

THÉORIE DES COLLISIONS À BASSE ÉNERGIE

JEAN-MARC SPARENBERG

Université Libre de Bruxelles, CP 229, B-1050 Bruxelles, Belgique

Résumé

Les notions de base de la théorie quantique des collisions à basse énergie sont introduites (sections efficaces, déphasages, résonances, ...), en particulier dans le cas de particules chargées positivement, ceci en vue de leur application à la physique nucléaire. Une introduction à la méthode de la matrice de réaction ou matrice R est ensuite proposée, tant pour la résolution de l'équation de Schrödinger décrivant les collisions que pour l'ajustement phénoménologique de données expérimentales. La plupart des résultats sont établis sans démonstration mais avec un accent particulier sur leur compréhension intuitive et leurs éventuels analogues en mécanique classique. Plusieurs choix dictés par cette logique sont faits : (i) l'exposé débute par un "rappel" détaillé de la description classique des collisions, (ii) les concepts sont d'abord introduites dans des cas théoriques idéaux avant d'aborder le formalisme plus compliqué permettant de décrire des situations expérimentales réalistes, (iii) un seul exemple sert de fil conducteur à travers quasiment tout le texte, (iv) l'ensemble des notions est établi pour les collisions élastiques de particules sans spin, une simple mention de leur généralisation à plusieurs voies étant donnée pour référence à la fin du texte.

Abstract

The basic notions of low-energy quantum scattering theory are introduced (cross sections, phase shifts, resonances, ...), in particular for positively-charged particles, in view of nuclear-physics applications. An introduction to the reaction-matrix (or R-matrix) method is then proposed, as a tool to both solve the Schrödinger equation describing collisions and fit experimental data phenomenologically. Most results are established without proof but with a particular emphasis on their intuitive understanding and their possible analogs in classical mechanics. Several choices are made consequently: (i) the text starts with a detailed "reminder" of classical scattering theory, (ii) the concepts are first introduced in ideal theoretical cases before going to the more complicated formalism allowing the description of realistic experimental situations, (iii) a single example is used throughout nearly the whole text, (iv) all concepts are established for the elastic scattering of spinless particles, with only a brief mention of their multichannel generalization at the end of the text.

1 Introduction

Le monde des molécules, atomes, noyaux, particules est décrit par les lois de la physique quantique, ce qui implique que de nombreux phénomènes se déroulant à ces échelles paraissent peu intuitifs à nos esprits formés, par la nature même de notre existence, au monde macroscopique et à ses lois de physique classique. Les phénomènes de collision ne font pas exception à la règle : même les plus simples d'entre eux – les collisions élastiques de basse énergie – se manifestent sous des formes surprenantes pour qui n'aurait en tête que des collisions classiques idéales, comme celles entre boules de billard ou corps célestes. Ainsi, des phénomènes d'*interférences* et de *résonances* sont observés

lors de la mesure de taux de collisions, qui ne peuvent en aucun cas être expliqués par la mécanique classique. Ces phénomènes deviennent plus spectaculaires encore lorsque, toujours à basse énergie, l'on s'intéresse à des collisions plus complexes, comme les collisions inélastiques, dans lesquelles l'état interne des particules entrant en collision est modifié au cours de la collision, ou les réactions, dans lesquelles c'est la nature même des particules qui est altérée : en effet, ces phénomènes seraient parfois purement et simplement impossibles en physique classique car ils violeraient la conservation de l'énergie. On constate qu'ils se déroulent néanmoins, ce qui s'explique par un autre effet purement quantique : l'*effet tunnel*.

Les réactions nucléaires sont certainement parmi les plus fascinants de ces phénomènes, en particulier lorsqu'elles se déroulent dans des environnements tels que le bigbang (nucléosynthèse primordiale) ou les étoiles (nucléosynthèse stellaire). Deux éditions de l'école Joliot-Curie (1990 et 2000) ont d'ailleurs été consacrées à ce sujet. Une remarque s'impose à ce stade : par le grand public, ces environnements cosmiques seraient considérés comme extrêmement chauds et énergétiques. En réalité, du point de vue de la physique nucléaire, les énergies mises en oeuvre sont extrêmement faibles, ce qui implique que les taux de réactions sont très bas. Certaines réactions ne se produisent d'ailleurs à des taux appréciables que grâce aux phénomènes de résonances mentionnés ci-dessus. En conséquence, tant du point de vue expérimental que du point de vue théorique, les principaux problèmes rencontrés dans ce contexte sont liés aux très basses énergies. Les problématiques sont donc très éloignées de la physique des particules qui concerne, elle, les (très) hautes énergies avec, du point de vue expérimental, les très grosses machines que l'on sait et, du point de vue théorique, des modèles basés sur la relativité restreinte et la théorie des champs. Expérimentalement, les réactions nucléaires de basse énergie requièrent une approche très spécifique, décrite dans d'autres cours de cette école. Du point de vue théorique, ces réactions sont par contre très similaires aux collisions que l'on rencontre dans d'autres disciplines : citons par exemple la physique atomique, en particulier l'étude des gaz quantiques, et la physique du solide. La motivation d'étudier les collisions de basse énergie est donc essentielle en physique nucléaire, mais dépasse largement le cadre de cette discipline. Les phénomènes mentionnés ci-dessus (interférences, résonances, effet tunnel) donnent un indice quant au type de description théorique à mettre en oeuvre pour décrire de telles collisions : ils sont révélateurs d'un comportement *ondulatoire*. Le présent cours se situe donc dans le contexte de la mécanique quantique, ou mécanique ondulatoire, en l'occurrence *non relativiste* du fait des basses énergies. L'équation clé de cette discipline est l'équation de Schrödinger, dont les solutions sont les fonctions d'onde qui décrivent l'état des particules.

Le formalisme de la mécanique quantique étant assez mathématique, il nous a paru opportun, vu la proportion importante de jeunes expérimentateurs dans le public de cette école et la limitation à deux heures de cours, d'en tenter une approche la plus intuitive et la plus inductive possible. Nous ne voulons cependant pas éviter d'aborder certains concepts théoriques clés, comme les états stationnaires de diffusion ou les symétries. Nous avons donc fait le choix d'utiliser autant que possible les analogies, mais aussi les différences, avec les collisions classiques, plus faciles à appréhender. Le texte commence donc par un "rappel" détaillé de ces notions (paragraphe 2), avec en particulier l'introduction de la notion de section efficace et l'établissement de la formule de Rutherford (section efficace de collision élastique pour des particules chargées). Ensuite, dans la partie quantique proprement dite (paragraphe 3), nous avons choisi d'aborder l'exposé des concepts théoriques de manière heuristique, par simple examen des solutions numériques de l'équation de Schrödinger dans un cas particulier typique. L'exposé commence par revisiter la notion d'état lié, qui devrait être familière aux lecteurs ayant suivi un premier cours de mécanique quantique (penser au spectre de l'atome d'hydrogène). On passe ensuite aux états de collision ou états libres proprement dits, avec une introduction des concepts clés que sont le déphasage, la matrice de collision et les résonances. La troisième partie de l'exposé (paragraphe 4) concerne une méthode particulière permettant de résoudre l'équation de Schrödinger, pour laquelle notre groupe a développé une certaine expertise. Il s'agit de la méthode de la matrice de réaction, ou matrice R. Cette méthode présente l'avantage d'être également un modèle phénoménologique intéressant pour l'ajustement de données expérimentales trop compliquées pour être reproduites par un modèle prédictif. Enfin, nous terminons (paragraphe 5) par une extension

rapide des notions introduites au cas des collisions à plusieurs voies.

Dans ces notes de cours, nous choisissons de ne pas utiliser d'unités réduites et de traiter rigoureusement l'interaction coulombienne. Ces deux choix alourdissent les équations mais devraient faciliter l'utilisation des formules établies comme référence ultérieure. Un choix différent a été fait pour la présentation orale, dont les transparents constituent donc un complément utile aux présentes notes. Enfin, nous tentons de suivre les recommandations de l'Académie française en matière de nouvelle orthographe; "ambigüité", "apparaît", "bigbang", etc ne sont donc pas des fautes de frappe.

2 Système de deux particules en mécanique classique

Dans ce premier paragraphe, nous étudions un système de deux particules ponctuelles en interaction, à l'aide des outils de la mécanique classique. On se limite au cas où la structure interne de ces particules est négligée; en particulier, elle n'est pas affectée par l'interaction interparticulaire. Les collisions seront donc uniquement élastiques. Ceci nous permettra de discuter, de manière intuitive, les simplifications importantes qui apparaissent dans les situations théoriques idéales (les "rêves de théoricien"), puis d'introduire la notion de section efficace, indispensable pour décrire les situations expérimentales de collisions de particules microscopiques.

Les résultats présentés dans ce paragraphe le sont sans démonstration, puisqu'ils sont d'une part supposés connus du lecteur, et d'autre part rappelés ici dans le but principal de servir de guide intuitif et de point de comparaison lors de l'introduction des concepts équivalents – mais plus compliqués à percevoir intuitivement – de la mécanique quantique. Pour l'établissement rigoureux des résultats du présent paragraphe, on consultera par exemple la référence [KKR72].

2.1 Simplifications du problème

2.1.1 Séparation du mouvement du centre de masse

Considérons un système de deux particules, 1 et 2, de masses m_1 , m_2 , et de coordonnées \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 , se déplaçant dans un espace à trois dimensions.¹ On définit

- la masse totale $M = m_1 + m_2$ et la coordonnée du centre de masse $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)/M$ de ce système, ainsi que
- la masse réduite

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (1)$$

et la coordonnée relative

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad (2)$$

qui permettent de définir la vitesse relative $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$ et l'impulsion relative $\mathbf{p} = \mu\mathbf{v}$.

Si ces deux particules ne sont soumises à aucune force extérieure et que leur force d'interaction mutuelle dérive d'un potentiel $V(\mathbf{r})$ qui ne dépend que de leur coordonnée relative, une première simplification apparaît. En effet, le mouvement de ces deux particules se ramène, d'une part, au mouvement d'une particule libre pour le centre de masse, et, d'autre part, au mouvement d'une particule de masse μ et de coordonnée \mathbf{r} , dont l'énergie totale est conservée et vaut²

$$E = T + V(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Dans cette équation, l'énergie totale est la somme de l'énergie cinétique du mouvement relatif, T , et de l'énergie potentielle V . Le mouvement du centre de masse étant trivial, on ramène donc un problème à deux particules à un problème à une particule fictive, aussi appelée particule relative.

¹Dans ce cours, les caractères gras désignent les vecteurs à trois dimensions.

²Dans la formulation lagrangienne ou hamiltonienne de la mécanique classique, l'énergie totale est aussi égale à la fonction hamiltonienne H .

Notons que, dans le cas où une particule est beaucoup plus légère que l'autre, par exemple $m_1 \ll m_2$, on a $\mu \approx m_1$ et la particule relative est équivalente à la particule la plus légère. Dans les autres cas, le sens physique de la particule relative est moins intuitif, la donnée de \mathbf{r} , combiné à \mathbf{R} , permettant seulement d'en déduire les positions des deux particules : lorsque la particule relative se trouve à l'origine ($\mathbf{r} = 0$), cela signifie par exemple que les deux particules sont confondues en leur centre de masse.

2.1.2 Séparation du mouvement angulaire

La première simplification du problème provenait du fait que la seule force présente était une force d'interaction entre les deux particules et que cette force dérivait d'un potentiel $V(\mathbf{r})$ qui ne dépendait que de la coordonnée relative des deux particules. Une seconde simplification majeure se produit lorsque ce potentiel est central, c'est-à-dire qu'il ne dépend que de la *distance* r entre les deux particules, pas de leur orientation relative. On le note alors $V(r)$.

En effet, dans ce cas, le moment cinétique

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (4)$$

est conservé au cours du mouvement. Cette quantité étant vectorielle, il est intéressant de considérer séparément les conséquences de la conservation de sa direction et de la conservation de son module. La conservation de sa direction implique que le mouvement relatif des deux particules (ou le mouvement de la particule fictive) se déroule dans un plan perpendiculaire à cette direction et passant par l'origine. D'un problème à trois dimensions, on passe donc à un problème à deux dimensions. Par ailleurs, la conservation du module du moment cinétique implique que, connaissant r , on connaît la vitesse angulaire de ce mouvement plan. On se ramène donc à un problème à une dimension : l'étude du mouvement de la particule relative suivant la coordonnée radiale r , tout le reste pouvant s'en déduire. Cette particule est soumise à un potentiel effectif dépendant du module du moment cinétique,

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\mathbf{L}^2}{2\mu r^2} + V(r), \quad (5)$$

et, au cours du mouvement, il y a conservation de l'énergie totale, dont l'expression, similaire à (3), est cette fois

$$E = T_r + V_{\text{eff}}(r) = \frac{p_r^2}{2\mu} + V_{\text{eff}}(r). \quad (6)$$

Outre le potentiel effectif, cette énergie totale fait apparaître l'énergie cinétique radiale T_r , qui s'exprime en fonction de p_r , la composante radiale de l'impulsion relative.

2.1.3 Exemple : potentiel newtonien

La mécanique céleste est probablement l'application la plus majestueuse des résultats résumés ci-dessus ; elle permet également d'en renforcer la compréhension intuitive. Considérons donc un système de deux masses m_1 et m_2 , interagissant par l'intermédiaire de la force (attractive) de gravitation, c'est-à-dire du potentiel central newtonien

$$V(r) = -\frac{Gm_1m_2}{r} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad (7)$$

où G est la constante de gravitation universelle. La valeur de ce potentiel lorsque les deux masses sont infiniment séparées l'une de l'autre est (arbitrairement) choisie égale à zéro. Ce potentiel est attractif mais non confinant car les masses peuvent être infiniment séparées l'une de l'autre, pour autant qu'elles aient une énergie cinétique relative suffisante. Le potentiel centrifuge étant, lui, répulsif, le potentiel effectif total présente un minimum (puits de potentiel).

On peut donc distinguer deux types de solutions pour le mouvement relatif des deux masses :

- pour une énergie E négative, on obtient une orbite elliptique *liée*, confinée à une zone finie de l'espace et dont le mouvement radial présente deux points de rebroussement (penser par exemple au mouvement elliptique des planètes autour du Soleil) ;
- pour une énergie E positive, on obtient une orbite hyperbolique *libre*, qui s'étend jusqu'à l'infini, tant avant qu'après la collision, et dont le mouvement radial présente un seul point de rebroussement (penser par exemple au mouvement d'une sonde spatiale passant à proximité d'une planète qui dévie sa trajectoire, puis s'en éloignant).

Ce dernier cas décrit une *collision élastique* ; il nous intéressera plus particulièrement dans la suite de ce cours. Choisissons l'axe z des coordonnées parallèle à la direction de l'impulsion relative des deux masses lorsqu'elles sont infiniment séparées l'une de l'autre avant la collision, l'impulsion relative asymptotique initiale $\mathbf{p}_{\text{as},\text{in}}$. Une telle trajectoire libre est caractérisée par :

- le plan dans lequel se déroule le mouvement, qui comprend l'origine et est parallèle à l'axe z ; on le repère par l'angle azimutal ϕ , c'est-à-dire l'angle de ce plan pris par rapport à la direction (arbitraire) de l'axe x ;
- l'énergie totale du mouvement relatif, qui égale l'énergie cinétique asymptotique

$$E = p_{\text{as}}^2/2\mu > 0; \quad (8)$$

pour une collision élastique, l'énergie cinétique asymptotique après la collision égale celle avant la collision, par conservation de l'énergie ;

- la paramètre d'impact b , distance entre l'origine et la droite tangente à la trajectoire asymptotique.

Ces deux dernières quantités définissent la norme du moment cinétique

$$L = p_{\text{as}}b. \quad (9)$$

Celle-ci étant également conservée au cours de la collision, on voit que tant p_{as} que b sont égaux avant et après la collision. En revanche, au cours de la collision, la trajectoire est courbée ; on appelle $\theta(b, E)$ l'angle entre la trajectoire asymptotique initiale et la trajectoire asymptotique finale. Cet angle est non nul en général et constitue le résultat physique essentiel pour la suite. Pour le potentiel Newtonien, il est par exemple donné par la relation

$$\tan \frac{\theta(b, E)}{2} = \frac{Gm_1m_2}{2Eb}. \quad (10)$$

Deux remarques s'imposent à ce stade.

- La physique du problème nous a implicitement amenés à utiliser le système de coordonnées sphériques r, θ, ϕ pour repérer la position de la particule relative. r est sa distance par rapport à l'origine, ϕ est l'angle azimutal qui caractérise le plan de son mouvement, et θ est sa colatitude (angle par rapport à la direction de l'axe des z positifs). La direction de la trajectoire asymptotique initiale correspond à $\theta = 0$, alors que la direction de la trajectoire asymptotique finale correspond à $\theta = \theta(b, E)$, ce qui montre la cohérence des deux notations.
- L'équation (10) montre que la trajectoire initiale n'est significativement affectée par la collision – $\theta(b, E)$ n'est non nul – que si le paramètre d'impact est suffisamment petit. Les équations (8) et (9) impliquent alors que, pour une énergie donnée, la collision ne se produit que pour des L suffisamment petits ou que, pour un moment cinétique donné, la collision ne se produit que pour des E suffisamment élevées.

2.2 Section efficace de diffusion élastique

Considérons maintenant, toujours dans une perspective de mécanique classique, des collisions – on parle aussi de *diffusion* – entre particules microscopiques (molécules, atomes, noyaux, ...), typiquement un faisceau incident sur une cible. Les réalités expérimentales d'une telle situation font que l'on s'éloigne des cas théoriques idéaux décrits ci-dessus, ce qui amène à introduire la notion de section efficace.

2.2.1 Section efficace différentielle

Les principales différences par rapport à la trajectoire d'une sonde spatiale discutée précédemment sont que chaque collision ne peut être suivie individuellement et que les paramètres d'impact des particules microscopiques ne sont pas accessibles expérimentalement, parce que les positions précises des particules ne sont contrôlables ni dans le faisceau ni dans la cible. Pour décrire cette réalité expérimentale, on calcule donc une moyenne sur un grand nombre de collisions, dont on suppose que les paramètres d'impact ont une distribution de probabilité uniforme ; on note n_{inc} le flux incident des particules relatives (nombre de particules par unité de surface et de temps). Dans le cas de la diffusion d'un faisceau uniforme sur une cible homogène, n_{inc} est par exemple le produit du flux du faisceau par le nombre de particules de la cible se trouvant dans le faisceau. Par contre, la vitesse relative des deux types de particules avant leur collision, qui correspond à p_{as} , peut être maîtrisée expérimentalement ; on la supposera donc connue. Remarquons que, p_{as} étant connu mais b étant inconnu, on ne connaît pas le moment cinétique des collisions individuelles. La moyenne portera donc sur les différents moments cinétiques accessibles.

De même, il n'est pas envisageable de suivre la trajectoire des particules *pendant* le processus de collision ; en principe, on contrôle par contre cette trajectoire avant la collision (faisceau) et on est capable de mesurer les particules – du moins celles qui sortent de la cible – après leur collision (détecteurs). La question que l'on peut donc se poser est, pour une énergie donnée E et pour un détecteur positionné à une position $\Omega = (\theta, \phi)$ avec une ouverture d'angle solide $\Delta\Omega$, quel est le nombre de particules détectées ? Ce nombre de particules doit être proportionnel au flux de particules incidentes ; le coefficient de proportionnalité est par définition la *section efficace* :

$$\underbrace{N_{\text{diff}}(E, \Omega, \Delta\Omega)}_{\text{diffusées}} \equiv n_{\text{inc}} \times \underbrace{\sigma(E, \Omega, \Delta\Omega)}_{\text{section efficace}} . \quad (11)$$

Par symétrie de révolution, cette section efficace ne dépend que de l'angle θ .³ Par ailleurs, on définit la *section efficace différentielle* comme la limite du rapport entre particules diffusées par unité d'angle solide et particules incidentes lorsque l'angle solide tend vers zéro :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) \equiv \lim_{\Delta\Omega \rightarrow 0} \frac{N_{\text{diff}}(E, \theta, \Delta\Omega)}{n_{\text{inc}}\Delta\Omega} . \quad (12)$$

2.2.2 Exemple : formule de Rutherford

En mécanique classique, il suffit, pour calculer cette section efficace différentielle, de calculer, en résolvant les équations de mouvement, l'angle de déviation $\theta(E, b)$ et d'inverser cette relation pour trouver $b(E, \theta)$. En effet, les particules détectées après la collision dans l'anneau d'angle solide $2\pi \sin\theta d\theta$ sont celles qui sont passées par l'anneau de surface $2\pi b(E, \theta)db(E, \theta)$ avant la collision. On a donc

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = \frac{2\pi b(E, \theta)db(E, \theta)}{2\pi \sin\theta d\theta} = \frac{b(E, \theta)}{\sin\theta} \frac{\partial b(E, \theta)}{\partial \theta} . \quad (13)$$

Appliquons cette formule au cas du potentiel coulombien électrostatique entre deux charges ponctuelles Z_1e et Z_2e , où e est la charge élémentaire :

$$V_C(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} , \quad (14)$$

où ϵ_0 est la permittivité électrique du vide. Mathématiquement, ce potentiel est équivalent au potentiel newtonien (7) ; on trouve donc le même angle de déviation qu'à l'équation (10) :

$$\tan \frac{\theta_R(b, E)}{2} = \frac{|Z_1 Z_2| e^2}{8\pi\epsilon_0 E b} , \quad (15)$$

³Dans le cas où les particules ont un spin, non considéré ici, il est possible de polariser la cible et/ou le faisceau, si bien que la symétrie de révolution est brisée.

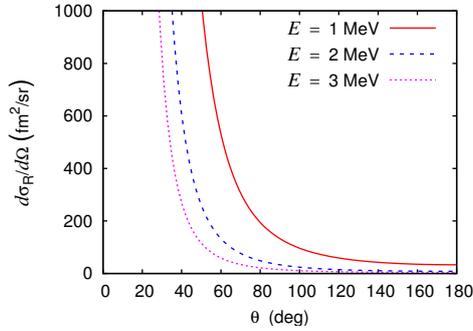


FIG. 1 – Exemples de sections efficaces différentielles de Rutherford, en fonction de l’angle de diffusion dans le référentiel du centre de masse et pour différentes valeurs de l’énergie cinétique relative, dans le cas de la répulsion coulombienne entre les noyaux ^{16}O et α ($Z_1 = 8$, $Z_2 = 2$).

dont on remarque qu’il ne dépend pas des signes relatifs des charges électriques. Ce résultat fut en fait obtenu pour la première fois dans le cas électrostatique, plutôt que dans le cas newtonien, par Rutherford en 1911 [Rut11] (voir aussi la référence [KKR72] et le cours de B. Fernandez dans ce volume). Cet angle de déviation mène à la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega}(E, \theta) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (16)$$

qui est elle aussi indépendante du signe relatif des charges. Cette section efficace différentielle est représentée en fonction de l’angle pour différentes valeurs de l’énergie à la figure 1 ; on remarque qu’elle diverge lorsque θ tend vers 0, ce qui est dû à la longue portée de l’interaction.

Terminons par deux remarques.

- Dans les exemples de mécanique céleste choisis ci-dessus (Soleil-planète et planète-sonde), l’hypothèse d’une particule beaucoup plus légère que l’autre était satisfaite, si bien que le centre de masse était confondu avec le point matériel le plus lourd. En physique microscopique, c’est plus rarement le cas. Il faut alors se souvenir que les grandeurs introduites ici, en particulier l’angle θ et la section efficace, caractérisent le mouvement des particules relatives de masse μ dans le référentiel du centre de masse. Il est donc nécessaire d’effectuer un changement de coordonnées pour déduire de ces quantités l’angle de déviation de la trajectoire d’une des deux particules, ou la section efficace, dans un référentiel autre que le centre de masse (par exemple le référentiel du laboratoire dans les expériences de physique microscopique). Les formules de ce changement de référentiel sont par exemple données dans la référence [New82] (voir aussi le cours de P. Roussel-Chomaz dans ce volume).
- Dans les cas rencontrés en physique nucléaire (voir ci-dessous), l’interaction est rarement purement coulombienne : elle peut également contenir des termes à courte portée comme l’interaction nucléaire. En mécanique classique, on peut caractériser l’effet de cette interaction supplémentaire par une modification de l’angle de déviation par rapport au cas purement coulombien. On écrit alors

$$\theta(b, E) = \theta_R(b, E) + \theta_{\text{add}}(b, E). \quad (17)$$

3 Système de deux particules en mécanique quantique

Forts de ce bagage puisé dans la mécanique classique, nous pouvons maintenant aborder l’étude des collisions quantiques proprement dites, en soulignant tant les analogies que les différences entre les notions classiques et quantiques. Nous suivrons le même cheminement que dans le paragraphe précédent : en nous basant sur les simplifications possibles du problème, nous décrirons d’abord les états théoriques idéaux, libres et liés, puis construirons les états correspondant à la situation

expérimentale de collisions élastiques, qui feront apparaître la notion de section efficace. Comme introduction à la théorie des collisions, on consultera par exemple le chapitre VIII de la référence [CTDL73] et l'excellent ouvrage de Taylor [Tay72]. Une référence très complète mais (nettement !) moins pédagogique est [New82].

3.1 Simplifications du problème

Le problème de deux particules en mécanique quantique permet les mêmes simplifications qu'en mécanique classique ; en particulier, le problème de deux particules à trois dimensions se ramène à un problème à une particule et à une dimension. Cependant, ces simplifications se concrétisent ici différemment.

3.1.1 Séparation du mouvement du centre de masse

La séparation du mouvement du centre de masse ramène le problème de deux particules réelles à un problème à une particule relative. Le mouvement relatif est cette fois décrit à l'aide de l'équation de Schrödinger dépendant du temps

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\mathbf{r}, t) = H\varphi(\mathbf{r}, t), \quad (18)$$

dans laquelle apparaît la fonction d'onde relative $\varphi(\mathbf{r}, t)$ et l'opérateur hamiltonien

$$H = T + V(r) = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} + V(r), \quad (19)$$

où

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} \quad (20)$$

est l'opérateur différentiel qui correspond à l'impulsion relative. Cette expression s'obtient à partir de l'expression classique de l'énergie totale (3), à laquelle on applique la règle de correspondance pour construire l'opérateur quantique (ou *observable*) correspondant.⁴

3.1.2 Conservation de l'énergie

La conservation de l'énergie, qui correspond au fait que l'opérateur H ne dépend pas du temps, implique que l'on peut trouver des solutions de l'équation (18) qui ne dépendent pas du temps, si ce n'est pas l'intermédiaire d'une phase. Ces fonctions d'onde particulières sont solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$H\varphi_E(\mathbf{r}) = E\varphi_E(\mathbf{r}), \quad (21)$$

c'est-à-dire qu'elles sont *fonctions propres* de l'opérateur H pour une valeur propre E égale à l'énergie totale du mouvement relatif. Le statut de ces solutions stationnaires est ambivalent : d'une part, elles sont mathématiquement plus simples et plus élégantes que les solutions dépendant du temps. Dans la suite, suivant notre approche "théorique idéale", nous n'utiliserons d'ailleurs qu'elles, d'autant qu'on peut montrer que, calculées pour toutes les énergies physiques, elles constituent une *base* de l'espace (de Hilbert) des fonctions d'onde et qu'elles contiennent donc toute la physique du problème. D'autre part, elles peuvent paraître moins intuitives, particulièrement dans la description d'un processus comme une collision, dans lequel on s'attend à voir jouer un rôle important au temps (on parle intuitivement d'"avant", "pendant" et "après" la collision). Pour rassurer les plus conservateurs, mentionnons le fait qu'une formulation alternative de la théorie des collisions peut s'appuyer sur la notion de "paquet d'ondes", ou fonction d'onde dépendant du temps [CTDL73, Tay72], et mener aux mêmes résultats. Pour titiller les plus imaginatifs, évoquons cependant la possibilité que cette "inutilité du temps" dans la description du monde microscopique puisse avoir un sens plus profond. . .

⁴Tout le reste de ce cours portant sur le cas quantique, nous utiliserons pour les opérateurs de la mécanique quantique la même notation que pour les quantités classiques correspondantes. Insistons cependant ici sur le fait qu'il s'agit dorénavant d'opérateurs, par exemple différentiels, agissant sur des fonctions d'onde. Pour une introduction (avancée mais très didactique) à la mécanique quantique, voir par exemple la référence [CTDL73].

3.1.3 Conservation du moment cinétique

En mécanique quantique, le moment cinétique (4) est un opérateur vectoriel dont les trois composantes sont des opérateurs différentiels. On peut en obtenir l'expression explicite en combinant les équations (4) et (20), ce qui donne par exemple pour la composante z en coordonnées sphériques

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (22)$$

La conservation du moment cinétique correspond au fait que chacune de ses composantes commute avec le hamiltonien (lorsque le potentiel est central, ce que nous supposons ici). La nature mathématique particulière de l'opérateur de moment cinétique a plusieurs conséquences très spéciales en physique quantique. D'une part, les valeurs que peuvent prendre les observables que sont ses composantes et son module, qui sont égales aux valeurs propres des opérateurs correspondant, sont *quantifiées*. D'autre part, ses différentes composantes ne commutent pas entre elles ; on ne peut donc pas trouver de fonction d'onde ayant simultanément une valeur bien définie pour deux composantes différentes du moment cinétique. Seuls (le carré de) son module et sa composante dans une direction arbitraire (que l'on choisit égale à z ici) forment, avec le hamiltonien, un *ensemble complet d'observables qui commutent* :

$$\text{ECOC} = \{H, \mathbf{L}^2, L_z\}. \quad (23)$$

Les états propres correspondant à ces opérateurs forment une *base* de l'espace des états. On les appelle ondes partielles ; leur expression générale fait apparaître une séparation des variables radiale r et angulaires θ, ϕ :

$$\varphi_{Elm}(\mathbf{r}) = R_{El}(r)Y_l^m(\Omega) = \frac{u_{El}(r)}{r}Y_l^m(\theta, \phi). \quad (24)$$

Dans cette expression, les fonctions harmoniques sphériques

$$Y_l^m(\theta, \phi) = i^{m+|m|} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}, \quad (25)$$

qui ne dépendent que des variables angulaires, sont états propres de \mathbf{L}^2 et L_z . Grâce à elles, les ondes partielles satisfont les relations

$$\mathbf{L}^2 \varphi_{Elm}(\mathbf{r}) = \hbar^2 l(l+1) \varphi_{Elm}(\mathbf{r}) \quad (26)$$

et

$$L_z \varphi_{Elm}(\mathbf{r}) = \hbar m \varphi_{Elm}(\mathbf{r}). \quad (27)$$

L'équation (27) se vérifie en utilisant les équations (22) et (25). Pour \mathbf{L}^2 , le calcul est plus compliqué et fait appel aux propriétés des fonctions de Legendre associées $P_l^{|m|}$ [AS65]. Le nombre quantique l est naturel, d'où la quantification des valeurs possibles du module du moment cinétique, différence essentielle par rapport au cas classique. Le nombre quantique m est entier et doit satisfaire les inégalités

$$-l \leq m \leq l. \quad (28)$$

Comme le montre l'équation (25), ce nombre m conditionne la dépendance en l'angle azimutal de la fonction d'onde, qui est une simple phase variable. Cette simplicité est ce qui subsiste du mouvement dans un plan de la mécanique classique (ϕ constant). La dépendance en θ de la fonction d'onde se complexifie avec les valeurs croissantes de l ; elle mène aux formes des orbitales atomiques (orbitale s sphérique pour $l = 0$, orbitale p en forme d'haltères pour $l = 1$, etc).

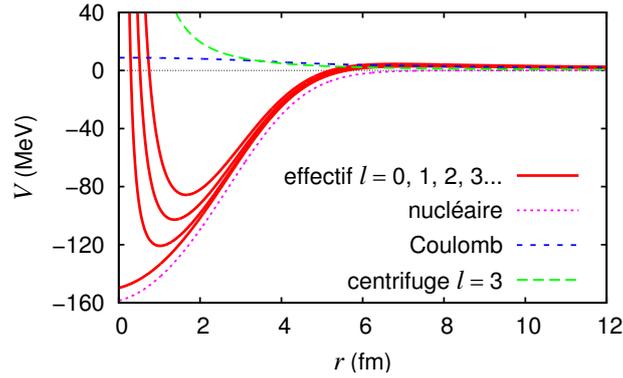


FIG. 2 – Décomposition en termes coulombien (point-sphère), nucléaire et centrifuge du potentiel d’interaction effectif central entre un noyau d’ ^{16}O et un noyau d’ ^4He , en fonction de r , distance de séparation entre les noyaux, et pour différentes valeurs de l , nombre quantique de moment cinétique. Le potentiel effectif croît avec l .

3.1.4 Équation de Schrödinger radiale

En introduisant les ondes partielles (24) dans l’équation de Schrödinger stationnaire (21), on obtient l’équation de Schrödinger radiale

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r)}_{\text{pot. effectif } V_l(r)} \right] u_{El}(r) = E u_{El}(r), \quad (29)$$

satisfaite par la fonction radiale $u_{El}(r)$. Cette équation est l’analogie précise de l’expression de l’énergie classique (6), dans laquelle l’impulsion radiale p_r est remplacée par $-i\hbar\partial/\partial r$ et le potentiel effectif (5) dépend maintenant du nombre quantique l à cause de l’équation aux valeurs propres (26). Remarquons que, comme en classique, l’angle azimutal (le nombre quantique m) ne joue aucun rôle dans cette équation radiale. La différence essentielle entre les cas classique et quantique est, une fois encore, la nature de la solution du problème : en classique, le potentiel effectif permet de calculer le *mouvement* radial de la particule relative ; en quantique, il conditionne sa *fonction d’onde* radiale stationnaire.

Pour simplifier l’écriture de cette équation, on introduit souvent le nombre d’onde k tel que

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \quad (30)$$

(réel pour les énergies positives, imaginaire pour les énergies négatives), combiné aux unités réduites $\hbar = 2\mu = 1$. L’équation s’écrit alors

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + V_l(r) \right] u_{kl}(r) = k^2 u_{kl}(r) \quad (\hbar = 2\mu = 1), \quad (31)$$

dans laquelle les énergies s’expriment en longueur $^{-2}$ et l’indice E a été remplacé par k . Dans la suite, on gardera cependant de préférence les expressions dimensionnées, ce afin d’établir des formules pouvant aisément servir de référence ultérieure ; les expressions adimensionnées, utilisées par exemple pour la présentation orale de ce cours, s’en déduisent facilement en prenant $\hbar = 2\mu = 1$ (“qui peut le plus peut le moins”).

3.1.5 Exemple : potentiel d’interaction $^{16}\text{O} + \alpha$ pour $l = 3$

Illustrons la notion de potentiel effectif apparaissant dans l’équation (29) par un cas typique de physique nucléaire : l’interaction entre un noyau d’oxygène et un noyau d’hélium (voir figure 2).

Dans une approche simplifiée, dans laquelle la structure interne des noyaux est négligée, le potentiel central est constitué de deux termes :

- un potentiel coulombien répulsif donné par l'équation (14) pour $Z_1 = 8$ et $Z_2 = 2$; ce potentiel étant singulier à l'origine, on le régularise souvent par un potentiel point-sphère (c'est le cas dans la figure 2 pour $r \leq 4$ fm) ;
- un potentiel nucléaire attractif, résultant de l'interaction forte entre les nucléons ; dans le cas de l'exemple, il s'agit du mélange d'un potentiel gaussien et d'un potentiel de Woods-Saxon, inspiré de la référence [MAB⁺83].

C'est ce potentiel qui servira de fil conducteur à tous les exemples numériques présentés ci-dessous.

3.2 Étude heuristique de l'équation de Schrödinger radiale

Passons maintenant en revue les différents types de solutions de l'équation de Schrödinger radiale (29), analogues des trajectoires classiques liées (orbites elliptiques) et libres (orbites hyperboliques). Pour un moment cinétique orbital l et une énergie E données, cette équation est une équation différentielle homogène du second ordre ; sa solution mathématique générale est donc une combinaison linéaire de deux solutions particulières linéairement indépendantes. Cependant, la physique impose des conditions supplémentaires sur cette solution mathématique générale : en effet, une fonction d'onde ne peut avoir de sens physique que si elle est bornée. L'expression générale des ondes partielles (24) implique donc, pour que $R(0)$ soit finie, la condition à l'origine

$$u_{kl}(0) = 0. \quad (32)$$

Nous ne considérerons donc que les solutions de l'équation de Schrödinger radiale régulières à l'origine, ce qui les détermine totalement, à un facteur de normalisation près. La phase de ces solutions est également arbitraire ; lorsque le potentiel effectif est réel, cette phase est constante et nous la prendrons généralement nulle ci-dessous ; les fonctions u seront alors purement réelles. Notons que dans le cas d'un potentiel optique, comportant une partie imaginaire (voir par exemple le cours d'É. Bauge dans ce volume), la phase de u n'est plus constante.

Examinons maintenant, pour une onde partielle donnée, le comportement qualitatif de cette fonction u pour différentes valeurs de l'énergie. Nous commencerons par les énergies négatives, des plus basses aux plus élevées, puis terminerons par les énergies positives, qui nous intéressent plus directement pour la description de collisions. La raison pour laquelle nous considérons également les énergies négatives est que pour certaines de ces énergies apparaissent des *états liés*, dont les *résonances* de la théorie des collisions sont de très proches analogues.

3.2.1 Énergie négative, toujours inférieure au potentiel

Considérons une énergie négative

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\kappa^2 < 0, \quad (33)$$

où l'on a introduit le nombre réel κ , utilisé dans la suite de préférence au nombre d'onde $k = i\kappa$, imaginaire pour une énergie négative. Lorsque cette énergie est très négative, elle est inférieure pour tout r au potentiel effectif. Il est alors intéressant de réécrire l'équation (29) sous la forme

$$\frac{u''_{kl}(r)}{u_{kl}(r)} = \kappa^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2}V_l(r), \quad (34)$$

où prime signifie dérivée par rapport à r . L'hypothèse faite sur l'énergie implique que le second membre de cette égalité est positif pour tout r . Les fonctions u et u'' sont donc de même signe, ce qui signifie, en termes intuitifs, que u "s'éloigne de l'axe de plus en plus vite" lorsque r croît. Ce comportement est illustré par la figure 3, où la fonction u correspondant au potentiel effectif présenté

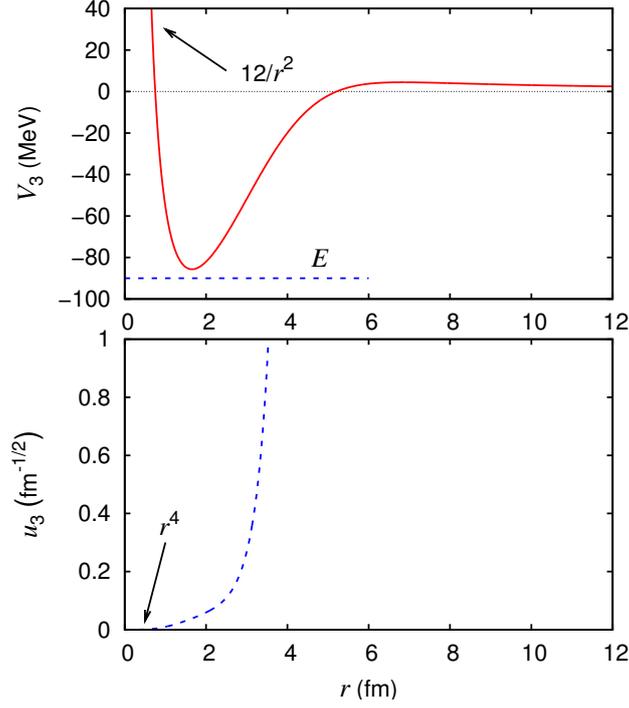


FIG. 3 – Potentiel effectif $^{16}\text{O} + \alpha$ pour $l = 3$ (en haut) et solution régulière à l’origine de l’équation de Schrödinger radiale correspondante (en bas), pour une énergie $E = -90$ MeV. Les comportements schématisés du potentiel et de la solution au voisinage de l’origine sont également indiqués.

au paragraphe 3.1.5 est représentée pour une énergie de -90 MeV. On y voit clairement la fonction u s’éloigner de l’axe et diverger ; ce comportement n’est pas acceptable physiquement car la fonction n’est pas bornée.

Notons également qu’à l’origine, le potentiel effectif présente un coeur répulsif dû au terme centrifuge,

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} V_l(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} \frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (35)$$

L’équation (34) implique alors que la fonction d’onde est “écrasée” par ce coeur, puisqu’elle se comporte comme

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\propto} r^{l+1}. \quad (36)$$

Ces comportements sont également visibles à la figure 3.

3.2.2 Énergie négative, parfois supérieure au potentiel

L’énergie augmentant progressivement, des intervalles de r sur lesquels le potentiel est inférieur à l’énergie apparaissent. Dans ces zones, le second membre de l’équation (34) est négatif ; la concavité de la fonction d’onde y est donc inversée, des points d’inflexion apparaissant là où $V_l(r) = E$; dans ces zones, u peut donc “se rapprocher” de l’axe. Ce comportement est illustré par la solution à -70 MeV représentée dans la première colonne de la figure 4. Notons également qu’à l’infini, le potentiel effectif tend vers zéro :

$$V_l(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} 0. \quad (37)$$

Lorsque cette décroissance est suffisamment rapide (au minimum en r^{-2}), l’équation de Schrödinger radiale (29) tend asymptotiquement vers une équation différentielle à coefficients constants, dont la

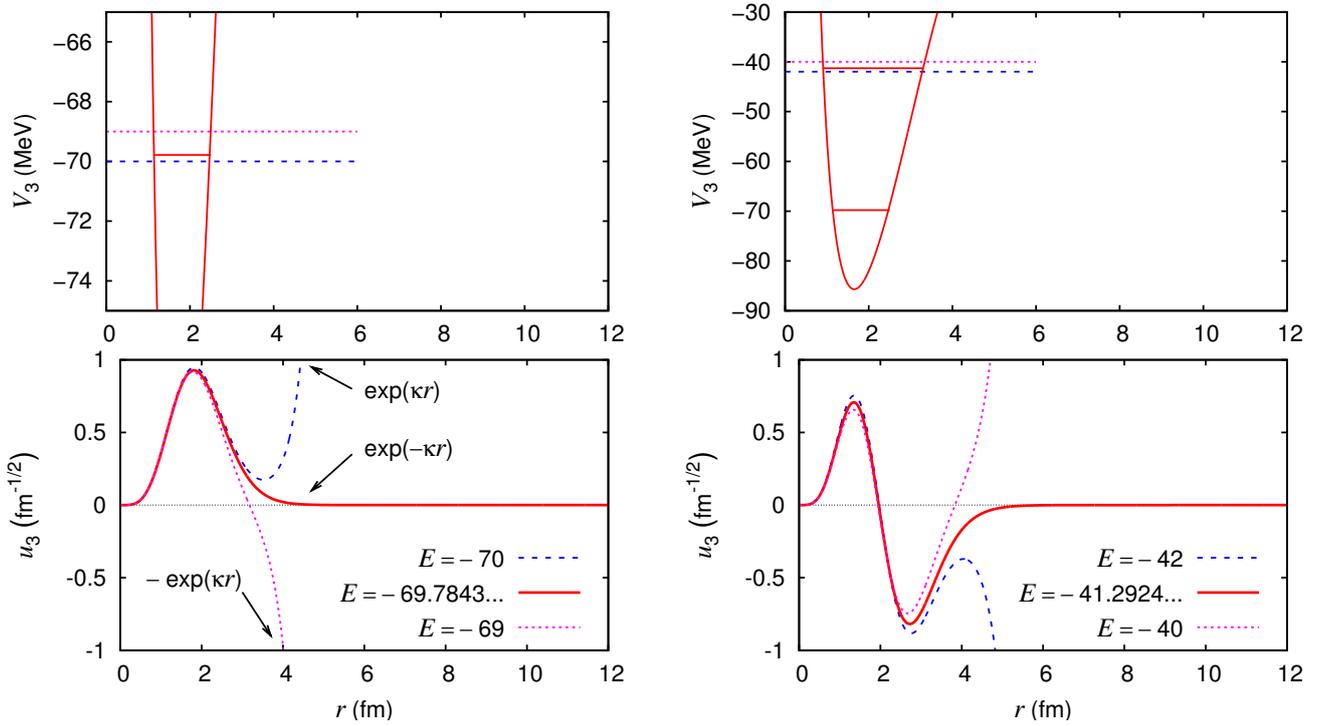


FIG. 4 – Potentiel effectif $^{16}\text{O} + \alpha$ pour $l = 3$ (en haut) et solution régulière à l'origine de l'équation de Schrödinger radiale correspondante (en bas), pour une énergie inférieure, égale ou supérieure à celle du premier état lié (à gauche) ou du second état lié (à droite). Dans la première colonne, les comportements schématiques (négligeant Coulomb) des solutions à grande distance sont également indiqués.

solution générale est une combinaison linéaire d'exponentielles croissante et décroissante

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C e^{\kappa r} + D e^{-\kappa r} \quad (\eta = 0), \quad (38)$$

où les coefficients C et D sont arbitraires mais réels. L'exponentielle croissante domine le comportement asymptotique, comme indiqué schématiquement dans la colonne de gauche de la figure 4 ; n'étant pas bornée, la solution n'est donc toujours pas acceptable physiquement à cette énergie. Continuons à faire croître l'énergie. La zone dans laquelle le potentiel est inférieur à l'énergie s'agrandit, si bien que la fonction u se rapproche de l'axe puis le croise (voir la solution pour $E = -69$ MeV à la figure 4). La fonction d'onde a maintenant un noeud radial. À l'infini, u change de signe mais est toujours non bornée ; le terme dominant dans (38) est toujours l'exponentielle croissante mais le signe du coefficient C a changé.

En toute rigueur, lorsque le potentiel effectif contient un potentiel coulombien (comme c'est le cas dans notre exemple), les choses sont plus compliquées. Le potentiel coulombien décroît en effet comme r^{-1} à l'infini ; cette décroissance est plus lente que celle requise pour que le comportement asymptotique (38) soit valable. Pour établir le comportement exact, on réécrit le potentiel coulombien (14) sous la forme

$$V_l(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2\eta\kappa}{r}, \quad (39)$$

où l'on a introduit η , le paramètre adimensionné de Sommerfeld, qui s'écrit pour des énergies négatives

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}. \quad (40)$$

On peut vérifier que l'équation (34) admet alors comme solution générale pour ce potentiel

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C e^{\kappa r} r^\eta + D \frac{e^{-\kappa r}}{r^\eta}. \quad (41)$$

Pour $\eta = 0$, cette expression se ramène bien à (38) ; dans les autres cas, le facteur en puissance de r variant plus lentement que celui en exponentielle, la discussion qualitative faite plus haut reste valable.

3.2.3 Énergie négative, états liés

Dans la discussion précédente, le passage entre un coefficient C positif et un coefficient C négatif implique l'existence d'une énergie unique, pour laquelle ce coefficient s'annule. C'est à cette énergie qu'apparaît le noeud radial. La fonction u correspondant à cette énergie à un comportement asymptotique décroissant exponentiellement puisque $C = 0$ dans l'équation (41) ; elle est donc bornée, et même normalisable. Cette fonction d'onde est représentée dans la colonne de gauche de la figure 4. Elle a le sens physique d'un *état lié*, équivalent à une orbite liée en mécanique classique. Comme c'est l'énergie la plus basse pour laquelle une telle fonction d'onde existe, on parle d'état fondamental (pour l'onde partielle $l = 3$; les ondes partielles correspondant à des l plus petits admettent des états liés à des énergies plus basses, le potentiel effectif y étant plus petit). La différence essentielle entre les cas classique et quantique est qu'ici, les énergies liées acceptables physiquement forment un spectre *discret* ; on dit que les énergies liées sont *quantifiées* (d'où le nom de physique *quantique*). La constante D qui multiplie l'exponentielle décroissante dans l'équation (41) est appelée *constante de normalisation asymptotique* lorsque la fonction d'onde est normalisée, comme c'est le cas dans la figure 4.

Lorsque l'énergie continue à croître, la courbure de la fonction u devient de plus en plus forte, si bien que des noeuds radiaux supplémentaires sont introduits. Les énergies auxquelles ces noeuds radiaux apparaissent, c'est-à-dire auxquelles le comportement asymptotique de la solution change de signe, correspondent toutes à des états liés ; le nombre de noeuds radiaux des fonctions radiales correspondantes croît donc avec l'énergie. À titre d'exemple, le second état lié (ou premier état excité)

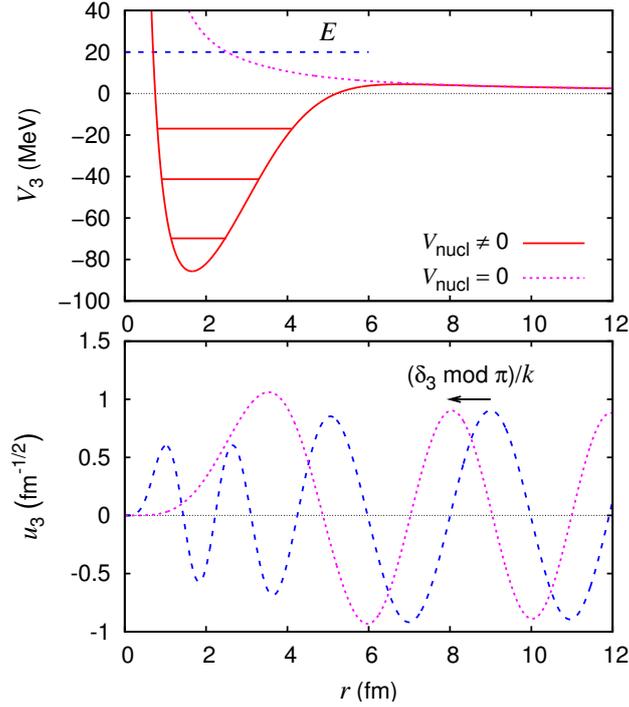


FIG. 5 – Potentiel effectif $^{16}\text{O} + \alpha$ pour $l = 3$ (en haut) et solution régulière à l’origine de l’équation de Schrödinger radiale correspondante (en bas), pour une énergie positive de 20 MeV. La fonction coulombienne régulière calculée pour les mêmes valeurs de l , η et k est également représentée (traits pointillés), ce qui permet de définir le déphasage additionnel δ_3 à une ambiguïté de π près.

de l’onde partielle $l = 3$ du système $^{16}\text{O} + \alpha$, dont la fonction d’onde présente un noeud radial à distance finie, est représenté dans la colonne droite de la figure 4. Pour ce potentiel, il existe enfin un troisième état lié (ou second état excité), dont la fonction d’onde radiale (non représentée ici) a deux noeuds.⁵

3.2.4 Énergie positive, états libres

Après l’étude des états liés, passons maintenant à l’étude des collisions proprement dites, analogues des orbites libres de la mécanique classique, qui correspondent au cas où l’énergie devient positive dans l’équation de Schrödinger. On travaille cette fois directement avec le nombre d’onde k , qui est réel et relié à l’énergie par la relation (30). Continuant sur la lancée des paragraphes précédents, nous faisons encore croître l’énergie, ce qui augmente encore le nombre d’oscillations de la fonction d’onde. Lorsque l’énergie devient positive, le nombre d’oscillations devient infini car la région où l’énergie est supérieure au potentiel s’étend maintenant jusqu’à l’infini. À la figure 5, la fonction u est par exemple représentée pour le potentiel $^{16}\text{O} + \alpha$ traité jusqu’ici, à une énergie de 20 MeV. Le comportement asymptotique comportant des exponentielles réelles (41) devient maintenant une combinaison linéaire d’exponentielles imaginaires (toujours modifiées par une puissance de r en

⁵Notons qu’aucun de ces 3 états liés ne correspond à un état lié physique du noyau de ^{20}Ne (qui serait vu comme un noyau composé de ^{16}O et α) : le potentiel utilisé ici présente en fait des états liés d’énergies très négatives qui sont physiquement interdits par le principe d’exclusion de Pauli entre les nucléons constituant la particule α et ceux constituant le noyau d’oxygène. Ce potentiel peut être interprété physiquement comme un “potentiel de champ moyen” vu par la particule α ; comme le potentiel de champ moyen nucléaire, il présente des “orbitales occupées”. Les potentiels de ce type, souvent qualifiés de “profonds” (par opposition aux potentiels peu profonds qui ne présentent que des états liés observés), ont l’avantage qu’ils permettent souvent d’ajuster des données expérimentales de collisions élastiques avec un petit nombre de paramètres.

présence d'un terme coulombien dans le potentiel) :

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C e^{-ikr} r^{i\eta} + D \frac{e^{ikr}}{r^{i\eta}} = C e^{-i(kr - \eta \ln r)} + D e^{i(kr - \eta \ln r)}, \quad (42)$$

où le paramètre adimensionné de Sommerfeld est cette fois défini par la relation

$$V_l(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{2\eta k}{r}. \quad (43)$$

On a donc pour ce paramètre les expressions alternatives

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 k} \equiv \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar v}, \quad (44)$$

en fonction du nombre d'onde k ou de la vitesse relative v (l'impulsion $p = \mu v$ vaut en effet également $\hbar k = h/\lambda$, où λ est la longueur d'onde de de Broglie). Remarquons que l'expression (41) peut s'obtenir à partir de l'expression (42) en utilisant un nombre d'onde et un paramètre de Sommerfeld imaginaires purs. En comparant les équations (41) et (42), on voit que l'exponentielle croissante devient une onde radiale entrante, alors que l'exponentielle décroissante devient une onde radiale sortante (rappelons que ces ondes sont stationnaires). Quelle que soit l'énergie, le comportement asymptotique (42) est toujours borné, si bien que la fonction u est toujours acceptable physiquement. La première différence par rapport aux énergies liées est donc que, pour les énergies libres, le spectre est continu. Par ailleurs, la normalisation des fonctions d'onde est maintenant arbitraire (si les fonctions d'onde sont bornées, elles ne sont pas normalisables, leurs oscillations étant présentes jusqu'à l'infini).

3.2.5 Déphasage et matrice de collision

Dans l'expression (42), la fonction d'onde étant réelle, les coefficients C et D sont mutuellement complexes conjugués ; on a donc

$$D = C^* = A e^{i\Delta_l(k)}, \quad (45)$$

où A est un coefficient réel arbitraire et où la dépendance en l et k du *déphasage* réel $\Delta_l(k)$ est explicitement introduite. Des écritures alternatives de ce comportement asymptotique sont donc

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kr - \eta \ln r + \Delta_l(k)) \equiv \sin\left(kr - \eta \ln 2kr + \sigma_l(k) - l\frac{\pi}{2} + \delta_l(k)\right) \quad (46)$$

$$\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \underbrace{e^{-i(kr - \eta \ln 2kr + \sigma_l(k) - l\frac{\pi}{2})}}_{\text{onde entrante}} - \underbrace{e^{i(kr - \eta \ln 2kr + \sigma_l(k) - l\frac{\pi}{2})}}_{\text{onde sortante}} \times U_l(k), \quad (47)$$

où l'on a introduit la *matrice de collision*

$$U_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}. \quad (48)$$

La première ligne (46) est une sinusoïde qui fait clairement apparaître le caractère purement réel de la fonction d'onde. Le déphasage $\Delta_l(k)$ y est arbitrairement décomposé en quatre termes :

1. le terme $-\eta \ln 2k$, nul en l'absence de terme coulombien et qui se combine avec le terme $-\eta \ln r$ pour rendre l'argument du logarithme sans dimension,
2. le déphasage *coulombien* $\sigma_l(k) = \arg \Gamma(l + 1 + i\eta)$, également nul en l'absence de terme coulombien (voir la référence [AS65] pour son calcul lorsque $\eta \neq 0$),
3. le déphasage *centrifuge* $-l\pi/2$, nul pour l'onde s ,
4. le *déphasage additionnel* $\delta_l(k)$, appelé simplement "déphasage" en général.

Les deux premiers termes apparaissent dans le comportement asymptotique de la *fonction coulombienne régulière*, $F_l(\eta, kr)$, qui n'est autre la solution régulière à l'origine de l'équation de Schrödinger radiale (29) pour un potentiel effectif contenant seulement un terme centrifuge et un terme coulombien.⁶ Le déphasage additionnel n'apparaît, lui, que lorsque le potentiel effectif contient, en plus des termes centrifuge et coulombien, un terme à courte portée, comme un terme de régularisation du cœur coulombien répulsif ou un terme d'interaction nucléaire.

Ce déphasage additionnel possède donc l'interprétation physique suivante : il est la seule trace visible à grande distance dans la fonction d'onde de la présence d'un terme d'interaction à courte portée. La seconde ligne (47) est instructive à ce propos : elle montre que la fonction d'onde radiale peut également s'interpréter comme la combinaison linéaire d'une onde entrante et d'une onde sortante déphasée par la "*matrice*" de collision additionnelle $U_l(k)$. Dans le cas de collisions élastiques de particules sans spin, comme considéré jusqu'ici, cette matrice de collision est un simple nombre complexe. Dans un cas plus général (voir paragraphe 5), cette notion se généralise cependant et devient une véritable matrice, dont la dimension est égale au nombre de voies. En mécanique quantique, les ondes entrante et sortante peuvent être interprétées comme des courants de probabilité [CTDL73] ; la matrice de collision doit donc être unitaire pour assurer la conservation du flux de probabilité ; cette propriété est immédiatement vérifiée ici, le déphasage étant réel. La matrice de collision quantique joue un rôle analogue à l'angle de déviation additionnel d'une collision en mécanique classique (voir l'équation (17) : pour un moment cinétique et une énergie relative données, elle résume l'influence qu'a le potentiel d'interaction à courte portée au cours du processus de collision. En mécanique classique, lorsqu'il n'y a pas d'interaction (à courte portée), l'angle de déviation (additionnel) est nul ; en mécanique quantique, lorsqu'il n'y a pas d'interaction (à courte portée), le déphasage (additionnel) entre l'onde entrante et l'onde sortante est nul, ce qui correspond à une matrice de collision égale à un. Nous verrons d'ailleurs plus loin que $U_l(k)$ permet de calculer la section efficace de collision élastique, au même titre que l'angle de déviation le permet en mécanique classique, par la formule (13). Insistons sur le fait que cette utile analogie entre classique et quantique s'arrête là : la nature physique d'une trajectoire libre "idéale", caractérisée par une énergie et un moment cinétique donnés, est très différente de la nature physique d'une fonction d'onde libre caractérisée par les mêmes quantités : en mécanique quantique, la géométrie de la fonction d'onde est toujours définie par l'onde partielle (24), qui est nettement plus difficile à visualiser qu'une trajectoire classique !

Signalons enfin que l'équation (46) est souvent utilisée pour *définir* le déphasage additionnel à partir du comportement asymptotique de la fonction d'onde ; cette définition mène à une ambiguïté de π pour le déphasage, une variation de π modifiant seulement le signe de la fonction d'onde et pouvant être compensée par un changement de signe du coefficient A des équations (45). Nous verrons ci-dessous que cette ambiguïté est soluble en théorie ; en revanche, elle n'est pas soluble expérimentalement : en effet, ajouter un multiple de π au déphasage ne modifie pas la matrice de collision, et donc ne modifie pas la section efficace.

La notion de déphasage additionnel est illustrée par la figure 5, dans laquelle la solution de l'équation radiale considérée jusqu'ici est comparée à la fonction coulombienne régulière pour les mêmes valeurs de l , η et k . À courte distance, les deux fonctions sont très différentes : la fonction coulombienne est écrasée car le potentiel effectif correspondant est la somme des potentiels centrifuge et coulombien, qui sont tous deux répulsifs et singuliers à l'origine ; la fonction u présente en revanche des oscillations dues au puits de potentiel nucléaire (cf états liés). À grande distance par contre, les deux fonctions ont le même type de comportement oscillant, proche d'une simple sinusoïde (le terme en $\eta \ln r$ de l'équation (42) varie lentement et a peu d'influence visible), la seule différence entre les

⁶En divisant l'équation (29) par E , on obtient dans ce cas

$$\left[-\frac{d^2}{k^2 dr^2} + \frac{l(l+1)}{k^2 r^2} + \frac{2\eta}{kr} - 1 \right] u_{kl}(r) = 0, \quad (49)$$

qui ne dépend bien que des nombres sans dimension l , η et kr . Mathématiquement, les fonctions $F_l(\eta, kr)$ s'expriment sous forme de séries hypergéométriques [AS65]. Pour $\eta = 0$, elles se ramènent à des fonctions de Bessel sphériques $F_l(0, kr) = j_l(kr)$. Si de plus $l = 0$, on a simplement $F_0(0, kr) = \sin(kr)$.

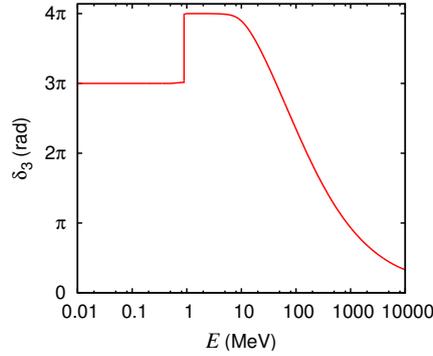


FIG. 6 – Déphasage additionnel $l = 3$ pour le potentiel d'interaction $^{16}\text{O} + \alpha$ défini à la figure 2, en fonction de l'énergie.

deux étant le déphasage δ_3 , dont on voit qu'il n'est défini qu'à π près si l'on se base uniquement sur le comportement asymptotique de la fonction d'onde.

3.2.6 Définition et propriétés théoriques des déphasages

Revenons à la figure (5) et imaginons un passage continu de la fonction d'onde coulombienne régulière (pointillés) à la fonction u (tirets). Cette transformation se produit si, partant d'un potentiel effectif répulsif centrifuge-coulombien pur, on lui ajoute progressivement un potentiel attractif nucléaire (et régularisateur du terme coulombien); la fonction u glisse alors progressivement vers l'origine, avec des oscillations de plus en plus serrées au fur et à mesure que le potentiel devient plus profond. Au cours de cette transformation, on voit le déphasage additionnel partir d'une valeur nulle puis croître continument, augmentant de π chaque fois que les zéros de la fonction u croisent les zéros de la fonction F . En comptant le nombre de noeuds radiaux des fonctions d'ondes u et F , on peut se convaincre que le déphasage additionnel doit valoir environ 3.5π pour l'énergie de 20 MeV à laquelle est dessinée la figure. C'est bien la valeur que l'on peut extraire de la figure 6 ci-dessous.

Cette définition théorique du déphasage additionnel, qui repose sur une comparaison détaillée entre la fonction d'onde et la fonction coulombienne régulière, et pas seulement sur une comparaison de leurs comportements asymptotiques, ne souffre donc pas d'ambiguïté de π . Une formule intégrale donnant ce déphasage théorique non ambigu a été établie récemment pour toute onde partielle mais en l'absence de Coulomb [CKK01]. Nous avons vérifié numériquement que sa généralisation au cas coulombien est

$$\delta_l(k) = -k \int_0^\infty \frac{\left[\frac{2\mu}{\hbar^2} V_l(r) - \frac{2\eta k}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{kl}^2(r)}{[F_l'(\eta, kr)u_{kl}(r) - F_l(\eta, kr)u_{kl}'(r)]^2 + [G_l'(\eta, kr)u_{kl}(r) - G_l(\eta, kr)u_{kl}'(r)]^2} dr, \quad (50)$$

où F_l désigne la fonction coulombienne régulière à l'origine introduite précédemment (dont le comportement asymptotique est donné par (46) avec $\delta_l(k) = 0$) et G_l désigne la fonction coulombienne irrégulière : solution de la même équation que F_l , elle est singulière à l'origine et a un comportement asymptotique en cosinus plutôt qu'en sinus. Pour l'onde s sans Coulomb, la formule (50) s'écrit par exemple

$$\delta_0(k) = -k \int_0^\infty \frac{2\mu}{\hbar^2} V_0(r) \frac{u_{k0}^2(r)}{u_{k0}'^2(r) + k^2 u_{k0}^2(r)} dr \quad (l = \eta = 0). \quad (51)$$

Ces équations devraient à terme supplanter les équations intégrales donnant les déphasages à π près présentes dans les livres de référence sur la théorie des collisions.

Énonçons maintenant sans démonstration quelques propriétés importantes du déphasage additionnel, dont on peut se convaincre en tenant le même raisonnement que précédemment (variation continue de la fonction d'onde entre F et u), pour différentes valeurs de l'énergie :

- $\delta_l(k)$ est une fonction continue de k (ou de E),

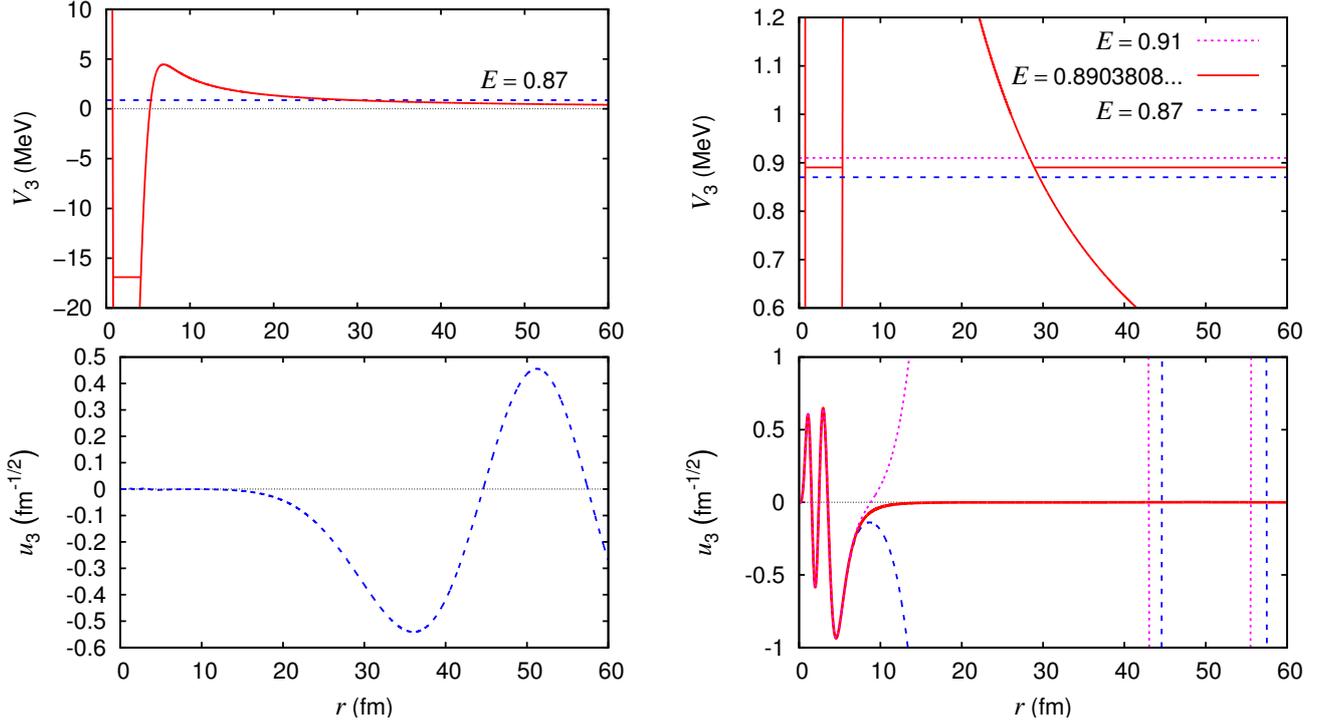


FIG. 7 – Potentiel effectif $^{16}\text{O} + \alpha$ pour $l = 3$ (en haut) et solution régulière à l’origine de l’équation de Schrödinger radiale correspondante (en bas), pour une énergie inférieure de 0.87 MeV (à gauche) et pour une énergie inférieure, égale ou supérieure à celle de la résonance (à droite). Aux échelles choisies, les oscillations de la fonction d’onde près de l’origine sont invisibles à gauche, alors que les oscillations asymptotiques de la fonction d’onde résonante sont invisibles à droite.

- $\delta_l(\infty) = 0$ car le potentiel devient négligeable par rapport à l’énergie dans ce cas (notons cependant que l’approximation non relativiste faite dans le présent cours n’est alors plus valable),
- $\delta_l(0) = N_l\pi$, où N_l est le nombre d’états liés pour l’onde partielle l (ce théorème, dû à Levinson, peut se démontrer à partir du nombre de noeuds radiaux de la fonction d’onde à énergie nulle; il repose donc sur la connexion entre états liés, noeuds radiaux et déphasage, qui ne devrait pas surprendre le lecteur de ce cours).⁷

Ces propriétés sont illustrées par la figure 6, qui montre le déphasage additionnel du potentiel effectif utilisé jusqu’ici. On voit en particulier que le potentiel a trois états liés, ce qui implique que $\delta_3(0) = 3\pi$; le saut de π vers 1 MeV est une résonance étroite qui sera discutée plus loin.

3.2.7 Basse énergie et développement en portée effective

Étudions maintenant plus en détail le cas d’une énergie positive mais petite

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 \gtrsim 0, \quad (52)$$

en revenant d’abord à l’étude heuristique de l’équation de Schrödinger radiale. La partie gauche de la figure 7 montre l’allure typique de la solution de cette équation pour une énergie “basse”, c’est-à-dire une énergie inférieure à la hauteur de la barrière de potentiel constituée des potentiels répulsifs centrifuge et coulombien. Classiquement, cette barrière serait infranchissable pour une telle énergie et la particule aurait un point de rebroussement vers 30 fm. En mécanique quantique, le phénomène

⁷Notons que pour $l = \eta = 0$, il est également possible d’avoir une fonction d’onde bornée d’énergie nulle; on a alors dans ce cas très particulier $\delta_0(0) = (N_l + \frac{1}{2})\pi$.

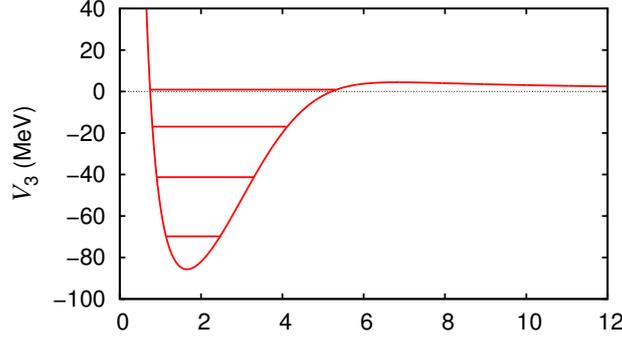


FIG. 8 – Potentiel effectif $^{16}\text{O} + \alpha$ pour $l = 3$ et son spectre complet (3 états liés et 1 résonance).

d’effet tunnel a comme conséquence qu’il existe une probabilité non nulle de traverser cette barrière. Cette probabilité de transmission s’appelle *facteur de pénétration* et se comporte à basse énergie comme

$$P_l \underset{k \rightarrow 0}{\propto} \begin{cases} k^{2l+1} & (\eta = 0). \\ e^{-2\pi\eta} & (\eta \neq 0). \end{cases} \quad (53)$$

On voit qu’il tend très rapidement vers zéro lorsque l’énergie tend vers zéro car la barrière devient alors de plus en plus large et difficile à traverser. Dans le cas neutre, cette annulation est d’autant plus rapide que l est grand.

Une première conséquence de la présence de cette barrière est qu’à très basse énergie le potentiel nucléaire à courte portée a très peu d’influence sur le processus de collision. On s’attend donc à ce que le déphasage additionnel soit proche de zéro. De fait, on peut montrer qu’à basse énergie le déphasage vérifie le *développement en portée effective*, dont le premier terme s’écrit (pour le développement complet, voir par exemple [KB07])

$$\delta_l(k) - \delta_l(0) \underset{k \rightarrow 0}{\sim} \begin{cases} -a_l k^{2l+1} & (\eta = 0). \\ -a_l \frac{2\pi(\eta k)^{2l+1}}{l^2} e^{-2\pi\eta} & (\eta \neq 0). \end{cases} \quad (54)$$

Ceci explique le comportement très “plat” du déphasage à basse énergie sur la figure 6. Ce comportement est également à mettre en correspondance avec celui de l’angle de déviation classique, qui tend vers zéro lorsque l’énergie tend vers 0, pour un moment cinétique donné.

Le seul cas où le déphasage à basse énergie est non négligeable est celui où il n’y a ni barrière coulombienne ni centrifuge. On a alors

$$\delta_0(k) - \delta_0(0) \underset{k \rightarrow 0}{\sim} -a_0 k \quad (l = \eta = 0), \quad (55)$$

où a_0 est la *longueur de diffusion*, qui peut devenir très grande en valeur absolue lorsqu’il y a un état lié ($a_0 > 0$) ou virtuel ($a_0 < 0$) proche de l’énergie $E = 0$.

3.2.8 Résonances

Une seconde conséquence de la présence de cette barrière est le fait que lorsque le potentiel à courte portée est attractif, comme c’est le cas de l’interaction nucléaire forte, le puits de potentiel formé est assez isolé de la zone asymptotique. Nous avons vu plus haut que ce puits de potentiel pouvait admettre des états liés à des énergies négatives, phénomène typique d’un potentiel confinant la particule dans une zone finie de l’espace. Pour une énergie positive, on ne peut avoir d’état lié (les fonctions d’onde ne sont jamais normalisables); cependant, pour une énergie positive mais petite, les potentiels à longue portée peuvent former une barrière quasiment infranchissable et le puits de

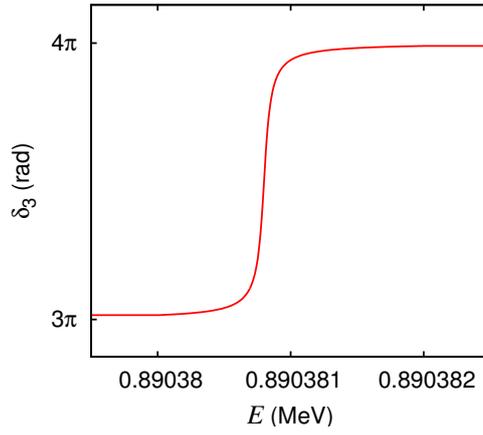


FIG. 9 – Déphasage additionnel $l = 3$ pour le potentiel d'interaction $^{16}\text{O} + \alpha$ défini à la figure 2, en fonction de l'énergie, au voisinage de la résonance étroite.

potentiel est alors quasiment confinant. Le système peut alors présenter des *états quasi-liés*; c'est ce qu'on appelle des *résonances*. Ce phénomène apparait par exemple dans l'onde partielle $l = 3$ du système $^{16}\text{O} + \alpha$ (c'est d'ailleurs une des raisons du choix de ce potentiel comme exemple transversal dans ce cours); le spectre complet de ce potentiel effectif est représenté à la figure 8, où l'on voit les 3 états liés mais aussi la résonance à l'énergie de 0.89 MeV, égale à la valeur expérimentale. La colonne de droite de la figure 7 montre les solutions de l'équation de Schrödinger radiale pour trois énergies positives : l'une sous la résonance, l'autre au milieu de la résonance, et enfin la troisième au-dessus de la résonance. Cette figure est à comparer à la situation des états liés (figure 4) : on voit que le phénomène de résonance est totalement analogue à celui d'état lié, si ce n'est que la fonction u oscille à grande distance plutôt que de croître ou décroître exponentiellement. En particulier, les fonctions d'onde juste au-dessous et juste au-dessus de la résonance sont très proche l'une de l'autre, à un changement de signe près, qui correspond à l'apparition d'un nouveau noeud radial. Lorsqu'on traverse la résonance en faisant croître l'énergie, la fonction d'onde

- se contracte vers la gauche, ce qui correspond à une augmentation de π du déphasage (voir la figure 6 et le zoom sur la partie intéressante à la figure 9); nous verrons plus loin que le comportement du déphasage dans cette zone peut se décomposer en un terme de fond et un terme résonnant :

$$\delta_l(E) \underset{E \approx E_r}{\approx} \delta_{\text{fond}} + \arctan \frac{\Gamma/2}{E_r - E}, \quad (56)$$

où E_r est l'énergie de la résonance et Γ est sa largeur;

- voit son amplitude relative entre la zone intérieure et la zone extérieure croître fortement, cette amplitude relative étant d'autant plus grande que la largeur de la résonance est petite (pour une résonance large, la fonction d'onde subit des changements nettement moins spectaculaires lorsque l'énergie varie); cette forme particulière de l'état stationnaire de diffusion à l'énergie de la résonance (grand dans le puits de potentiel, petit en dehors) implique un comportement très intéressant de la fonction d'onde non stationnaire dans une approche basée sur des paquets d'onde [Tay72] : à l'énergie de la résonance, les particules qui entrent en collision sont capturées pendant un certain temps dans l'état quasi-lié, avant de se séparer à nouveau; ce temps, aussi appelé *durée de vie* de l'état résonnant, est d'autant plus long que la résonance est étroite; il vaut

$$\tau = \hbar/\Gamma. \quad (57)$$

Par exemple, la résonance considérée ci-dessus pour l'onde partielle $l = 3$ du système $^{16}\text{O} + \alpha$ a une largeur $\Gamma \approx 0.08$ eV, ce qui correspond à une durée de vie $\tau \approx 8$ fs, à comparer à la valeur expérimentale de 140(40) fs.

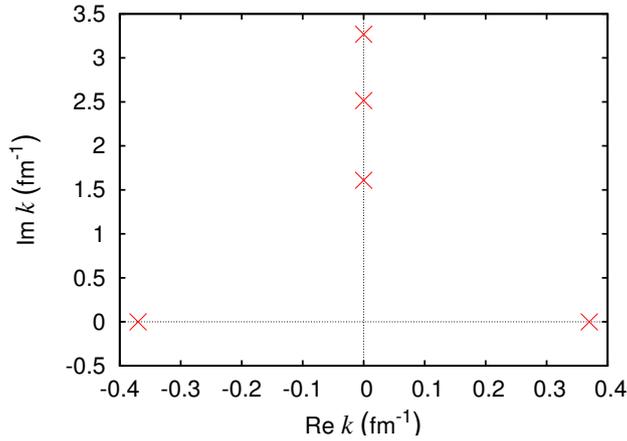


FIG. 10 – Pôles de la matrice de collision partielle $l = 3$ du potentiel $^{16}\text{O} + \alpha$ présenté plus haut, dans le plan des nombres d’ondes complexes. Les pôles du demi-plan supérieur correspondent aux trois états liés, alors que la paire de pôles du demi-plan inférieur (leur partie imaginaire négative est invisible à l’échelle choisie) correspond à la résonance étroite.

Examinons brièvement le comportement de la matrice de collision correspondant au déphasage résonnant (56). En utilisant le lien entre matrice de collision et déphasage donné par l’équation (47), on obtient

$$U_l(E) \underset{E \approx E_r}{\approx} U_{\text{fond}} \frac{E - E_r - i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2}. \quad (58)$$

On constate que la résonance correspond à un pôle de la matrice de collision à une énergie complexe dont la partie réelle vaut l’énergie de la résonance et dont la partie imaginaire vaut sa largeur divisée par deux. De manière générale, rendre complexe l’énergie (ou plutôt le nombre d’onde, de même d’ailleurs que le moment cinétique l) est un des outils mathématiques essentiels de la théorie des collisions. Donnons-en un très court aperçu ici : dans le plan des nombres d’ondes complexes, les pôles de la matrice de collision correspondent aux états liés du système (pôles sur l’axe imaginaire positif), aux états virtuels (pôles sur l’axe imaginaire négatif) et à ses résonances (paires de pôles dans le demi-plan inférieur, symétriques par rapport à l’axe imaginaire à cause de l’unitarité de la matrice de collision). L’étude de ces pôles permet par exemple de démontrer le théorème de Levinson vu ci-dessus ou de comprendre comment un état lié peut se transformer en état virtuel ou en résonance lorsque le potentiel devient moins attractif. À titre d’exemple, la figure 10 montre les pôles de la matrice de collision partielle du système étudié jusqu’ici ; on retrouve les 3 états liés et la résonance visibles à la figure 8.

3.3 Amplitude de diffusion et section efficace

Suivant le même cheminement que dans le cas classique, nous quittons maintenant les états libres “idéaux”, états propres du moment cinétique, pour tenter de décrire une réalité expérimentale plus fréquente, à savoir un faisceau de particules incident sur une cible. Nous faisons l’hypothèse d’un faisceau idéal, monoénergétique et parfaitement collimaté. L’onde entrante est donc cette fois une onde plane, que nous choisissons orientée suivant l’axe z , alors que l’onde diffusée peut l’être différemment suivant la direction. L’état quantique décrivant cette situation est *l’état stationnaire*⁸ *de diffusion*, $\varphi_{k\mathbf{1}_z}(\mathbf{r})$, solution de l’équation de Schrödinger stationnaire (21) avec le comportement asymptotique

$$\varphi_{k\mathbf{1}_z}(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{i[kz + \eta \ln k(r-z)]} + \frac{e^{i(kr - \eta \ln 2kr)}}{r} f(k, \theta), \quad (59)$$

⁸Rappelons ici la discussion du paragraphe 3.1.2 et la possibilité de décrire également les collisions en termes de paquet d’ondes dépendant du temps.

où les termes dus à Coulomb ($\eta \neq 0$) compliquent une fois de plus l'expression mathématique sans en modifier profondément l'interprétation et où le coefficient modulant l'onde sphérique sortante, $f(k, \theta)$, est appelé *amplitude de diffusion*.

Cet état présente la même symétrie de révolution azimutale que l'expérience qu'il décrit. L'onde plane incidente implique qu'il n'est pas possible de définir un paramètre d'impact ; contrairement au cas classique, où cette indétermination provient d'une simple ignorance des détails des réactions individuelles, il s'agit ici d'un fait fondamental, résultant du principe d'incertitude pour une onde plane. Aux deux termes de l'équation (59), on peut faire correspondre des courants de probabilité, l'un parallèle à z , l'autre radial. Un raisonnement identique au cas classique mène, en calculant le rapport de ces deux courants, à l'expression de la section efficace différentielle de diffusion élastique en fonction de l'amplitude de diffusion

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = |f(k, \theta)|^2. \quad (60)$$

On voit donc que l'amplitude de diffusion, qui caractérise l'effet de la collision à grande distance, détermine totalement la section efficace.

Considérons maintenant quelques cas particuliers. Lorsque l'interaction est purement coulombienne, on obtient l'amplitude de diffusion coulombienne

$$f_c(k, \theta) = -\frac{\eta}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{2i(\sigma_0 - \eta \ln \sin \frac{\theta}{2})}, \quad (61)$$

dont on vérifie qu'elle mène à la section efficace de Rutherford classique (16) en utilisant l'expression (44) du paramètre de Sommerfeld. Il est donc assez remarquable que, pour ce cas particulier, les calculs classique et quantique mènent au même résultat.⁹ Dans le cas d'une interaction comportant un terme coulombien et un terme à courte portée, on considère comme précédemment l'interaction coulombienne comme une référence, ce qui mène à une décomposition de l'amplitude de diffusion en la somme d'une amplitude coulombienne et d'une amplitude additionnelle,

$$f(k, \theta) = f_c(k, \theta) + f_{\text{add}}(k, \theta), \quad (62)$$

dont l'usage est très fréquent en physique nucléaire. Le dernier cas particulier intéressant est celui de l'absence de terme coulombien. Contrairement au cas précédent, la section efficace différentielle ne diverge plus lorsque θ tend vers 0. On peut alors définir la section efficace totale de diffusion élastique sous la forme de l'intégrale convergente

$$\sigma(E) = \int_{4\pi} |f(k, \theta)|^2 d\Omega \quad (\eta = 0). \quad (63)$$

3.3.1 Méthode des déphasages pour l'amplitude de diffusion

Montrons maintenant comment combiner la notion de déphasage, obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger radiale, avec la notion d'amplitude de diffusion, et donc de section efficace, obtenue ci-dessus. On développe pour cela l'état stationnaire de diffusion $\varphi_{k\mathbf{1}_z}(\mathbf{r})$ sur la base des ondes partielles (24) pour l'énergie considérée. En toute généralité, le développement d'une fonction d'onde stationnaire d'énergie positive contient une infinité de termes, correspondant aux différents nombres quantiques l et m . Dans le cas de $\varphi_{k\mathbf{1}_z}(\mathbf{r})$, l'état ayant une symétrie de révolution azimutale, seuls les termes correspondant à $m = 0$ seront non nuls (voir la dépendance en ϕ des harmoniques sphériques (25)). On a donc

$$\varphi_{k\mathbf{1}_z}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l \frac{u_{kl}(r)}{kr} P_l(\cos \theta), \quad (64)$$

⁹Remarquons également que la phase de l'amplitude de diffusion coulombienne (61) n'intervient pas dans le calcul de la section efficace. Cette phase joue par contre un rôle essentiel dans le calcul de la section efficace coulombienne de particules *identiques*, pour lesquelles la fonction d'onde relative doit satisfaire le principe de Pauli ; le résultat quantique (section efficace de Mott) est alors différent du cas classique.

où les harmoniques sphériques se ramènent, à un facteur près absorbé dans les coefficients c_l , à des polynômes de Legendre P_l en $\cos \theta$ et où la dépendance en ϕ a disparu. Les fonctions u_{kl} apparaissant dans cette expression sont celles discutées ci-dessus, solutions de l'équation de Schrödinger radiale (29) régulières à l'origine. Dans le cas d'un état stationnaire de diffusion coulombienne pure (respectivement d'une onde plane), on peut montrer que ces fonctions sont les fonctions coulombiennes régulières F_l (respectivement les fonctions de Bessel sphériques j_l) et que les coefficients c_l sont égaux à

$$c_l = (2l + 1)e^{i(\sigma_l(k) + l\frac{\pi}{2})}. \quad (65)$$

Lorsqu'une interaction à courte portée est présente, l'état stationnaire de diffusion se développera avec les mêmes coefficients c_l , à condition de réécrire le comportement asymptotique (47) des fonctions u_{kl} sous la forme (la normalisation a ici son importance)

$$u_{kl}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left(kr - \eta \ln 2kr + \sigma_l(k) - l\frac{\pi}{2} \right) + e^{i(kr - \eta \ln 2kr + \sigma_l(k) - l\frac{\pi}{2})} k f_l(k), \quad (66)$$

où le premier terme correspond à l'état stationnaire de diffusion purement coulombien (respectivement à une onde plane) et le second terme correspond à l'onde sphérique diffusée du fait de la présence d'un potentiel à courte portée. Le coefficient de ce second terme fait apparaître l'amplitude de diffusion partielle $f_l(k)$, dont l'expression s'obtient par comparaison avec l'équation (47) :

$$f_l(k) = \frac{U_l(k) - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k)}{k}. \quad (67)$$

En remplaçant l'expression (66) dans le développement (64) avec les coefficients (65) et en comparant au développement asymptotique de l'état stationnaire de diffusion (59), où l'amplitude de diffusion est donnée par la somme (62), on obtient l'amplitude de diffusion additionnelle

$$f_{\text{add}}(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) e^{2i\sigma_l(k)} f_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (68)$$

Cette expression révèle l'importante simplicité de la méthode des déphasages à basse énergie. En effet, nous avons vu plus haut que, pour une énergie donnée, le déphasage tendait vers zéro lorsque l croissait, et ce d'autant plus vite que l'énergie était basse. L'équation (67) montre qu'il en est de même pour l'amplitude de diffusion partielle. Pour une énergie donnée, la somme (68) se limite donc en pratique à un nombre fini de termes, ce nombre étant d'autant plus petit que l'énergie est basse. Pour calculer une amplitude de diffusion à basse énergie, on se contentera donc de résoudre un petit nombre d'équations de Schrödinger radiales.

Ayant obtenu l'amplitude de diffusion, on pourra alors calculer la section efficace différentielle (60), ainsi que la section efficace totale (63) en l'absence de Coulomb. La section efficace différentielle fera apparaître des *interférences* entre ondes partielles différentes, qui mènent aux comportements typiquement ondulatoires des sections efficaces quantiques. Dans la section efficace totale par contre, les contributions des différentes ondes partielles se découpent selon

$$\sigma(E) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(E) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) |f_l(k)|^2 \quad (\eta = 0). \quad (69)$$

Les seuls phénomènes typiquement ondulatoires visibles dans la section efficace totale seront donc les résonances. La méthode des déphasages permet de prédire la forme de ces résonances : en effet, l'expression (56) du déphasage au voisinage d'une résonance mène à une variation brutale de la section efficace partielle correspondante. Par exemple, lorsque le déphasage de fond est négligeable, on obtient

$$\sigma_l(E) \underset{E \approx E_r}{\approx} \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{\Gamma^2/4}{(E_r - E)^2} \quad (\delta_{\text{fond}} = 0). \quad (70)$$

Cette équation est la formule de Breit-Wigner ; elle correspond à un pic dans la section efficace à l'énergie E_r , d'une largeur Γ . Lorsque le déphasage de fond est non négligeable, la section efficace a

une forme plus compliquée (creux, pic suivi d'un creux ou creux suivi d'un pic), également prédite par la formule (56). La méthode des déphasages est donc particulièrement adaptée à l'étude de résonances individuelles, typiques des basses énergies.

Cette méthode permet également d'analyser le comportement de la section efficace de collision à très basse énergie. En effet, seule l'onde s ($l = 0$) joue un rôle dans ce cas, le terme centrifuge rendant les contributions des ondes partielles plus élevées négligeables. L'amplitude de diffusion correspondante est isotrope ; elle vaut

$$f(k, \theta) \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} -a_0 \quad (\eta = 0), \quad (71)$$

ce qui correspond à la section efficace d'une sphère de rayon a_0 :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} a_0^2, \quad \sigma \xrightarrow[k \rightarrow 0]{} 4\pi a_0^2 \quad (\eta = 0). \quad (72)$$

L'isotropie de la section efficace et son expression en termes d'un seul paramètre, la longueur de diffusion, est une simplification physique importante, utilisée notamment pour les collisions atome-atome dans la physique des gaz ultrafroids ; dans ce contexte, on exploite également le fait que a_0 (et donc la section efficace) est très grande en présence d'un état lié ou virtuel proche de l'énergie de seuil $E = 0$. Lorsque l'énergie croît, les ondes partielles suivantes entrent progressivement en jeu, rendant la dépendance en θ de l'amplitude de diffusion (et donc de la section efficace) de plus en plus complexe.

3.3.2 Autres méthodes de calcul de l'amplitude de diffusion

Mentionnons brièvement pour terminer d'autres méthodes de calcul de l'amplitude de diffusion. Notons tout d'abord que la décomposition (62) de l'amplitude de diffusion en un terme de longue portée (coulombien) et un terme de courte portée (nucléaire) est un cas particulier de la méthode plus générale de l'*amplitude de référence* : lorsque le potentiel se décompose en

$$V = V_I + V_{II}, \quad (73)$$

l'amplitude de diffusion se décompose en

$$f = f_I + f_{II}. \quad (74)$$

Une autre situation dans laquelle cette méthode est particulièrement utile est celle où le potentiel V_{II} est suffisamment petit pour être traité comme une perturbation du potentiel V_I :

$$V_{II} \ll V_I. \quad (75)$$

Le traitement perturbatif qui en résulte, basé sur un développement en série, est appelé *approximation de l'onde déformée* et est dû à Born (distorted-wave Born approximation, ou DWBA). Similairement, à haute énergie, on a $V \ll E$, si bien que c'est tout le potentiel d'interaction qui peut être considéré comme une perturbation. On est alors dans le cas de l'approximation de Born.

4 Méthode de la matrice \mathbf{R}

Revenons maintenant aux basses énergies et à la méthode des déphasages, basée sur la décomposition de la fonction d'onde en ondes partielles. Comme nous l'avons vu ci-dessus, le point central de cette méthode est l'équation de Schrödinger radiale (29), qui doit être résolue pour un nombre relativement restreint de valeurs du moment cinétique l (typiquement $l \leq 5$). Dans les paragraphes qui précèdent, nous avons tenté de faire comprendre les concepts de base de la théorie des collisions à basse énergie par inspection de l'allure des solutions de cette équation (voir figures 3, 4, 5 et 7). Nous n'avons cependant pas encore expliqué *comment* résoudre cette équation. Comme il s'agit

d'une équation différentielle du second ordre à une dimension, associée à une condition initiale à l'origine (32), une méthode basée sur les différences finies est celle qui vient en premier lieu à l'esprit (mathématiquement, le problème à résoudre est un problème de Dirichlet). De fait, la structure de l'équation (29), à coefficients constants et sans terme du premier ordre, se prête particulièrement bien à une telle méthode. Citons en particulier la méthode de Numerov. Une telle technique présente cependant quelques inconvénients : tout d'abord, si l'on veut calculer les sections efficaces à un grand nombre d'énergies, on doit intégrer numériquement l'équation à chacune de ces énergies ; ensuite, le traitement des états liés requiert de combiner la technique d'intégration numérique à une itération sur les énergies (par exemple par la méthode de Newton) pour trouver les énergies acceptables physiquement.

Dans le cadre de ce cours, nous avons choisi de présenter une autre méthode, qui nous paraît injustement sous utilisée actuellement en physique nucléaire : la méthode de la *matrice de réaction* ou *matrice R*. Comme nous le verrons plus bas, du point de vue théorique, il s'agit d'une méthode très efficace de *résolution* de l'équation de Schrödinger, qui présente deux avantages par rapport aux différences finies. Tout d'abord, elle traite de manière identique les états liés et les états libres ; il s'agit en fait d'une méthode de *discrétisation du continu*, basée sur la résolution d'un problème aux valeurs propres (mathématiquement, on résout cette fois un problème différentiel aux limites, ou de Sturm-Liouville). Les valeurs propres négatives correspondent aux états liés, alors que les valeurs propres positives correspondent aux résonances et à l'ensemble du spectre continu. Le second avantage par rapport aux différences finies est que le déphasage s'exprime comme une fonction analytique de l'énergie, fonction dans laquelle les valeurs propres du problème de Sturm-Liouville apparaissent comme de simples paramètres. Pour une onde partielle donnée, il suffit donc de résoudre une seule fois le problème aux valeurs propres pour disposer du déphasage à toute énergie.

Autre conséquence fondamentale de cette approche aux valeurs propres : plutôt que de calculer ces valeurs propres par résolution d'un problème théorique, on peut aussi les considérer comme des paramètres phénoménologiques permettant d'*ajuster* des sections efficaces expérimentales. La matrice R est donc un outil autant utilisé par les théoriciens que par les expérimentateurs. En particulier, son utilisation dans un contexte expérimental exploite le fait que la méthode, que nous présenterons essentiellement ici pour les collisions élastiques, se généralise assez directement aux collisions inélastiques et aux réactions (d'où son nom, voir le paragraphe 5). Notons enfin que, si la matrice R est particulièrement utile (et historiquement née) en physique nucléaire, elle est également utilisée dans plusieurs autres disciplines, comme la physique atomique ou la chimie quantique.

La meilleure référence sur la matrice R reste probablement l'article de revue de Lane et Thomas [LT58]. Très complet, il est par contre d'un abord un peu rébarbatif. Des introductions plus pédagogiques mais moins complètes ont été proposées par différents auteurs, en particulier par P. Descouvemont dans l'école Joliot-Curie de 2000 (voir également [Des01, Des03]).

4.1 Principe : division de l'espace en deux régions

- Dans la méthode de la matrice R, l'axe des r est divisé en deux régions, séparées par un *rayon* a :
- la région *extérieure* ($r > a$), dans laquelle on suppose que seuls les potentiels centrifuge et coulombien sont non nuls, c'est-à-dire les potentiels à longue portée, "simples" car indépendants de la structure des particules qui interagissent, et dont les solutions sont bien connues (il s'agit des ondes coulombiennes, déjà rencontrées plus haut) ; on tronque donc le potentiel nucléaire au-delà de la distance a ;
 - la région *intérieure* ($r < a$), dans laquelle tous les potentiels sont tenus en compte, y compris le potentiel nucléaire, c'est-à-dire un potentiel à courte portée, compliqué car dépendant de la structure des noyaux. Dans la suite, nous ne traiterons que le cas d'un potentiel d'interaction simple, décrivant l'interaction entre les deux particules de manière simplifiée. La méthode de la matrice R est cependant généralisable aux cas où l'interaction à courte portée est plus compliquée, en particulier lorsqu'elle est basée sur une description microscopique des particules interagissant (structure interne en nucléons dans le cas de noyaux).

Le principe de la méthode de la matrice R repose sur une *résolution* complète de l'équation de Schrödinger sur la région intérieure, suivie d'un *raccord* en $r = a$ avec les solutions bien connues de la région extérieure.

Le rayon a est arbitraire mais borné inférieurement car il ne peut être inférieur à la portée du potentiel nucléaire ; autrement, l'hypothèse de troncature n'est pas justifiée. Par exemple, dans le cas du système $^{16}\text{O} + \alpha$ considéré plus haut (voir figure 2), on doit avoir $a \gtrsim 7$ fm. Lorsque l'on utilise la matrice R pour *résoudre* l'équation de Schrödinger, on a intérêt à choisir le rayon le plus petit possible compatible avec cette limite, ce afin d'alléger au maximum le calcul sur la zone intérieure. Faire varier a est alors un bon test de stabilité du calcul. Lorsque l'on utilise la matrice R pour *ajuster* des données expérimentales, on peut être amené à considérer a comme un paramètre et à l'optimiser, ce qui peut mener à des a inférieurs à la limite "physique". Nous exprimerons cependant quelques réserves sur cette approche ci-dessous.

Illustrons maintenant en détail la méthode, en utilisant à nouveau comme exemple l'onde partielle $l = 3$ pour le système $^{16}\text{O} + \alpha$. Nous montrerons d'abord comment résoudre l'équation dans la zone intérieure, puis comment définir la matrice R et comment effectuer le raccord avec la zone extérieure. Nous montrerons enfin comment la formule du déphasage résultant de ce raccord peut être utilisée comme modèle phénoménologique.

4.2 Zone intérieure

La résolution de l'équation de Schrödinger radiale (29), assortie de la condition aux limites à l'origine (32) et du caractère borné de la fonction d'onde, est un problème hermitique lorsqu'on le considère sur l'ensemble du demi-axe $r \geq 0$, mais pas lorsqu'on le considère sur la zone intérieure $0 \leq r \leq a$ seulement. L'hermiticité étant une propriété très utile en physique mathématique, en particulier parce qu'elle implique que les fonctions propres du problème constituent une base de l'espace des fonctions d'onde, on la rétablit en imposant en plus une condition aux limites sur la dérivée logarithmique de la fonction u en $r = a$, que l'on adimensionne et que l'on impose égale à une constante arbitraire B :¹⁰

$$\left. \frac{ru'_{kl}(r)}{u_{kl}(r)} \right|_{r=a} = B. \quad (76)$$

Le problème aux limites (de Sturm-Liouville) ainsi posé n'admet de solutions que pour des valeurs propres réelles et dénombrables de l'énergie

$$E_{nl} \quad (n = 1, \dots, \infty). \quad (77)$$

Les fonctions propres normées correspondantes,

$$v_{nl}(r) \quad (n = 1, \dots, \infty), \quad (78)$$

forment une base pour les fonctions u dans la zone intérieure. La condition aux limites (76) étant fonction de a et de B , il en est de même pour les éléments propres E_{nl} et v_{nl} ; nous n'écrivons cependant pas explicitement cette dépendance dans la suite, pour alléger les notations. De plus, les résultats physiques seront indépendants des valeurs de ces paramètres, sauf dans l'utilisation de la matrice R comme modèle phénoménologique.

Les énergies et les fonctions propres E_{nl} et v_{nl} fournissent de bonnes approximations des états liés et des résonances étroites du système physique considéré. À titre d'exemple, le tableau 1 montre les énergies propres les plus basses et la figure 11 montre les fonctions propres correspondantes dans le cas $^{16}\text{O} + \alpha$, pour les valeurs des paramètres $l = 3$, $a = 7$ et $B = 0$. Le potentiel effectif utilisé est celui de la figure 2. On vérifie sur la figure 11 que les fonctions propres satisfont la condition aux limites (76), puisqu'elles ont une pente nulle en $r = a$. On voit également que le nombre de

¹⁰Une approche mathématique plus formelle consiste en l'introduction de la condition aux limites dans l'équation de Schrödinger proprement dite, sous forme d'un opérateur de Bloch. L'approche équivalente suivie ici nous paraît plus simple à saisir.

n	E_{n3} (MeV)	Énergie état lié/résonance (MeV)
1	-69.7867	-69.7867
2	-41.2925	-41.2925
3	-16.9037	-16.9032
4	0.886485	0.8903808
5	7.77366	-
\vdots	\vdots	

TAB. 1 – Premières énergies propres E_{n3} de la méthode de la matrice R pour le système $^{16}\text{O} + \alpha$, dans l'onde partielle $l = 3$, pour le potentiel effectif de la figure 2. Les valeurs des paramètres de la méthode de matrice R sont $a = 7$ et $B = 0$. La dernière colonne montre les valeurs des 3 énergies liées et de l'énergie de la résonance étroite pour le même système. Les chiffres en italique soulignent la différence entre les deux colonnes d'énergies.

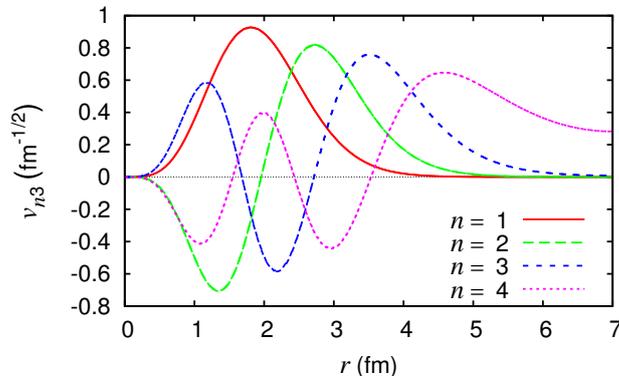


FIG. 11 – Fonctions propres de la méthode de la matrice R correspondant aux énergies propres données dans le tableau 1.

noeuds radiaux de ces fonctions augmente avec l'énergie. Le rayon a étant choisi suffisamment grand, les fonctions d'onde v_{nl} d'énergies les plus basses sont très proches des fonctions d'onde d'états liés, dont la décroissance exponentielle mène à une pente quasi nulle pour des r grands (voir la figure 4). Ceci est également confirmé par les valeurs des énergies propres E_{1l} et E_{2l} données au tableau 1, qui sont identiques aux énergies liées pour toutes les décimales données. Pour le troisième état lié, une différence apparaît à la quatrième décimale : l'énergie étant moins basse, la décroissance exponentielle est moins rapide et la pente de la fonction d'onde en $r = a$ est moins proche d'une pente nulle. Cette imprécision s'accroît encore pour l'énergie de la résonance étroite, où la différence apparaît dès la seconde décimale. On voit là les limites de la condition aux limites mathématique (76) : pour les énergies les plus hautes, une correction des valeurs données par la matrice R est nécessaire.

Pour $n \geq 5$, les fonctions v_{nl} n'ont plus de sens physique direct. Elles peuvent par contre être utilisées comme éléments d'une base sur laquelle les fonctions u_{kl} , pour une énergie arbitraire, peuvent être développées :

$$u_{kl}(r) = \sum_{n=1}^{\infty} v_{nl}(r) \langle v_{nl} | u_{kl} \rangle = \left[u'_{kl}(a) - B \frac{u_{kl}(a)}{a} \right] \sum_{n=1}^{\infty} \frac{v_{nl}(r) v_{nl}(a)}{E_{nl} - E}. \quad (79)$$

Dans cette expression, la valeur du produit scalaire $\langle v_{nl} | u_{kl} \rangle$ a été obtenue à partir de l'équation de Schrödinger radiale pour u_{kl} (respectivement v_{nl}), multipliée par v_{nl} (respectivement par u_{kl}), puis par soustraction des deux équations obtenues et intégration par partie en tenant compte des conditions aux limites. C'est en ce sens que la méthode de la matrice R constitue une méthode de discrétisation du continu, le développement (79) étant valable pour toute énergie positive.

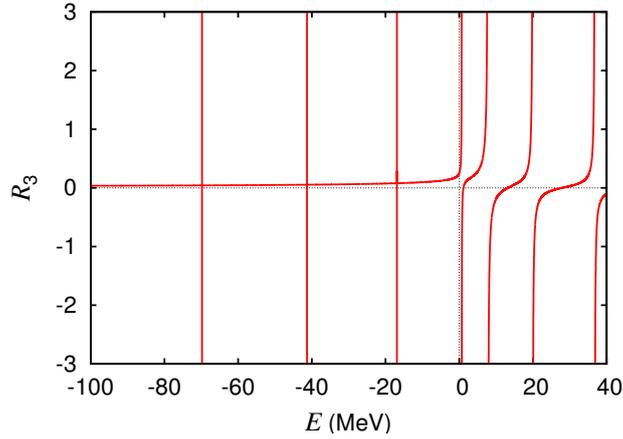


FIG. 12 – Matrice R du système $^{16}\text{O} + \alpha$ en fonction de l'énergie relative entre les noyaux, pour le potentiel effectif de la figure 2 et pour les valeurs des paramètres $l = 3$, $a = 7$, $B = 0$. Les trois premiers pôles, qui correspondent aux états liés, ont la même forme que les suivants mais ce comportement n'est pas visible à l'échelle choisie tant leurs largeurs réduites formelles sont petites.

Ce développement permet de calculer la dérivée logarithmique de u_{kl} à la frontière, pour une énergie quelconque ; elle vaut¹¹

$$\frac{au'_{kl}(a)}{u_{kl}(a)} = B + \frac{1}{R_l(E)}, \quad (80)$$

expression qui fait apparaître la *matrice* R

$$R_l(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{v_{nl}^2(a)}{E_{nl} - E} \equiv \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{\gamma}_{nl}^2}{E_{nl} - E}. \quad (81)$$

Comme pour la matrice de collision, le terme “matrice” provient de la généralisation de ce concept à plusieurs voies (voir paragraphe 5). Il s'agit dans le cas simple considéré ici d'une fonction réelle croissante en fonction de l'énergie. À titre d'exemple, elle est représentée pour le cas traité précédemment à la figure 12. On voit que cette fonction présente une infinité de singularités, aux énergies E_{nl} qui sont donc les *pôles* de la matrice R . Les résidus de ces pôles, les $\tilde{\gamma}_{nl}^2$, sont appelés *largeurs réduites formelles* pour des raisons qui apparaîtront plus loin ; ils sont donnés par les valeurs des fonctions v_{nl} en $r = a$.

Deux remarques s'imposent à ce stade. La condition aux limites (76) dépendant de a et de B , il en est de même pour la matrice R . En revanche, on peut montrer [BGS02] que la dérivée logarithmique (80), si elle dépend évidemment du choix de a , n'en est pas moins indépendante de B .

4.3 Zone extérieure

Ayant résolu l'équation dans la zone intérieure et en ayant déduit la dérivée logarithmique de la fonction u à la frontière, nous pouvons maintenant exprimer la continuité de cette fonction et de sa dérivée première avec la solution de la zone extérieure. C'est de cette continuité que va découler l'expression de la matrice de collision partielle. En effet, dans la zone extérieure, le potentiel nucléaire

¹¹Il peut sembler surprenant que cette méthode permette de calculer une dérivée logarithmique quelconque, alors que toutes les fonctions de la base ont la même dérivée logarithmique donnée par l'équation (76). Ce paradoxe s'explique par le fait que les sommes qui apparaissent dans ces développements contiennent une infinité de termes ; en d'autres termes, la série (79) converge et est dérivable sur l'intervalle $[0, a]$. En pratique, lorsqu'on résout numériquement l'équation de Schrödinger radiale sur la zone intérieure, on utilise un nombre fini de fonctions de base (par exemple des polynômes) ; il est alors plus avantageux de prendre des fonctions de base dont la dérivée logarithmique est quelconque, le raccord en $r = a$ se faisant plus facilement [BHSV98].

étant nul, la solution de l'équation s'écrit

$$u_{kl}(r) \propto I_l(kr) - O_l(kr)U_l(k) \quad (r \geq a), \quad (82)$$

où les I_l et O_l sont les fonctions coulombiennes entrante et sortante (“Ingoing” et “Outgoing”), dont le comportement asymptotique est donnée par l'équation (47), et U_l est la matrice de collision partielle, encore inconnue à ce stade. Ces fonctions coulombiennes sont les solutions exactes de l'équation de Schrödinger radiale pour un potentiel centrifuge + coulombien. Elles sont complexes et mutuellement conjuguées l'une de l'autre et on les définit souvent à partir de leurs parties réelle et imaginaire, qui ne sont autres que les fonctions coulombiennes F_l et G_l introduites précédemment. On a

$$I_l^*(kr) = O_l(kr) = G_l(kr) + iF_l(kr), \quad (83)$$

où G_l (resp. F_l) se comporte asymptotiquement comme un cosinus (resp. sinus) et est singulière (resp. régulière) en $r = 0$. Un cas particulier important est

$$O_l = e^{ikr} \quad (l = \eta = 0). \quad (84)$$

En exprimant la continuité de la solution (82) avec la solution de la zone intérieure en $r = a$, ce qui se fait en égalant leurs dérivées logarithmiques, on obtient les expressions suivantes pour la matrice de collision et le déphasage en fonction de la matrice R

$$U_l(k) = \frac{I_l(ka)}{O_l(ka)} \times \frac{1 - [S_l(ka) - B - iP_l(ka)] R_l(E)}{1 - [S_l(ka) - B + iP_l(ka)] R_l(E)}, \quad (85)$$

$$\delta_l(k) = -\arctan \frac{F_l(ka)}{G_l(ka)} + \arctan \frac{P_l(ka)R_l(E)}{1 - [S_l(ka) - B]R_l(E)} \quad (86)$$

$$\equiv \delta_{l,\text{HS}}(k) + \delta_{l,\text{R}}(k), \quad (87)$$

où S_l et P_l sont les facteurs de *déplacement* (“Shift”) et de *pénétration* (déjà rencontré à l'équation (53)), définis en termes des fonctions coulombiennes par

$$\frac{O'(ka)a}{O(ka)} = S_l(ka) + iP_l(ka). \quad (88)$$

La matrice de collision est donc décomposée en un produit de deux facteurs, qui correspond à une somme de deux termes pour le déphasage :

- un terme de sphère dure (“Hard Sphere”), égal à la matrice de collision dans le cas d'un mur de potentiel infini en $r = a$; en effet, l'équation (82) implique dans ce cas que

$$u_{kl}(a) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad U_l(k) = \frac{I_l(ka)}{O_l(ka)}; \quad (89)$$

- un terme “matrice R” ou “résonnant”, dans lequel apparait la matrice R proprement dite.

Le terme de sphère dure varie lentement avec l'énergie, alors que le terme résonnant peut varier brutalement avec l'énergie, lorsque l'on traverse un pôle de la matrice R. Ceci confirme l'idée, déjà évoquée par le tableau 1, que les pôles de la matrice R peuvent correspondre à des résonances physiques. Précisons cette idée en étudiant plus en détail l'*approximation à un pôle*

$$R_l(E) \approx \frac{\tilde{\gamma}_1^2}{E_1 - E}. \quad (90)$$

Une telle approximation est valable lorsque l'énergie E n'est pas trop éloignée de l'énergie du pôle E_1 , et lorsque les autres pôles sont suffisamment loin et/ou ont des largeurs réduites suffisamment petites pour avoir un effet négligeable. La matrice de collision résonnante a alors la forme d'une résonance de Breit-Wigner

$$U_{l,\text{R}}(E) \approx \frac{1 - [S_l(ka) - B - iP_l(ka)] \frac{\tilde{\gamma}_1^2}{E_1 - E}}{1 - [S_l(ka) - B + iP_l(ka)] \frac{\tilde{\gamma}_1^2}{E_1 - E}} \underset{E \approx E_r}{\approx} \frac{E - E_r - i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2}. \quad (91)$$

Les paramètres physiques de la résonance s'obtiennent en multipliant les numérateur et dénominateur de la première expression par $E - E_1$ et en identifiant ensuite les deux expressions. L'identification des parties réelles du dénominateur (ou du numérateur) fournit une expression implicite pour l'énergie de la résonance :

$$E_r \approx E_1 - \tilde{\gamma}_1^2 [S_l(k_r a) - B]. \quad (92)$$

Cette expression est implicite car le facteur de déplacement est lui-même calculé à l'énergie de la résonance. En supposant une dépendance linéaire en l'énergie du facteur de déplacement au voisinage de la résonance,¹²

$$S_l(k a) \underset{E \approx E_r}{\approx} S_l(k_r a) + \frac{dS_l(k_r a)}{dE} (E - E_r), \quad (93)$$

on peut déduire de l'expression (92) une expression explicite de E_r en fonction de E_1 . Avec l'hypothèse (93), on peut également, par un artifice de calcul, faire apparaître $E - E_r$ comme partie réelle du dénominateur de la matrice de collision ; l'identification des parties imaginaires de ce dénominateur pour les deux expressions (91) fournit alors l'expression de la largeur

$$\Gamma \approx 2 \frac{\tilde{\gamma}_1^2}{1 + \tilde{\gamma}_1^2 \frac{dS_l(k_r a)}{dE}} P_l(k_r a) \equiv 2\gamma^2 P_l(k_r a). \quad (94)$$

Les deux expressions (92) et (94) illustrent la différence entre les paramètres formels E_1 , $\tilde{\gamma}_1^2$, apparaissant dans l'expression de la matrice R, et les paramètres physiques ou observés, E_r , γ^2 , de la résonance. L'expression (92) montre que S “déplace” l'énergie de la résonance (d'où le terme “facteur de déplacement”), sauf lorsque $S_l(k_r a) = B$. L'expression (94) montre que la largeur de la résonance peut s'interpréter comme la produit de la probabilité de présence en $r = a$ (donnée par la largeur réduite au carré, γ^2) par la probabilité de transmission entre a et l'infini (facteur de pénétration). Dans le cas plus général où la contribution d'un seul pôle ne l'emporte pas sur les autres, des méthodes numériques plus sophistiquées sont nécessaires pour passer de paramètres physiques à formels, une possibilité étant de calculer directement les pôles de la matrice de collision dans le plan complexe à partir de l'expression (85) (pour une autre approche, voir la référence [AD00]). De manière générale, il faut prendre garde à cette distinction et ne baser des discussions physiques que sur des paramètres physiques : les valeurs des paramètres formels sont, elles, dépendantes des valeurs choisies pour B et a .

Remarquons pour terminer que les deux termes apparaissant dans le déphasage matrice R (87) satisfont le développement en portée effective (54). Il s'agit d'un avantage majeur de la méthode de la matrice R : elle fournit toujours des déphasages acceptables physiquement à basse énergie.

4.4 Modèle phénoménologique

Le fait que le déphasage résonnant puisse être bien représenté par le terme matrice R suggère, par examen de la décomposition (56) du déphasage, de considérer le déphasage de sphère dure comme un déphasage de fond et d'utiliser le déphasage matrice R pour décrire les résonances. On aborde ainsi l'utilisation de la matrice R comme modèle phénoménologique, la somme dans la matrice R pouvant a priori être limitée aux résonances physiques pour ajuster correctement des données expérimentales, ce qui limite fortement le nombre de paramètres. Cette approche, fréquemment utilisée dans la littérature, présente également l'intérêt que, comme nous venons de le remarquer, le développement en portée effective est automatiquement satisfait par un déphasage calculé avec la matrice R, par opposition par exemple à un déphasage calculé avec une formule de Breit-Wigner (56) utilisée pour toute énergie. Le sens physique d'une utilisation phénoménologique de la matrice R doit cependant parfois être questionné. À titre d'exemple, considérons à nouveau l'onde partielle $l = 3$ du système $^{16}\text{O} + \alpha$. Ayant calculé la matrice R par résolution sur la zone intérieure (voir figure 12), on peut calculer les différents déphasage de ce système en fonction de l'énergie (voir figure 13). Sur cette

¹²Le facteur de déplacement, contrairement au facteur de pénétration qui varie rapidement avec l'énergie (voir l'équation (53)), varie lentement en fonction de l'énergie.

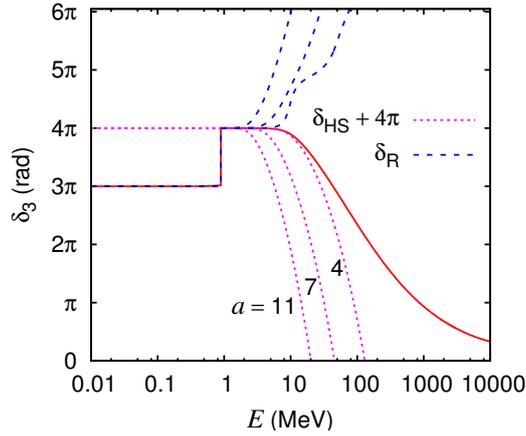


FIG. 13 – Déphasages additionnels de sphère dure (traits pointillés), matrice R (traits en tirets) et totaux (traits pleins) pour l’onde partielle $l = 3$ du système $^{16}\text{O} + \alpha$. Les paramètres choisis pour la méthode de la matrice R sont $B = 0$, $n = 90$ et $a = 11$ (courbes de gauche), 7 (courbes du milieu) et 4 (courbes de droite). Le déphasage total n’est pas représenté pour $a = 4$, pour ne pas alourdir la figure. Pour $a = 7$ et $a = 11$, les déphasages totaux sont indiscernables, de même que les courbes en tirets et pleines à basse énergie.

figure, le déphasage exact (courbe pleine¹³, identique à la courbe de la figure 6) est comparé à une décomposition en $\delta_{3,\text{HS}}$ (courbes en pointillés) et $\delta_{3,\text{R}}$ (courbes en tirets), pour différentes valeurs du rayon a . On voit que les déphasages de sphère dure présentent un comportement monotone en fonction de l’énergie, alors que le terme résonnant affiche la résonance étroite, ce pour les 3 valeurs de a . Pour $a = 11$ et $a = 7$ fm, la somme de $\delta_{3,\text{HS}}$ et $\delta_{3,\text{R}}$, qui donne le déphasage total (87), est indiscernable du déphasage exact, et ce pour toute la gamme (très large) des énergies. Ceci démontre l’efficacité de la matrice R comme méthode de résolution de l’équation de Schrödinger radiale en vue de calculer le déphasage, et la liberté de choix du rayon a . En comparaison, pour $a = 4$ fm, le déphasage total (non représenté à la figure 13 pour plus de clarté) s’écarterait visiblement du résultat exact à cause d’une résonance non physique apparaissant dans le terme matrice R. Ce résultat inexact est dû au fait qu’en prenant $a = 4$ fm, on ampute le potentiel effectif de manière significative (voir figure 2).

En revanche, pour $a = 4$ fm, le terme de sphère dure seul est plus proche du déphasage exact dans la zone où celui-ci ne présente plus de variation brutale avec l’énergie. Si l’on souhaite ajuster le déphasage exact avec un minimum de paramètres, par exemple entre 0 et 30 MeV, il serait donc relativement efficace d’utiliser un terme de sphère dure pur $a = 4$ fm, combiné avec un terme de matrice R ne contenant qu’un seul pôle pour décrire la résonance étroite vers 1 MeV. Le rayon de la matrice R devient alors un paramètre phénoménologique, auquel on ne peut attribuer le sens physique d’un rayon au-delà duquel l’interaction nucléaire est négligeable. On entre ici dans le domaine de l’utilisation de la matrice R comme modèle phénoménologique, dans lequel la liberté du choix de a est restreinte. Pour la même zone d’énergie, $[0, 30]$ MeV, un modèle phénoménologique plus élaboré pourrait utiliser un a plus grand, compensé par une résonance très large à une énergie supérieure à 30 MeV. On aurait alors 3 paramètres pour décrire le déphasage de fond, ce qui en permettrait sans doute un ajustement fin. Il importe cependant de garder à l’esprit dans ce genre d’approche que ni le rayon a ni les paramètres de la résonance large n’ont de sens physique profond, ce qui peut mener à certains problèmes [Spa04].

¹³La valeur élevée de n est nécessaire pour calculer le déphasage jusqu’à l’énergie très élevée de 10 GeV, pour laquelle la fonction d’onde a de très nombreuses oscillations.

5 Généralisation à plusieurs voies

Jusqu'ici, nous n'avons considéré que les collisions élastiques de deux particules sans spin. Tout en restant dans le cadre de collisions à *deux* particules, plusieurs généralisations sont possibles. Le but du présent paragraphe est d'évoquer brièvement ces généralisations, afin de montrer que plusieurs des notions et modèles introduits ci-dessus restent valables dans ces cas, moyennant une généralisation vectorielle des fonctions d'onde et matricielle des potentiels, matrice de collision, matrice R, etc. Pour plus de détails, on consultera une fois encore les références [CTDL73, Tay72, New82, LT58].

Commençons par les particules de spin non nul. En physique quantique, l'état d'une particule de spin I_1 est représenté par un spineur à $2I_1 + 1$ composantes, chaque composante correspondant à une valeur de la projection du moment cinétique sur un axe arbitraire. Pour un système de deux particules de spins I_1 et I_2 , l'état du mouvement relatif des deux particules est donc représenté par un spineur à $(2I_1 + 1)(2I_2 + 1)$ composantes. La notion de spineur généralise la notion de fonction d'onde : un spineur est un vecteur dont chaque composante est une fonction. En théorie des collisions, on souhaite pouvoir décrire tant des situations dans lesquelles l'état de spin est identique avant et après la collision (on peut alors se limiter à une seule composante du spineur et on se ramène formellement au cas considéré jusqu'ici) que des situations dans lesquelles l'état de spin est modifié au cours de la collision. Dans ce dernier cas, on doit travailler avec des spineurs complets, chaque état de spin, c'est-à-dire chaque composante du spineur, définissant alors une *voie* possible pour le système de deux particules. On dira que ces voies sont *couplées* lorsqu'il est possible de passer de l'une à l'autre.

Une autre situation physique importante qui généralise la notion de voie est celle des collisions inélastiques, du type $a + b \rightarrow a + b^*$, au cours desquelles l'état de la particule b est modifié (par exemple par une excitation de ses degrés de liberté internes). La fonction d'onde relative comprendra alors deux composantes : une pour chaque voie, la voie élastique $a + b$ et la voie inélastique $a + b^*$. Cette situation mène à l'importante notion d'*énergie de seuil* $\Delta = (m_{b^*} - m_b)c^2$. Les collisions inélastiques ne sont elles-mêmes qu'un cas particulier des *réactions*, du type $a + b \rightarrow c + d$, qui nécessitent également la définition de différentes voies et énergies de seuil, mais également un ensemble de *coordonnées relatives* plus général : $\mathbf{r}_{ab} \neq \mathbf{r}_{cd}$.

Formellement, on peut unifier ces trois situations dans un formalisme à plusieurs voies : chaque voie α est caractérisée par l'état interne (composition, énergie de masse, (état de) spin, ...) des particules infiniment séparées l'une de l'autre. Il lui correspond une masse réduite μ_α , une coordonnée relative \mathbf{r}_α et une composante du vecteur représentant l'état du système :

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ \varphi_\alpha(\mathbf{r}_\alpha) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (95)$$

Pour décrire des collisions, on fait également correspondre à chaque voie une énergie relative E_α et un nombre d'onde relatif \mathbf{k}_α . Au cours d'une collision, le système peut passer d'une voie à l'autre :

$$\underbrace{a + b}_{\text{voie } \alpha} \rightarrow \underbrace{c + d}_{\text{voie } \beta}, \quad (96)$$

pour autant que l'énergie E_α soit supérieure à l'énergie de seuil $\Delta = (m_c + m_d - m_a - m_b)c^2$. On dit alors que la voie est ouverte (elle est fermée lorsque l'énergie est trop basse).

Nous allons maintenant définir les principales notions utiles en théorie des collisions pour décrire de tels cas, montrer qu'elles mènent à une généralisation *matricielle* du formalisme établi précédemment, puis les illustrer par un calcul matrice R.

5.1 Sections efficaces différentielles

Commençons par généraliser la notion d'état stationnaire de diffusion. Il s'agit toujours de solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire mais il en existe un pour chaque voie d'entrée β et

ils sont définis en fonction de leur comportement asymptotique dans chaque voie de sortie γ par une relation qui généralise l'équation (59). Explicitement, par exemple dans le cas de deux voies β et γ , l'état stationnaire de diffusion pour la voie d'entrée β a le comportement asymptotique

$$\begin{pmatrix} \varphi_\beta(\mathbf{r}_\beta) \\ \varphi_\gamma(\mathbf{r}_\gamma) \end{pmatrix}_{k_\beta \mathbf{1}_{z_\beta}} \underset{r_\beta, r_\gamma \rightarrow \infty}{\sim} \begin{pmatrix} e^{i[k_\beta z_\beta + \eta_\beta \ln k_\beta (r_\beta - z_\beta)]} + f_{\beta\beta}(k_\beta, \theta_\beta) \frac{e^{i(k_\beta r_\beta - \eta_\beta \ln 2k_\beta r_\beta)}}{r_\beta} \\ \left(\frac{\mu_\gamma}{\mu_\beta}\right)^{1/2} f_{\gamma\beta}(k_\beta, \theta_\gamma) \frac{e^{i(k_\gamma r_\gamma - \eta_\gamma \ln 2k_\gamma r_\gamma)}}{r_\gamma} \end{pmatrix}. \quad (97)$$

La composante β comporte une onde plane incidente et une onde sphérique sortante (déformées en présence d'un terme coulombien), alors que la composante γ ne comprend qu'une onde sphérique sortante. De manière symétrique, on définit l'état stationnaire de diffusion dont la voie d'entrée est la voie γ . Les comportements asymptotiques de ces deux états stationnaires définissent les quatre *amplitudes de diffusion* $f_{\gamma\beta}(k_\beta, \theta_\gamma)$, dont on déduit les *sections efficaces différentielles*

$$\frac{d\sigma_{\gamma\beta}}{d\Omega_\gamma}(k_\beta, \theta_\gamma) = \frac{k_\gamma}{k_\beta} |f_{\gamma\beta}(k_\beta, \theta_\gamma)|^2, \quad (98)$$

relation qui généralise (60).

Le calcul de ces amplitudes de diffusion peut se faire par une méthode qui généralise la méthode des déphasages. On décompose pour cela les états stationnaires de diffusion en ondes partielles, états propres cette fois du carré du module du moment cinétique total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2$ et de la parité π . Les amplitudes de diffusion s'expriment alors sous forme de sommes compliquées faisant intervenir des *matrices de collision partielles* $\mathbf{U}^{J\pi}(E)$. Le calcul des matrices de collision partielles se fait par résolution d'un système d'équations de Schrödinger radiales couplées, pour une valeur donnée des bons nombres quantiques E , J et π . Ainsi, on a par exemple à deux voies

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2\mu_\beta} \frac{d^2}{dr_\beta^2} + V_{\beta\beta}^{l_\beta}(r_\beta) & V_{\beta\gamma}(r_\gamma) \\ V_{\gamma\beta}(r_\beta) & -\frac{\hbar^2}{2\mu_\gamma} \frac{d^2}{dr_\gamma^2} + V_{\gamma\gamma}^{l_\gamma}(r_\gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\beta\beta}^{EJ\pi}(r_\beta) \\ u_{\gamma\beta}^{EJ\pi}(r_\gamma) \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k_\beta^2}{2\mu_\beta} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2 k_\gamma^2}{2\mu_\gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\beta\beta}^{EJ\pi}(r_\beta) \\ u_{\gamma\beta}^{EJ\pi}(r_\gamma) \end{pmatrix}, \quad (99)$$

qui généralise matriciellement l'équation de Schrödinger radiale (29). Les bons nombres quantiques sont cette fois indiqués en indice supérieur (dans le cas à une voie, la valeur de l fixait également la parité car $\pi = (-1)^l$ pour les harmoniques sphériques (25) ; π n'était donc pas indiquée explicitement), alors que les indices inférieurs désignent les voies : le premier indice indique la composante de la solution, alors que le second indique sa voie d'entrée. On définit la matrice de collision $\mathbf{U}^{J\pi}(E)$ à partir du comportement asymptotique des solutions de ce système d'équations pour les différentes voies d'entrée possibles :

$$\begin{pmatrix} u_{\beta\beta}^{EJ\pi}(r_\beta) & u_{\beta\gamma}^{EJ\pi}(r_\beta) \\ u_{\gamma\beta}^{EJ\pi}(r_\gamma) & u_{\gamma\gamma}^{EJ\pi}(r_\gamma) \end{pmatrix} \underset{r \rightarrow \infty}{\propto} \begin{pmatrix} e^{-i(k_\beta r_\beta - \eta_\beta \ln 2k_\beta r_\beta + \sigma_{l_\beta}(k_\beta) - l_\beta \frac{\pi}{2})} & 0 \\ 0 & e^{-i(k_\gamma r_\gamma - \eta_\gamma \ln 2k_\gamma r_\gamma + \sigma_{l_\gamma}(k_\gamma) - l_\gamma \frac{\pi}{2})} \end{pmatrix} \\ - \begin{pmatrix} e^{i(k_\beta r_\beta - \eta_\beta \ln 2k_\beta r_\beta + \sigma_{l_\beta}(k_\beta) - l_\beta \frac{\pi}{2})} & 0 \\ 0 & e^{i(k_\gamma r_\gamma - \eta_\gamma \ln 2k_\gamma r_\gamma + \sigma_{l_\gamma}(k_\gamma) - l_\gamma \frac{\pi}{2})} \end{pmatrix} \\ \times \begin{pmatrix} U_{\beta\beta}^{J\pi}(E) & \sqrt{\frac{k_\gamma}{k_\beta}} U_{\beta\gamma}^{J\pi}(E) \\ \sqrt{\frac{k_\beta}{k_\gamma}} U_{\gamma\beta}^{J\pi}(E) & U_{\gamma\gamma}^{J\pi}(E) \end{pmatrix}, \quad (100)$$

ce qui généralise le comportement asymptotique (47).

	$a = 4$ fm	$a = 5$ fm
E_1 (keV)	127	158
$\tilde{\gamma}_d^2$ (keV)	170	111
$\tilde{\gamma}_p^2$ (keV)	45	31

TAB. 2 – (adapté de la référence [Des03]) Paramètres formels d'un modèle matrice R phénoménologique à deux voies et un pôle pour la réaction ${}^3\text{He}(d,p){}^4\text{He}$.

5.2 Méthode de la matrice R

Comme dans le cas à une voie, la matrice de réaction permet tant de résoudre le système des équations de Schrödinger radiale couplées, que de paramétriser les matrices de collision partielles, pour des valeurs de J et π données, en vue d'ajuster des données expérimentales. La matrice R est définie par les énergies (réelles) de ses pôles, E_n , ainsi que par les largeurs réduites formelles dans chacune des voies α , $\tilde{\gamma}_{n,\alpha}^2$, par une formule similaire à (81),

$$R_{\alpha\beta}(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\tilde{\gamma}_{n,\alpha}\tilde{\gamma}_{n,\beta}}{E_n - E}. \quad (101)$$

La matrice de collision s'écrit alors

$$\mathbf{U}(E) = \mathbf{Z}^{-1}(E)\mathbf{Z}^*(E), \quad (102)$$

avec

$$Z_{\alpha\beta}(E) = O_{\alpha}(k_{\alpha}a)\delta_{\alpha\beta} - a\sqrt{\frac{k_{\alpha}}{k_{\beta}}}R_{\alpha\beta}(E)O'_{\beta}(k_{\beta}a), \quad (103)$$

où l'on s'est limité au cas de conditions aux limites nulles pour les dérivées logarithmiques des fonctions radiales au rayon a (voir l'équation (76)).

À titre d'exemple, montrons comment paramétriser la section efficace totale de la réaction de transfert ${}^3\text{He}(d,p){}^4\text{He}$ [Des03]. Il s'agit d'une réaction d'intérêt astrophysique, dont la section efficace devient extrêmement petite à très basse énergie à cause de la répulsion coulombienne entre les noyaux. Il est donc plus pratique de la caractériser par le *facteur astrophysique*

$$S(E) = \sigma(E)E \exp(2\pi\eta), \quad (104)$$

dont la variation en fonction de l'énergie est relativement faible. La paramétrisation la plus simple de ce facteur astrophysique requiert seulement un modèle à deux voies : la voie d'entrée (deuton) avec $l_d = 0$ et la voie de sortie (proton) avec $l_p = 2$. Il y a une résonance $3/2^+$, d'énergie $E_r = 210$ keV et de largeurs partielles $\Gamma_d = 26$ keV et $\Gamma_p = 190$ keV. Sa largeur totale vaut donc $\Gamma = 216$ keV. Il suffit donc d'une matrice R à un pôle pour ajuster le facteur astrophysique. Deux exemples de paramétrisation sont donnés au tableau 2, pour des valeurs du rayon $a = 4$ et 5 fm. On observe que les valeurs des paramètres formels diffèrent des valeurs des paramètres physique de la résonance, et qu'elles dépendent de plus fortement de la valeur du rayon. Les facteurs astrophysiques correspondants sont représentés à la figure 14 ; ils sont proches l'un de l'autre et proches des valeurs expérimentales, même si, sous la résonance, on observe une certaine sensibilité du facteur astrophysique au rayon a de la matrice R.

6 Conclusion

En conclusion, nous avons introduit les fondements de la théorie quantique des collisions dans le cas de systèmes à deux corps entrant en collision à faible énergie relative. L'outil principal présenté est la méthode de la décomposition en ondes partielles, ou méthode des déphasages, dont l'utilisation

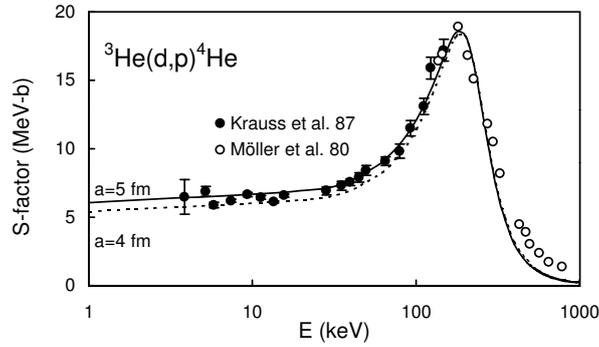


FIG. 14 – (reproduite de la référence [Des03]) Facteur astrophysique correspondant à la section efficace totale de la réaction ${}^3\text{He}(d,p){}^4\text{He}$. Les données expérimentales proviennent des références [KBT⁺87, MB80] et les courbes théoriques d’un modèle matrice R phénoménologique à deux voies et un pôle, pour deux valeurs du rayon.

se base sur la résolution d’une équation (ou d’un système d’équations) de Schrödinger radiale(s) à une dimension. Les déphasages ou matrices de collision ainsi obtenus permettent de calculer les amplitudes de diffusion sous forme de sommes. Aux basses énergies, le nombre de termes dans ces sommes est relativement restreint, ce qui est le principal intérêt de la méthode. Le module de ces amplitudes élevé au carré donne alors les sections efficaces, qui sont comparables aux données expérimentales. Il y a donc un long cheminement à suivre pour aller des calculs théoriques aux résultats expérimentaux. Ce cheminement est néanmoins essentiel pour décrire correctement le phénomène de résonance, dont nous avons vu qu’il s’agit d’un phénomène ondulatoire, analogue au phénomène le plus caractéristique de la physique quantique : la quantification des spectres liés.

Nous avons également présenté les bases de la méthode de la matrice R, et défendu la thèse qu’il s’agit d’une méthode très efficace, tant théoriquement qu’expérimentalement, mais que quelques précautions sont nécessaires quant à son utilisation comme modèle phénoménologique.

Remerciements

Je remercie Daniel Baye pour les nombreuses discussions sur les collisions quantiques que nous avons eues depuis des années et pour ses propres notes de cours, qui sont pour moi une référence et une source d’inspiration permanentes. Merci également à Pierre Descouvemont pour ses transparents sur la théorie des collisions, pour les discussions sur la matrice R, et pour avoir proposé mon nom au comité d’organisation de cette école. Merci au dit comité d’avoir suivi cette proposition ! Enfin, merci d’avance au lecteur pour tout commentaire constructif sur ces notes de cours, qui ne sont encore qu’un “premier jet”.

Références

- [AD00] C. Angulo and P. Descouvemont. R-matrix analysis of interference effects in ${}^{12}\text{C}(\alpha, \alpha){}^{12}\text{C}$ and ${}^{12}\text{C}(\alpha, \gamma){}^{16}\text{O}$. *Phys. Rev. C*, 61:064611, 2000.
- [AS65] M. Abramowitz and I. A. Stegun, editors. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, 1965.
- [BGS02] D. Baye, J. Goldbeter, and J.-M. Sparenberg. Equivalence of the Siegert-pseudostate and Lagrange-mesh R-matrix methods. *Phys. Rev. A*, 65:052710, 2002.
- [BHSV98] D. Baye, M. Hesse, J.-M. Sparenberg, and M. Vincke. Analysis of the R-matrix method on Lagrange meshes. *J. Phys. B*, 31:3439–3454, 1998.

- [CKK01] K. Chadan, R. Kobayashi, and T. Kobayashi. The absolute definition of the phase-shift in potential scattering. *J. Math. Phys.*, 42:4031–4049, 2001.
- [CTDL73] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Mécanique Quantique, I et II*. Hermann, Paris, 1973.
- [Des01] P. Descouvemont. Theoretical models for nuclear astrophysics. *Ann. Phys. (Paris)*, 26:1–90, 2001.
- [Des03] P. Descouvemont. *Theoretical Models for Nuclear Astrophysics*. Nova, New York, 2003.
- [KB07] R. Kamouni and D. Baye. Scattering length and effective range for collisions between light ions within a microscopic model. *Nucl. Phys. A*, 791:68–83, 2007.
- [KBT⁺87] A. Krauss, H. W. Becker, H. P. Trautvetter, C. Rolfs, and K. Brand. Low-energy fusion cross sections of D + D and D + ³He reactions. *Nucl. Phys. A*, 465:150–172, 1987.
- [KKR72] C. Kittel, W. D. Knight, and M. A. Ruderman. *Mécanique*, volume 1 de *Berkeley: cours de Physique*. Armand Colin, Paris, 4ème édition, 1972.
- [LT58] A. M. Lane and R. G. Thomas. R-matrix theory of nuclear reactions. *Rev. Mod. Phys.*, 30:257–353, 1958.
- [MAB⁺83] F. Michel, J. Albinski, P. Belery, Th. Delbar, G. Grégoire, B. Tasiaux, and G. Reidemeister. Optical model description of α +¹⁶O elastic scattering and alpha-cluster structure in ²⁰Ne. *Phys. Rev. C*, 28:1904–1917, 1983.
- [MB80] W. Möller and F. Besenbacher. A note on the ³He + D nuclear-reaction cross section. *Nucl. Instr. Methods*, 168:111, 1980.
- [New82] R. G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles*. Springer, New York, second edition, 1982.
- [Rut11] E. Rutherford. The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom. *Phil. Mag.*, 21:669, 1911.
- [Spa04] J.-M. Sparenberg. Clarification of the relationship between bound and scattering states in quantum mechanics: Application to ¹²C + α . *Phys. Rev. C*, 69:034601:1–6, 2004.
- [Tay72] J. R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory on Nonrelativistic Collisions*. Wiley, New York, 1972.