$):

$$\hat{q}_N = \frac{e}{2}(1 + 2\hat{\tau}_3), \qquad \hat{q}_\pi = e\hat{t}_3,$$

il est facile de voir que l'opérateur recherché est de la forme

$$\hat{V}_{\text{coul}} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_\pi - \mathbf{r}_N|}(1 + 2\hat{\tau}_3)\hat{t}_3.$$

16.30. Etant donné que pour un système de deux pions la permutation des coordonnées des pions est équivalente à leur réflexion par rapport au centre de masse,

la symétrie de la fonction d'onde spatiale avec une valeur donnée du moment cinétique du mouvement relatif L (égal au moment total $J = L$) coïncide avec sa parité $(-1)^L$. La fonction d'onde de deux pions qui sont deux bosons identiques, doit être symétrique par rapport à la permutation de leurs variables : coordonnées et variables d'isospin. Donc, dans l'état avec L donné, la partie d'isospin de la fonction d'onde des pions doit être symétrique pour les valeurs paires de L et antisymétrique pour les valeurs impaires de L.

Compte tenu de la valeur de l'isospin du pion $T = 1$ et de l'analogie formelle des propriétés du moment et de l'isospin (y compris les règles d'addition d'isospins), on conclut, en s'appuyant sur le résultat du problème 3.39 du Tome I, que la partie d'isospin du système de deux pions par rapport à leur permutation est symétrique pour l'isospin total $T = 0$ et 2 et antisymétrique pour $T = 1$. Donc, dans les états avec L pair on a $T = 0$ et 2 et, pour L impairs, on a $T = 1$.

16.31. Compte tenu de l'analogie entre des propriétés du moment cinétique et de l'isospin et compte tenu de la symétrie de la partie isospin de la fonction d'onde du système de deux pions, on conclut, en se basant sur le résultat du problème 3.39 du Tome I, que l'isospin total de deux π^0 ne peut prendre que deux valeurs : $T = 0$ et $T = 2$ (la fonction d'onde de l'état avec $T = 1$ est antisymétrique par rapport à la permutation des variables d'isospin des pions), de sorte que

$$\overline{\mathbf{T}^2} \equiv \sum_T T(T+1)w(T) = 6w(T=2). \tag{1}$$

De plus, en utilisant le résultat du problème 3.37 du Tome I, on obtient $((t_3)_{\pi^0} = 0)$

$$\overline{\mathbf{T}^2} = 2t_\pi(t_\pi+1) + (t_3^{(1)})_{\pi^0}(t_3^{(2)})_{\pi^0} = 4. \tag{2}$$

D'après (1) et (2), on trouve : $w(T=2) = 2/3$, $w(T=0) = 1/3$.

16.32. Dans les états considérés du système πN, les composantes t_3 de l'isospin du nucléon et du pion possèdent des valeurs déterminées $((t_3)_{\mathrm{p}} = 1/2$, $(t_3)_{\mathrm{n}} = -1/2$, $(t_3)_{\pi^+} = 1$, $(t_3)_{\pi^0} = 0$, $(t_3)_{\pi^-} = -1)$. Compte tenu de l'analogie formelle des propriétés du moment cinétique et de l'isospin, ainsi que du résultat du problème 3.37 du Tome I, il vient

$$\overline{\mathbf{T}^2} = t_{\mathrm{N}}(t_{\mathrm{N}}+1) + t_\pi(t_\pi+1) + 2(t_3)_\pi(t_3)_{\mathrm{N}} = 11/4 + 2(t_3)_\pi(t_3)_{\mathrm{N}}. \tag{1}$$

D'autre part, pour le système πN, il n'existe que deux valeurs de l'isospin total : $T = 1/2$ et $T = 3/2$. En notant par $w(1/2)$ la probabilité d'avoir la valeur $T = 1/2$ $(w(3/2) = 1 - w(1/2))$, on obtient

$$\overline{\mathbf{T}^2} \equiv \sum_T T(T+1)w(T) = 15/4 - 3w(T=1/2). \tag{2}$$

En utilisant (1) et (2), on trouve :

a) pour les systèmes $\pi^+\mathrm{p}$ et $\pi^-\mathrm{n}$: $\overline{\mathbf{T}^2} = 15/4$, $w(3/2) = 1$ (résultat à fortiori évident) ;
b) pour les systèmes $\pi^+\mathrm{n}$ et $\pi^-\mathrm{p}$: $\overline{\mathbf{T}^2} = 7/4$, $w(1/2) = 2/3$, $w(3/2) = 1/3$;
c) pour les systèmes $\pi^0\mathrm{p}$ et $\pi^0\mathrm{n}$: $\overline{\mathbf{T}^2} = 11/4$, $w(1/2) = 1/3$, $w(3/2) = 2/3$.

16.33. Le problème peut être résolu de différentes façons. Par exemple, en tenant compte de l'analogie des propriétés du moment cinétique et de l'isospin, on peut se servir des coefficients de Clebsch-Gordan. L'addition de deux moments identiques en un moment total nul a été obtenu dans le problème 3.47 du Tome I. Appliqué à ce problème, on trouve

$$\Psi_{T=0}(2\pi) = \frac{1}{\sqrt{3}}\{\psi_1(1)\psi_{-1}(2) - \psi_0(1)\psi_0(2) + \psi_{-1}(1)\psi_1(2)\}. \tag{1}$$

Ici, $\Psi_{T=0}(2\pi)$ est la fonction d'onde d'isospin de deux pions avec $T = 0$; $\psi_{t_3}(1)$ ou $\psi_{t_3}(2)$ est une fonction d'onde d'isospin d'un pion avec une valeur déterminée de la composante t_3 de l'isospin ($t_3 = 1, 0, -1$).

Les probabilités de désintégration de f^0 dans les deux canaux ($\pi^+\pi^-$ et $2\pi^0$) sont proportionnelles aux probabilités de présence des pions dans ces états pour $T = 0$ (en vertu de la conservation de l'isospin dans la désintégration). D'après (1), la probabilité de désintégration en deux π^0 vaut $w_{T=0}(2\pi^0) = (1/\sqrt{3})^2 = 1/3$ (rappelons que pour le π^0, $t_3 = 0$). De même, $w_{T=0}(\pi^+\pi^-) = 2/3$, de sorte que

$$\frac{w(\mathrm{f}^0 \to \pi^+\pi^-)}{w(\mathrm{f}^0 \to 2\pi^0)} = 2. \tag{2}$$

Donnons encore deux autres solutions à ce problème :

1) Considérons la désintégration d'un nombre N de particules f^0. Après leur désintégration, il se forme $Nw(\mathrm{f}^0 \to \pi^+\pi^-)$ mésons π^+, le même nombre de mésons π^- et $2Nw(\mathrm{f}^0 \to 2\pi^0)$ mésons π^0 (dans la désintégration $\mathrm{f}^0 \to 2\pi^0$, il y a formation de deux π^0). Il est clair que le système initial composé de f^0 est symétrique dans l'espace d'isospin (vu que $T_{\mathrm{f}^0} = 0$). L'état final comprenant les pions de désintégration doit donc être également symétrique. Cette symétrie doit donner un nombre égal de pions dans les états de charge différents π^+, π^0, π^-, ce qui conduit immédiatement à la relation (2) établie plus haut.

   La solution donnée est très explicite du point de vue physique. On peut l'utiliser également dans les cas plus complexes (voir, par exemple, 16.35).

2) Utilisons le résultat du problème 1.48 du Tome I, selon lequel $|\Psi_A(B)|^2 = |\Psi_B(A)|^2$ (les notations sont celles du problème 1.48). Identifions à $\widehat{B}$ les opérateurs composantes $t_3^{(1)}$ et $t_3^{(2)}$ de l'isospin de deux pions et à $\widehat{A}$ les opérateurs carré de l'isospin total des pions $\widehat{\mathbf{T}}^2$ et de sa composante $\widehat{T}_3$. La relation prend alors la forme

$$|\Psi_{TT_3}(t_3^{(1)}, t_3^{(2)})|^2 = |\Psi_{t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}(T, T_3)|^2. \tag{3}$$

En posant dans (3) $T = 0$, $t_3^{(1)} = t_3^{(2)} = 0$, récrivons cette relation sous la forme $w_{T=0}(2\pi^0) = w_{2\pi^0}(T = 0) = 1/3$, où on a tenu compte de la valeur de la probabilité obtenue dans 16.31, que le système de deux pions π^0 ait un isospin total $T = 0$.

En accord avec ce qui a été dit antérieurement, la valeur trouvée de $w_{T=0}(2\pi^0) = 1/3$ donne la relation (2). Dans ce dernier procédé on utilise la possibilité de calculer les coefficients de Clebsch-Gordan (plus précisément, de leurs carrés) en utilisant la relation (3).

16.34. La partie isospin de la fonction d'onde de trois pions avec $T(3\pi) = 0$ peut être obtenue en prenant en compte des faits suivants :

1) l'analogie formelle des propriétés du moment cinétique et de l'isospin ;
2) la possibilité de décrire l'état d'un des pion séparé avec $t_\pi = 1$ par le vecteur $\boldsymbol{\varphi}$ dans l'espace d'isospin (la relation entre la représentation vectorielle et la représentation t_3 habituellement utilisée est alors identique à celle du moment cinétique, voir 3.67 du Tome I ; ainsi, le pion π^0 ($t_3 = 0$) est décrit dans l'espace d'isospin par le vecteur $\boldsymbol{\varphi}_{\pi^0}$ ayant les composantes $\boldsymbol{\varphi}_{\pi^0} = (0, 0, 1)$);
3) la fonction d'onde avec l'isospin $T = 0$ est un scalaire (ou un pseudoscalaire) dans l'espace d'isospin ;
4) à partir des trois vecteurs $\boldsymbol{\varphi}_a$ décrivant les états d'isospin des trois pions particuliers, on ne peut construire qu'une seule fonction d'onde d'isospin scalaire (ou plutôt pseudo-scalaire) d'un système de trois pions :

$$\Psi_{T=0}(3\pi) = \boldsymbol{\varphi}_1 \cdot (\boldsymbol{\varphi}_2 \wedge \boldsymbol{\varphi}_3) = \varepsilon_{ikl}\varphi_{1i}\varphi_{2k}\varphi_{3l}. \tag{1}$$

La fonction d'onde d'isospin trouvée correspondant à la valeur $T(3\pi) = 0$ est manifestement antisymétrique par rapport à la permutation des variables d'isospin de deux pions.

Comme la fonction d'onde d'isospin d'un système de trois π^0 est symétrique par rapport à leur permutation, la fonction d'onde antisymétrique (1) ne comporte pas de terme correspondant aux trois pions π^0 démontrant ainsi l'impossibilité de la désintégration donnée dans l'énoncé.

16.35. Pour Δ^{++} et Δ^-, il n'y a qu'un seul canal de désintégration : $\Delta^{++} \to \pi^+\mathrm{p}$, $\Delta^- \to \pi^-\mathrm{n}$ tandis que pour Δ^+ et Δ^0 il y a deux canaux de désintégration, par exemple,

$$\Delta^+ \to \begin{cases} \pi^+\mathrm{n}, \\ \pi^0\mathrm{p}. \end{cases} \tag{1}$$

Pour obtenir les probabilités relatives des désintégrations de Δ^+ suivant ces voies il faut tenir compte qu'en vertu de la conservation de l'isospin le système $\pi\mathrm{N}$ se trouve dans un état d'isospin avec $T = 3/2$ et $T_3 = 1/2$, et sa fonction d'onde d'isospin peut être représentée sous la forme

$$\Psi_{T=3/2,T_3=1/2} = C_1\psi_1(\pi)\psi_{-1/2}(\mathrm{N}) + C_2\psi_0(\pi)\psi_{1/2}(\mathrm{N}),$$

où $\psi_{t_3}(\pi)$ et $\psi_{t_3}(\mathrm{N})$ sont les fonctions d'onde d'isospin normées du pion et du nucléon dans un état avec une valeur déterminée de la composante t_3 de l'isospin. Les pions π^+, π^0, π^- correspondent aux valeurs $t_3 = 1, 0, -1$; pour le proton et le neutron, on a $t_3 = 1/2, -1/2$. Les grandeurs $|C_1|^2$ et $|C_2|^2$ définissent les probabilités des états de charge (respectivement de $\pi^+\mathrm{n}$ et $\pi^0\mathrm{p}$) du système pion-nucléon et, donc, les probabilités de désintégration Δ^+ suivant les voies (1).

Compte tenu de l'analogie des propriétés du moment cinétique et de l'isospin, on note que C_l et C_2 représentent les coefficients correspondants de Clebsch-Gordan, et leurs valeurs peuvent être facilement obtenues suivant les formules connues de ces coefficients. On donnera, cependant, deux méthodes de calcul de $|C_1|^2$ et $|C_2|^2$ qui n'exigent pas la connaissance de ces coefficients.

1) On utilise l'égalité

$$w_{TT_3}(t_3^{(1)}, t_3^{(2)}) = |\Psi_{TT_3}(t_3^{(1)}, t_3^{(2)})|^2 = |\Psi_{t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}(T, T_3)|^2 = w_{t_3^{(1)}, t_3^{(2)}}(T, T_3) \qquad (2)$$

(voir (16.33)) selon laquelle la probabilité d'un état de charge défini par les nombres quantiques $t_3^{(1)}, t_3^{(2)}$ dans l'état du système avec les valeurs données T et $T_3 = t_3^{(1)} + t_3^{(2)}$ est égale à la probabilité de la valeur totale d'isospin T dans l'état du système caractérisé par les nombres quantiques $t_3^{(1)}, t_3^{(2)}$ (en ce sens, l'égalité (2) peut être appelée "relation de réciprocité"). Pour le système $\pi\mathrm{N}$ envisagé, les valeurs du second membre de (2) ont été obtenues dans 16.32. Ceci pris en compte, on obtient $|C_1|^2 \equiv w_{T=3/2}(\pi^+\mathrm{n}) = w_{\pi^+\mathrm{n}}(T = 3/2) = 1/3$, etc., de sorte que

$$\frac{w(\Delta^+ \to \pi^+\mathrm{n})}{w(\Delta^+ \to \pi^0\mathrm{p})} = \frac{w(\Delta^0 \to \pi^-\mathrm{p})}{w(\Delta^0 \to \pi^0\mathrm{n})} = \frac{1}{2}. \qquad (3)$$

2) On utilise des arguments physiques suivants. Ecrivons les voies de désintégration possibles de la particule Δ en indiquant leur probabilité relative ($w_1 + w_2 = 1$) :

$$\Delta^{++} \to \pi^+\mathrm{p}, \qquad \Delta^- \to \pi^-\mathrm{n},$$
$$\Delta^+ \to \begin{cases} \pi^+\mathrm{n}, & w_1, \\ \pi^0\mathrm{p}, & w_2, \end{cases} \qquad \Delta^0 \to \begin{cases} \pi^-\mathrm{p}, & w_1, \\ \pi^0\mathrm{n}, & w_2. \end{cases} \qquad (4)$$

En écrivant (4), on a tenu compte du fait que les probabilités de deux désintégrations, dont l'une est la réflexion de l'autre dans l'espace d'isospin, sont égales (dans cette réflexion toutes les particules de la réaction possédant certaines composantes t_3 d'isospin sont remplacées par les particules correspondantes du multiplet avec la valeur opposée de t_3) ; c'est ainsi que $w(\Delta^+ \to \pi^+\mathrm{n}) = w(\Delta^0 \to \pi^-\mathrm{p})$.

Examinons un faisceau de particules Δ non polarisé en termes d'isospin, c'est-à-dire où tous les états de charge de Δ sont en nombre égal N_0. Parmi les produits de désintégration, pions et nucléons, les pions sont en nombres suivants: $N(\pi^+) = N(\pi^-) = N_0(1 + w_1)$, $N(\pi^0) = 2N_0 w_2 = 2N_0(1 - w_1)$. Sur la base de considérations physiques, il s'avère évident que le faisceau de pions dans l'espace d'isospin doit être de même non polarisé, de sorte que les différents états de charge du pion sont représentés de façon identique : $N(\pi^+) = N(\pi^0) = N(\pi^-)$. Cette

condition donne $w_1 = 1/3$ et aboutit à la relation (3) établie plus haut par une autre méthode. Notons que, dans ce cas, le faisceau de nucléons de désintégration est aussi non polarisé, c'est-à-dire $N(\mathrm{p}) = N(\mathrm{n})$.

16.36. Le problème se résout de façon analogue au problème précédent et on trouve :

$$\frac{w(\mathrm{N}^{*+} \to \pi^+\mathrm{n})}{w(\mathrm{N}^{*+} \to \pi^0\mathrm{p})} = \frac{w(\mathrm{N}^{*0} \to \pi^-\mathrm{p})}{w(\mathrm{N}^{*0} \to \pi^0\mathrm{n})} = 2.$$

16.37. Puisque $T_\mathrm{d} = 0$ et $T_\pi = 1$, les états finaux des deux réactions constituent deux états d'isospin d'un même système physique (pion + deutéron) avec un isospin égal à $T = 1$, ne différant que par la composante T_3 de l'isospin. Comme on a conservation de l'isospin, ces réactions ne sont autorisés que pour un état du système nucléon-nucléon initial avec un isospin $T = 1$. Dans la réaction $\mathrm{pp} \to \mathrm{d}\pi^+$, les deux nucléons se trouvent justement dans l'état d'isospin $T = 1$ (et $T_3 = 1$), tandis que dans la réaction $\mathrm{pn} \to \mathrm{d}\pi^0$, dans l'état avec $T = 1$ (et $T_3 = 0$) est évidemment représenté avec la probabilité $1/2$ (de même que pour l'état avec $T = 0, T_3 = 0$).

Suivant les conditions de sélection des sections efficaces $d\sigma$, les deux réactions sont absolument identiques du point de vue de degrés de liberté de coordonnées et de spin ; en vertu de l'invariance d'isospin le rapport de leurs sections efficaces est égal au rapport des probabilités des états d'isospin avec $T = 1$ dans les états initiaux, c'est-à-dire à deux, ce qu'il fallait démontrer.

16.38. Comme $T_\mathrm{d} = 0$, le deutéron joue, dans les réactions considérées, du point de vue de l'isospin, le rôle de "catalyseur" au cours du processus de "dissociation" du proton p en un nucléon et un pion :

$$\mathrm{p} \to \mathrm{N}(T = 1/2)\pi(T = 1).$$

Dans l'état initial, $T = 1/2$, $T_3 = 1/2$, et comme on a conservation de l'isospin, le système pion-nucléon dans l'état final, possède les mêmes valeurs pour T et T_3. D'après la condition de sélection des sections efficaces $d\sigma$ les deux réactions sont absolument identiques du point de vue des degrés de liberté de coordonnées et de spin, de sorte qu'en vertu de l'invariance de l'isospin le rapport de leurs sections efficaces est égal au rapport des "poids" des états $\mathrm{n}\pi^+$ et $\mathrm{p}\pi^0$ du système pion-nucléon dans l'état avec $T = 1/2$ et $T_3 = 1/2$. Ce rapport vaut 2, ce qui démontre l'assertion du problème (comparer à la solution des problèmes 16.35 et 16.36).

16.39. Notons par $d\sigma(\mathrm{I})$, $d\sigma(\mathrm{II})$ et $d\sigma(\mathrm{III})$ les sections efficaces différentielles des réactions considérées.

Les réactions (II) et (III) correspondent à la réaction $\pi^-\mathrm{p} \to \pi\mathrm{N}$ ne différant que par les états de charge divers du système pion-nucléon dans l'état final dont l'isospin, d'après l'énoncé, vaut $T = 3/2$. Comparons $(d\sigma(\mathrm{II})+d\sigma(\mathrm{III}))$ à $d\sigma(\mathrm{I})$. Les réactions étudiées sont absolument identiques du point de vue des degrés de liberté de coordonnées et de spin, et en vertu de l'invariance de l'isospin (compte tenu du rôle

supposé dominant de l'état $T = 3/2$ dans l'interaction πN) le rapport des sections efficaces $(d\sigma(\mathrm{II})+d\sigma(\mathrm{III})) : d\sigma(\mathrm{I})$ est égal au rapport des "poids" des états d'isospin avec $T = 3/2$ dans les états initiaux $\pi^-\mathrm{p}$ et $\pi^+\mathrm{p}$ du système pion-nucléon. Ces "poids" valent : 1 pour le système $\pi^+\mathrm{p}$ et 1/3 pour le système $\pi^-\mathrm{p}$ (comparer à 16.35), de sorte que

$$(d\sigma(\mathrm{II})+d\sigma(\mathrm{III})) : d\sigma(\mathrm{I}) = 1 \ : \ 3. \tag{1}$$

Cherchons le rapport $d\sigma(\mathrm{II}) \ : \ d\sigma(\mathrm{III})$. Il est égal au rapport des "poids" des états de charge $\pi^0\mathrm{n}$ et $\pi^-\mathrm{p}$ du système pion-nucléon dans l'état avec $T = 3/2$ (et $T_3 = -1/2$) et vaut 2 (comparer au résultat du problème 16.35), c'est-à-dire

$$d\sigma(\mathrm{II}) \ : \ d\sigma(\mathrm{III}) = 2 \ : \ 1. \tag{2}$$

De (1) et (2), on déduit la relation cherchée:

$$d\sigma(\mathrm{I}) : d\sigma(\mathrm{II}) : d\sigma(\mathrm{III}) = 9 \ : \ 2 \ : \ 1.$$

16.40. En vertu de la symétrie d'isospin, les probabilités de transition, les sections efficaces différentielles, etc., de deux processus liés l'un à l'autre par les substitutions $\mathrm{p} \to \mathrm{n}$, $\mathrm{n} \to \mathrm{p}$, $\pi^+ \to \pi^-$, $\pi^- \to \pi^+$ et $\pi^0 \to \pi^0$ sont égales (dans l'espace d'isospin, ces deux processus constituent des réflexions par rapport au plan perpendiculaire à l'axe T_3).

Soulignons de plus le fait suivant : la substitution de particules par leurs correspondants doivent naturellement s'effectuer dans l'état initial et dans l'état final. Appliqué aux réactions considérées, cela signifie que les caractéristiques d'impulsions et de spins du proton et du neutron dans les états initiaux des deux réactions doivent être échangées.

APPENDICE

OSCILLATEUR HARMONIQUE LINÉAIRE

La résolution de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur linéaire

$$\widehat{H}\Psi_n \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_n''(x) + \frac{kx^2}{2}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

donne les niveaux d'énergie $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$, $\omega = \sqrt{k/m}$, et les fonctions d'onde normées correspondantes des états stationnaires

$$\Psi_n^{\text{osc}} = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \mathrm{e}^{-x^2/2a^2} H_n\left(\frac{x}{a}\right),$$

où $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, $H_n(z)$ sont les polynômes d'Hermite.

Donnons les premiers polynômes d'Hermite :

$$H_0(z) = 1, \qquad H_1(z) = 2z, \qquad H_2(z) = 4z^2 - 2.$$

HARMONIQUES SPHÉRIQUES

Les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ sont les fonctions propres normées des opérateurs du moment orbital carré de la particule $\widehat{\mathbf{l}}^2$ et de sa projection $\widehat{l}_z$ sur l'axe z :

$$\widehat{\mathbf{l}}^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) \equiv -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial^2\varphi}\right] Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm},$$

$$\widehat{l}_z Y_{lm} \equiv -i\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm} = mY_{lm},$$

et ont la forme[1]

$$Y_{lm} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos\theta)\mathrm{e}^{im\varphi}$$

$$= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} i^l \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \sin^{|m|}\theta \frac{d^{|m|}P_l(\cos\theta)}{d(\cos\theta)^{|m|}}\mathrm{e}^{im\varphi},$$

1 La phase dans la définition des fonctions sphériques est la même que dans [1].

où P_l et $P_l^{|m|}$ sont respectivement les polynômes de Legendre et les fonctions de Legendre associées.

Quelques premières harmoniques sphériques sont :

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_{10} = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \qquad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1 - 3\cos^2\theta),$$

$$Y_{1,\pm1} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi},$$

$$Y_{2,\pm1} = \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi}, \qquad Y_{2,\pm2} = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\varphi}.$$

FONCTIONS DE BESSEL

La fonction de Bessel est la solution régulière en $z = 0$ de l'équation de Bessel

$$z^2w'' + zw' + (z^2 - \nu^2)w = 0.$$

Elle est donnée par la série

$$J_\nu(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k(z/2)^{2k+\nu}}{\Gamma(k+\nu+1)\Gamma(k+1)}.$$

La deuxième solution indépendante (singulière en $z = 0$) de l'équation de Bessel est donnée par la fonction de Neumann $N_\nu(z)$ définie comme

$$N_\nu(z) = \frac{J_\nu(z)\cos\pi\nu - J_{-\nu}(z)}{\sin\pi\nu}.$$

Pour $\nu = n$,

$$N_n(z) = \lim_{\nu\to n} N_\nu(z).$$

On utilise également les fonctions d'Hankel $H_\nu^{(1)}(z)$ et $H_\nu^{(2)}(z)$ définies comme

$$H_\nu^{(1,2)}(z) \equiv J_\nu(z) \pm iN_\nu(z).$$

Pour l'argument z imaginaire, on introduit les fonctions de Bessel modifiées et les fonctions de MacDonald :

$$I_\nu(z) \equiv i^{-\nu}J_\nu(iz),$$
$$K_\nu(z) \equiv \frac{\pi}{2}i^{\nu+1}H_\nu^{(1)}(iz).$$

Pour $z \to 0$, ces fonctions ont le comportement

$$J_\nu(z) \approx \frac{1}{\Gamma(\nu+1)}\left(\frac{z}{2}\right)^\nu,$$

$$N_\nu(z) \approx -\frac{\Gamma(\nu)}{\pi}\left(\frac{2}{z}\right)^\nu \text{ pour } \nu > 0, \qquad N_0(z) \approx \frac{2}{\pi}\ln\frac{\gamma z}{2},$$

$$K_n(z) \approx \frac{(n-1)!}{2}\left(\frac{2}{z}\right)^n \text{ pour } n = 1, 2, \ldots, \qquad K_0(z) \approx \ln\frac{2}{\gamma z}$$

ici $\gamma = e^C = 1,781\ldots$ est la constante d'Euler, $C = 0,5772$.

Pour les grandes valeurs de z, ces fonctions ont le comportement asymptotique suivant :

$$J_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos(z - \nu\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}) + O\left(\frac{1}{z^{3/2}}\right),$$

$$N_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin(z - \nu\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4}) + O\left(\frac{1}{z^{3/2}}\right),$$

$$H_\nu^{(1,2)}(z) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}}\, e^{\pm i(z - \nu\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4})} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right],$$

$$I_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{1}{2\pi z}}\, e^{z} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right],$$

$$K_\nu(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\, e^{-z} \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right)\right].$$

FONCTION HYPERGÉOMÉTRIQUE ET FONCTION HYPERGÉOMÉTRIQUE DÉGÉNÉRÉE

La fonction hypergéométrique est définie dans le cercle $|z| < 1$ par la série

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots$$

et, pour $|z| > 1$, elle s'obtient par prolongement analytique de cette série.

La fonction hypergéométrique est une solution de l'équation

$$z(1-z)u'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z]u' - \alpha\beta u = 0.$$

Les paramètres α et β sont arbitraires et $\gamma \neq 0, -1, -2, \ldots$ La deuxième solution indépendante de cette équation différentielle est donnée par la fonction

$$z^{1-\gamma} F(\beta - \gamma + 1, \alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z)$$

qui possède une singularité en $z = 0$.

Si α (ou β) est un entier négatif (ou nul), $\alpha = -n$, la fonction hypergéométrique se réduit à un polynôme de degré n et peut se mettre sous la forme

$$F(-n, \beta, \gamma, z) = \frac{z^{1-\gamma}(1-z)^{\gamma+n-\beta}}{\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+n-1)} \frac{d^n}{dz^n}[z^{\gamma+n-\beta}(1-z)^{\beta-\gamma}].$$

La fonction hypergéométrique dégénérée est définie par la série

$$F(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots$$

convergent quel que soit z fini. Le paramètre α est arbitraire et $\gamma \neq 0, -1, -2, \ldots$

La fonction hypergéométrique dégénérée est une solution de l'équation

$$zu'' + (\gamma - z)u' - \alpha u = 0$$

dont la deuxième solution indépendante est donnée par la fonction

$$z^{1-\gamma} F(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, z)$$

qui possède une singularité pour $z = 0$.

Si α est un entier négatif (ou nul), $\alpha = -n$, la fonction hypergéométrique dégénérée se réduit à un polynôme de degré n et peut se mettre sous la forme

$$F(-n, \gamma, z) = \frac{1}{\gamma(\gamma+1)\ldots(\gamma+n-1)} z^{1-\gamma} \mathrm{e}^{z} \frac{d^n}{dz^n} (\mathrm{e}^{-z} z^{\gamma+n-1}).$$

PARTICULE DANS LE CHAMP COULOMBIEN (ATOME HYDROGÉNOÏDE)

Les fonctions d'onde des états liés dans le champ coulombien d'attraction $U = -\alpha/r$ avec $\alpha > 0$ peuvent être représentées sous la forme $\Psi_{n_r lm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (n_r étant le nombre quantique radial, $n = n_r + l + 1$ le nombre quantique principal), où la partie radiale de la fonction d'onde est donnée par l'expression ($a = \hbar^2/m\alpha$)

$$R_{nl} = -\frac{2}{n^2 a^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^2}} \mathrm{e}^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^{l} L_{n+l}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na}\right),$$

où $L_n^k(z)$ sont les polynômes de Laguerre généralisés. L'énergie de cet état est égale à $E_n = -\dfrac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}$. Les parties radiales de la fonction d'onde des premiers états sont

$$R_{10} = \tfrac{2}{a^{3/2}} \mathrm{e}^{-r/a} \qquad \text{(état fondamental } 1s\text{)},$$

$$R_{20} = \tfrac{1}{\sqrt{2a^3}} \left(1 - \tfrac{r}{2a}\right) \mathrm{e}^{-r/2a} \qquad \text{(état } 2s\text{)},$$

$$R_{21} = \tfrac{1}{2\sqrt{6a^3}} \tfrac{r}{a} \mathrm{e}^{-r/2a} \qquad \text{(état } 2p\text{)}.$$

BIBLIOGRAPHIE

1) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Mécanique quantique, Mir, Moscou, 1975

2) A.S. Davydov, Quantum mechanics, Pergamon Press, Oxford, 1969

3) Cl. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Lalöe, Mécanique quantique, Hermann, Paris, 1973

4) A. Messiah, Mécanique quantique, Tomes 1 et 2, Dunod, Paris, 1995

5) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Mécanique, Mir, Moscou, 1982

6) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Théorie des champs, Mir, Moscou, 1989

7) L.D. Landau, E.M. Lifchitz, Physique statistique, Mir, Moscou, 1967

8) A.I. Akhiezer, V.B. Berestetskii, Qaunrum Electrodynamics, John Wiley and sons, New York, 1965

9) M. Preston, Physics of the Nucleus, London 1962

10) S. Flügge, Practical Quantum Mechanics, Springer-Verlag, Berlin, 1971

11) I.S. Gradshtein, I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products, Academic Press, Boston, San Diego, New York, London, Sydney, Tokyo, Toronto, 1994

12) H. Batemen, A. Erdélyi, Higher Transcendental Functions, Mc Graw-Hill Book Company, New York, 1953

TABLE DES MATIÈRES

Avant-propos 5

Symboles et constantes 7

Chapitre 9. Approximation quasi-classique 9

9.1. Quantification des niveaux d'énergie. Fonctions d'onde quasi-classiques 9

9.2. Franchissement des barrières de potentiel 12

Chapitre 10. Particules identiques 15

10.1. Symétrie des fonctions d'onde 15

10.2. Fondements du formalisme de la seconde quantification 17

10.3. Systèmes composés d'un grand nombre, $N \gg 1$, de particules 20

Chapitre 11. Atomes et molécules 21

11.1. Etats stationnaires d'atomes à un et deux électrons 21

11.2. Atomes à plusieurs électrons 24

11.3. Principales représentations de la théorie moléculaire 26

11.4. Atomes et molécules dans des champs extérieurs. Interaction entre atomes et molécules 29

11.5. Phénomènes non stationnaires dans les atomes et les molécules 33

Chapitre 12. Le noyau atomique 35

12.1. Notions générales sur les forces nucléaires. Deutéron 35

12.2. Le modèle en couches 39

Chapitre 13. Théorie de la diffusion 43

13.1. L'approximation de Born 43

13.2. Calcul des déphasages. Diffusion de particules lentes. Diffusion résonnante 46

13.3. Diffusion des particules rapides (approximation eikonale). Diffusion des particules douées de spin 49

13.4. Diffusion des particules composites. Collisions inélastiques 50

Chapitre 14. Théorie quantique du rayonnement 53

14.1. Emission de photons 53

14.2. Diffusion des photons. Rayonnement des photons en collision 55

Chapitre 15. Equations d'ondes relativistes 57

15.1. Equation de Klein-Gordon 57

15.2. Equation de Dirac 60

Chapitre 16. Lois de conservation 65

16.1. Cinématique des désintégrations et des collisions 65

16.2. Constantes de mouvement 67

16.3. Conservation du moment et de la parité dans les désintégrations et les collisions. Isospin 69

Solutions 73

Chapitre 9. Approximation quasi-classique 75

Chapitre 10. Particules identiques 107

Chapitre 11. Atomes et molécules 135

Chapitre 12. Le noyau atomique 203

Chapitre 13. Théorie de la diffusion 229

Chapitre 14. Théorie quantique du rayonnement 279

Chapitre 15. Equations d'ondes relativistes 313

Chapitre 16. Lois de conservation 351

Appendice 375

Bibliographie 379

Table des matières 381