4190M

UNIVERSITE DE LIEGE
Faculté des Sciences
Section des Sciences Mathématiques

Etude de la borne supérieure de la longueur de collision

B. van den Peereboom

Mémoire de Licence

Année Académique 1962 - 1963

RAPPORT SUR LA DISSERTATION DE Melle VAN de PEEREBOOM

"Etude de la borne supérieure de la longueur de collision"

Le concept de longueur de collision joue un rôle important dans l'étude des problèmes quantiques de diffusion.
J'ai proposé à Melle Van de Peereboom d'étudier le problème de la détermination d'une borne supérieure de cette grandeur à l'aide d'un certain nombre de travaux publiés récemment par Spruch et Rosenberg.
Melle Van de Peereboom a travaillé avec beaucoup de conscience et a fait preuve d'une persévérance inlassable.

Elle a dû fournir un travail important pour se mettre d'abord au courant des techniques variationnelles utilisées dans ces problèmes (travaux de Hulthén, Kohn, Schwinger).

Elle a fait beaucoup de calculs, ayant acquis le sentiment qu'elle pouvait apporter au problème une contribution originale. Cet espoir ne s'est pas réalisé. Néanmoins, la connaissance approfondie qu'elle a acquise de ces problèmes, l'a mise en mesure de rédiger un fort bon exposé qui est loin d'être la quasi juxtaposition des travaux étudiés.

J'estime qu'il s'agit d'une fort bonne dissertation de licence.

J. SERPE.

Je tiens à exprimer tous mes remerciements à Monsieur le Professeur J.Serpe qui a aimablement accepté de diriger mon mémoire de licence.

Je tiens également à remercier Monsieur J.Beckers, assistant, pour ses conseils, et son aide constante durant cette année.

B. van den Peereboom

INTRODUCTION.

Nous n'aborderons dans ce travail que les problèmes de collision les plus simples, à savoir la diffusion mutuelle de deux particules élémentaires(nous entendons par particules élémentaires, des particules non susceptibles de se scinder en plusieurs parties), ce problème se ramenant à la diffusion dans un potentiel central, après séparation du mouvement relatif et du mouvement du centre de masse; nous verrons aussi brièvement la diffusion d'une particule par un système composé, ainsi que le cas d'existence d'états liés.

Cette étude a pour objet le paramètre appelé "longueur de collision", lequel caractérise le comportement asymptotique de la fonction d'onde lorsque l'énergie de diffusion est nulle; plus précisément, il s'agit d'une détermination variationnelle de la borne supérieure de la longueur de collision.

Mais avant d'aborder le calcul effectif de la borne supérieure de la longueur de collision, nous situerons ce paramètre dans le cadre général de la diffusion, c'est-à-dire que nous rappellerons les relations qui relient entre eux les différents paramètres du problème de la diffusion.

Les méthodes variationnelles jouent dans cette étude un rôle assez important. En effet, c'est d'elles que dépend surtout la précisision obtenue pour la borne supérieure de la longueur de collision; elles permettent de calculer les paramètres dont la fonction d'onde d'essai dépend. C'est pourquoi, avant d'aborder le problème essentiel, nous développerons quatre méthodes variationnelles susceptibles de fournir une expression stationnaire pour la longueur de collision.

Il ne sera question ici que de borne supérieure de la longueur de collision, notons cependant qu'il est possible dans certaines conditions d'obtenir une borne inférieure. En effet Kato *) a étudié le problème de la borne inférieure des constantes de phase, ces dernières apparaissent dans le comportement asymptotique des fonctions d'onde, lorsque l'énergie de diffusion est différente de zéro; connaissant dès

* T.Kato, Prog. Théor. Phys. 6,295, (1951)
Prog. Théor. Phys. 6,394, (1951).

lors la relation (voir chapitre I) entre la constante de phase et la longueur de collision, il est possible d'étendre les résultats obtenus par Kato au cas où l'énergie de diffusion est nulle.
Bien que nous ne parlerons pas ici de l'étude de Kato, nous prendrons comme point de départ dans la recherche de la borne supérieure, une égalité dont lui-même se sert dans son travail; nous l'écrirons évidemment pour une énergie de diffusion nulle.

CHAPITRE I

INTRODUCTION DE LA LONGUEUR DE COLLISION (1)

Les grandeurs les plus importantes du problème général de la diffusion apparaissent explicitement dans le développement en série de puissances de k de l'expression $k\cot g\,\eta$, nous verrons dans la suite de l'exposé que ce développement est possible, η étant fonction de k . Considérons la relation:

$$k \cot g\, \eta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_o k^2 - P k^4 r_o^3 + \ldots \qquad (1,1)$$

où k est le nombre d'onde

η la constante de phase d'une onde S

a la longueur de collision (au sens de Fermi).

r_o la portée effective des forces nucléaires.

P le paramètre dépendant de la forme.

§ 1. HYPOTHESES GENERALES

Afin de définir ces différentes grandeurs, et de donner la valeur de la longueur de collision, reprenons l'étude générale de la diffusion.

Nous faisons les hypothèses suivantes:

1. nous ne considérons que le cas de la diffusion élastique, c'est-à-dire que nous ne tenons pas compte de la structure interne des particules.

2. pour n'avoir qu'une seule direction d'incidence, nous supposons la diffusion prédominante dans l'état S (première sous-couche de chaque niveau différent de l'atome, dont le nombre quantique azimutal l caractérisant l'excentricité de l'orbite, est nul).

3. la cible est formée d'une particule au repos.

4. La force nucléaire est une force centrale, dirigée suivant l'axe OZ, (axe joignant les deux particules), elle dérive d'un potentiel V(r) du type:
$$\left|\vec{r}\right| \quad V(\vec{r}) \to 0 \quad \text{si} \quad \left|\vec{r}\right| \to \infty .$$

5. Les particules incidentes suivent l'axe OZ et leur énergie est petite ($<$10 Mev). En nous limitant aux cas d'énergies faibles, nous négligeons ainsi tous les effets relativistes. En effet, pour pouvoir le faire, il faut pouvoir négliger le rapport $\frac{v^2}{c^2}$ vis-à-vis de l'unité, ce que nous ne pouvons faire ici, car si E_c est l'énergie cinétique de la particule incidente, nous pouvons écrire:
$$\frac{v^2}{c^2} = \frac{2Ec}{mc^2} ,$$
Or nous savons que si l'énergie au repos(mc^2) est de l'ordre de 1000 Mev, l'énergie cinétique sera de l'ordre de 25 Mev, d'où nous avons $\frac{v^2}{c^2} \sim \frac{5}{100}$,ce qui, en bonne approximation peut être négligé vis-à-vis de l'unité.

§2. AMPLITUDE DE DIFFUSION ET SECTION EFFICACE.

Nous nous plaçons dans le système du centre de masse, dans ce cas, le mouvement du centre de masse est rectiligne et uniforme et, après séparation de ce mouvement, il ne restera que le mouvement relatif. Notons que dans le système de laboratoire, lié à la terre, le problème serait beaucoup plus compliqué.

Soit $\psi(r)$, la fonction d'onde décrivant l'état de ce système, elle satisfait à l'équation:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) \right] \psi(r) = 0 \qquad (1,2),$$

où nous avons posé $\begin{cases} k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2} \\ W(r) = -\dfrac{2m}{\hbar^2} V(r) \end{cases}$ avec $\begin{cases} E > 0 \\ \hbar \text{ : la constante de Dirac} \\ m \text{ : la masse réduite de la particule.} \end{cases}$

Puisque $\psi(r)$ doit décrire le phénomène de diffusion, elle doit décrire un faisceau de particules incidentes suivant OZ, plus une onde diffusée de particules à partir du centre de diffusion; donc à grande distance elle sera du type:

$$\psi(r) \sim e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \text{ pour } r \to \infty \qquad (1,3)$$

où $f(\theta)$ est l'amplitude de diffusion dans la direction θ, par rapport au faisceau incident; nous négligeons la dépendance vis-à-vis de φ, car il y a symétrie cylindrique autour de OZ.

Quant à la section efficace de diffusion σ, nous la définissons par : $\mathcal{P} = \sigma(\theta) n . N . d\Omega$.

où: $\mathcal{P}$ est le nombre de particules diffusées par seconde dans l'angle solide $d\Omega$

n est le nombre de particules dans la cible.

N est le nombre de particules incidentes par seconde et par cm^2 perpendiculairement à OZ.

Nous savons que la section efficace de diffusion est liée à l'amplitude de diffusion par la relation: $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$ (1,4)

que l'on démontre comme suit:

a) on exprime N en utilisant la densité du courantde probabilité, et l'expression (3) de ψ (r).

$$N = \int_0^\infty i_z \, dS = i_z = \frac{\hbar}{2mi} \left(\bar{\psi} \frac{d\psi}{dz} - \frac{d\bar{\psi}}{dz} \psi\right) = \frac{k\hbar}{m} = v.$$

b) de même, on explicite le nombre de particules diffusées dans l'angle $d\Omega$, en négligeant les termes en $\frac{1}{r^3}$ et suivant ,dans le comportement asymptotique

$$d\mathcal{P} = i_r \, r^2 \, d\Omega = \frac{\hbar}{2mi} \, r^2 \, d\Omega \left(\bar{\psi} \frac{d\psi}{dr} - \frac{d\bar{\psi}}{dr} \psi\right)$$

$$= \frac{\hbar k}{m} \left| f \right|^2 \, d\Omega = v \left| f \right|^2 \, d\Omega .$$

En utilisant alors la définition de $\sigma(\theta)$, nous obtenons la relation cherchée.

§3. CONSTANTE DE PHASE

La troisième grandeur à introduire, est la constante de phase η, elle caractérise le comportement asymtotique de la fonction d'onde.

Puisque l'état S possède la symétrie sphérique, nous pouvons poser : $\psi(r) = \frac{u(r)}{r}$, où $u(r)$ satisfait à l'équation (1,2) et à la condition limite $u(o) = o$.

Puisque $V(r)$ décroit rapidement, le comportement asymptotique de $u(r)$, sera du type:

$$u(r) \sim C \sin(kr + \eta) \text{ pour } r \to \infty \qquad (1,5)$$

La constante de phase η est donc la valeur particulière que prend l'angle de phase $(kr + \eta)$ lorsque la distance internucléaire est nulle.

Si nous voulons que $u(r)$ soit normalisée, c'est-à-dire que: $u(r) = 1$ pour $r = 0$, nous posons $C = \frac{1}{\sin\eta}$, d'où:

$$u(r) \to V(r) = \frac{\sin(kr + \eta)}{\sin\eta} \qquad (1,5').$$

Montrons qu'il est possible de relier η à σ

Nous savons que $\psi(r)$ peut être développée en polynômes de Legendre, il s'en suit que pour le cas considéré ici, (l=o), nous avons:

$$\psi(r) = \psi_o(r)\, Y_{o,o}(\theta),$$

et après normalisation de l'harmonique sphérique $Y(\theta)$, nous obtenons: $\psi_o(r) = \psi(r)\,(4\pi)^{\frac{1}{2}}$

ce qui peut encore s'écrire:

$$\psi_o(r) = \sqrt{4\pi}\, e^{ikr\cos\theta} + \sqrt{4\pi}\, f(\theta)\, \frac{e^{ikr}}{r} \qquad (1,6).$$

Intégrons cette relation sur les angles en remarquant qu'aux basses énergies, l'amplitude de diffusion $f(\theta)$ est indépendante de l'angle et est égale à sa valeur moyenne $\bar{f}$; soit:

$$\psi_o(r) = \frac{i\sqrt{\pi}}{kr}\left[e^{-ikr} - e^{ikr}\right] + \sqrt{4\pi}\, \overline{f(\theta)}\, \frac{e^{ikr}}{r} \qquad (1,7).$$

Or, à grande distance , $\psi_o(r)$ et $u(r)$ représentent le même état du système, par conséquent les expressions (1,5) et (1,7) doivent s'identifier, et les coéfficients de e^{ikr} doivent être proportionnels, c'est-à-dire que:

$$\bar{f} = k^{-1} e^{i\eta} \sin\eta \ .$$

De cette relation, nous passons à celle entre σ et η :

$$d\sigma = k^{-2} \sin^2\eta \ d\Omega$$

ou encore $\sigma = \dfrac{4\pi \sin^2\eta}{k^2}$ (1,8)

§4. LONGUEUR DE COLLISION

Connaissant les principaux paramètres du problème de la diffusion, et les expressions qui les relient, nous sommes en mesure d'introduire la longueur de collision, principale caractéristique du comportement asymptotique de $u(r)$, à énergie nulle.

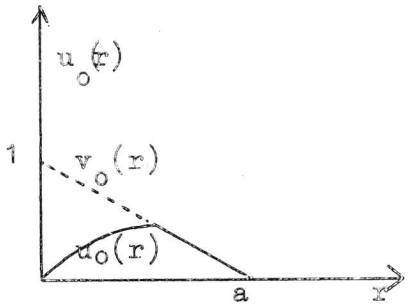
Pour $E = o$, et $r \to \infty$, l'équation (1,2) se réduit à :

$$\frac{d^2 u_o(r)}{dr^2} = o \qquad (1,9)$$

(l'indice o signifie $E = o$)

La solution de cette équation est du type : $u_o(r) = C_1 r + C_2$.

Sur un graphique, portons : $\begin{cases} u_o(r) & \text{en ordonnée} \\ r & \text{en abscisse} \end{cases}$, et représentons $u_o(r)$ en fonction de r.



D'après la solution, nous remarquons que pour r assez grand, $u_o(r)$ est représentée par une droite, laquelle coupe l'axe des r en un point de coordonnées(a,o); nous pouvons dès lors écrire que:

$$u_o(r) = a - r \qquad (1,10).$$

Par définition, l'abcisse du point d'intersection de la droite et de l'axe des r, est la longueur de collision.

Normalisons $u_o(r)$ de telle manière que $u_o(o) = 1$, nous obtenons:

$$u_o(r) \to v_o(r) = 1 - \frac{r}{a} \qquad (1,10').$$

Si dans l'expression de $u(r)$ asymptotique, calculée pour une énergie quelconque, nous faisons tendre $k \to o$, le résultat obtenu doit égaler $v_o(r)$; pour k petit nous avons:

$$v(r) = \frac{\sin(kr + \eta)}{\sin \eta} = 1 + kr \cot g\, \eta$$

d'où : $\lim_{k \to o} (1 + kr \cot g\, \eta) = 1 - \frac{r}{a}$, soit que: $tg\eta = -ka$. (1,11).

Connaissant la relation entre σ et η, nous pouvons obtenir celle entre σ et a, en se servant de (1,11), nous obtenons:

$$\sigma_o = 4\pi a^2 \qquad (1,12).$$

Remarquons que la mesure expérimentale de σ_o, fournit seulement la valeur absolue de a.

Il reste enfin une expression importante à démontrer, et à partir de laquelle nous obtenons la valeur de la longueur de collision; il s'agit de l'approximation indépendante de la forme, ainsi appelée car on ne peut déterminer la forme du potentiel nucléaire à partir des seules données expérimentales de r_o et a.

Cette relation s'obtient comme suit: écrivons l'équation (1,2) pour deux énergies différentes: $E_1 = o$, E_2 quelconque:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2u_o(r)}{dr^2} + W\,u_o(r) = 0 & (a) \\[2ex] \dfrac{d^2u(r)}{dr^2} + W\,u(r) = -k^2u(r) & (b) \end{cases}$$

Après multiplication de (a) par u(r), et de (b) par $u_o(r)$, nous soustrayons la seconde relation de la première, nous obtenons:

$$\frac{d}{dr}\,(u\,u'_o - u_o\,u') = k^2\,u(r).u_o(r) \qquad (1,13)$$

Notons qu'en intégrant (1,12) sur r dans l'intervalle $[0,R]$ (où R est la portée des forces nucléaires), nous obtenons la relation de Bethe-Peierls entre η et k. Cette relation prouve que le développement (1) est valable, puisque η s'exprime en fonction de k.

Ecrivons la relation (1,12) pour les fonctions normalisées v(r) et $v_o(r)$:

$$\frac{d}{dr}\,(v\,v'_o - v_o v') = k^2\,v(r)v_o(r) \qquad (1,13')$$

et soustrayons (1,13) de (1,13'); nous intégrons dans la relation obtenue sur r, dans l'intervalle $[0,\infty]$, en tenant compte des conditions suivantes:

$$u(o) = 0 \qquad v'(o) = k \cot g\,\eta$$
$$v(o) = 1 \qquad v'_o(o) = -\frac{1}{a}.$$

$$\left.\begin{array}{l} v_o(r) \equiv u_o(r) \\ v(r) \equiv u(r) \end{array}\right\} \text{ pour } r \to \infty$$

Nous obtenons finalement: $k \cot g \eta = -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^\infty (v_o v - u_o u)\, dr.$

Or pour r très grand, la contribution de l'intégrale est presque nulle, ce n'est que pour $r < r_o$, que la contribution de l'intégrale ne sera plus négligeable.

C'est donc une bonne approximation que de remplacer u par u_o et v par v_o, nous obtenons ainsi l'approximation indépendante de la forme:

$$k \cot g\, \eta = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_o k^2 \qquad (1,14)$$

où nous avons posé, r_o, la portée effective de la force nucléaire:

$$r_o = 2 \int_0^\infty (v_o^2 - u_o^2)\, dr \qquad (1,15)$$

Notons que(13) aurait pu être déduite du développement de $k \cot g\, \eta$, puisque le terme $Pk^4 r_o^3$ et les suivants sont négligeables aux basses énergies . A partir de (13), nous pouvons également vérifier que la constante de phase est un nombre pur:

$$[L^{-1}][\eta] = [L^{-1}] + [L\, L^{-2}]$$

Enfin, en calculant la limite de (13) pour $k \to 0$, nous avons :

$$\lim_{k \to 0} (k \cot g\, \eta) = -\frac{1}{a} \qquad (1,16)$$

§5. APPLICATION AU DEUTERON.

Dans le cas particulier du deutéron, la signification physique de la longueur de collision est immédiate.
Nous savons que le deutéron est un système de deux particules de masses à peu près égales, maintenues ensemble par une force attractive de petite portée . Soit B son énergie de liaison , nous posons E=-B.
Puisque à grande distance, le potentiel est négligeable, la fonction d'onde se comporte comme:

$$e^{-\frac{r}{R}} \qquad \text{où } R = \left| k^{-1} \right| = \left| \hbar^{-1} \left(MB^{\frac{1}{2}} \right) \right|$$

R a les dimensions d'une longueur et est supérieur à la portée des forces; dès lors, il existe une grande probabilité de trouver le deutéron dans un état lié, même si la distance internucléaire est plus grande que la portée de la force nucléaire, puisque u(r) décroit exponentiellement , c'est-à-dire que R détermine la dimension du deutéron. L'approximation indépendante de la forme s'écrit:

$$-R^{-1} = -a^{-1} + \frac{1}{2} r_o R^{-2}$$

nous en concluons que dans la limite où la portée r_o peut être négligée, la dimension du deutéron est donnée par la longueur de collision.

CHAPITRE II

METHODES VARIATIONNELLES.

Dans l'étude de la longueur de collision, il sera nécessaire de résoudre l'équation de Schrödinger; c'est pourquoi nous exposerons ici quatre méthodes différentes en facilitant la résolution.

Dans le cas d'un système de deux particules entre lesquelles s'exerce une force nucléaire, du type force centrale, l'équation de Schrödinger en mouvement relatif s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] \phi(r) = o \qquad (2.1)$$

où $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $E > o$

$$W(r) = - \frac{2m}{\hbar^2} V(r)$$

Si on prend $l = o$ dans cette équation, on retrouve l'équation (2) du chapitre précédent, où nous n'avions considéré que l'état S.

La fonction d'onde $\phi(r)$, décrivant l'état du système, doit être finie et continue dans tout l'espace, elle doit donc vérifier les conditions limites :

$$\phi(o) = o$$

$$\phi(r) \rightarrow \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l\right) \qquad (2.2)$$

Si l'énergie est connue, la résolution de l'équation (1) revient à déterminer la fonction d'onde décrivant cet état d'énergie. Cette étude se simplifie, grâce à l'utilisation des méthodes variationnelles.

Nous en étudierons quatre.

§1. METHODE VARIATIONNELLE DE HULTHEN. (2)

La méthode variationnelle de Hulthen est basée sur la propriété de stationnarité de la constante de phase η_1, définie par le comportement asymptotique de la fonction d'onde.

Etablir un principe variationnel, c'est étudier le comportement d'une intégrale au cours de l'évolution du système, et montrer que l'intégrant se comporte de telle manière que la première variation de l'intégrale soit nulle.

Dans le cas présent, on considère l'intégrale L telle que:

$$L = \int_0^\infty G\, D\, G\, dr \qquad (2,3)$$

où $D = \frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}$

Il est évident que (3) s'annule si G est solution exacte de l'équation de Schrödinger. Supposons qu'il en soit ainsi, et étudions le comportement de l'intégrale lorsque nous ajoutons à G une quantité infinitésimale δg telle que $(G + \delta G)$ vérifie les conditions limites (2). Pour δG, celles-ci deviennent:

$$\delta G(o) = 0$$
$$\delta G(r) \rightarrow \cos(kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_1)\,\delta\eta_1 \qquad (2,4)$$

car la constante de phase η_1 varie quand on fait varier la fonction G.

Calculons ensuite la variation de L. A partir de (3) on obtient:

$$\delta L = \delta \int_0^\infty G\, D\, G\, dr$$

Soit que : $$\delta L = \int_0^\infty \delta G\, D\, G\, dr + \int_0^\infty G\, D\, \delta G\, dr$$

Dans δL, nous intégrons la seconde intégrale par parties, en tenant compte que dans D intervient une dérivée seconde:

$$\int_0^\infty G\, \frac{d^2 \delta G}{dr^2}\, dr = \left[G\, \frac{d\,\delta G}{dr} - \delta G\, \frac{dG}{dr} \right]_0^\infty + \int_0^\infty \delta G\, \frac{d^2 G}{dr^2}\, dr$$

Nous obtenons ainsi pour δL:

$$\delta L = 2\int_0^{\infty} \delta G \, D \, G \, dr + \left[G \frac{d\delta G}{dr} - \delta G \frac{dG}{dr} \right]_0^{\infty}$$

Puisque par hypothèse, G est la solution exacte de (1), l'intégrale du second membre n'annulle, et tenant compte des conditions limites (2) et (4), la parenthèse s'écrit: $- k\delta\eta_1$.

Soit finalement : $\delta L + k\,\delta\eta_1 = 0$.

Nous constatons ainsi que la condition de stationnarité de L dépend uniquement de la stationnarité de la constante de phase;(k étant connu).

Supposons qu'au cours de l'évolution du système, la variation de la fonction est telle que ($G + \delta G$) est toujours solution exacte de (1); dans ce cas nous aurons toujours $L = 0$, mais aussi $\delta L = 0$. Et cette hypothèse entraîne bien la stationnarité de η_1:

$$\delta\eta_1 = 0 \qquad (2,5)$$

Inversément, si nous supposons dès le début du problème que la constante de phase est stationnaire, alors quel que soit δG, mais qui vérifie les conditions (4), $G + \delta G$ est solution exacte de l'équation de Schrödinger puisque $\delta L = 0$.

En général, pour trouver la fonction d'onde, on procède comme suit. Considérons une fonction $G = G(r, c_1 \ldots c_n)$ où $c_1 \ldots c_n$ sont des paramètres inconnus; calculons l'intégrale L, soit:

$L = L(\eta_1, c_1 \ldots c_n)$; puis exprimons que η_1 est stationnaire dans la relation:

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial \eta_1} \delta\eta_1 + \sum_i \frac{\partial L}{\partial c_i} \delta c_i$$

et que G est solution exacte de l'équation (1), c'est-à-dire que $L = 0$ et par suite que $\delta L = 0$

Dès lors, il suffit de résoudre le système de (n + 1)équations à (n+1)inconnues, pour déterminer les paramètres dont la fonction d'onde dépend, soit:

$$\begin{cases} L = 0 \\ \dfrac{\partial L}{\partial c_i} = 0 \text{ pour } i = 1, 2, \ldots n. \end{cases} \qquad (2,6)$$

Notons qu'en général, il n'est pas facile de distinguer entre maximum et minimum pour la constante de phase, car dans le cas continu ($E > 0$), considéré ici, la variation seconde de L est nulle.

Une généralisation intéressante de ce problème a été développée par Hylleraas[3]. Intéressante, car elle traite de la même manière le problème du spectre continu et du sprectre discret. La méthode suppose que, quel que soit le cas considéré, un seul paramètre est variable, les autres étant fixes.
Le principe variationnel consiste alors à rendre ce paramètre stationnaire. Dans le cas de k^2 , par exemple, nous avons l'expression:

$$k^2 = \frac{-\int_0^\infty G\left[\frac{d^2}{dr^2} + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] G \; dr}{\int_0^\infty G\, G\, dr}$$

Cette relation tirée de $\int_0^\infty G\, D\, G\, dr = 0$, est stationnaire si la fonction $(G + \delta G)$ est toujours solution exacte de l'équation(1), quel que soit δG.

Signalons enfin que Hulten a donné une nouvelle formulation de sa méthode, dans laquelle il met en évidence le caractère de quasi-valeur propre de la constante de phase. C'est dans cette caractéristique que réside principalement l'intérêt de la méthode.
Dans cet exposé, Hulten introduit une fonction $y(r)$ telle que:

$$\psi(r) = \sin(kr + \eta) - \sin\eta \cdot y(r) \qquad (2,7)$$

Nous ne considérons que le cas de l'onde S : $l = 0$.
Tandis que $\psi(r)$ vérifie les conditions (2), $y(r)$ vérifie les conditions

$$\begin{aligned} y(0) &= 1 \\ y(\infty) &= 0 \end{aligned} \qquad (2,8)$$

Introduisons $\psi(r)$ donné par (2,7) dans l'équation de Schrödinger; nous obtenons:

$$y'' + k^2 y + W(r)\, y = W(r)\left[\cos kr + \operatorname{cotg}\eta \cdot \sin kr\right]. \qquad (2,9).$$

Si cot g η est donné, le second membre de (2,9) est connu, et dans ce cas nous n'obtiendrons qu'une seule solution y(r) vérifiant les conditions limites (2,8). Dès lors, nous pouvons considérer la constante de phase comme un genre de paramètre-valeur propre, d'où son nom phase propre.

Nous pouvons également montrer que la relation (2,9) n'est rien d'autre que l'équation d'Euler du problème variationnel suivant:

$$J = \int_0^\infty F\,(r,\ y\ ,\ y')\ dr.$$

où $F(r,y,y') = -y'^2 + k^2y^2 + W(r)\ [\ \cos kr - y\ ]^2$. (2,10)

Si nous imposons de plus que:

$$N = \int_0^\infty G\ (r,y)dr = \text{constante}, \text{où } G(r,y) = W(r)\ \sin kr\ (\cos kr - y)$$

(2,11)

$$k\eta_B = \int_0^\infty W(r)\ \sin^2 kr\ dr$$

où η_B est la phase propre de l'approximation de Born.

alors, le principe variationnel revient à exprimer la stationnarité de J ($\delta J = 0$) , ou encore, revient à étudier l'équation d'Euler correspondante, qui s'obtient comme suit: posons cotg $\eta = \lambda$, et introduisons le multiplicateur 2λ, dans l'équation d'Euler, nous aurons l'équation:

$$\frac{d}{dr}\left[\frac{\partial(F + 2\lambda G)}{\partial y'}\right] - \frac{\partial(F + 2\lambda G)}{\partial y} = 0$$

et cette relation est identique à (2,9).

Il s'en suit que si cotg η est fixe, la résolution de l'équation (2,9) fournira une valeur de y , qui introduite dans la relation (2,7), donnera la valeur de la fonction d'onde.

§2. METHODE VARIETIONNELLE DE KOHN (4)

Nous allons développer une autre méthode variationnelle, qui diffère assez peu de celle de Hulthen.

Au lieu de la quantité "L" considérée précédemment, posons:

$$Q = \int_0^a \left\{ -\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2 + k^2 \psi^2 + W(r)\ \psi^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\ \psi^2 \right\} dr + K\,\psi^2(a) \quad (2,12)$$

où k est la dérivée logarithmique de la fonction $\psi(r)$; pour $r = a$, a peut prendre toutes les valeurs de zéro à l'infini.

Si $\psi(r)$ est solution exacte de l'équation (2,1), Q est nul; en effet, en intégrant (2,12) par parties, nous obtenons:

$$Q = -\left(\psi \frac{d\psi}{dr}\right)_0^a + \int_0^a \left[\frac{d^2\psi}{dr^2} + k^2\psi + W\psi - \frac{l(l+1)}{r^2}\ \psi\right]\psi\, dr + K\,\psi^2\ (a)$$

$$Q = -\ \psi(a)\ .\ \psi'\ (a) + \frac{\psi'(a)}{\psi\ (a)}\ \psi^2(a) = 0\ .$$

Remarquons, qu'il n'est pas nécessaire que la fonction d'onde $\psi(r)$ soit normalisée convenablement à l'infini; ce qui n'était pas le cas dans la méthode de Hulten.

En partant de l'expression Q, nous pouvons développer un principe variationnel, soit pour K si l'énergie est connue, soit pour k^2, si K est connu. Nous nous intéresserons seulement au premier cas qui est le plus général.

Faisons varier $\psi\ (r)$, solution exacte de (2,1), d'une quantité infinitésimale $\delta\psi$, telle que $\delta\psi\ (o) = 0$; et supposons que la fonction $(\psi + \delta\psi)$ est encore solution exacte de (2,1), quel que soit $\delta\psi$. Dans ces conditions, $Q[\psi + \delta\psi] = 0$, mais de plus $\delta Q = 0$.

Cette hypothèse a pour conséquence la stationnarité de K, en effet:

$$\delta Q = \delta \int_0^a \left\{ -\left(\frac{d\psi}{dr}\right)^2 + k^2\psi^2 + W\psi^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\ \psi^2 \right\} dr + \delta K.\psi^2(a) + 2\,K.\psi(a)\delta\psi\ (a).$$

Après intégration par parties, nous obtenons:

$$\delta Q = -2\left\{\delta\psi \frac{d\psi}{dr}\right\}_0^a + 2\int_0^a \left[\frac{d^2\psi}{dr^2} + k^2\psi + W\psi - \frac{l(l+1)}{r^2}\psi\right]\delta\psi\, dr$$

$$+ \delta K\, \psi^2(a) + 2K.\psi(a)\delta\psi(a) = 0.$$

L'intégrale du second membre disparaît, puisque $\psi(r)$ est solution de (1) et il reste : $\delta K . \psi^2(a) = 0$.

Puisque $a \neq 0$, $\psi^2(a) \neq 0$ et il s'en suit que $\delta K = 0$ (2,13).

Inversément, si K est fixe, et quelle que soit la variation $\delta\psi$ mais telle que $\delta\psi(o) = 0$, la fonction $\psi + \delta\psi$ est une solution de l'équation de Schrödinger.

A partir de cette formulation, nous pouvons obtenir une valeur de K .

Posons: $\begin{cases} \psi_t = \sum_i c_i \psi_i . \\ \psi_i(o) = 0 \quad \text{pour } i = 1,\ldots,n. \end{cases}$ (2,14)

où nous supposons que : $\begin{cases} \psi_t \text{ est une solution de l'équation (2,1),} \\ K \text{ est fixe} \\ (c_1,\ldots,c_n) \text{ sont des coéfficients indéterminés.} \end{cases}$

Introduisons (14) dans l'expression de Q:

$$Q = \int_0^a \left\{ -\left(\frac{d\sum_i c_i \psi_i}{dr}\right)^2 + \left(k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\left(\sum_i c_i\psi_i\right)^2 \right\} dr$$

$$+ K\left[\sum_i c_i \psi_i(a)\right]^2 = 0.$$

Sous forme matricielle, nous avons:

$$\sum_{i,j=1}^{n} A_{ij}(k^2)\, c_i c_j + K\left(\sum_i c_i \psi_i(a)\right)^2 = 0 \quad (2,15).$$

Exprimons alors que la variation première de Q est nulle, soit:

$$\delta Q = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial Q}{\partial c_i} \delta c_i = 0.$$

Nous obtenons ainsi un système de n équations à n inconnues, les c_i:

$$\frac{\partial Q}{\partial c_i} = \sum_j A_{ij} c_j + K \left(\sum_i c_i \psi_i (a) \right) \psi_j (a) = 0.$$

Or ce système n'est résoluble, que si le déterminant des coéfficients des inconnues, est identiquement nul, c'est-à-dire si :

$$\Delta = [A_{ij} + K \psi_i (a) \psi_j (a)] = 0 \qquad (2,16)$$

la matrice $\psi_i(a) \psi_j(a)$, est de rang 1, dès lors l'équation(2,16) est linéaire en K et sa résolution fournit une seule valeur pour K.

Remarquons que si a tend vers l'infini, K devient:

$$K = k \cot g \, (ka + \eta).$$

Et puisque la section totale de diffusion $\sigma = 4 \pi k^{-2} \sin^2 \eta$, la connaissance de K entraîne celle de σ .

Enfin , à énergie nulle, la valeur asymptotique de K est finie, car η est une fonction de l'énergie, comme nous l'avons montré dans le premier chapitre.

§3. METHODE VARIATIONNELLE DE SCHWINGER.(5)

Dans cette troisième méthode, la caractéristique essentielle est le passage de l'équation de Schrödinger à une équation intégrale par l'utilisation d'une fonction de Green.

Dans le cas de l'onde S, l'équation (2,1) peut s'écrire:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2\right) \psi(r) = - W(r) \quad \psi(r) . \qquad (2,17).$$

Nous définissons la fonction de Green par la relation:

$$G(r, r') = k^{-1} \cos(kr_>) \sin(kr_<) \qquad (2,18)$$

où $\begin{cases} r_> = \text{maximum de } (r, r'). \\ r_< = \text{minimum de } (r, r') . \end{cases}$

Et de la définition (2,18), nous tirons que $\begin{cases} G(o, r') = 0 \\ G(r, r') \sim \cos kr \\ \quad \text{si } r > r' \end{cases}$

En utilisant la fonction de Green, montrons que $\psi(r)$ peut s'écrire:

$$\psi(r) \sim \sin kr + \int_0^\infty G(r, r') W(r') \psi(r') \, dr' \qquad (2,19).$$

Pour que (19) soit correcte, il faut que $\psi(r)$ vérifie les conditions limites (2).

Vérifions-le :

1. pour $r = 0$, on a bien $\psi(o) = 0$ puisque $G(o,r') = 0$.
2. pour $r \to$ infini : remarquons que l'intégrale dans (2,19) n'apporte une contribution non négligeable que si r' est de l'ordre de la portée des forces nucléaires puisque $|\vec{r}| V(\vec{r}) \to 0$ si $|\vec{r}| \to$ infini. Dès lors, nous pouvons y remplacer $r_<$ par r' et $r_>$ par r, nous obtenons:

$$\psi(r) \sim \sin kr + \left[k^{-1} \int_0^\infty \sin kr' \, W(r') \psi(r') \, dr'\right] \cos kr \qquad (2,20).$$

et ainsi écrite, $\psi(r)$ est bien du type : $\psi(r) \to \sin(kr + \eta)$
ou encore: $\psi(r) \to \sin kr + \operatorname{tg}\eta \cos kr$ (2,21).

Par comparaison des expressions (2,20) et (2,21) , nous obtenons que:

$$tg\eta = k^{-1}\int_0^\infty \sin kr'\ W(r')\ \psi(r')\ dr' \qquad (2,22).$$

Pour obtenir enfin le principe variationnel, multiplions les deux membres de (2,19) par $W(r)\psi(r)$, et intégrons de zéro à l'infini, nous avons:

$$\int_0^\infty W(r)\ \psi^2(r)\ dr = \int_0^\infty W(r)\ \psi(r)\ \sin kr\ dr + \iint_0^\infty W(r)\ \psi(r)\ G(r,r')\ W(r')\ \psi(r')\ dr\ dr'.$$

Après division des deux membres de cette expression par le carré de(22), et après avoir changé l'ordre des termes, nous obtenons:

$$\frac{\int_0^\infty W(r)\ \psi^2(r)\ dr - \iint_0^\infty W(r)\ \psi(r)\ G(r,r')\ W(r')\psi(r')\ dr\ dr'}{\left[k^{-1}\int_0^\infty W(r)\ \psi(r)\ \sin kr\ dr\right]^2} = \frac{\int_0^\infty W(r)\ \psi(r)\ \sin kr\ dr}{\left[k^{-1}\int_0^\infty W(r)\psi(r)\ \sin kr\ dr\right]^2}.$$

Nous en tirons finalement la formule fondamentale de la théorie de Schwinger:

$$k\cot g\eta = \frac{\int_0^\infty W(r)\psi^2(r)dr - \iint_0^\infty G(r,r')W(r)W(r')\psi(r)\psi(r')\ dr\ dr'}{\left[k^{-1}\int_0^\infty W(r)\ \sin kr\ \psi(r)\ dr\right]^2} \qquad (2,23)$$

Cette expression peut être considérée comme un principe variationnel pour $k\cot g\eta$. Considérons en effet une variation infinitésimale $\delta\psi(r)$, satisfaisant à la relation (2,19); dans ces conditions, on vérifie que $k\cot g\eta$ est stationnaire si l'énergie est connue.

Inversément, si la constante de phase est stationnaire, la fonction $(\psi + \delta\psi)$, où $\delta\psi$ vérifie (2,19), est une solution de l'équation de Schrödinger.

§4. METHODE VARIATIONNELLE DE RUBINOW (6)

Cette quatrième méthode variationnelle présente une différence essentielle à l'égard des trois autres; elle s'exprime uniquement en termes de la fonction d'onde interne.
Par fonction d'onde interne, nous entendons la partie de la fonction d'onde radiale, décrivant l'état du système dans la portée de la force nucléaire.

A la place de l'équation (2,1), nous considérons l'équation radiale correspondante, soit:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u(r) = 0 \qquad (2,24).$$

où $u(r) = r\phi(r)$.

u(r) vérifie les conditions limites:

$$\begin{cases} u(o) = 0. \\ u(r) \underset{r\to\infty}{\to} \cot g\,\eta_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2}) + \cos(kr - \frac{l\pi}{2}) \end{cases} \qquad (2,25).$$

Puisque W(r) est un potentiel nucléaire, sa contribution devient négligeable en dehors de la portée des forces nucléaires; par conséquent, pour $W(r) \to 0$, l'état du système est décrit par la fonction ω qui vérifie l'équation:

$$\frac{d^2\omega}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\omega = 0 \qquad (2,26)$$

Et la solution de cette équation différentielle peut s'écrire sous la forme: $\omega = \cot g\,\eta_l\,\omega_1 + \omega_2$.

A grande distance, ω doit être telle que:

$$\lim_{r\to\infty} \omega = \lim_{r\to\infty} u(r).$$

Dans l'équation (25), posons $\begin{cases} kr = \rho \\ \omega = kr\, f(kr) \end{cases}$

Après transformation, nous obtenons l'équation:

$$\frac{d^2f}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{df}{d\rho} + f - \frac{l(l+1)}{\rho^2} f = 0$$

qui présente une singularité essentielle à l'infini et en général un pôle d'ordre (l + 1) en $\rho = 0$.
Les fonctions de Bessel sphériques sont des solutions de cette équation.

D'où :
$$\left.\begin{aligned} \omega_1 &= kr\, j_l(kr) \\ \omega_2 &= -\, kr\, n_l(kr) \end{aligned}\right\} \qquad (2,26').$$

où
$$\begin{cases} j_l(kr) = R_l \dfrac{\sin kr}{kr} + S_l \dfrac{\cos kr}{kr} \\ n_l(kr) = R_l \dfrac{\cos kr}{kr} - S_l \dfrac{\sin kr}{kr} \end{cases}$$

R_l et S_l sont des polynômes en $(\frac{1}{kr})$, à coéfficients réels, et de degrés : respectivement l et (l-1).

Les valeurs asymptotiques de ω_1 et ω_2 sont dès lors:
$$\begin{aligned} \lim_{r \to \infty} \omega_1 &= \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \\ \lim_{r \to \infty} \omega_2 &= \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) = \omega_{2\infty} \end{aligned} \qquad (2,27)$$

De cette façon, nous avons bien : $[\, u(r) = \omega(r)]_{r=\infty}$

Nous utiliserons, pour exposer la méthode variationnele de Rubinow, la fonction $\omega_{2\infty}$, plutôt que ω_2 , car cette dernière a un comportement irrégulier à l'origine.

Ayant défini la partie asymptotique de la fonction u(r), introduisons la fonction d'onde interne, y(r), par la relation:
$$u(r) = -y(r) + \cot g\, \eta_l \cdot \omega_1 + \omega_{2\infty} \qquad (2,28)$$

où y(r) verifie les conditions limites:
$$\begin{aligned} y(o) &= \cos \frac{l\pi}{2} \\ y(r) &\to 0 \quad \text{pour} \quad r \to \infty \end{aligned} \qquad (2,29)$$

Remarquons que pour l = 0 , y(o) = 1 ; dès lors la fonction d'onde interne coïncide avec la fonction y(r) introduite déjà dans la seconde formulation de Hulten.

Recherchons à quelle équation satisfait y(r).
Pour celà, remplaçons u(r) par son expression (2,28) dans l'équation (2,24):

$$\frac{d^2}{dr^2}(-y + \cot g\eta_1 . \omega_1 + \omega_{2\infty}) + [k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}](-y + \omega_1 \cot g\eta_1 + \omega_{2\infty}) = 0$$

Or $\omega_{2\infty}$ vérifie l'équation : $\frac{d^2}{dr^2}\omega_{2\infty} + k^2\omega_{2\infty} = 0$ (2,30).

et ω_1 vérifie l'équation : $\frac{d^2}{dr^2}\omega_1 + (k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})\omega_1 = 0$ (2.30')

Tenant compte de ces deux équations nous obtenons l'équation en y(r):

$$\frac{d^2y}{dr^2} + k^2y - \frac{l(l+1)}{r^2}(y - \omega_{2\infty}) + W(r)(y - \cot g\eta_1 . \omega_1 - \omega_{2\infty}) = 0 \quad (231).$$

Recherchons encore à quelle équation satisfait $(y - \omega_{2\infty})$.
Procédant comme pour y(r), nous obtenons:

$$[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}](y - \omega_{2\infty}) - \cot g\eta_1 W(r).\omega_1 = 0 \quad (1.31').$$

L'avantage de la méthode de Rubinow, est de présenter plusieurs expressions variationnelles différentes pour la constante de phase.

Nous allons en exposer deux différentes en partant des équations (2.31) et (2.31').

A. La première expression se calcule de la manière suivante:
Nous considérons l'équation (2.31), nous la multiplions par:
$(-y(r) + \cot g\eta_1 . \omega_1 + \omega_{2\infty})$, puis nous intégrons de zéro à l'infini:

$$\int_0^\infty (\frac{d^2}{dr^2}y + k^2y)(-y + \cot g\eta_1\omega_1 + \omega_{2\infty})dr - \int_0^\infty \frac{l(l+1)}{r^2}(y - \omega_{2\infty})(-y + \cot g\eta_1\omega_1 + \omega_{2\infty})dr$$

$$+ \int_0^\infty W(r)(y - \omega_1 \cot g\eta_1 - \omega_{2\infty})(-y + \cot g\eta_1\omega_1 + \omega_{2\infty})\, dr = 0$$

Intégrons les trois premiers termes par parties, il vient que:

$$-\left(\frac{dy}{dr}\cdot y\right)_0^\infty + \int_0^\infty \left[\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 - k^2y^2\right] dr + \left[\frac{dy}{dr}\left(\cot g\eta_1 \cdot \omega_1 + \omega_{2\infty}\right) - y\frac{d}{dr}\left(\cot g\eta_1 \cdot \omega_1 + \omega_{2\infty}\right)\right]_0^\infty$$

$$+\int_0^\infty \left(\frac{d^2\omega_{2\infty}}{dr^2} + k^2\omega_{2\infty}\right) y\, dr + \int_0^\infty \left(\frac{d^2\omega_1}{dr^2} + k^2\omega_1 - \frac{l(l+1)}{r^2}\omega_1\right) y \cot g\eta_1\, dr$$

$$+\int_0^\infty \frac{l(l+1)}{r^2}\cot g\eta_1\, \omega_1\, \omega_{2\infty}\, dr + \int_0^\infty \frac{l(l+1)}{r^2}\left(y - \omega_{2\infty}\right)^2 dr$$

$$-\int_0^\infty W(r)\left(y - \omega_1 \cot g\eta_1 - \omega_{2\infty}\right)^2 dr = 0.$$

En tenant compte des conditions limites, et des équations vérifiées respectivement par y, ω_1 et $\omega_{2\infty}$, nous obtenons:

$$\int_0^\infty \left[\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 - k^2y^2\right] dr - \int_0^\infty W(r)\left(y - \omega_1 \cot g\eta_1 - \omega_{2\infty}\right)^2 dr + \int_0^\infty \frac{l(l+1)}{r^2}\left(y - \omega_{2\infty}\right)^2 dr$$

$$+\int_0^\infty \frac{l(l+1)}{r^2}\cot g\eta_1\, \omega_1\, \omega_{2\infty}\, dr = 0.$$

Or $\displaystyle\int_0^\infty \frac{l(l+1)}{r^2}\cot g\eta_1\, \omega_1\, \omega_{2\infty}\, dr = \cot g\eta_1 \int_0^\infty \left[\frac{d^2\omega_1}{dr^2} + k^2\omega_1\right] \omega_{2\infty}\, dr.$

Après deux intégrations par parties, il reste:

$$\cot g\eta_1 \left[\frac{d\omega_1}{dr}\,\omega_{2\infty} - \omega_1 \frac{d\,\omega_{2\infty}}{dr}\right]_0^\infty + \cot g\eta_1 \int_0^\infty \left[\frac{d^2\omega_{2\infty}}{dr^2} + k^2\omega_{2\infty}\right] \omega_1\, dr$$

soit finalement : $k\cot g\,\eta_1$.

Nous pouvons donc écrire que:

$$k\cot g\eta_1 = \int_0^\infty \left[-\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + k^2y^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\left(y - \omega_{2\infty}\right)^2 + W\left(y - \omega_1 \cot g\eta_1 - \omega_{2\infty}\right)^2\right] dr \qquad (2.32).$$

L'expression obtenue pour k cotg η_l présente encore une difficulté, car la constante de phase apparaît encore dans le second membre. Pour l'éviter, nous écrivons (2.32) comme suit:

$$A(k\cot g\,\eta_l)^2 - 2\,B\,(k\cot g\,\eta_l) + C = 0 \qquad (2.33).$$

à condition de définir:

$$\begin{cases} A = \dfrac{1}{k^2}\displaystyle\int_0^\infty W(r)\ \omega_1{}^2\ dr. \\[2ex] B = \dfrac{1}{2} + \dfrac{1}{k}\displaystyle\int_0^\infty W(r)\omega_1\ (y - \omega_{2\infty})\ dr. \\[2ex] C = \displaystyle\int_0^\infty \left[-\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + k^2\ y^2 - \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - W\right)(y - \omega_{2\infty})^2\right]\ dr. \end{cases} \qquad (2.34).$$

La solution de l'équation du second degré (33) est:

$$k\cot g\,\eta_l = \frac{B \pm \sqrt{B^2 - A\,C}}{A} \qquad (2.35)$$

Nous nous limiterons au cas du signe plus devant le radical, de telle manière, que pour une valeur particulière de y, kcotgη_l se réduise à l'approximation de Born.

En effet, si nous prenons $y(r) = -\omega_{2\infty}$, nous avons $B = \frac{1}{2}$ et $C = 0$ et (2.35) se réduit à : $k\cot g\,\eta_l = \frac{1}{A}$

c'est-à-dire que $A\,k\cot g\,\eta_l = 1$ et $k\ tg\,\eta_l = \displaystyle\int_0^\infty W(r)\omega_1{}^2\ dr.$

Cette dernière relation correspond à l'approximation de Born.

On sait, en effet, que l'approximation de Born est valable pour des potentiels décroissant très rapidement à grande distance et très faibles au voisinage de l'origine, ce qui est précisément le cas ici, puisque l'équation (2.30'), relative au cas où $W(r) \simeq 0$, a pour solution la fonction $\omega_1(r)$.

B. La seconde manière d'obtenir l'expression de $k\cot g\eta_1$ est un peu plus longue. Nous recherchons en fait deux expressions différentes pour $k\cot g\eta_1$; ces expressions ne sont pas stationnaires, par contre nous remarquons qu'une combinaison des deux fournira une expression stationnaire pour la constante de phase.

La première expression s'obtient de la façon suivante: nous multiplions l'équation (2.31') par $(y-\omega_{2\infty})$ et intégrons de zéro à l'infini, soit:

$$\int_0^\infty \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right](y-\omega_{2\infty})^2\,dr - \cot g\eta_1 \int_0^\infty W(r)\omega_1(y-\omega_{2\infty})\,dr = 0$$

$$\int_0^\infty \left[-\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + k^2y^2 + \left(W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)(y-\omega_{2\infty})^2\right] dr + \left(\frac{dy}{dr}\,y\right)_0^\infty$$

$$+ \int_0^\infty \left(\frac{d^2\omega_{2\infty}}{dr^2} + k^2\omega_{2\infty}\right)\omega_{2\infty}\,dr - 2\int_0^\infty \left(\frac{d^2\omega_{2\infty}}{dr^2} + k^2\omega_{2\infty}\right) y\,dr$$

$$- \cot g\eta_1 \int_0^\infty W(r)\,\omega_1\,(y-\omega_{2\infty})\,dr = 0$$

Tenant compte des relations (29) et (30) nous obtenons:

$$\int_0^\infty \left[-\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + k^2y^2 + \left(W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)(y-\omega_{2\infty})^2\right] dr$$

$$- \cot g\eta_1 \int_0^\infty W(r)\,\omega_1\,(y-\omega_{2\infty})\,dr = 0 \qquad (2.36).$$

Soit finalement : $(k\cot g\eta_1)\,B_1 - C = 0$ (2.36').

où $B_1 = \frac{1}{k}\int_0^\infty W(r)\omega_1(y-\omega_{2\infty})\,dr$ (2.34').

Pour obtenir la seconde expression, nous multiplions (2.31') par ω_1, et (2.30') par $(y-\omega_{2\infty})$, puis nous soustrayons la seconde

relation de la première et intégrons de zéro à l'infini:

$$\int_0^\infty \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] (y-\omega_{2\infty})\,\omega_1 dr - \int_0^\infty \cot g\eta_1\, W\omega_1^{\,2}\, dr$$

$$-\int_0^\infty \left[\frac{d^2\omega_1}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\omega_1\right] (y-\omega_{2\infty})\, dr = 0.$$

Après des intégrations par parties, il reste:

$$\int_0^\infty \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] (y-\omega_{2\infty})\,\omega_1\, dr + \int_0^\infty W(r)\,\omega_1\,(y-\omega_{2\infty})\, dr$$

$$-\int_0^\infty \cot g\,\eta_1\, W\omega_1^{\,2}\, dr - \int_0^\infty \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] (y-\omega_{2\infty})\,\omega_1\, dr$$

$$-\left[\frac{d\omega_1}{dr}(y-\omega_{2\infty}) - \omega_1 \frac{d(y-\omega_{2\infty})}{dr}\right]_0^\infty = 0.$$

D'où, finalement : $k \cot g\eta_1 = \dfrac{1 + B_1}{A}$ (2.37).

La combinaison la plus simple de (36') et (37) se calcule comme suit:

$$\begin{cases} k \cot g\eta_1 \cdot B_1 = C \\ k \cot g\eta_1 \cdot (1 + B_1) = \dfrac{(1 + B_1)^2}{A} \end{cases}$$

et en soustrayant la première relation de la seconde nous avons:

$$k \cot g\eta_1 = \frac{(1 + B_1)^2}{A} - C \qquad (2.38).$$

Il reste à montrer que les deux expressions obtenues, (35) et (38), conduisent à un principe variationnel pour la constante de phase. C'est-à-dire qu'il faut montrer que $k\cot g\eta_1$ est stationnaire quand on introduit dans un de ces expressions, la fonction $(y + \delta y)$ où y est solution de l'équation (31) et où δy vérifie les conditions limites(2.29).

Il faut que nous ayons dans chaque cas pris séparément :

1. $$\frac{1}{A}\left\{\delta B + \frac{B\,\delta B - \frac{1}{2}\,A\delta C}{(B^2 - AC)^{\frac{1}{2}}}\right\} = 0 \qquad (2.39).$$

2. $$\frac{2(1 + B_1)\,\delta B_1}{A} - \delta C = 0 \qquad (2.40).$$

Vérifions donc ces deux égalités.

1. Si nous calculons la variation de $k\cot g\eta_1$ à l'aide de (2.32), nous obtenons que $\delta(k\cot g\eta_1) = 0$, dans les conditions énoncées pour $(y + \delta y)$. Il doit dès lors en être de même pour la solution de l'équation (2.33), expression équivalente à (2.32). Et dès lors (2.39) est vérifiée. Remarquons que A est stationnaire puisqu'elle ne dépend pas de $y(r)$. (2.36') et (2.37) ne sont pas stationnaires, mais leurs variations sont proportionnelles à δB_1, en effet:

a) $$(k\cot g\eta_1) = \frac{B_1\delta C - C\delta B_1}{B_1^{\,2}}$$

et de plus $\delta C = 2\,(k\cot g\eta_1)\,\delta B_1$ car:

$$\delta C = 2(k\cot g\eta_1)\int_0 W(r)\,\omega_1\,\delta y\,dr = 2\,(k\cot g\eta_1)\,\delta B_1$$

d'où:

$$\delta(k\cot g\eta_1) = \frac{2B_1\,(k\cot g\eta_1)\delta B_1 - C\,\delta B_1}{B_1^{\,2}} = \frac{2B_1(k\cot g\eta_1) - C}{B_1^{\,2}}\,\delta B_1$$

b) $$\delta(k\cot g\eta_1) = \frac{\delta B_1}{A}$$

c'est pourquoi en soustrayant les deux expressions comme nous l'avons fait, les variations de δB_1 s'annullent et (40) est exacte.
On peut aussi le vérifier explicitement:

$$\delta(k\cot g\eta_1) = \frac{2(1 + B_1)\,\delta B_1}{A} - \delta C$$

$$\delta(k\cot g\eta_1) = 2(1 + B_1)\,\frac{\delta B_1}{A} - 2\,(k\cot g\eta_1)\,\delta B_1$$

$\delta(k\cot g\eta_l) = 2\delta B_1 \left(\frac{1 + B_1}{A} - k\cot g\eta_l\right) = 0$, en vertu de la relation (2.37).

Comme cas particulier de cette étude, nous allons résoudre le problème de l'onde S (l = 0)

ω_1 et $\omega_{2\infty}$ s'écrivent respectivement : sin kr, cos kr.

Dans le premier chapitre, nous avons donné le développement en série de $k\cot g\,\eta$. $k\cot g\eta_o = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_o k^2 + \ldots$ où l'indice o signifie l = 0.

A l'aide de la méthode de Rubinow, nous allons calculer les paramètres a et r_o. A cette fin, remarquons que chacune des intégrales A, B, C peut aussi se développer en une série de puissances de k; pour A nous avons par exemple:

$$A = A_o + \frac{1}{2} r_o k^2 + \ldots$$

où les valeurs de A_o, B_o, C_o s'écrivent:

$$\begin{cases} A_o = \int_o^\infty W(r)\, r^2\, dr \\ B_o = \frac{1}{2} + \int_o^\infty W.r\,(y-1)\, dr \\ C_o = \int_o^\infty \left\{ -\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + W(r)\,(y-1)^2 \right\} dr. \end{cases}$$

La première expression de $k\cot g\eta_o$, selon la méthode de Rubinow s'écrit: $k\cot g\eta_o = \frac{B + (B^2 - AC)^{\frac{1}{2}}}{A}$

on y remplace A,B,C par leur développement en série, puis on identifie les coéfficients des mêmes puissances de k dans les deux expressions de $k\cot g\,\eta_o$

Nous obtenons: $-\frac{1}{a} = \frac{B_o + (B_o^2 - A_o C_o)^{\frac{1}{2}}}{A_o}$ (2.41).

De la même manière, nous obtenons la valeur de la portée effective des forces:

$$r_o = \frac{1}{(B_o^2 - A_o C_o)^{\frac{1}{2}}} \left[\frac{A_1}{A_o} C_o + C_1 - \frac{2B_1}{a} \right] + 2 \frac{A_1}{A_o a}$$

où:

$$\begin{cases} A_1 = -\frac{1}{3} \int_0^\infty W(r)\, r^4\, dr \\ B_1 = \frac{1}{6} \int_0^\infty W\, r^3\, (y - 1)\, dr \\ C_1 = \int_0^\infty \left[y^2 - W\, r^2\, (y - 1) \right] dr \end{cases}$$

§5. RELATION DE KATO ENTRE LES METHODES DE HULTEN ET SCHINGER

Nous voudrions signaler ici que Kato[7] a établi une relation entre la méthode de Hulthen et celle de Schwinger.

Pour obtenir cette relation, écrivons d'une manière plus générale les conditions limites auxquelles doit satisfaire la fonction d'onde; soit:

$$\begin{cases} \psi(o) = 0 \\ \psi(r) \rightarrow \cos kr + \lambda \sin kr. \end{cases} \qquad (2.42).$$

où $\lambda = \text{cotg}\,\eta$, en ne considérant que l'onde S.

Nous utiliserons également la fonction $y(r)$, introduite déjà dans la seconde formulation de Hulthen, ainsi que dans la méthode de Rubinow; cette fonction est telle que :

$$\psi(r) = - y + \cos kr + \lambda \sin kr \qquad (2.43).$$

avec les conditions limites suivantes: $\begin{cases} y(o) = 1 \\ y(\infty) = 0 \end{cases}$

Appelons ψ_o la fonction d'onde exacte, solution de l'équation de Schrödinger, et correspondant a un état d'énergie déterminé.

Cherchons alors à résumer par une seule fonction chacune des méthodes variationnelles de Hulthen et Schwinger.

Remarquons que la méthode variationnelle de Kohn se rapproche assez bien de celle de Hulthen puisque pour a $\rightarrow$ infini , nous avons, pour $\psi \equiv \psi_o$, : $\delta Q = \delta K \psi^2 (a) \underset{a \rightarrow \infty}{\rightarrow} \delta K \sin^2 (ka + \eta)$

soit que: $\delta Q = - k \delta\eta$,

de même dans la méthode de Hulten nous avons vu que $\psi \equiv \psi_o$:

$$\delta L = - k\delta\eta .$$

Dès lors, nous pouvons dire que la méthode de Kohn est en quelque sorte une généralisation de la méthode de Hulten.

Partons alors de la première formulation de Hulthen: on y étudiait l'intégrale:

$$L = \int_o^\infty \psi(r)\, D.\, \psi(r)\, dr.$$

Calculons la variation première de L, pour $\psi \equiv \psi_o$, nous avons:

$\delta L = + k\ \delta\eta$ et non plus $- k\ \delta\eta$, puisque nous avons modifié la condition à l'infini.

Posons ensuite : $F\left[\psi\right] = k\lambda - \int_0^\infty \psi\ D\ \psi\ dr.$ (2.44).

nous constatons que si $\psi \equiv \psi_o$,nous avons: $F[\ \psi_o] = k\lambda$

$$\delta F\ [\ \psi_o] = 0$$

Il s'en suit que $F[\ \psi\ ]$ est bien la fonction qui résume la première formulation de Hulthen.

Afin d'obtenir la seconde formulation, introduisons y(r), c'est-à-dire , remplaçons $\psi(r)$ par $[\ -y + \cos kr + \lambda \sin kr]$ dans $F[\psi]$; nous obtenons, après des intégrations par parties et en tenant compte des conditions sur $y(_r)$ que :

$$F[\psi\ ] = - J + 2(\kappa - N)\lambda - k\eta_B\lambda^2. \qquad (2.45)$$

où nous retrouvons trois expressions définies précédemment:

$$\begin{cases} J = \int_0^\infty \left[k^2y^2 - \left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + W\ (r)\ (\cos kr - y)^2\right]\ dr. \\ N = \int_0^\infty \sin kr\ (\cos kr - y)\ W(r)\ \ dr \\ k\eta_B = \int_0^\infty W \sin^2 kr\ dr. \end{cases} \qquad (2.46).$$

Or, pour obtenir la seconde formulation de Hulthen nous devons exprimer que J est stationnaire avec la condition que N et $k\eta_B$ sont constantes : soit ici: $-\delta J = \delta F[\ \psi] = 0$

Explicitement : $\sum_n \frac{\partial F}{\partial c_n}\ \delta\ C_n + \frac{\partial F}{\partial \lambda}\delta\lambda = 0$

puisque $y = y(C_1 \ldots\ldots C_n)$.

Soit: $\dfrac{\partial F}{\partial C_n} = -\dfrac{\partial J}{\partial C_n} - 2\lambda \dfrac{\partial N}{\partial C_n} = 0$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = 2(k - N) - 2k\eta_B \lambda = 0 \text{ , d'où: } k - N = k\eta_B \lambda.$$

et après introduction de cette valeur de $k\eta_B \lambda$ dans $F[\psi]$, nous obtenons que : $F_H[\psi] = k\lambda - J - \lambda N$. (2.47).

où $F_H[\psi]$ est telle que:

$$F_H[\psi_o] = k\lambda \text{ car } (J+\lambda N) = \int_0^\infty \left[\frac{d^2y}{dr^2} y + k^2y^2 + W(\cos kr - y + \lambda \sin kr)(\cos kr - y)\right] dr$$

$$(J + \lambda N) = \int_0^\infty \left[\frac{d^2}{dr^2} y + k^2 y + W(y - \cos kr - \lambda \sin kr)\right](y - \cos kr) \, dr$$

et cette intégrale est bien nulle pour une solution d'onde exacte

$$\delta F_H[\psi_o] = 0 \text{ car } \delta F_H = k\delta\lambda - (\delta J + 2\lambda\delta N) + \delta\lambda . N - \lambda\delta N - 2\delta\lambda . N$$

$$\delta F_H = k\eta_B \lambda . \delta\lambda - (\delta J + 2\lambda\delta N) + \lambda\delta(k - k\eta_B \lambda)$$

$$\delta F_H = \lambda k \eta_B \delta\lambda - (\delta J + 2\lambda\delta N) - \lambda k \eta_B \delta\lambda = 0$$

en vertu des relations de stationnarité obtenues précédemment.

Il s'agit maintenant de trouver la fonction F_S résumant la méthode de Schwinger. En fait, nous la supposons telle que:

$$F_S[\psi_o] = k\lambda$$
$$\delta F_S[\psi_o] = 0$$

et nous la calculons explicitement en partant de la relation de Kato:

$$F_S = F_H + \int_0^\infty W^{-1} \, I[\psi]^2 \, dr \qquad (2.48).$$

Introduisons dans cette relation la valeur de F_H donnée par (2.47) et la fonction $z(r)$, telle que $z = \cos kr - y$, d'où $\psi(r) = z + \lambda \sin kr$. En intégrant par parties et en tenant compte qu'à l'infini, $z \to \cos kr$ il vient que:

$$F_S = \int_0^\infty \left[\frac{d^2z}{dr^2} + k^2 z\right]^2 W^{-1} dr + \int_0^\infty \left[\frac{d^2z}{dr^2} + k^2 z\right] z \, dr \qquad (2.49).$$

Il est évident que z n'est pas une solution de l'équation de Schrödinger, nous posons donc:

$$\frac{d^2z}{dr^2} + k^2 z = - Wv.$$

Cette équation peut se résoudre en utilisant la fonction de Green; en effet, puisque $z \to \cos kr$ pour $r \to \infty$, la fonction de Green est la même que celle utilisée dans la méthode de Schwinger, soit :

$$G(r\ r') = k^{-1} \sin (kr_<) \cos(kr_>),$$

$$\text{et} \quad z(r) = \int_0^\infty G(r, r')\, W(r')\, v(r')\, dr'.$$

c'est-à-dire que F_S s'écrit dans ces conditions:

$$F_S = \int_0^\infty W v^2\, dr - \int_0^\infty W v\, dr \int_0^\infty G(r\ r')W(r')\, v(r')\, dr' \qquad (2.50)$$

Il reste à calculer le dénominateur de la relation fondamentale de Schwinger: $k^{-1}\int_0^\infty \sin kr\ W(r)\, v(r)\, dr = - k^{-1}\int_0^\infty \sin kr \left[\frac{d^2z}{dr^2} + k^2 z\right] dr$

Intégrons par parties, nous avons que:

$$k^{-1}\int_0^\infty \sin kr\, W(r)\, v(r)\, dr = - k^{-1} \left[\sin kr\ \frac{dz}{dr} - k \cos kr - z\right]_0^\infty$$

$$- k^{-1}\int_0^\infty \left[\frac{d^2 \sin kr}{dr^2} + k^2 \sin kr\right] z\, dr = -k^{-1}\left[- k \sin^2 kr - k \cos^2 kr\right] = 1$$

Dès lors, F_S donnée par (2.48) est bien la fonction de Schwinger, et la relation de Kato , relie donc les méthodes variationnelles de Hulthen et Schwinger.

§6. CONCLUSIONS.

Les cinq expressions, respectivement de Hulthen(2.3), de Kohn (2.12), de Schwinger (2.23) et de Rubinow (2.35) et (2.39) constituent le point de départ d'une méthode de calcul variationnel des déphasages, et, ce qui est plus important, pour nous, de la longueur de collision.

Dans ce but, on calcule le second membre d'une de ces expressions en y remplaçant ϕ ou y, suivant le cas, par une fonction d'essai coresrespondante. Et la valeur obtenue pour la longueur de collision et d'autant meilleure que la fonction d'essai est proche de la fonction exacte. Or les méthodes de Kohn, de Schwinger et de Rubiniw sont caractérisées par le fait que les fonctions $(\phi(r)$ et $y(r),)$ sont indépendantes d'une normalisation correcte à l'infini. Ce n'est pas le cas pour la méthode de Hulthen.

Nous pouvons donc dire que ces trois méthodes sont plus précises, en général, que celle de Hulthen. Pour ces méthodes, en effet, il suffit de choisir une fonction d'essai dont l'allure est la plus proche possible de celle de la fonction réelle, seulement dans la région où la contribution du potentiel n'est pas négligeable.

Remarquons aussi que cette caractéristique est utilisée dès le début de la méthode de Rubinow, puisque la fonction d'onde y est décomposée en deux fonctions y et ω_∞ et que le principe variationnel s'exprime en termes de la première qui est nulle à l'infini.

CHAPITRE III

ETUDE DE LA BORNE SUPERIEURE DE LA LONGUEUR DE COLLISION DANS LE CAS STATIQUE

§1. PRELIMINAIRES.

La longueur de collision " a " est un des deux paramètres qui caractérisent la diffusion à basse énergie, dans l'approximation indépendante de la forme, (l'autre paramètre est la portée effective des forces nucléaires), il 'sen suit que sa détermination pour le problème à énergie nulle est très importante.

Il est possible cependant, de calculer théoriquement la valeur exacte de la longueur de collision, puisque nous ne possèdons pas de relation où elle soit la seule inconnue. Mais nous pouvons, à l'aide de méthodes variationnelles, en obtenir une valeur approximative. En fait, il s'agit exactement d'une borne supérieure de la valeur réelle de a.

Quelle que soit la méthode variationnelle considérée, nous devons utiliser une fonction d'essai dépendant d'un certain nombre de paramètres. Evidemment, la précision finale dépend du choix de cette fonction, La méthode a dès lors moins d'intérêt, si elle n'est pas accompagnée de critères assurant une précision rigoureuse au résultat final. C'est ce que nous tâcherons de réaliser dans notre étude.

L.Spruch et L. Rosenberg[8] ont étudié le problème de la borne supérieure de la longueur de collision, dans tous les cas possibles, en partant du cas statique que nous allons exposer.
Nous supposons qu'il n'existe pas d'états liés.(Nous verrons plus tard le cas où il existe un ou plusieurs états liés).

Soit u(r), la fonction d'onde radiale, dans le cas de l'onde S; u(r) vérifie l'équation différentielle:

$$L\,u = \left[\frac{d^2}{dr^2} + W(r)\right] u(r) = 0 \qquad (3.1).$$

où $\begin{cases} W(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} V(r) \\ m \text{ est la masse de la particule incidente.} \end{cases}$

$u(r)$ doit être finie et continue dans tout l'espace, d'où:

1. à l'origine : $u(o) = 0$
2. à l'infini: la contribution de $W(r)$ est négligeable, dès lors la solution de l'équation asymptotique s'écrit à une constante près: $u(r) = c\,(r - a)$.

   Posons: $u_1(r) = a - r$

   $u_2(r) = 1 - \frac{r}{a}$

Remarquons que $u_2(r)$ est telle que $[u_2(r)] = 1$ pour $r = 0$; il s'agit ici d'une normalisation dictée pour la simplicité des calculs.
Dans la suite, nous nous servirons de ces deux types différents de fonctions : $u_i(r)$ pour $i = 1,2$. Comme fonctions de r, $u_1(r)$ ne diffère de $u_2(r)$ que par une constante; ce n'est qu'au point de vue de la longueur de collision que la différence est essentielle: en effet, dans l'une " a" est en numérateur, et dans l'autre en dénominateur.

Mais les fonctions $u_i(r)$ sont inconnues, nous les choisissons arbitrairement. Les fonctions d'essai $u_{it}(r)$ vérifient les conditions limites:

$$\begin{cases} u_{it}(o) = 0 & \text{pour } i = 1,2 \\ \left.\begin{array}{l} u_{1t} \to a_t - r \\ u_{2t} \to 1 - \dfrac{r}{a_t} \end{array}\right\} & \text{pour } r \to \infty \end{cases} \qquad (3.3)$$

où a_t est une constante qui éventuellement, peut être différente dans $u_{1t}(r)$ et $u_{2t}(r)$.

Et quitte à les modifier, nous supposons que les fonctions d'essai sont continues ainsi que leurs dérivées premières.

Posons encore: $\omega_i(r) = u_{it}(r) - u_i(r)$ pour $i = 1,2$ (3.4)

Ces fonctions vérifient les conditions limites:

$$\begin{cases} \omega_i(o) = 0 & \text{pour } i = 1,2 \\ \omega_1(r) \to a_t - a = \text{constante} & \\ \omega_2(r) \to r\left(\dfrac{1}{a_t} - \dfrac{1}{a}\right) = \text{infini} & \text{pour } r \to \infty \end{cases} \qquad (3.5)$$

Notons que les $\omega_i(r)$ caractérisent le choix des $u_{it}(r)$; car si les fonctions $\omega_i(r)$ sont nulles, les fonctions d'essai coincident avec

les fonctions exactes, et de même la constante a_t s'identifie dans ce cas à la longueur de collision réelle.

Deux égalités démontrées par T.Kato, constituent le point de départ de notre étude. Elles s'écrivent différemment suivant les fonctions d'onde utilisées.

Dans le cas de $u_1(r)$ et $u_{1t}(r)$ on a:

$$a = a_t - \int_0^\infty u_{1t} \; L\, u_1 t \; dr + \int_0^\infty \omega_1 \; L\, \omega_1 \; dr \qquad (3.6).$$

dans le cas de $u_2(r)$ et $u_{2t}(r)$:

$$-a^{-1} = -a_t^{-1} - \int_0^\infty u_{2t} \; L\, u_{2t} \; dr + \int_0^\infty \omega_2 \; L\omega_2 \; dr \qquad (3.7).$$

Vérifions ces identités;la première s'écrit:

$$a = a_t - \int_0^\infty u_{1t} \; L\, u_{1t} \; dr + \int_0^\infty (u_{1t} - u_1) \; L\,(u_{1t} - u_1) \; dr$$

$$= a_t - \int_0^\infty u_{1t} \; L\, u_{1t} \; dr + \int_0^\infty u_{1t} \; L\, u_{1t} \; dr - \int_0^\infty u_1 L\, u_{1t} \; dr - \int_0^\infty (u_{1t} - u_1) L u_1 \; dr$$

Puisque $u_1(r)$ est la fonction d'onde exacte, il reste :

$$a = a_t - \int_0^\infty u_1 \; L\, u_{1t} \; dr = a_t - \int_0^\infty u_1 \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 \right] u_{1t} \; dr.$$

Après deux intégrations par parties, il vient que :

$$a = a_t - \left[u_1 \frac{du_{1t}}{dr} - \frac{du_1}{dr} \; u_{1t} \right]_0^\infty - \int_0^\infty u_{1t} \; Lu_1 \; dr$$

En tenant compte des conditions limites (2) et (3) , nous obtenons une identité. La seconde égalité (3.7) se vérifie de la même manière.

Le problème revient donc à étudier séparément les deux égalités de Kato, et en se basant sur cette étude, à déterminer la meilleure borne supérieure de la valeur réelle de la longueur de collision.

§2. ETUDE DE LA PREMIERE IDENTITE DE KATO.

$$a = a_t - \int_0^\infty u_{1t} \; L\, u_{1t} \; dr + \int_0^\infty \omega_1(r) \; L\, \omega_1(r) \; dr \qquad (3.6).$$

Remarquons tout de suite que si $\int_0^\infty \omega_1 \; L\omega_1 \; dr$ disparaît de l'identité de Kato, il ne reste dans le second membre qu'une constante et une intégrale; et cette expression peut conduire à un principe varationnel pour la longueur de collision.

En effet, suivant le signe de l'intégrale négligée , nous avons:

$$a \lesseqgtr a_t - \int_0^\infty u_{1t} \; L \; u_{1t} \; dr,$$

le signe d'égalité ayant lieu si seulement la fonction arbitraire est identique à la fonction réelle.

Mais avant de pouvoir utiliser une méthode variationnelle, il faut déterminer le sens de l'inégalité précédente, c'est-à-dire rechercher le signe de l'intégrale négligée.

Nous étudions donc l'expression $\int_0^\infty \omega_1 \; \mathbf{L}\, \omega_1 \; dr \qquad (3.8)$

Dans cette intégrale, nous avons posé : $L \equiv \frac{d^2}{dr^2} + W(r)$

Or le hamiltonien est défini par : $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$

ou encore: $H = \frac{\hbar^2}{2\,mi^2} \frac{d^2}{dr^2} + V(r)$ puisque $p_{op} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dr}$

Comparons les valeurs de L et H , en nous rappelant que $W(r) = -\frac{2m}{\hbar^2} V(r)$,

il vient que : $L \equiv -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) H.$

Introduisons cette valeur de L dans l'intégrale (3.8), nous avons:

$$\int_0^\infty \omega_1 \; L\omega_1 \; dr = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \int_0^\infty \omega_1 \; H\, \omega_1 \; dr \qquad (3.9).$$

Or l'opérateur hamiltonien est défini positif pour les fonctions d'onde de l'espace de configuration, qui sont de carré sommable, c'est-à-dire pour les fonctions $\psi\ (q_1\ q_2 \ldots\ldots\ldots q_n)$ telles que l'intégrale $\int |\psi(q_1 \ldots\ldots q_n)|^2\ d\tau$ converge, où $d\tau$ désigne l'élément de volume $dq_1\ dq_2 \ldots\ldots dq_n$.

Pour notre problème, H est défini positif si $\int_0^\infty |\omega_1(r)|^2\ dr$ converge. S'il en est ainsi, nous pouvons affirmer que $\int_0^\infty \omega_1\ L\omega_1\ dr$ est négative ou nulle puisqu'il en est ainsi du second membre. Malheureusement, $\omega_1(r)$ n'est pas de carré sommable. En effet, en vertu des conditions limites (3.5) vérifiées par $\omega_1(r)$, nous constatons que la valeur asymptotique de $\omega_1(r)$ n'est pas de carré sommable, puisque $\int_0^\infty$ (constante) dr ne converge pas. Et de cette façon, nous ne pouvons conclure quant au signe de l'intégrale (3.8).

Cependant, il est possible, en utilisant une autre fonction, soit $\omega_1(r\lambda)$, où λ est un paramètre arbitraire, mais positif, d'aboutir à la conclusion cherchée.

Posons: $\omega_1(r\lambda) = \omega_1(r)\ e^{-\lambda r}$ (3.10).

On vérifie que $\omega_1(r\lambda)$ est telle que :

$$\begin{cases} \omega_1\ (o, \lambda) = 0 \\ \omega_1\ (r, \lambda) \to 0 \qquad \text{pour } r \to \text{infini.} \end{cases}$$

et de plus, qu'elle est de carré sommable, puisque:

$$\int_0^\infty |\omega_1(r,\lambda)|^2\ dr \text{ converge.}$$

Dans ces conditions, nous pouvons dire que la fonction $M_1(\lambda)$ est négative et nulle, c'est-à-dire que :

$$M_1(\lambda) = \int_0^\infty \omega_1(r,\lambda)\ L\ \omega_1(r,\lambda)\ dr = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int_0^\infty \omega_1(r,\lambda)\ H\ \omega_1(r,\lambda)\ dr \leqslant 0 \quad (3.11).$$

et ceci est vrai quel que soit λ positif.

Il reste à montrer que l'inégalité (11) est encore exacte si le paramètre λ est nul . Il suffit pour cela de démontrer que la fonction $M_1(\lambda)$ est une fonction continue de λ , c'est-à-dire que :

$$\lim_{\lambda \to 0} M_1(\lambda) = M_1(o)$$

Considérons l'expression $M_1(\lambda) - M_1(o)$, et calculons sa valeur:

$$M_1(\lambda) - M_1(o) = \int_0^\infty \omega_1(r\lambda)\, L\omega_1(r\lambda)dr - \int_0^\infty \omega_1(r)\, L\,\omega_1(r)\, dr$$

$$= \int_0^\infty \omega_1(r)\, e^{-\lambda r}\left[\frac{d^2}{dr^2} + W(r)\right]\omega_1(r)e^{-\lambda r}dr - \int_0^\infty \omega_1(r) L\,\omega_1(r)dr$$

En tenant compte de la dérivée seconde, il vient que:

$$M_1(\lambda) - M_1(o) = \int_0^\infty \omega_1(r)\left(e^{-2\lambda r} - 1\right) L\,\omega_1(r)\, dr + \lambda^2 \int_0^\infty \omega_1^2(r) e^{-2\lambda r} dr$$

$$- 2\lambda \int_0^\infty \omega_1(r)\, \omega'_1(r)\, e^{-2\lambda r}\, dr.$$

Calculons la limite de cette expression pour $\lambda \to 0$:

$$\lim_{\lambda \to o}\left[M_1(\lambda) - M_1(o)\right] = \lim_{\lambda \to o} \int_0^\infty \omega_1(r)\left[e^{-2\lambda r} - 1\right] L\,\omega_1(r)\, dr$$

$$+ \lim_{\lambda \to o} \lambda^2 \int_0^\infty \omega_1^2(r)\, e^{-2\lambda r}\, dr - \lim_{\lambda \to o} 2\lambda \int_0^\infty \omega_1(r)\omega'_1(r)\, e^{-2\lambda r}\, dr.$$

Dans la première intégrale du second membre, il faut, pour pouvoir passer à la limite sous la signe d'intégration, appliquer le théorème de Lebesgue. C'est-à-dire qu'il faut que l'intégrant $[\omega_1(r)\,(e^{-2\lambda r} - 1) L\,\omega_1(r)]$ tende vers zéro en restant majoré par une fonction F, intégrable dans $[o, \infty]$ et indépendante de λ . Or il en est bien ainsi puisque pour $\lambda \geqslant 0$, on a :

$$\omega_1(r)\left(e^{-2\lambda r} - 1\right) L\omega_1(r) < \omega_1(r)\, L\,\omega_1(r) \in L_1\,[o, \infty].$$

D'où:

$$\lim_{\lambda\to 0}\int_0^\infty \omega_1(r)\left(e^{-2\lambda r}-1\right) L\,\omega_1(r)\,dr$$

$$=\int_0^\infty \lim_{\lambda\to 0}\left[\omega_1(r)\left(e^{-2\lambda r}-1\right)\right] L\,\omega_1(r)\,dr = 0$$

En procédant de même dans la troisième intégrale, nous avons que:

$$\lim_{\lambda\to 0}\left[2\lambda\,\omega_1(r)\,\omega'_1(r)e^{-2\lambda r}\right] = 0 \text{ avec}$$

$$2\lambda\,\omega_1(r)\omega'_1(r)\,e^{-2\lambda r}\;\omega_1(r)\omega'_1(r) \in L_1\left[0,\infty\right]$$

d'où : $$\lim_{\lambda\to 0} 2\lambda\int_0^\infty \omega_1(r)\,\omega'_1(r)\,e^{-2\lambda r}\,dr$$

$$=\int_0^\infty \lim_{\lambda\to 0}\left(2\lambda\,\omega_1(r)\;\omega'_1(r)\,e^{-2\lambda r}\right)dr = 0.$$

Dans la seconde intégrale, nous ne pouvons pas appliquer le théorème de Lebesgue car $\omega_1^2(r) \notin L_1\left[0,\infty\right]$. Mais nous pouvons cependant montrer que:

$$\lim_{\lambda\to 0}\lambda^2\int_0^\infty e^{-2\lambda r}\,\omega_1^2(r)\,dr = \lim_{\lambda\to 0}\left[\lambda \lim_{r\to\infty}\omega_1^2(r)\right] = \lim_{\lambda\to 0}\lambda C_1 = 0$$

En effet, posons dans l'intégrale: $\lambda r = y$, il vient que:

$\lim_{\lambda\to 0}\lambda\int_0^\infty e^{-2y}\,\omega_1^2\left(\frac{y}{\lambda}\right)dy$. Et en appliquant le théorème de B.Lévi, nous constatons que, puisque $\left\{e^{-2y}\,\omega_1^2\left(\frac{y}{\lambda}\right)\right\}$ est une suite croissante de fonctions intégrables quand $\lambda\to 0$, nous avons alors:

$e^{-2y}\,\omega_1^2\left(\frac{y}{\lambda}\right) \leq C_2 e^{-2y} \in L_1\left[0,\infty\right]$ où $C_2 > C_1$; nous pouvons dès lors passer à la limite sous le signe d'intégration et il vient:

$$\lim_{\lambda\to 0}\lambda\int_0^\infty e^{-2y}\,\omega_1^2\left(\frac{y}{\lambda}\right)dy = \lim_{\lambda\to 0}\lambda\;C_1 = 0$$

Chacun des termes devient aussi petit que l'on veut quand $\lambda \to 0$,

d'où : $\lim_{\lambda \to 0} M_1(\lambda) = M_1(o)$

Et puisque $M_1(\lambda)$ est négative ou nulle pour $\lambda > 0$

nous avons aussi : $M_1(o) \leq 0$

c'est-à-dire que $\int_0^\infty \omega_1(r)\, L\, \omega_1(r)\, dr \leq 0$ (3.12).

Introduisons ce résultat dans l'identité de Kato, nous obtenons l'inégalité :

$$a \leq a_t - \int_0^\infty u_{1t}\, Lu_{1t}\, dr \qquad (3.13)$$

de laquelle nous pouvons tirer une borne supérieure de la valeur réelle de la longueur de collision.

Puisque a_t et u_{1t} $(c_1 \ldots c_n)$ sont arbitraires, le second membre de l'inégalité (3.13) se présente comme une fonction dépendant de (n+1) paramètres indéterminés, soit

$$a_t - \int_0^\infty u_{1t}\, L\, u_{1t}\, dr = F\,(a_t, c_1 \ldots c_n)$$

Le minimum de $F(a_t, c_1 \ldots c_n)$ est dès lors la meilleure borne supérieure de la longueur de collision, et celui-ci s'obtient par un processus de calcul variationnel.

1). Utilisons d'abord la méthode variationnelle de Kohn.

La valeur de Q est définie dans ce cas par:

$$Q = a_t - I_1. \qquad \text{où } I_1 = \int_0^\infty u_{1t}\, L\, u_{1t}\, dr \quad (3.14).$$

Exprimons que la variation première de Q est nulle, soit:

$$\delta Q = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial Q}{\partial c_i}\, \delta c_i + \frac{\partial Q}{\partial a_t}\, \delta a_t = 0$$

ce qui revient à résoudre le système de (n + 1) équations à (n + 1) inconnues :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial a_t} = 0 \\[2ex] \dfrac{\partial Q}{\partial c_i} = 0 \quad \text{pour } i = 1, 2, \ldots n. \end{cases} \qquad (3.15)$$

Après introduction dans $Q\,(a_t, c_1 \ldots c_n)$, des valeurs obtenues pour les (n+ 1) paramètres, nous obtenons la valeur extremum de Q; nous ne

pouvons distinguer entre maximum et minimum, puisque la variation seconde de Q est nulle.

2). En utilisant la méthode de Hulthen, nous considérons l'intégrale:

$$I_1 = \int_0^\infty u_{1t} \, L u_{1t} \, dr = I_1 \, (a_t \, c_1 \ldots c_n).$$

Pour obtenir les paramètres inconnus, nous résolvons le système:

$$\begin{cases} I_1 = 0 \\ \dfrac{\partial I_1}{\partial c_i} = 0 \qquad \text{pour } i=1,\ldots n \end{cases} \qquad (3.16).$$

le calcul des paramètres fournit donc l'extrémum de I_1 et par suite une borne supérieure pour la longueur de collision.

3). Pour utiliser la méthode variationnelle de Rubinow, nous devons d'abord introduire la fonction d'onde interne $y(r)$:

Posons $u_{1t}(r) = -a_t \, y(r) + a_t - r$ (3.17).

où $y(r)$ vérifie les conditions limites:

$$\begin{cases} y\,(o) = 1 \\ y\,(r) = 0 \quad \text{pour } r \to \text{infini} \end{cases} \qquad (3.17').$$

La fonction d'onde interne est évidemment indépendante de a_t, puisque cette constante n'intervient que dans le comportement asymptotique des fonctions d'onde, or celui de $y(r)$ est nul.

Exprimons alors l'inégalité (3.13) en termes de la fonction d'onde interne:

$$a \leqslant a_t - \int_0^\infty (-a_t \, y + a_t - r) \left[\frac{d^2}{dr^2} + W(r)\right] (-a_t \, y(r) + a_t - r) \, dr$$

$$a \leqslant a_t - \int_0^\infty (-a_t \, y + a_t - r)^2 \, W(r) \, dr + a_t \int_0^\infty (-a_t \, y + a_t - r) \frac{d^2 y}{dr^2} \, dr.$$

Intégrons la seconde intégrale par parties, il vient que:

$$a \leqslant a_t - \int_0^\infty W(r)\ (-a_t\ y + a_t - r)^2 dr + a_t^2 \left[\frac{dy}{dr}\right]_0^\infty - a_t^2 \left(y\ \frac{dy}{dr}\right)_0^\infty$$

$$+ a_t^2 \int_0^\infty \left(\frac{dy}{dr}\right)^2 dr - a_t \left[r\ \frac{dy}{dr}\right]_0^\infty + a_t \left[y\right]_0^\infty .$$

$$a \leqslant a_t - \int_0^\infty W(r)\ (a_t^2\ y^2 + a_t^2 + r^2 + 2a_t\ ry - 2a_t^2\ y - 2\ a_t r)\ dr$$

$$+ a_t^2 \int_0^\infty \left(\frac{dy}{dr}\right)^2 dr - a_t .$$

Cette inégalité peut encore s'écrire:

$$a \leqslant A_B - 2\ a_t\ B - a_t^2\ C \qquad (3.18).$$

où on a posé:

$$\begin{cases} A_B = -\int_0^\infty W\ r^2\ dr \\ B = \int_0^\infty W.r.(y - 1)\ dr \\ C = \int_0^\infty \left[-\left(\frac{dy}{dr}\right)^2 + W\ (y - 1)^2\right]\ dr \end{cases} \qquad (3.19).$$

A_B correspond à l'approximation de Born dans le cas où l'énergie est nulle.

A partir de (3.18) , il est donc possible d'obtenir une borne supérieure pour la longueur de collision. Dans ce but, nous déterminons a_t variationnellement à partir du trinôme

$$A_B - 2\ a_t B - a_t^2\ C.$$

Le trinôme est extremum pour $a_t = -\frac{B}{C}$, et la valeur de l'extremum est:

$$\frac{A_B C + B^2}{C} .$$

d'où nous avons: $$a \leqslant \frac{A_B C + B^2}{C} \qquad (3.20).$$

Contrairement aux méthodes de Kohn et Hulthen, il est parfois possible de distinguer entre maximum et minimum.
Il s'agira d'un maximum si $C > 0$
d'un minimum si $C < 0$

Dans le cas où C est positif, nous avons que $\frac{B^2}{C}$ est positif, d'où
$$a \leqslant A_B \qquad (3.20').$$

Cette inégalité signifie que l'approximation de Born fournit une borne supérieure de la longueur de collision.

4). Nous ne faisons pas appel ici à la méthode de Schwinger puisque c'est de cette méthode que s'est exclusivement servi Kato dans l'étude des bornes supérieures et inférieures des constantes de phase.

En utilisant trois méthodes variationnelles, nous avons évidemment obtenu trois bornes supérieures différentes.
Par conséquent, il s'agit de trouver laquelle de ces méthodes apporte le meilleur résultat. En général, il n'est pas possible de le savoir directement: cependant pour des types de problèmes comme celui de la diffusion à énergie nulle, sans états liés, nous pouvons apporter quelques précisions.
Comparons d'abord les méthodes variationnelles de Hulthen et de Kohn.

Des deux expressions étudiées de part et d'autre, I_1 et Q, celle de Kohn est la plus complète, puisque Q comprend tout le second membre de l'inégalité (3.13), alors que I_1 n'en est qu'une partie. En outre, Q est certainement bornée inférieurement par la valeur réelle de la longueur de collision puisque $a \leqslant Q$, ce qui n'est pas le cas pour I_1 puisque $a \leqslant a_t - I_1$.
Ceci signifie, que pour une valeur donnée de la fonction d'essai, les paramètres calculés à partir du système (3.15) fournissent la plus petite valeur possible pour Q.

Remarquons que si $u_{1t}(r)$ n'est pas une fonction linéaire des

paramètres, nous obtiendrons plusieurs solutions pour ceux-ci, en résolvant le système (3.15) ; nous adopterons dans ce cas, les valeurs des c_i telles que Q ait la valeur minimum.

Supposons que l'on ait calculé Q à l'aide d'une première fonction $u_{1t}(r)$, soit Q_1, la valeur obtenue; et que l'on recommence alors les calculs à l'aide d'une seconde fonction $u'_{1t}(r)$, plus simple que $u_{1t}(r)$, et telle que pour des valeurs particulières des paramètres, $u_{1t}(r)$ coincide avec $u'_{1t}(r)$; soit Q_2 la valeur obtenue. Dans ce cas, nous pouvons comparer Q_1 à Q_2 et éventuellement améliorer la première limite supérieure Q_1.

Les deux dernières remarques sont également valables pour la méthode de Hulthen . Mais par le fait que I_1 n'est pas bornée inférieurement, a_t étant un paramètre arbitraire, choisi supérieur ou inférieur à la longueur de collision, nous concluons que l'utilisation de la méthode de Kohn sera généralement préférable à celle de Hulthen.

Quant à la méthode de Rubinow, nous ne pouvons pas savoir à priori si elle est préférable à celle de Kohn. Elle présente pourtant sur cette dernière un avantage, c'est que l'on peut parfois distinguer entre maximum et minimum. Dans le cas du minimum, la borne supérieure de la longueur de collision est donnée par l'approximation de Born.(3.20').

§3. ETUDE DE LA SECONDE IDENTITE DE KATO.

$$-a^{-1} = -a_t^{-1} - \int_0^\infty u_{2t}\, L\, u_{2t}\, dr + \int_0^\infty \omega_2(r)\, L\, \omega_2(r)\, dr \qquad (3.7).$$

Remarquons comme précédemment que si $\int_0^\infty \omega_2(r)\, L\, \omega_2(r)\, dr$ est négligée dans l'égalité (7), il restera dans le second membre une expression qui peut conduire à un principe variationnel pour l'inverse de la longueur de collision. Mais contrairement à la première identité, il n'est plus possible de déterminer le signe de l'intégrale et par conséquent le sens de l'inégalité.

$$-a^{-1} \leqslant -a_t^{-1} - \int_0^\infty u_{2t}(r)\, L\, u_{2t}(r)\, dr.$$

En effet, pour obtenir le signe de l'intégrale $\int_0^\infty \omega_2(r)\, L\, \omega_2(r) dr$, il faut montrer que $\omega_2(r)$ est de carré sommable, c'est-à-dire que $\int_0^\infty |\omega_2(r)|^2\, dr$ converge.

Or pour la valeur asymptotique de $\omega_2(r)$, cette intégrale est divergente, car $\omega_2(r)$ est indéterminée pour r tendant vers l'infini. En raisonnant comme dans le premier cas, nous choisissons la fonction

$$\omega_2(r\lambda) = \omega_2(r)\, e^{-\lambda r}, \quad \lambda > o \qquad (3.21).$$

et cette fonction et de carré sommable.

Il en résulte que la fonction $M_2(\lambda)$ est négative ou nulle, soit:

$$M_2(\lambda) = \int_0^\infty \omega_2(r\lambda)\, L\, \omega_2(r\lambda)\, dr = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty \omega_2(r\lambda)\, H\, \omega_2(r\lambda)\, dr \leqslant 0$$

quelque soit $\lambda > 0$.

Pour que cette inégalité soit encore valable pour $\lambda = 0$, il faut que $M_2(\lambda)$ soit une fonction continue de λ, soit que :

$$\lim_{\lambda \to o} M_2(\lambda) = M_2(o)$$

Calculons l'expression $M_2(\lambda) - M_2(o)$, nous obtenons:

$$M_2(\lambda) - M_2(o) = \int_o^\infty \omega_2(r) \left[e^{-2\lambda r} - 1\right] L\,\omega_2(r)\,dr + \lambda^2 \int_o^\infty \omega_2^2(r)\, e^{-2\lambda r}\,dr$$

$$- 2\lambda \int_o^\infty \omega_2(r)\,\omega'_2(r)\, e^{-2\lambda r}\,dr.$$

Prenons-en la limite, nous avons que:

$$\lim_{\lambda\to o}\left[M_2(\lambda) - M_2(o)\right] = \lim_{\lambda\to o}\int_o^\infty \omega_2(r)\left[e^{-2\lambda r} - 1\right] L\,\omega_2(r)dr$$

$$+ \lim_{\lambda\to o} \lambda^2 \int_o^\infty \omega^2_2(r)\, e^{-2\lambda r}\,dr - \lim_{\lambda\to o} 2\lambda \int_o^\infty \omega_2(r)\,\omega'_2(r)\, e^{-2\lambda r}\,dr.$$

Mais ici, nous ne pouvons plus passer à la limite sous le signe d'intégration, car dans le premier cas, par exemple, l'intégrant n'est plus majoré par une fonction intégrable dans $[o,\infty]$ et indépendante de λ : en effet, $\omega_2(r)$ est indéterminée à l'infini,

$$\omega_2(r)\; L\omega_2(r) \notin L_1[(0,\infty)] .$$

Ceci montre bien que le choix de la fonction d'onde est essentiel dans la détermination de la borne supérieure.

Remarquons cependant, que $\omega_2(r) \equiv r$ appartient à la classe des fonctions qui contient $\omega_2(r)$, puisque r vérifie les mêmes conditions limites que $\omega_2(r)$. Introduisons cette fonction particulière dans l'expression (7), nous avons:

$$- a^{-1} = - a_t^{-1} - \int_o^\infty u_{2t}\; L\,u_{2t}\,dr + \int_o^\infty r\,L\,r\,dr$$

$$- a^{-1} = -a_t^{-1} - \int_o^\infty u_{2t}\; L\,u_{2t}\,dr + \int_o^\infty r^2\,W(r)\,dr$$

or: $\displaystyle\int_o^\infty r^2\,W(r)\,dr = \int_o^b r^2\,W(r)\,dr + \int_b^\infty r^2\,W(r)\,dr$; où b est la portée des forces nucléaires.

Chacune des deux dernières intégrales peut être négligée, en effet:

1- $\int_0^b r^2 W(r)\, dr$ est négligeable puisque la portée des forces nucléaires est très petite

2- $\int_b^\infty r^2 W(r)\, dr$ est aussi négligeable puisque pour $r > b$, $W(r) \to 0$.

Nous obtenons dès lors l'approximation:

$$a^{-1} \approx a_t^{-1} + \int_0^\infty u_{2t}\ L\, u_{2t}\, dr \qquad (3.22).$$

dont on ne peut tirer aucunes limites, supérieure ou inférieure, de a^{-1}.

Interprétons cette approximation, en termes de la fonction $y(r)$.

Nous posons : $u_{2t}(r) = -\, y(r) + 1 - \frac{r}{a_t}$ (3.23).

où $y(r)$ peut évidemment différer de la fonction $y(r)$ introduite dans $u_{1t}(r)$.

Après introduction de (23) dans (22) ,nous obtenons:

$$a^{-1} \approx a_t^{-1} + \int_0^\infty \left(-y+1 - \frac{r}{a_t}\right) \left(\frac{d^2}{dr^2} + W\right) \left(-\, y + 1 - \frac{r}{a_t}\right) dr$$

$$a^{-1} \approx a_t^{-1} - \int_0^\infty \left(-y + 1 - \frac{r}{a_t}\right) \frac{d^2y}{dr^2}\, dr + \int_0^\infty W(r) \left(-y + 1 - \frac{r}{a_t}\right)^2 dr$$

Intégronspar parties, il vient que:

$$a^{-1} \approx a_t^{-1} - \int_0^\infty \left(\frac{dy}{dr}\right)^2 dr + \int_0^\infty W\left(-y + 1 - \frac{r}{a_t}\right)^2 dr - a_t^{-1} (y)_0^\infty$$

Soit : $a^{-1} \approx C + 2\, a_t^{-1}(B+1) - a_t^{-2}\ A_B$ (3.24).

où C, B, A_B sont définis par (19).

L'extremum du trinôme a lieu pour $a_t^{-1} = \frac{(B+1)}{A_B}$, la valeur de l'extremum est donc:

$$a^{-1} \approx A_B^{-1} (B+1)^2 + C \qquad (3.24').$$

Remarquons que (24') correspond à la quatrième formulation de la méthode variationnelle de Rubinow, dans le cas où l'énergie est nulle.

En résumé, la seconde identité de Kato n'apporte aucun résultat précis quant à la valeur réelle de la longueur de collision; puisque l'approximation (22) n'est très bonne que dans le cas où la portée des forces nucléaires est extrêmement petite.

Il peut arriver dans certains cas particuliers, que la rapidité des calculs soit préférable à une précision finale rigoureuse; nous pouvons alors nous servir du résultat suivant.

$$a \leqslant a_t (1 - a_t I_2) \qquad (3.25).$$

relation qui se simplifie en : $a \leqslant a_t$ si $\begin{cases} a_t > 0 \\ |a_t I_2| \ll 1 \end{cases}$

(25) s'obtient comme suit :

nous posons

$$I_2 = \int_0^\infty u_{2t} L u_{2t} \, dr$$

$$u_{1t} = a_t u_{2t}(r) = a_t \left(1 - \frac{r}{a_t}\right) = a_t - r.$$

Après introduction de la valeur de $u_{2t}(r)$ dans I_2, nous avons:

$$a_t^2 I_2 = \int_0^\infty u_{1t} L u_{1t} \, dr$$

Or: $a \leqslant a_t - \int_0^\infty u_{1t} L u_{1t} \, dr$

Remplaçons l'intégrale par sa valeur , nous obtenons:

$a \leqslant a_t - a_t^2 I_2$, soit l'inégalité (3.25).

§4. GENERALISATION A DES MOMENTS ANGULAIRES DIFFERENTS DE ZERO

Dans le cas où les particules du système possèdent un moment angulaire l, différent de zéro, le comportement asymptotique de la fonction d'onde est caractérisé par un paramètre A_l, qui correspond à la longueur de collision dans le cas où $l = 0$, mais n'a plus cette fois les dimensions d'une longueur.

Nous allons donc reprendre l'étude précédente et la généraliser à des particules de moment angulaire l quelconque.
Nous supposerons encore qu'il n'existe pas d'états liés.

L'équation de Schrödinger s'écrit comme suit:

$$L\, u_l(r) = \left[\frac{d^2}{dr^2} + W(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = 0 \qquad (3.26).$$

Et la valeur asymptotique de $u_l(r)$ vérifie l'équation:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] u_l(r) = 0 \qquad (3.26').$$

Cherchons la solution de cette équation:
Dans ce but, on pose $\frac{1}{r} = t$ et on effectue la transformation, soit:

$$t^2 \frac{d^2 v_l}{dt^2} + 2t \frac{dv_l}{dt} - l(l+1)\, v_l = 0 \quad \text{où } v_l = v_l(t).$$

Dans les conditions d'application du théorème de Fuchs, on constate que $t = 0$ est un point singulier régulier de l'équation en la variable t.
On pose alors : $v = t^\theta$, et on introduit t^θ dans l'équation, on obtient l'équation déterminante: $\theta(\theta + 1) - l(l+1) = 0$

dont les racines sont: $\theta = \dfrac{-1 \pm \sqrt{1 + 4\, l\, (l+1)}}{2}$

Nous avons donc la solution : $v_l = C_1 t^l + C_2 t^{-(l+1)}$ pour $t \to 0$

ou encore : $u_l = C_1 r^{-l} + C_2\, r^{l+1}$ pour $r \to$ infini

Si nous posons $\begin{cases} C_1 = \dfrac{A_l}{2\,l+1} \\ C_2 = -1 \end{cases}$ nous avons que:

$$u_l(r) \to -r^{l+1} + \frac{A_l}{2\,l+1}\, r^{-l} \quad \text{pour} \quad r \to \text{infini} \quad (3.27).$$

Pour $l = 0$, on a bien $u(r) \to r - a$.

De plus $u_l(r)$ est telle que $u_l(o) = 0$.

Choisissons une fonction d'essai, soit $u_t(r)$, elle est telle que:

$$\begin{cases} u_t(o) = 0 \\ u_t(r) \to -r^{l+1} + \dfrac{A_{lt}}{2\,l+1}\, r^{-l} \quad \text{pour} \quad r \to \text{infini} \end{cases} \quad (3.28).$$

où A_{lt} est une constante arbitraire.

L'identité de Kato s'écrit dans ce cas:

$$A_l = A_{lt} - \int_0^\infty u_t\, L\, u_t\, dr + \int_0^\infty \omega\, L\, \omega\, dr \quad (3.29).$$

où $\omega = u_t - u$

Comme dans le cas où $l = 0$, on obtient l'identité de Kato en partant de l'expression $K = \int_0^\infty (u\, L\, u_t - u_t\, L\, u)\, dr$, que l'on calcule de deux façons différentes.

1. $\int_0^\infty u_t\, L\, u\, dr = 0$ puisque $u(r)$ est solution de l'équation (3.26).

d'où $K = \int_0^\infty u\, Lu_t\, dr$.

2. $\int_0^\infty u\, L\, u_t\, dr - \int_0^\infty u_t L\, u\, dr = \left[u\dfrac{du_t}{dr} - \dfrac{du}{dr}\, u_t\right]_0^\infty + \int_0^\infty u_t\, L\, u\, dr - \int_0^\infty u_t\, L\, u\, dr$

d'où $K = A_{lt} - A_l$.

par conséquent: $A_{lt} - A_l = \int_0^\infty u\, L\, u_t\, dr$

qui peut s'écrire: $A_l = A_{lt} \int_0^\infty u_t\, L\, u_t\, dr + \int_0^\infty \omega\, L\, \omega\, dr$

En vertu du comportement asymptotique de $\omega\,(r)$, nous constatons qu'il s'agit d'une fonction d'onde de carré sommable, en effet:

$$\omega\,(r) \to \frac{r^{-l}}{2\,l+1}\,(A_{lt} - A_l) \quad \text{pour} \quad r \to \text{infini}.$$

Nous pouvons donc affirmer que :

$$\int_0^\infty \omega(r)\, L\, \omega(r)\, dr = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \int_0^\infty \omega(r)\, H\, \omega(r)\, dr \leq 0 \qquad (3.30).$$

et ce , quel que soit $l > 0$.

Il n'y a donc que dans le cas ou $l = 0$, que $\omega(r)$ n'est pas de carré sommable, et que l'on doit recourir à $\omega(r\lambda)$ pour déterminer le signe de l'intégrale : $\int_0^\infty \omega\, L\, \omega\, dr$

Introduisons l'inégalité (30) dans (29) , nous avons que:

$$A_l \leqslant A_{lt} - \int_0^\infty u_{lt}\, L\, u_{lt}\, dr \qquad (3.31).$$

De nouveau, si l'on modifie le comportement asymptotique de $u(r)$, c'est-à-dire si on le prend tel que:

$u(r) \to -(2l+1)\, A_l^{-1}\, r^{l+1} + r^{-l}$ pour $r \to$ infini, il n'est plus possible de déterminer une inégalité, car la valeur asymptotique de $\omega(r)$ n'est pas de carré sommable.

Cependant en prenant une fonction $\omega(r)$ particulière, soit $\omega(r) = r^{l+1}$, nous avons que:

$$\int_0^\infty r^{l+1}\, L\, r^{l+1}\, dr = \int_0^\infty W(r) \,.\, r^{2l+2}\, dr.$$

Et si b, la portée des forces nucléaires est suffisamment petite, cette intégrale est négligeable et l'identité de Kato:

$$-A_l^{-1} = -A_{lt}^{-1} - \int_0^\infty u_t\, L\, u_t\, dr + \int_0^\infty \omega\, L\, \omega\, dr \qquad (3.29').$$

s'écrit dans ce cas particulier:

$$A_l^{-1} \approx A_{lt}^{-1} + \int_0^\infty u_t\, L\, u_t\, dr \qquad (3.31').$$

En résumé, dans le cas de la diffusion dans un champ de potentiel statique, où il n'existe pas d'états liés, et quelle que soit

la valeur du moment angulaire orbital l , des particules, nous pouvons obtenir une limite supérieure de la valeur réelle de la longueur de collision, en utilisant une des trois méthodes variationnelles : Kohn , Hulthen ou Rubinow; mais en sachant que la méthode de Kohn est généralement la plus précise.

Nous généraliserons cette étude dans les deux cas suivants:

1- le diffuseur et un système composé.
2- le potentiel est tel qu'il existe des états liés.

CHAPITRE IV

CAS OU LE DIFFUSEUR EST UN SYSTEME COMPOSE

§1. CARACTERISTIQUES DU SYSTEME COMPOSE

Nous considérons un système très général formé de la façon suivante:

le diffuseur comprend Z protons et N neutrons,
le faisceau incident comprend un neutron,

et nous nous limiterons encore au cas où:

1. La diffusion est élastique, c'est-à-dire qu'après diffusion, le diffuseur et les particules diffusées restent dans le même état interne, dès lors le neutron diffusé peut être différent du neutron incident. (si un proton sortait du nucléon après le choc, il y aurait réaction nucléaire, donc diffusion inélastique).

2. il n'existe pas d'états liés, par conséquent, le comportement asymptotique de la fonction d'onde est caractérisé par un paramètre réel:
   η : la constante de phase si $E \neq 0$.
   A : la longueur de collision si $E = 0$.

Dans ces conditions , recherchons les caractéristiques du système.

1. Soit une énergie arbitraire de diffusion, celle-ci est une combinaison de l'énergie du nucléon dans son état fondamental et de l'énergie du neutron incident:

$$E = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \qquad (4.1).$$

où E_g est l'énergie du nucléon.

$\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = \frac{p^2}{2\mu}$ est l'énergie du neutron; μ étant la masse réduite d'un neutron par rapport au reste du système.

2. Ce système possède un moment angulaire total J , combinaison du moment angulaire total I du nucléon et du moment de spin du neutron; or I est lui-même la somme des moments de spin ($\vec{s}$) de ses (Z + N) constituants et du moment angulaire ($\vec{l}$) du mouvement orbital dans le nucléon

$$\vec{I} = \vec{l} + \vec{s} \qquad (4.2).$$

et $J_z = I_z + \frac{1}{2}$ si oz est la direction de l'incidence.

3.Le phénomène de diffusion d'un neutron par un nucléon, s'accompagne d'une émission de rayons gamma. Nous ne tenons pas compte ici de ce champ de radiation; si nous en tenions compte, il ne s'agirait plus d'une diffusion élastique.

Enfin, nous considérons ici des neutrons et des protons, nous pourrions tout aussi bien étudier, par exemple, la diffusion d'électrons par des atomes neutres, en tenant compte bien entendu des forces de Coulomb. Cependant, l'interaction entre la particule diffusée et le diffuseur devenant rapidement négligeable, nous pourrions encore définir dans ce cas une constante de phase. Puisque nous voulons trouver une borne supérieure de la longueur de collision, généralisons l'identité de Kato(3.6) pour le système plus complexe que nous étudions.

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$-\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right) \quad (T + V - E)\,\psi = \Lambda\psi = 0 \qquad (4.3).$$

où T est l'opérateur d'énergie cinétique du système.

V est l'opérateur d'énergie potentielle du système.

E est l'énergie totale donnée par (1).

Or le système comprend d'une part, Z particules identiques(protons), et d'autre part, (N + 1) particules identiques(neutrons), dès lors la fonction d'onde ψ doit être telle que:

$$\psi = \sum_j (-1)^j \psi_j \qquad \text{pour } j = 1 --- Z \qquad (4.4).$$

$$\psi = \sum_i (-1)^i \psi_i \qquad \text{pour } i = Z + 1 --- Z + N + 1 \quad (4.4').$$

car en vertu du principe de Pauli, les fonctions d'onde admissibles pour les fermions, sont nécessairement antisymétriques. Mais puisqu'il s'agit d'une diffusion élastique , nous ne tiendrons compte que de l'antisymétrie sur les neutrons (4').

Par conséquent:

a) $\psi_{Z+N+1} = \psi(1...Z;\ Z + 1,...Z+ N + 1)$ n'est pas univoquement déterminée par la connaissance des ψ_i, on pourra toujours lui ajouter une quantité $\Delta\psi_{Z+N+1}$ telle que $\sum_i (-1)^i \Delta\psi_i = 0$

b) pour obtenir ψ_i à partir de ψ_{i+1}, il suffit d'interchanger les coordonnées des i ème et (i+1)ème neutron.

Remplaçons l'équation (3) par l'équation radiale correspondante, soit: $-\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)(T + V - E)\varphi = \Lambda\varphi = 0$

où $\varphi = \sum_i (-1)^i \varphi_i$ et $\psi_i = \frac{\varphi_i}{q_i}$, si q_i est la distance du ième neutron à une des (Z+N) autres particules.

Posons encore:

$$F_i = F_i(1....Z;\ Z+1,....(i-1),\ (i+1),...Z+N+1) \qquad (4.5).$$

La fonction F_i décrit l'état du système dont le ième neutron est à l'infini, elle caractérise donc le système après le choc, et intervient dès lors dans le comportement asymptotique de la fonction radiale φ_i F_i est telle que $F_i = \alpha_i \mathfrak{F}_i$ et nous supposons que les fonctions $\mathfrak{F}_i$ sont normées.

Recherchons le comportement asymptotique de la fonction φ_i, celui-ci doit donc dépendre de la fonction F_i, et de la fonction de spin du ième neutron soit X(i).

Si D est une constante arbitraire, nous avons:

$$\varphi_i \to D\ X(i)\ F_i\ \frac{\sin(kq_i + \eta)}{\sin(\eta - \theta)} \quad \text{pour } q_i \to \text{infini}$$

où $\begin{cases} \eta \text{ est la constante de phase} \\ \theta \text{ est un paramètre de normalisation.} \end{cases}$

Dès lors, ψ_i est telle que:

$$\psi_i \to D\ X(i)\ F_i\ \frac{\sin(kq_i + \eta)}{q_i \sin(\eta - \theta)} \quad \text{pour } q_i \to \text{infini} \qquad (4.6).$$

Puisqu'une seule particule est diffusée, nous avons encore si $r_{m,n}$ désigne la distance entre les particules m et n que

$$\psi_i \to 0 \quad \text{pour } r_{m\,n} \to \text{infini} \qquad (4.6').$$

si $m,n \neq i$.

§2. GENERALISATION DE L'IDENTITE DE KATO.

Pour obtenir l'identité de Kato, nous partons de l'expression suivante:

$$K = \int_0^\infty \phi_t^* \Lambda \psi d\tau - \int_0^\infty \psi^* \Lambda \psi_t \, d\tau \qquad (4.7).$$

où $\int_0^\infty d\tau$ signifie que l'on intègre sur l'espace de configuration, mais en tenant compte en plus d'une sommation sur les spins, et ψ_t est une fonction d'essai vérifiant les conditions limites(6) et (6'). En vertu du principe de Pauli, la fonction d'essai peut aussi s'écrire:

$$\psi_t = \sum_i (-1)^i \psi_i \quad \text{pour } i = Z + 1 \ldots Z + N + 1. \qquad (4.8).$$

L'expression de K donnée par (7) se calcule de deux façons différentes:

a) Nous remarquons tout d'abord que $\int_0^\infty \psi_t^* \Lambda \psi \, d\tau = 0$ puisque ψ est une solution exacte de (3), il reste donc:

$$K = -\int_0^\infty \psi^* \Lambda \psi_t \, d\tau \qquad (4.9).$$

b) Introduisons dans K les expressions de ψ (4') et de ψ_t (8), nous avons:

$$K = \sum_i \sum_j \int_0^\infty \psi_{it}^* \Lambda \psi_j \, d\tau - \sum_j \sum_i \int_0^\infty \psi_j^* \Lambda \psi_{it} \, d\tau .$$

Il n'existe pas de surface à l'infini où deux fonctions différentes, ψ_i et ψ_j, par exemple, soient simultanément différentes de zéro, et de même pour les fonctions d'essai; dès lors, quand nous intégrerons par parties, lestermes pour lesquels $i \neq j$, n'apporteront aucune contribution en zéro et l'infini, nous pouvons donc écrire:

$$K = \sum_i \int_0^\infty \psi_{it}^* \Lambda \psi_i \, d\tau - \sum_i \int_0^\infty \psi_i^* \Lambda \psi_{it} \, d\tau$$

Nous intégrons par partie, car dans Λ intervient l'opérateur d'énergie cinétique qui s'écrit:

$$T = \frac{p^2}{2\mu} + t = -\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}\right) \sum_i \frac{d^2}{dq_i^2} + t$$

où t ne contient pas d'opérateur de dérivation.

V et E, l'énergie potentielle et l'énergie totale sont des nombres donnés, généralement, dans les hypothèses du problème.
Avec cette valeur de T, K s'écrit:

$$K = \Sigma_i \int_0^\infty \psi^*_{it} \frac{d^2}{dq_i^2} \psi_i \, d\tau - \sum_i \int_0^\infty \psi^*_i \frac{d^2}{dq_i^2} \psi_{it} \, d\tau .$$

Dans la première intégrale, nous intégrons deux fois par parties:

$$K = \sum_i \left[\psi^*_{it} \frac{d\psi_i}{dq_i} - \frac{d\psi^*_{it}}{dq_i} \psi_i \right]_0^\infty + \sum_i \int_0^\infty \left(\frac{d^2}{dq_i^2} \psi^*_{it} \cdot \psi_i - \psi^*_i \frac{d^2}{dq_i^2} \psi_{it} \right) d\tau .$$

Dans le second membre, l'intégrale s'annule; d'autre part puisque aucun des neutrons ne joue un rôle prépondérant, nous avons:

$$K = (N + 1) \left[\psi^*_{it} \frac{d\psi_i}{dq_i} - \frac{d\psi^*_{it}}{dq_i} \psi_i \right]_0^\infty .$$

Calculons cette parenthèse, en tenant compte des conditions limites (6) et (6') , et de la normalisation des fonctions $\mathcal{J}_i$ et X (i).

Nous obtenons:

$$K = (N + 1) D^2 \frac{k \sin(\eta_t - \eta)}{\sin(\eta - \theta) \sin(\eta_t - \theta)}$$

$$= (N + 1) D^2 k \left[\cot g(\eta - \theta) - \cot g(\eta_t - \theta) \right]$$

D est arbitraire, soit que $D^2 = (N + 1)^{-1}$, il vient alors:

$$K = k \left[\cot g(\eta - \theta) - \cot g(\eta_t - \theta) \right] \qquad (4.10).$$

En comparant les 2 valeurs de K [(9) et (10)] , nous obtenons:

$$k \cot g(\eta - \theta) = k \cot g(\eta_t - \theta) - \int_0^\infty \psi^*_t \Lambda \psi_t \, d\tau + \int_0^\infty \psi^* \Lambda \Omega \, d\tau \qquad (4.11).$$

où $\Omega = \psi_t - \psi$.

La relation (11) est donc bien l'identité de Kato généralisée au cas où le diffuseur est un système composé et où l'énergie de diffusion est arbitraire.

§3. RECHERCHE DE LA BORNE SUPERIEURE.

Pour trouver la borne supérieure de k cotg $(\eta - \theta)$, nous devons déterminer le signe de $\int_0^\infty \Omega^* \Lambda \Omega \, d\tau$.

Comme dans la première étude, cette intégrale peut s'écrire:

$$\int_0^\infty \Omega^* \Lambda \Omega \, d\tau = -\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right) \int_0^\infty \Omega^* (H - E) \Omega \, d\tau \qquad (4.12).$$

où H est un opérateur hermitien, et il en est de même de (H - E) (l'énergie H est positive car il n'existe pas d'états liés).

Or nous savons que l'opérateur hermitien n'est défini positif que pour les fonctions d'onde de carré sommable; c'est-à-dire que si Ω est une fonction de carré sommable dans $[o, \infty]$, nous pouvons affirmer que le second membre de (12) est négatif ou nul, et qu'il en est de même alors du premier membre, ce qui nous conduit à la borne supérieure de k cotg $(\eta - \theta)$.

Notons que $\int_0^\infty \Omega^* \Lambda \Omega d\tau = 0$, si seulement la fonction d'essai est identique à la fonction d'onde exacte.

Voyons si $\Omega \in L_2$. Cette fonction peut s'écrire:

$$\Omega = \sum_i (-1)^i \Omega_i \text{ : pour } i = (Z + 1) \ldots (Z + N + 1),$$

où Ω_i vérifie les conditions limites:

$$\Omega_i \to D\,X(i) \frac{F_i}{q_i} \left[\frac{\sin(kq_i + \eta_t)}{\sin(\eta_t - \theta)} - \frac{\sin(kq_i + \eta)}{\sin(\eta - \theta)}\right]$$

$$= D\,X(i) \frac{F_i}{q_i} \left[\frac{\sin(kq_i + \eta) - \sin(\eta - \eta_t)}{\sin(\eta_t - \theta)\sin(\eta - \theta)}\right] \text{ pour } q_i \to \infty$$

ou encore:

$$\begin{cases} \Omega_i \to \text{Constante. } D\,X(i)\, F_i \left\{\dfrac{\sin(kq_i + \theta)}{q_i} - \dfrac{C_1}{q_i}\right\} \text{ pour } q_i \to \infty \\ \Omega_i \to 0 \text{ pour } r_{mn} \to \infty \quad \text{si } m,n \neq i. \end{cases} \qquad (4.13).$$

Il s'en suit que la valeur asymptotique de Ω_i n'est pas de carré sommable, en effet: $\frac{\sin(kq_i + \theta)}{q_i}$ est intégrable en $q_i = 0$, mais pas à l'infini. Car si $\frac{\sin(kq_i + \theta)}{q_i}$ était dans L_1 ($[a, \infty]$) ($a > 0$) , alors en posant $kq_i = \frac{\pi}{2} - ky_i$, avec y_i rebaptisé q_i , la fonction $\frac{k\cos(kq_i + \theta)}{\frac{\pi}{2} - kq_i}$ serait aussi dans L_1 $[(a, \infty)]$, de même que la fonction $\frac{\cos(kq_i + \theta)}{q_i}$ puisque $\left|\frac{\cos(kq_i + \theta)}{q_i}\right| < \left|\frac{k\cos(kq_i + \theta)}{\frac{\pi}{2} - kq_i}\right|$.

Nous aurions alors que la fontion:

$$\frac{\sin(kq_i + \theta)}{q_i} \sin(kq_i + \theta) + \frac{\cos(kq_i + \theta)}{q_i} \cos(kq_i + \theta) = \frac{1}{q_i} \in L_1 \left[(a, \infty)\right],$$

ce qui n'est pas possible. De même $\frac{\sin^2(kq_i + \theta)}{q_i^2} \notin L_1 [0, \infty]$.

C'est pourquoi nous sommes amenés à considérer la fonction

$$\Omega(\lambda) = \Omega e^{-\lambda \sum_i q_i} \qquad (4.14),$$

où λ est un paramètre arbitraire, mais positif.

Dans ces conditions, la fonction $\Omega(\lambda)$ est de carré sommable et nous pouvons alors dire que la fonction $M(\lambda)$ est négative ou nulle pour $\lambda > 0$, c'est-à-dire que:

$$M(\lambda) = \int_0^{\infty *} \Omega^*(\lambda) \Lambda\Omega(\lambda) \, d\tau \leq 0 \qquad (4.15).$$

Il reste à montrer que l'inégalité (15) est encore exacte pour $\lambda = 0$; nous démontrons pour celà la continuité de la fonction $M(\lambda)$ par rapport au paramètre λ . Calculons l'expression $M(\lambda) - M(0)$.

$$M(\lambda) - M(0) = \int_0^{\infty} \Omega^*(\lambda) \Lambda\Omega(\lambda) \, d\tau - \int_0^{\infty} \Omega^* \Lambda \Omega \, d\tau \quad .$$

Calculons la première intégrale en tenant compte de ce que:

$$\Omega(\lambda) = \Omega e^{-\lambda\Sigma_i q_i} = \Sigma_i (-1)^i \Omega_i \; e^{-\lambda\Sigma_i q_i}$$

$$\Lambda \text{ op} = -\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)\left[T + V - E\right] = -\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_j^2 + t\right) + V - E\right].$$

Nous avons:

$$M(\lambda) = \int_0^\infty \Omega^* e^{-\lambda\Sigma_i q_i}\left\{-\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_j^2 + t\right) + V - E\right]\right\}\Omega e^{-\lambda\Sigma_i q_i} d\tau$$

$$M(\lambda) = \int_0^\infty \Omega^* e^{-\lambda\Sigma_i q_i}(\nabla_j^2)\Omega e^{-\lambda\Sigma_i q_i} d\tau + \int_0^\infty \Omega^* e^{-\lambda\Sigma_i q_i}\left[-\frac{2\mu}{\hbar^2}(t+V-E)\right]\Omega e^{-\lambda\Sigma_i q_i} d\tau$$

Or : $\nabla_j^2\left(\Omega e^{-\lambda\Sigma_i q_i}\right) = \left[\nabla_j^2\Omega + (N+1)\lambda^2\Omega - 2(N+1)\lambda\frac{\partial\Omega_j}{\partial q_j}\right] e^{-\lambda\Sigma_i q_i}$

où nous avons remplacé la somme sur tous les indices (i=Z+1...Z+N+1) des neutrons, par(N+1) puisque aucun d'eux ne joue un rôle prédominant.

Dès lors, nous obtenons:

$$M(\lambda) - M(0) = \int_0^\infty \Omega^*(e^{-2\lambda\Sigma_i q_i} - 1)\Lambda\Omega d\tau + (N+1)\lambda^2\int_0^\infty |\Omega|^2 e^{-2\lambda\Sigma_i q_i} d\tau$$

$$-(N+1)\,2\lambda\int_0^\infty \Omega^*\frac{\partial\Omega}{\partial q_j} e^{-2\lambda\Sigma_i q_i} d\tau \qquad (4.16).$$

Notons que cette expression peut aussi s'écrire:

$$M(\lambda) - M(0) = \int_0^\infty \Omega^*(e^{-2\lambda\Sigma_i q_i} - 1)\Lambda\Omega d\tau + (N+1)\lambda^2\int_0^\infty |\Omega|^2 e^{-2\lambda\Sigma_i q_i} d\tau$$

$$-(N+1)\,2\lambda\int_0^\infty (q_i\Omega^*)\frac{\partial(q_i\Omega)}{\partial q_j} e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}\frac{d\tau}{q_i^2} \qquad (4.16').$$

Nous calculons alors la limite de $M(\lambda)$ pour $\lambda \to 0$.

$$\lim_{\lambda\to o}\left[M(\lambda)-M(o)\right] = \lim_{\lambda\to o}\int_o^\infty \Omega^*\left[e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}-1\right]\Lambda\Omega\, d\tau$$

$$+\lim_{\lambda\to o}\lambda^2(N+1)\int_o^\infty|\Omega|^2 e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}\, d\tau - \lim_{\lambda\to o} 2\lambda(N+1)\int_o^\infty \Omega^*\frac{\partial\Omega}{\partial q_j} e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}\, d\tau$$

Afin de mieux marquer l'analogie avec le cas où le diffuseur ne comprend qu'une seule particule, décomposons les deux dernières intégrales de manière à faire apparaître les composantes de Ω , nous avons:

$$1.)\int_o^\infty|\Omega|^2 e^{-2\lambda\sum_i q_i}\, d\tau = \sum_i\int_o^\infty|\Omega_i|^2 e^{-2\lambda\Sigma_{i'} q_{i'}}\, d\tau + R$$

$$= (N+1)\int_o^\infty|\Omega_i|^2 e^{-2\lambda\Sigma_{i'} q_{i'}}\, d\tau + R$$

où R est une intégrale résultant des termes diagonaux et qui dès lors est finie quand $\lambda\to 0$.

$$2.)\int_o^\infty \Omega^*\frac{\partial\Omega}{\partial q_j} e^{-\lambda\Sigma_i q_i}\, d\tau = \sum_j\int_o^\infty \Omega_j^*\frac{\partial\Omega_j}{\partial q_j} e^{-\lambda\Sigma_{i'} q_{i'}}\, d\tau + R'$$

$$= (N+1)\int_o^\infty \Omega_j^*\frac{\partial\Omega_j}{\partial q_j} e^{-\lambda\sum_{i'} q_{i'}}\, d\tau + R'$$

En utilisant le théorème de H. Lebesgue, nous montrons, dans le cas de la première et de la troisième intégrale, que le passage à la limite sous le signe d'intégration est possible, en effet:

1) $\Omega^*\left[e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}-1\right]\Lambda\Omega \to 0$ quand $\lambda\to 0$, de plus,

$$\Omega^*\left[e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}-1\right]\Lambda\Omega < \Omega^*\Lambda\Omega \in L_1\ [o,\infty]$$

d'où $\lim_{\lambda\to o}\int_o^\infty \Omega^*\left[e^{-2\lambda\sum_i q_i}-1\right]\Lambda\Omega\, d\tau = \int_o^\infty \lim_{\lambda\to o}\Omega^*\left[e^{-2\lambda\Sigma_i q_i}-1\right]\Lambda\Omega\, d\tau = 0$

2) $2\lambda \overset{*}{\Omega}_j \dfrac{\partial \Omega_j}{\partial q_j} e^{-\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} \to 0$ quand $\lambda \to 0$, de plus

$$2\lambda \Omega_j^* \frac{\partial \Omega_j}{\partial q_j} e^{-\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} < \Omega_j^* \frac{\partial \Omega_j}{\partial q_j} \in L_1 \left[o, \infty\right]$$

d'où: $\lim\limits_{\lambda \to o} (N+1)^2 \, 2\lambda \displaystyle\int_o^\infty \Omega_j^* \frac{\partial \Omega_j}{\partial q_j} e^{-2\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} d\tau$

$$= (N+1) \int_o^\infty \lim_{\lambda \to o} 2\lambda \, \Omega_j^* \frac{\partial \Omega_j}{\partial q_j} e^{-2\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} d\tau = 0.$$

Dans le cas de la seconde intégrale, nous utilisons le théorème de B. Lévi et montrons que:

$$\lim_{\lambda \to o} (N+1)^2 \lambda \int_o^\infty \left| \Omega_i \right|^2 e^{-2\lambda \sum_{i'} q_{i'}} d\tau = \lim_{q_i \to \infty} \left| \Omega_i \right|^2$$

$$= \text{constante} \left| \chi(i) \frac{F_i}{q_i} \right|^2 \sin^2(kq_i + \theta) = \text{constante} \sin^2 (kq_i + \theta)$$

en procédant de la même façon que dans le cas du potentiel statique,

d'où: $\lim\limits_{\lambda \to o} (N+1) \lambda^2 \displaystyle\int_o^\infty \left| \Omega_i \right|^2 e^{-2\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} d\tau = 0$

et en passant à la limite sous le signe d'intégration, nous avons que:

$$\lim_{\lambda \to o} (N+1) \lambda^2 \int_o^\infty \left| \Omega_i \right|^2 e^{-2\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} d\tau = (N+1) \int_o^\infty \lim_{\lambda \to o} \lambda^2 \left| \Omega_i \right|^2 e^{-2\lambda \Sigma_{i'} q_{i'}} d\tau = 0$$

Par conséquent, quand $\lambda \to 0$, chacune des intégrales devient aussi petite que l'on veut et $\lim\limits_{\lambda \to o} M(\lambda) = M(0)$.

Ce qui entraîne que:

$$M(o) = \int_o^\infty \Omega^* \Lambda \, \Omega \, d\tau \leq 0. \qquad (4.17).$$

puisqu'il en est ainsi pour $M(\lambda)$.

Introduisons cette inégalité dans la relation (4.11), nous obtenons:

$$k \operatorname{cotg} (\eta - \theta) < k \operatorname{cotg} (\eta_t - \theta) + \int_o^\infty \psi_t^* \Lambda \, \psi_t \, d\tau \quad (4.18).$$

Par une méthode de calcul variationnel, nous pouvons dès lors obtenir une borne supérieure pour k cotg $(\eta - \theta)$. Dans le cas où l'énergie est nulle, nous aurons suivant les différentes valeurs de θ :

1. $\theta = 0$:

$$- A^{-1} < - A_t^{-1} + \lim_{k \to o} \int_o^{\infty} \psi_t^* \Lambda \psi_t \, d\tau$$

2. $\theta = \pi$: (4.18').

$$A^{-1} < A_t^{-1} + \lim_{k \to o} \int_o^{\infty} \psi_t^* \Lambda \psi_t \, d\tau$$

Dans le premier cas, nous aurons une borne inférieure de A^{-1}, ou une borne supérieure de A.

Dans le second cas , nous aurons une borne supérieure de A^{-1}.

§4. CAS PARTICULIER:DIFFUSION n-D.DANS L'ETAT QUARTET.

Supposons que les moments angulaires orbitaux soient respectivement:

$$\begin{cases} j = \frac{1}{2} \text{ pour le neutron} \\ j = o, \text{ ou } 1 \text{ pour le deutéron suivant que les spins sont antiparallèles ou parallèles.} \end{cases}$$

Nous constatons qu'il y a quatre manières différentes de combiner ces valeurs de j ; suivant ces différents types de combinaison , nous obtenons pour le moment angulaire total , I :

$$I = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$$

Puisqu'il y a quatre valeurs, nous disons qu'il ya diffusion du n - D dans l'état quartet. A chacune de ces valeurs de I, correspond une fonction différente. Soit X_q une de ces fonctions.
La fonction d'onde du système peut alors s'écrire:

$$\psi = X_Q \left[\Phi(1,2;3) - \Phi(1,3;2) \right] \qquad (4.19).$$

car Φ est antisymétrique par rapport à l'échange des neutrons, et

$$\Phi(1,2;3) = 2^{-\frac{1}{2}} R(r_{12}) \frac{f(q_3)}{q_3} \qquad (4.19').$$

où :
- $2^{-\frac{1}{2}} = D$ puisque ici $D^2 = (N+1) = 2$
- $R(r_{12})$ est la fonction décrivant l'état du deutéron
- $f(q_3)$ est la fonction qui décrit la particule diffusée par rapport au centre de masse.

La fonction d'onde ψ dépend de trois particules; signalons à ce sujet que Buckingham et Massey[9] ont introduit un problème à un corps celui-ci étant décrit par une équation intégro-différentielle :

$$L_s f(q_3) = 0 \qquad (4.20).$$

où l'indice "s" signifie que l'on considère l'approximation statique. A énergie nulle, la solution de cette équation est caractérisée par le paramètre A_{Q_s} .

D'autre part, nous pouvons choisir une fonction d'essai ϕ_t telle que:

$\phi_t = X_q \left[\Phi_t(1,2;3) - \Phi_t(1,3;2) \right]$; introduisons ϕ_t dans une des relations (4.18). Par la méthode de Kohn, nous calculons A_Q variationnellement, la valeur obtenue sera plus grande ou égale à A_{Q_s} puisque A_{Q_s} est calculée à l'approximation statique.

$A_Q = A_{Q_s}$: si la fonction d'essai ϕ_t est construite à l'aide de la solution de (20). Il s'ensuit que A_{Q_s} est une borne supérieure de la valeur réelle de la longueur de collision A_Q.

Après un bref résumé de l'étude de la diffusion n-D, nous montrerons que l'équation intégro-différentielle de Massey (20), peut être déduite du principe variationnel de Kohn.

Choisissons une fonction d'essai $\phi_t = \phi_{3t} - \phi_{2t}$,

où $$\phi_{3t} = \frac{1}{\sqrt{2}} X_q \; R(r_{12}) \; \frac{f_t(q_3)}{q_3} \qquad (4.21).$$

La fonction $f_t(q)$ (où nous écrivons q à la place de q_3, afin de généraliser) vérifie les conditions limites:

$$\begin{cases} f_t(q) \to 0 & \text{pour} \quad q = 0 \\ f_t(q) \to \sin kq + tg\eta_t \cos kq & \text{pour} \quad q \to \infty \end{cases} \qquad (4.22).$$

Or le principe variationnel de Kohn s'écrit:

$$k \; tg\eta \sim k \; tg\eta_t + \int_0^\infty \phi_t \Lambda \phi_t \; d\tau \qquad (4.23).$$

Et puisque $|\phi_{3t}| = |\phi_{2t}|$, nous avons:

$$k \; tg\eta \sim k \; tg\eta_t + 2 \int_0^\infty \phi_{3t} \Lambda \; \phi_t \; d\tau$$

Introduisons la valeur de ϕ_{3t} , il vient que:

$$k \; tg\eta \sim k \; tg\eta_t + \sqrt{2} \int_0^\infty q \; R(r) \; \frac{f_t(q)}{q} \Lambda \; \phi_t \; d\tau$$

$$k \operatorname{tg}\eta \sim k \operatorname{tg}\eta_t + \int_0^{\infty} f_t(q) \; L_s \, f_t(q) \; dq \qquad (4.24).$$

cette dernière relation définit l'opérateur L_s de Massey.

En calculant la limite de (24) pour $k \to 0$, nous pouvons obtenir une borne supérieure de A_Q . Et A_{Q_s} calculée à partir de $L_s \, f_t(q)$ est comme nous l'avons dit une borne supérieure de A_Q.

Notons enfin que l'approximation statique est applicable à une très grande classe de problèmes.

CHAPITRE V

CAS D'EXISTENCE D'UN SEUL ETAT LIE.

§1. NOTION D' ETAT LIE

Lorsque la valeur de l'énergie E est négative, l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$ n'admet de solutions que pour des valeurs particulières de E formant un spectre discret; la fonction d'onde ψ, (ou les fonctions ψ, s'il existe plusieurs valeurs négatives de E) s'annulle à l'infini de telle sorte que l'intégrale $\int_0^\infty |\psi(r)|^2 dr$ converge.
La probabilité de trouver la particule à l'infini est nulle, puisqu' elle est localisée dans un domaine fini, c'est pourquoi on dit que la particule est dans un état lié.

Nous étudierons d'abord le cas où il existe un état lié, puis le cas de plusieurs états liés.

La différence essentielle avec les deux premières études, est qu'en vertu de l'existence d'états liés, la diffusion ne peut plus être caractérisée par une longueur de collision réelle, si nous te - nons compte du champ de radiation. En effet, la modification apportée par le champ de radiation, au niveau dénergie considéré, revient à lui ajouter une énergie complexe. Mais nous négligerons dans la suite le champ de radiation, dès lors, à cette approximation, la longueur de collision sera encore un paramètre réel.

Pour la simplicité, nous nous limitons au cas d'une particule sans spin, neutre, et de moment angulaire orbital nul ($l = 0$), diffusée par un centre de force de petite portée.
Les résultats obtenus pourront évidemment être étendus au cas où le moment angulaire orbital est différent de zéro, et au cas où le diffuseur est un système composé,(revoir la première généralisation , chap.IV).

§2. CAS D'EXISTENCE D'UN SEUL ETAT LIE

Soit E_1 ,l'énergie de cet état lié.

Posons : $\varepsilon_1 = -\frac{2m}{\hbar^2} E_1$. (5.1).

Et si u_{ε_1} est la fonction propre correspondant à cet état, nous avons que $Lu_{\varepsilon_1} = \varepsilon_1 u_{\varepsilon_1}$.

Nous supposons de plus que la fonction u_{ε_1} est normée à l'unité, c'est-à dire que $(u_{\varepsilon_1}, u_{\varepsilon_1}) = 1$.

Or nous avons vu dans notre première étude, qu'en partant de l 'identité de Kato :

$$a = a_t - \int_0^\infty u_t \; L u_t \, dr + \int_0^\infty \omega \, L\omega \, dr \qquad (5.2).$$

nous pouvions obtenir une borne supérieure de a, en montrant que l'intégrale : $\int_0^\infty \omega L \; \omega \, dr \leqslant 0$, où $\omega = u_t - u$, et à condition que u(r) vérifie les conditions limites:

$$u(o) = 0$$
$$u(r) \to a - r \qquad \text{pour } r \to \infty$$

car en se servant d'une seconde fonction u(r) telle que:

$$u(o) = 0$$
$$u(r) \to 1 - \frac{r}{a} \qquad \text{pour } r \to \infty,$$

il n'était pas possible de trouver une borne supérieure de a.
Dès lors, dans le cas d'existence d'un état lié, nous allons encore nous baser sur l'identité de Kato, et étudier l'intégrale

$$\int_0^\infty \omega \; L \; \omega \; dr \qquad (5.3).$$

Cependant, nous ne pouvons plus conclure directement quant au signe de cette intégrale, car ω doit contenir une partie correspondant à l'état lié. Il s'agit donc d'ajouter à la fonction $\omega = u_t - u$, une fonction proportionnelle à u_{ε_1} , mais telle que pour la fonction totale

ω' nous ayons encore:

$$\int_0^\infty \omega' L\omega' \, dr \leq 0$$

Ceci est possible, puisque en prenant $\omega' = \omega + u_{\varepsilon_1}$, l'inégalité précédente est réalisée si ω est orthogonale à u_{ε_1}, en effet:

$$\int^\infty \omega' L\omega' \, dr = \int_0^\infty (\omega + u_{\varepsilon_1}) L(\omega + u_{\varepsilon_1}) dr = \int_0^\infty \omega L \omega \, dr + \int_0^\infty u_{\varepsilon_1} L\omega \, dr$$

$$+ \int_0^\infty \omega L u_{\varepsilon_1} \, dr + \int_0^\infty u_{\varepsilon_1} L u_{\varepsilon_1} \, dr.$$

Après deux intégrations par parties, et en tenant compte que u_{ε_1} est nulle aux limites d'intégrations, il reste que:

$$\int_0^\infty \omega L \omega \, dr + \int_0^\infty u_{\varepsilon_1} L u_{\varepsilon_1} \, dr = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) \left[\int_0^\infty \omega H \omega \, dr + \int_0^\infty u_{\varepsilon_1} H u_{\varepsilon_1} \, dr\right] \leq 0$$

Nous savons déjà que la fonction u est orthogonale à la fonction u_{ε_1}, mais nous ne pouvons pas savoir si la fonction u_t est orthogonale à u_{ε_1}, il est donc impossible de dire si oui ou non ω et u_{ε_1} sont orthogonales.

Cependant, il existe une fonction ω' telle que:

$$\omega' = \omega - (\omega, u_{\varepsilon_1}) u_{\varepsilon_1} \qquad (5.4).$$

et qui est orthogonale à u_{ε_1}, en effet, nous avons:

$$\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1} dr - \int_0^\infty \left(\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1} dr\right) u_{\varepsilon_1}^2 \, dr = \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1} \, dr - \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1} \, dr \int_0^\infty u_{\varepsilon_1}^2 \, dr = 0$$

Et pour cette fonction, nous avons bien que:

$$\int_0^\infty \left[\omega - u_{\varepsilon_1} \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1} \, dr\right] L \left[\omega - u_{\varepsilon_1} \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1} \, dr\right] dr \leq 0 \qquad (5.5).$$

Explicitons cette inégalité:

$$\int_0^\infty \omega\, L\omega\, dr - \int_0^\infty u_{\varepsilon_1}\left[\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right] L\omega\, dr - \int_0^\infty \omega\, L\left[u_{\varepsilon_1}\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right] dr$$

$$+\int_0^\infty \left[u_{\varepsilon_1}\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr\right] L\left[u_{\varepsilon_1}\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr\right] dr \leq 0.$$

$$\int_0^\infty \omega L\omega\, dr - \int_0^\infty u_{\varepsilon_1} L\omega\, dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr - \int_0^\infty \omega\, L\, u_{\varepsilon_1}\, dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr$$

$$-\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, L\left[\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right] dr + \int_0^\infty u_{\varepsilon_1} L\, u_{\varepsilon_1}\, dr \left[\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right]^2$$

$$+\int_0^\infty u^2_{\varepsilon_1}\, dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr \left[L\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right] \leq 0$$

Si nous tenons compte de ce que: $L\, u_{\varepsilon_1} = \varepsilon_1\, u_{\varepsilon_1}$ et que $\int_0^\infty u^2_{\varepsilon_1}\, dr = 1$, nous obtenons, en permutant les signes d'intégrations(ce qui est permis puisque chaque intégrale prise séparément à un sens):

$$\int_0^\infty \omega L\, \omega dr - \int_0^\infty u_{\varepsilon_1}\, L\, \omega dr \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr - \varepsilon_1\left[\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr\right]^2 - \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, L\left[\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right] dr$$

$$+\varepsilon_1\left[\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr\right]^2 + \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\, L\left[\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr\right] \leq 0$$

Soit:

$$\int_0^\infty \omega L\, \omega\, dr \leq \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_1}\, dr \int_0^\infty u_{\varepsilon_1}\, L\, \omega dr$$

Intégrons par parties dans le second membre:

$$\int_0^\infty \omega\, L\, \omega dr \leq \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\left[u_{\varepsilon_1}\frac{d\omega}{dr} - \frac{du_{\varepsilon_1}}{dr}\,\omega\right]_0^\infty dr + \varepsilon_1\left[\int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_1}\, dr\right]^2$$

Puisque u_{ε_1} est nulle aux limites d'intégrations et que u et u_{ε_1}

sont orthogonales, il reste finalement:

$$\int_0^\infty \omega L \omega \, dr \leq \varepsilon_1 \left[\int_0^\infty u_t \, u_{\varepsilon_1} \, dr \right]^2 . \qquad (5.6).$$

En nous servant de cette inégalité, l'identité de Kato devient:

$$a \leq a_t - \int_0^\infty u_t \; L \, u_t \, dr \; + \varepsilon_1 \left[\int_0^\infty u_t \, u_{\varepsilon_1} \, dr \right]^2 \qquad (5.7).$$

Et si u_{ε_1} est connue, nous pouvons donc obtenir une limite supérieure de la valeur réelle de a, en utilisant une méthode variationnelle. Malheureusement, ce n'est pas le cas en général. Cependant, si nous pouvions montrer que le dernier terme de (7) est négligeable pour une fonction d'essai u_t , nous pourrions encore obtenir à partir de cette inégalité, une borne supérieure de a, malgré l'ignorance de la fonction réelle de u_{ε_1} .

Dans le cas de $e^- H$, des expériences ont montré que contrairement à cette hypothèse, la dernière intégrale de (7) n'est pas suffisamment petite que pour être négligée.
Il faut dès lors trouver une autre inégalité, telle qu'elle soit indépendante de la fonction inconnue u_{ε_1}. Remarquons que le dernier terme de (7) peut encore s'écrire:

$$\varepsilon_1 \left[\int_0^\infty u_t \, u_{\varepsilon_1} \, dr \right]^2 = \frac{1}{\varepsilon_1} \left[\int_0^\infty u_t \; L \, u_{\varepsilon_1} \, dr \right]^2 = \frac{1}{\varepsilon_1} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_1} \; L \, u_t \, dr \right]^2$$

après deux intégrations par parties.

Utilisons alors l'inégalité de Schwartz : $|(\varphi \cdot \psi)| \leq \sqrt{(\varphi \cdot \varphi)(\psi \cdot \psi)}$,
et puisqu'ici, u_{ε_1} est normée à l'unité, nous obtenons que:

$$\frac{1}{\varepsilon_1} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_1} \; L \, u_t \; dr \right]^2 \leq \frac{1}{\varepsilon_1} \int_0^\infty (L \, u_t)^2 \, dr.$$

où cette expression est bien indépendante de u_{ε_1} .
Et l'inégalité (7) devient:

$$a \leq a_t - \int_0^\infty u_t \; L \, u_t \, dr \; + \frac{1}{\varepsilon_1} \int_0^\infty (L \, u_t)^2 \, dr \qquad (5.8).$$

Si d'autre part, ε_{1t} est la valeur expérimentale de l'énergie correspondant à l'état lié, et $u_{\varepsilon_{1t}}$ la fonction d'essai, nous avons que:

$$\varepsilon_{1t} = \int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_{\varepsilon_{1t}} \, dr$$

et si $u_{\varepsilon_{1t}}$ est suffisamment proche de la fonction exacte, nous pouvons remplacer ε_1 par ε_{1t}, et l'inégalité devient alors:

$$a \leq a_t - \int_0^\infty u_t \, L \, u_t \, dr + \frac{1}{\varepsilon_{1t}} \int_0^\infty (L \, u_t)^2 \, dr \qquad (5.9).$$

Evidemment, cette borne supérieure de a, que l'on obtient à partir de (8) ou (9), n'est pas la meilleure, puisque d'une part nous avons majoré en utilisant l'inégalité de Schwartz, et d'autre part, nous avons majoré en supposant que la valeur expérimentale de l'énergie ε_{1t}, est proche de sa valeur réelle, ou plus exactement, qu'elle lui est inférieure. C'est pourquoi, nous allons étudier une autre manière de résoudre le problème, en nous basant sur les deux théorèmes [10] suivants:

<u>Théorème 1</u>: Soit un système comportant exactement N états liés, et soit une base de K fonctions propres orthonormées, où K peut être plus grand, égal ou inférieur à N. Ecrivons l'opérateur hamiltonien sous la forme d'une matrice de K lignes et K colonnes; cette matrice est diagonale, avec les éléments diagonaux rangés par ordre croissant:

$$E_1^{(k)} \leq E_2^{(k)} \leq \ldots\ldots \leq E_k^{(k)}$$

Dans ces conditions: $\begin{cases} E_i^{(k)} \geq E_i & \text{pour } \begin{cases} i \leq N \\ E_i : \text{énergie du ième état lié.} \end{cases} \\ E_i^{(k)} \geq 0 & \text{pour } i > N. \end{cases}$

<u>Théorème 2</u>: Dans les mêmes conditions que dans le théorème 1, écrivons l'opérateur H sous la forme d'une matrice de rang (K + 1), à l'aide des mêmes K fonctions que précédemment, alors, les valeurs propres $E_i^{(k+1)}$ vérifient la relation:

$$E_i \leq E_i^{(k+1)} \leq E_i^{(k)}$$

Nous allons donc nous baser sur ces deux théorèmes pour obtenir une inégalité à partir de laquelle nous calculerons variationnellement une borne supérieure de a.

Nous n'avons ici qu'un seul état lié, doù: $N = 1$.

Soit $E_1^{(1)}$ l'énergie de l'état lié, et v_1 et v_2 une base de fonctions propres orthonormées. Sous forme matricielle, l'opérateur hamiltonien s'écrit:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$$

où $H_{i,j} = (v_i , Hv_j)$ pour $i, j = 1,2$.

Quant aux valeurs propres elles sont telles que:

$$E_1^{(1)} < 0 ,$$

et par application du théorème 1: $E_2^{(2)} \geqslant 0$

par application du théorème 2: $E_1^{(2)} \leq E_1^{(1)} < 0$

Nous en tirons donc que : $E_1^{(2)} . E_2^{(2)} \leq 0$.

Et puisque le produit des valeurs propres d'une matrice,est égal au déterminant de la matrice, nous avons:

$$E_1^{(2)} . E_2^{(2)} = H_{11}.H_{22} - H_{12}.H_{21} \leq 0$$

De plus , H est hermitien d'où:

$$H_{11}.H_{22} - (H_{21})^2 = H_{11}.H_{22} - (H_{12})^2 \leq 0. \qquad (5.10).$$

Selon les hypothèses des deux théorèmes, les fonctions propres de la base, v_1 et v_2 doivent être normées, cependant nous remarquons que dans (10), elles apparaissent chacune deux fois, dans chaque terme, par conséquent ni le signe, ni la norme de ces fonctions n'a beaucoup d'importance; nous pouvons dès lors prendre v_1 telle que:

$$\int_0^\infty |v_1|^2 \, dr = 1 ,$$

quant à v_2 nous la remplaçons par une fonction v_2' normée, mais non orthogonale à la fonction v_1, c'est-à-dire telle que:

$$v_2' = v_2 + (v_2' , v_1) v_1 .$$

où v_2 est encore orthogonale à v_1 puisque :

$$\int_0^\infty v_2 v_1 \, dr = \int_0^\infty v_2' v_1 \, dr - \int_0^\infty v_2' v_1 \, dr \int_0^\infty v_1^2 \, dr = 0$$

La fonction v_2' est en fait arbitraire, nous la prenons telle que:

$$v_2' = \omega (r \lambda) = \omega (r) e^{-\lambda r} . \text{ avec } \lambda > 0 \qquad (5.11).$$

d'où : $$v_2 = \omega (\lambda) - v_1 \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 \, dr .$$

Explicitons alors l'inégalité (10), en remplaçant v_2 par sa valeur:

$$\int_0^\infty v_1 H v_1 \, dr \int_0^\infty v_2 H v_2 \, dr - \left[\int_0^\infty v_2 H v_1 \, dr \right]^2 \leq 0$$

$$H_{11} \int_0^\infty \left[\omega (\lambda) - v_1 \int_0^\infty \omega (\lambda) v_1 \, dr \right] H \left[\omega (\lambda) - v_1 \int_0^\infty \omega (\lambda) v_1 \, dr \right] dr$$

$$- \left[\int_0^\infty \left[\omega (\lambda) - v_1 \int_0^\infty \omega (\lambda) v_1 \, dr \right] H v_1 \, dr \right]^2 \leq 0$$

Développons chaque parenthèse, en tenant compte que H est un opérateur de dérivation:

$$H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda) H \omega(\lambda) \, dr - H_{11} \int_0^\infty v_1 H \omega(\lambda) dr \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 dr - H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda) H v_1 dr \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 dr$$

$$- H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 \, dr \left[H \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 dr \right] + H_{11} \int_0^\infty v_1^2 \, dr \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 dr \left[H \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 \, dr \right]$$

$$+ H_{11} \int_0^\infty v_1 H v_1 \, dr \left[\int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 \, dr \right]^2 - \left[\int_0^\infty \omega(\lambda) H v_1 \, dr \right]^2 - \left[\int_0^\infty v_1 H v_1 \, dr \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 \, dr \right]^2$$

../..

$$+ 2 \int_0^\infty \omega(\lambda)\, H\, v_1\, dr \int_0^\infty v_1\, H\, v_1\, dr \int_0^\infty \omega(\lambda)\, v_1\, dr \leq 0.$$

Après simplification, il reste:

$$H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, H\, \omega(\lambda)\, dr - H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, v_1\, dr \int_0^\infty H\left[\omega(\lambda)\, v_1\right] dr - \left[\int_0^\infty \omega(\lambda) H\, v_1 dr\right]^2$$

$$+ 2\, H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, v_1\, dr \int_0^\infty \omega(\lambda)\, H\, v_1\, dr \leq 0.$$

Or, remarquons que le dernier terme peut s'écrire:

$$H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, v_1\, dr \int_0^\infty \left[\omega(\lambda)\, H\, v_1 + v_1\, H\, \omega(\lambda)\right] dr + H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda) v_1 \left[\omega(\lambda) \frac{dv_1}{dr} - \frac{d\omega(\lambda)}{dr} v_1\right]_0^\infty dr$$

$= H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, v_1 dr \int_0^\infty H\left[\omega(\lambda)\, v_1\right] dr$, car v_1 est nulle aux limites de l'intervalle $\left[0, \infty\right]$

D'où nous obtenons:

$$H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, H\, \omega(\lambda)\, dr \leq \left[\int_0^\infty \omega(\lambda)\, H\, v_1\, dr\right]^2$$

ou encore:

$$H_{11} \int_0^\infty \omega(\lambda)\, H\, \omega(\lambda)\, dr \leq \left[\int_0^\infty v_1\, H\, \omega(\lambda)\, dr\right]^2 + \left[\omega(\lambda) \frac{dv_1}{dr} - \frac{d\,\omega(\lambda)}{dr}\, v_1\right]^2$$

et puisque $L = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) H$, il vient que:

$$\int_0^\infty v_1\, L\, v_1\, dr \int_0^\infty \omega(\lambda)\, L\, \omega(\lambda)\, dr \leq \left[\int_0^\infty v_1 L\, \omega(\lambda)\, dr\right]^2$$

En fait, la fonction v_1 est identique à la fonction $u_{\varepsilon_{1t}}$, d'où:

$$\int_0^\infty \omega(\lambda)\, L\, \omega(\lambda)\, dr \leq \frac{1}{\varepsilon_{1t}} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\, \omega(\lambda)\, dr\right]^2 \qquad (5.12).$$

Nous avons démontré précédemment que le premier membre de cette inégalité était une fonction continue du paramètre λ , il en est de même du second membre, car:

$$\lim_{\lambda\to o}\left[\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\omega(\lambda)\,dr - \int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\,\omega dr\right] = \lim_{\lambda\to o}\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} (e^{-\lambda r} - 1)\, L\,\omega\, dr$$

$$+ \lim_{\lambda\to o} \lambda^2 \int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}}\, \omega\, e^{-\lambda r}\, dr - \lim_{\lambda\to o} 2\lambda \int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}}\, \omega'\, e^{-\lambda r}\, dr.$$

Si nous supposons que la fonction $u_{\varepsilon_{1t}}$ est continue dans $[o,\infty]$, alors nous pouvons passer à la limite sous le signe d'intégration, puisque chaque intégrant tend vers zéro, en restant majoré par une fonction indépendante de λ, et intégrable dans $[o,\infty]$.

Dans ces conditions nous pouvons donc écrire que :

$$\int_o^\infty \omega(r)\, L\,\omega(r)\, dr \leqslant \frac{1}{\varepsilon_{1t}}\left[\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\omega(r)\, dr\right]^2 \qquad (5.13).$$

Et en nous servant de cette inégalité, l'identité de Kato devient:

$$a \leqslant a_t - \int_o^\infty u_t\, L\, u_t\, dr + \frac{1}{\varepsilon_{1t}}\left[\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\,\omega\, dr\right]^2$$

ou encore puisque $L\,\omega = L\,u_t$,

$$a \leqslant a_t - \int_o^\infty u_t\, L\, u_t\, dr + \frac{1}{\varepsilon_{1t}}\left[\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\, u_t\, dr\right]^2 \qquad (5.14).$$

Cette inégalité ne fait donc intervenir que les valeurs expérimentales, c'est-à-dire $u_{\varepsilon_{1t}}$ et ε_{1t} , d'autre part nous n'utilisons pas l'inégalité de Schwartz pour y parvenir.

Si nous comparons maintenant cette dernière expression avec les deux premières que nous avons obtenues, (7) et (9), nous constatons que ces deux dernières ne sont que des cas particuliers de (14).

En effet: [1] $\frac{1}{\varepsilon_{1t}}\left[\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} L\, u_t dr\right]^2$ est identique à $\varepsilon_1\left(\int_o^\infty u_{\varepsilon_1}\, u_t\, dr\right)^2$ dans le cas particulier où la fonction expérimentale $u_{\varepsilon_{1t}}$ est identique à la fonction réelle u_{ε_1} , puisque alors $\frac{1}{\varepsilon_{1t}}\left(\int_o^\infty u_{\varepsilon_{1t}} Lu_t\, dr\right)^2 =$

$$= \frac{1}{\varepsilon_1}\left(\int_0^\infty u_{\varepsilon_1} \; L \; u_t \; dr\right)^2 = \frac{1}{\varepsilon_1}\left(\int_0^\infty L \; u_{\varepsilon_1} u_t \; dr\right)^2 = \varepsilon_1\left(\int_0^\infty u_{\varepsilon_1} \; u_t \; dr\right)^2$$

2) En utilisant l'inégalité de Schwartz , nous passons de

$$\frac{1}{\varepsilon_{1t}}\left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \; L \; u_t \; dr\right]^2 \text{ à } \frac{1}{\varepsilon_{1t}}\int_0^\infty (L \; u_t)^2 \; dr \text{ , si } u_{\varepsilon_{1t}} \text{ est normée à l'unité.}$$

Signalons encore, que l'inégalité (14) obtenue en nous basant sur les deux théorèmes, peut aussi être calculée en partant d'un principe variationnel. Cette méthode met plus clairement en évidence la généralisation du problème sans état lié, au problème avec état lié.

Lorsqu'il n'existe aucun état lié, l'expression variationnelle de Kohn (ou de Hulthen) s'écrit sous la forme:

$$a \sim a_t - \int_0^\infty u_t \; L \; u_t \; dr \qquad (5.15).$$

Mais, s'il existe un état lié, u_t doit contenir une partie correspondant à cet état, soit:

$u_t = u_t' + b \; u_{\varepsilon_{1t}}$, où b est un paramètre indéterminé.

Puisque $u_{\varepsilon_{1t}}$ est nulle en zéro et l'infini, u_t' vérifie les mêmes conditions limites que u_t, c'est-à-dire:

$$u_t'(o) = 0$$

$$u_t'(r) \to a_t - r \qquad \text{pour } r \to \infty .$$

Introduisons cette valeur de u_t dans (15), nous avons:

$$a \sim a_t - \int_0^\infty \left[u_t' + b \; u_{\varepsilon_{1t}}\right] L \left[u_t' + b \; u_{\varepsilon_{1t}}\right] dr$$

$$a \sim a_t - \int_0^\infty u_t' \; L \; u_t' \; dr - b\int_0^\infty \left[u_{\varepsilon_{1t}} \; L \; u_t' + u_t' \; L \; u_{\varepsilon_{1t}}\right] dr - b^2\int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \; L \; u_{\varepsilon_{1t}} \; dr.$$

Puisque $u_{\varepsilon_{1t}}$ est nulle en zéro et l'infini, il reste après deux

intégrations par parties dans la seconde intégrale:

$$a \sim a_t - \int_0^\infty u_t' \, L \, u_t' \, dr = 2b \int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_t' \, dr - b^2 \int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_{\varepsilon_{1t}} \, dr.$$

Déterminons le paramètre b variationnellement:

$$- 2 \int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_t' \, dr - 2 \, b \int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_{\varepsilon_{1t}} \, dr = 0$$

d'où : $b = -\frac{1}{\varepsilon_{1t}} \int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_t' \, dr.$

Avec cette valeur de b , nous obtenons l'inégalité,

$$a \leq a_t - \int_0^\infty u_t' \, L \, u_t' \, dr + \frac{1}{\varepsilon_{1t}} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_t' \, dr \right]^2 \qquad (5.16).$$

Et puisque u_t' vérifie les mêmes conditions limites que u_t , nous concluons que l'inégalité (16) fournit une borne supérieure de a.

Enfin, l'utilisation de la fonction d'essai $\left[u_t - \left(\frac{1}{\varepsilon_{1t}} \int u_{\varepsilon_{1t}} \, L \, u_t \, dr \right) u_{\varepsilon_{1t}} \right]$ est préférable à celle de u_t, puisque dans la première, la valeur du paramètre b est extremum.

Signalons encore que de nombreuses applications ont été résolues en utilisant ce type de fonction : par exemple, dans le cas de la diffusion électron-hydrogène, l'étude de Borowitz et Greenberg.[11]

Dans le cas de valeurs quelconques du moment angulaire orbital, la généralisation se fait aisément; nous remplaçons a par A_l et introduisons dans l'opérateur L, le terme:

$\left[- \frac{l \, (l + 1)}{r^2} \right]$, soit :

$$A_l \leq A_{lt} - \int_0^\infty u_{lt} \, L \, u_{lt} \, dr + \frac{1}{\varepsilon_{lt}} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_{lt}} \, L \, u_{lt} \, dr \right]^2 \qquad (5.17).$$

où la fonction d' essai vérifie les conditions limites suivantes:

$$u_{lt} \, (o) = 0$$

$$u_{lt} \, (r) \to A_{lt} \, \frac{r^{-l}}{(2 \, l + 1)} - r^{-(l + 1)} \quad \text{pour} \quad r \to \infty ,$$

et où le comportement asymptotique de la fonction d'essai s'obtient de la même manière que dans le problème sans états liés.

§3. CAS D'EXISTENCE DE PLUSIEURS ETATS LIES.

Supposons qu'il existe exactement N états liés.

Soit: $\begin{cases} E_i \text{ , pour } i = 1...N, \text{ les énergies de ces N états liés,} \\ u_{\varepsilon_i} \text{ , pour } i = 1...N, \text{ les fonctions propres correspondantes.} \end{cases}$

Supposons encore, que les valeurs des énergies sont rangées par ordre croissant, nous avons $E_1 < E_2 .....< E_N$.

Les valeurs des E_i sont négatives, par contre celles des ε_i sont positives si : $\varepsilon_i = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) E_i$.

Malheureusement, les fonctions propres et les valeurs propres des N états liés sont inconnues.

En raisonnant comme dans le cas d'existence d'un seul état lié, nous sommes amenés à choisir une fonction ω' telle que :

$$\omega' = \omega - \sum_{i=1}^{N} (\omega , u_{\varepsilon_i}) u_{\varepsilon_i} \qquad (5.18)$$

de façon que $\int_0^\infty \omega' L \omega' dr \leq 0$

Notons que cette fonction ω' est orthogonale à chacune des N fonctions propres des états liés, en effet nous avons:

$$\int_0^\infty \omega' u_{\varepsilon_i} dr = \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i} dr - \int_0^\infty \sum_{i=1}^{N} \left[\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i} dr\right] u^2_{\varepsilon_i} dr$$

$$= \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i} dr - \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i} dr \int_0^\infty u^2_{\varepsilon_i} dr = 0 \qquad (\text{pour } i = 1.....N).$$

puisque les fonctions propres sont orthonormées.

Dans ces conditions, nous avons bien:

$$\int_0^\infty \omega' L \omega' dr \leq 0 \qquad (5.19).$$

En utilisant la relation (18), nous pouvons expliciter cette inégalité, soit:

$$\int_0^\infty \left[\omega - \sum_{i=1}^N \left(\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr\right) u_{\varepsilon_i}\right] L\left[\omega - \sum_{i=1}^N \left(\int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr\right) u_{\varepsilon_i}\right] dr \leq 0.$$

$$\int_0^\infty \omega\, L\,\omega\, dr - \sum_{i=1}^N \int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L\,\omega dr \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr - \int_0^\infty \omega L\left(\sum_{i=1}^N u_{\varepsilon_i} \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_i}\, dr\right) dr$$

$$+ \sum_{i=1}^N \int_0^\infty \left[u_{\varepsilon_i} \int_0^\infty u_{\varepsilon_i}\, \omega\, dr\right] L\left[u_{\varepsilon_i} \int_0^\infty u_{\varepsilon_i}\, \omega\, dr\right] dr \leq 0.$$

En appliquant l'opérateur L à chaque terme, nous avons encore:

$$\int_0^\infty \omega\, L\,\omega dr - \sum_{i=1}^N \int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L\,\omega dr \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr - \sum_{i=1}^N \int_0^\infty \omega L\, u_{\varepsilon_i}\, dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_i}\, dr$$

$$- \sum_{i=1}^N \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr \left[L \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr\right] + \sum_{i=1}^N \int_0^\infty u^2_{\varepsilon_i}\, dr \int_0^\infty u_{\varepsilon_i}\, \omega\, dr \left[L \int_0^\infty \omega u_{\varepsilon_i}\, dr\right]$$

$$+ \sum_{i=1}^N \int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L\, u_{\varepsilon_i}\, dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_i}\, dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_i}\, dr \leq 0$$

En tenant compte que $L\, u_{\varepsilon_i} = \varepsilon_i\, u_{\varepsilon_i}$, il reste:

$$\int_0^\infty \omega\, L\,\omega dr \leq \sum_{i=1}^N \int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L\,\omega dr \int_0^\infty \omega\, u_{\varepsilon_i}\, dr$$

$$\leq \sum_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_i} \int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L\,\omega\, dr \int_0^\infty \omega\, L\, u_{\varepsilon_i}\, dr$$

Et après deux intégrations par parties dans le second membre, nous avons:

$$\int_0^\infty \omega\, L\,\omega dr \leq \sum_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_i} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L\,\omega\, dr\right]^2$$

ce qui peut encore s'écrire:

$$\int_0^\infty \omega L \omega \, dr \leq \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\varepsilon_i} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L u_t \, dr \right]^2 \qquad (5.20).$$

A l'aide de l'inégalité de Schwartz, nous avons finalement:

$$\int_0^\infty \omega L \omega dr \leq \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\varepsilon_i} \int_0^\infty (L u_t)^2 dr \qquad (5.20').$$

Cette borne supérieure de $\int_0^\infty \omega L \omega \, dr$, peut être améliorée, si nous observons/
que les valeurs E_i étant rangées par ordre croissant, les ε_i sont rangées par ordre décroissant, dès lors ε_N est la valeur minimum des ε_i. Il s'en suit que:

$$\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\varepsilon_i} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_i} (L u_t) dr \right]^2 \leq \frac{1}{\varepsilon_N} \sum_{i=1}^{N} \left[\int_0^\infty u_{\varepsilon_i} L u_t \, dr \right]^2 \leq \frac{1}{\varepsilon_N} \int_0^\infty (L u_t)^2 \, dr.$$

soit que : $$\int_0^\infty \omega L \omega dr \leq \frac{1}{\varepsilon_N} \int_0^\infty (L u_t)^2 \, dr \qquad (5.20'').$$

Cette dernière inégalité présente l'avantage de ne nécessiter la connaissance que d'une seule valeur propre ε_N.

La borne supérieure de la longueur de collision est donnée par:

$$a \leq a_t - \int_0^\infty u_t L u_t \, dr + \frac{1}{\varepsilon_N} \int_0^\infty (L u_t)^2 \, dr \qquad (5.21).$$

Cependant, cette inégalité ne peut nous servir que si la valeur de ε_N est connue, ce qui n'est pas le cas en général, c'est pourquoi nous allons rechercher une autre inégalité en nous basant sur les deux théorèmes cités précédemment (§2).

Nous choisissons une base de N fonctions propres orthonormées, soit v_i pour i = 1....N, et nous écrivons l'opérateur hamiltonien sous la forme d'une matrice de rang N:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ H_{N1} & \cdots & H_{NN} \end{pmatrix} \qquad (5.22)$$

où $H_{ij} = \int_0^\infty v_i \, H \, v_j \, dr.$

Nous supposons que les fonctions de la base sont suffisamment bien choisies pour que les valeurs propres qui leur correspondent soient telles que : $E_i < o$ pour $i = 1 \ldots\ldots N$.

Les valeurs propres de la matrice sont donc égales à E_i.

Considérons ensuite une fonction propre $v_{N+1}(r)$ qui est telle que :

$$\int_0^\infty \left| v_{N+1}(r) \right|^2 dr = 1$$

$$\int_0^\infty v_{N+1} \, v_i \, dr = 0 \qquad \text{pour } i = 1 \ldots N.$$

Avec cette (N+1)ième fonction, nous reformons la matrice de rang (N + 1), soit

$$\begin{pmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1N+1} \\ \vdots & & \\ H_{N,1} & \cdots \; H_{N,N} & H_{N,N+1} \\ H_{N+1,1} & H_{N+1,N} & H_{N+1,N+1} \end{pmatrix}$$

qui peut encore s'écrire, en sachant que:

$$\int_0^\infty H_{ii} \, dr = E_i^{(N)} \qquad \text{pour } i = 1 \ldots N$$

$$\int_0^\infty H_{ij} \, dr = 0 \qquad \text{pour } i,j = 1 \ldots N \; . \quad i \neq j.$$

$$\begin{pmatrix} E_1^N & \cdots & H_{1,N+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ & E_N^{(N)} & \\ H_{N+1,1} & \cdots & H_{N+1,N+1} \end{pmatrix} \qquad (5.22')$$

où $H_{i,N+1} = H_{N+1,i}$ pour $i = 1....(N+1)$.

Puisque le déterminant d'une matrice est égal au produit des valeurs propres, nous avons que:

Déterminant de la matrice(22') $= E_1^{(N+1)} \cdots\cdots E_{N+1}^{(N+1)}$. (5.22").

Par application du théorème 2, il vient que:

$$E_i^{(N+1)} \leqslant E_i^{(N)} \quad \text{pour } i = 1.....N$$

or $E_i^{(N)} < 0$, d'où $E_i^{(N+1)} < 0$ pour $i = 1...N$

Par le théorème 1, nous avons aussi que $E_{N+1}^{(N+1)} \geqslant 0$

Développons le déterminant de (22') suivant les éléments de la dernière ligne,nous avons que:

$$\begin{vmatrix} E_1^N & \cdots & H_{1,N+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ & E_N^{(N)} & \\ H_{N+1,1} & \cdots & H_{N+1,N+1} \end{vmatrix} = H_{N+1,1} \begin{vmatrix} 0 & \cdots & H_{1,N+1} \\ E_2^N & & \\ & \ddots & \\ & E_N^{(N)} & H_{N,N+1} \end{vmatrix} + \cdots H_{N+1,N+1} \begin{vmatrix} E_1^N & & \\ & \ddots & \\ & & E_N^{(N)} \end{vmatrix}$$

$$= E_1^{(N+1)} \cdots\cdots E_{N+1}^{(N+1)}$$

Finalement , le déterminant de (22') s'écrit:

$$(H_{N+1,1})^2 \; E_2^{(N)} \cdots\cdots E_N^{(N)} + (H_{N+1,2})^2 \; E_1^{(N)} \; E_3^{(N)} \cdots E_N^{(N)} + \cdots\cdots$$

$$+ H_{N+1,N+1} \; E_1^{(N)} \cdots E_N^{(N)}$$

d'où nous en tirons la valeur de : $H_{N+1,N+1}$:

$$H_{N+1,N+1} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{E_i^{(N)}} (H_{i,N+1})^2 + \frac{E_1^{(N+1)}}{E_1^{(N)}} \times \ldots\ldots \times \frac{E_N^{(N+1)}}{E_N^{(N)}} \times E_{(N+1)}^{(N+1)} \quad .(5.23).$$

Remarquons que dans le dernier terme, chacun des rapports $\dfrac{E_i^{(N+1)}}{E_i^{(N)}}$

est positif puisque $\begin{cases} E_i^{(N)} < 0 \\ E_i^{(N+1)} < 0 \end{cases}$ pour $i=1\ldots\ldots N$,

de plus: $E_{N+1}^{(N+1)} \geqslant 0$, par conséquent:

$$H_{N+1,N+1} \geqslant \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{E_i^N} (H_{N+1,1})^2 \qquad (5.24).$$

Suivant les hypothèses des deux théorèmes, la fonction v_{N+1} doit être normée; mais puisqu'elle apparaît deux fois dans les deux membres de (24), la valeur de $\int_0^\infty (v_{N+1})^2 \, dr$ n'a pas d'importance, nous pouvons donc choisir pour v_{N+1} la fonction :

$$v_{N+1} = \omega - \sum_{i=1}^{N} (\omega, v_i) \, v_i$$

qui est bien orthogonale à chacune des fonctions v_i (pour $i = 1\ldots N$).

Dans ces conditions l'inégalité (24) peut s'écrire:

$$\int_0^\infty \left[\omega - \sum_i v_i \int_0^\infty \omega v_i \, dr\right] H \left[\omega - \sum_i v_i \int_0^\infty \omega v_i \, dr\right] dr \geqslant \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{E_i^N} \left[\int_0^\infty \left(\omega - \sum_i v_i \int_0^\infty \omega v_i \, dr\right) H v_i \, dr\right]^2$$

Explicitons cette relation:

$$\int_0^\infty \Big[\omega H \omega \, dr - \sum_i \int_0^\infty v_i \, H \omega \, dr \int_0^\infty \omega v_i \, dr - \sum_i \int_0^\infty \omega v_i \, dr \left[H \int_0^\infty \omega v_i \, dr\right] - \sum_i \int_0^\infty \omega H v_i \, dr \int_0^\infty \omega \, v_i \, dr$$

$$+ \sum_i \int_0^\infty v_i^2 \, dr \int_0^\infty \omega \, v_i \, dr \left[H \int_0^\infty \omega \, v_i \, dr\right] + \sum_i \int_0^\infty v_i \, H \, v_i \, dr \left[\int_0^\infty \omega \, v_i \, dr\right]^2 \geqslant$$

$$\sum_i \frac{1}{E_i^N}\left[\int_0^\infty \omega H\, v_i\, dr\right]^2 + \sum_i \frac{1}{E_i^N}\left[\int_0^\infty v_i\, H\, v_i\, dr \int_0^\infty \omega\, v_i\, dr\right]^2$$

$$- 2 \sum_i \frac{1}{E_i^N}\int_0^\infty \omega H\, v_i \int_0^\infty v_i\, H v_i\, dr \int_0^\infty \omega\, v_i\, dr.$$

Il reste après suppression des termes égaux:

$$\int_0^\infty \omega\, H\, \omega\, dr \geqslant \sum_{i=1}^N \frac{1}{E_i^N}\left[\int_0^\infty \omega H\, v_i\, dr\right]^2$$

Après deux intégrations par parties dans le second membre, nous obtenons, sachant que v_i est nulle aux limites d'intégration et que $H\,\omega = H\,u_t$:

$$\int_0^\infty \omega\, H\, \omega\, dr \geqslant \sum_{i=1}^N \frac{1}{E_i^N}\left[\int_0^\infty v_i\, H\, u_t\, dr\right]^2 \quad \text{, ou encore:}$$

$$\int_0^\infty \omega\, L\, \omega\, dr \leqslant \sum_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_i^N}\left[\int_0^\infty v_i\, L\, u_t\, dr\right]^2 \qquad (5.25).$$

Et en introduisant cette inégalité dans la relation de Kato, nous avons:

$$a \leqslant a_t - \int_0 u_t\, L\, u_t\, dr + \sum_{i=1}^N \frac{1}{\varepsilon_i^N}\left[\int_0^\infty v_i\, L\, u_t\, dr\right]^2 \qquad (5.26).$$

Si nous remarquons que les expressions (24) et (25) ont la même forme, à la seule différence près que dans (25) la fonction v_{N+1} est remplacée par la fonction ω , nous pouvons conclure que le détermi - nant (22') doit aussi être invariant pour une telle transformation , c'est-à-dire pour le passage de ($v_1, \ldots\ldots, v_N, v_{N+1}$) à($v_1, v_2 \ldots v_N, \omega$). En effet, le passage des fonctions ($v_1, v_2 \ldots v_N, \omega$) aux fonctions ($v_1 \ldots\ldots v_N, v_{N+1}$) se fait à l'aide d'une matrice unimodulaire, soit

UNIVERSITE DE LIEGE BIBLIOTHEQUE

la matrice:

$$B = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & 0 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 \\ (\omega, v_1) & (\omega, v_2) & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Elle est bien telle que l'on ait:

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \\ \omega \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \\ v_{N+1} \end{pmatrix}$$

En effectuant cette transformation, nous retrouvons la définition de la fonction ω : $\omega = \sum_{i=1}^{N} (\omega, v_i) v_i + v_{N+1}$

De plus nous voyons directement que : déterminant B = 1.

Comme dans le cas d'un seul état lié, remarquons que nous pouvons relier l'inégalité (26) à l'expression variationnelle de Kohn (ou de Hulthen); nous choisissons pour cela une fonction d'essai tel que:

$u_t = u_t' + \sum_{i=1}^{N} b_i v_i$, et nous l'introduisons dans l'expression variationnelle de Kohn:

$$a \sim a_t - \int_0^\infty u_t \, L \, u_t \, dr$$

Après détermination variationnelle des N paramètres b_i , nous obtenons une inégalité de la forme (26).

Dans le cas d'existence des N états liés, nous avons ainsi deux inégalités (21) et (26), à l'aide desquelles nous pouvons obtenir une borne supérieure de la longueur de collision. Généralement, nous obtenons à l'aide de (26) un meilleur résultat qu'à l'aide de (21); en effet,

nous sommes arrivés à cette dernière inégalité en faisant deux majorations successives, et en utilisant l'inégalité de Schwartz. Cependant, l'expression (21) présente l'avantage de ne pas nécessiter le choix d'une base de N fonctions correspondant aux N états liés, comme dans (26), bien qu'il ne soit pas plus facile de choisir une fonction de diffusion suffisamment bonne de façon à obtenir un résultat utile en partant de (21).

Bien entendu, nous pouvons généraliser ces résultats à une large classe de problèmes, puisque nous n'avons considéré ici que le cas le plus simple. La seule restriction à maintenir, est qu'il ne doit exister qu'une seule direction d'incidence.

Recherchons par exemple, la borne supérieure de la longuuer de collison dans le cas de la diffusion d'une particule par un système composé, mais possèdant N états liés. Partons de l'inégalité (26).

Désignons par ψ_t : la fonction d'onde d'essai

par Φ_i : la fonction d'essai du ième état lié

par Λ l'opérateur : $-\frac{2m}{\hbar^2}(H - E_g)$ où H est le hamiltonien total; où E_g est l'énergie de liaison de l'état fondamental.

Dans ces conditions, l'inégalité (5.26) devient:

$$A \leq A_t - \int_0^\infty \psi_t^* \Lambda \psi_t \, d\tau + \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\varepsilon_i} \left[\int_0^\infty \Phi_i^* \Lambda \Phi_i \, d\tau \right]^2 \qquad (5.27)$$

Si de plus , il existe à l'infini une interaction entre la particule diffusée et le diffuseur, dûe à la force de Coulomb, l'inégalité aura encore la même forme que dans (27), mais cette fois, a sera définie en terme d'un déphasage additif, soit:

$$a = -\left(\frac{tg\,\eta}{kC^2}\right)_{k=0}$$

où C^2 est le facteur de pénétration de Coulomb.

Dans ce cas, le comportement asymptotique de la fonction d'essai ϕ_t varie quelque peu, puisque la force de Coulomb intervient à l'infini.

Notons encore que toute cette étude peut être refaite dans le cas plus particulier de la diffusion d'un neutron par un deutéron.

CONCLUSION.

L'essentiel à retenir de cette étude, est que dans tous les cas, nous avons pu obtenir une borne supérieure de la longeur de collision. La précision de cette borne dépend surtout du choix de la fonction d'onde d'essai et , en général, la méthode variationnelle de Kohn est préférable aux méthodes de Hulthen et Rubinow, rappelons que la méthode de Schwinger n'a pas été appliquée ici.

Nous avons vu dans le premier chapitre, que la section efficace de diffusion s'exprime, à énergie nulle, en termes de la longueur de collision, soit:

$$\sigma = 4\pi a^2 \qquad \text{pour } k \equiv 0.$$

On pourrait penser que la connaissance de la borne supérieure de " a ", entraîne la connaissance de la borne supérieure de σ, il n'en est rien. Considérons en effet un cas simple: supposons que pour la diffusion d'une particule de moment angulaire nul, nous ayons obtenu une borne supérieure positive de " a ", soit $a \leq R$.
Ne connaissant pas le signe de " a ", la valeur réelle de la longueur de collision pourra se trouver parmi les valeurs positives, inférieures à R , mais aussi parmi les valeurs négatives proches de zéro, si la valeur de R est suffisamment précise. Il s'ensuit, qu'en remplaçant "a" par R , nous obtiendrons pour σ une borne supérieure manquant totalement de précision. Dès lors, la connaissance de la borne supérieure de la longueur de collision ne nous conduit pas à la borne supérieure de la section efficace de diffusion.

BIBLIOGRAPHIE

(1) J.M. Blatt et V.F. Weisskopf, Theoritical Nuclear Physics, Chapître II, p.18 (Wiley 1952).
L.Hulthen et M Sugarawa, Handbuch der Physik, XXXIV, 37, (1957)
J.M. Blatt et J.D.Jackson, Phys.Rev. 76 ,18, (1949)

(2) N.F. Mott et H.S.W. Massey, the théory of atomic collisions (1933).
L. Hulthen , Ark. Mat. Astron. Fysik , 35 A, 25-1, (1948).

(3) E.A. Hylleraas , voir L. Rosenfeld, Nuclear forces.

(4) W. Kohn, Phys. Rev. 74, tome 2, (1948).

(5) J.M. Blatt et J.D. Jackson .Phys.Rev. 76, 18. (1949).

(6) H. Fesbach et S.I. Rubinow, Phys.Rev., 88 , 484, (1952).
Phys.Rev., 98 ,tome 1, (1955).

(7) T. Kato , Phys.Rev., 80 , 475, (1950)

(8) L. Spruch et L. Rosenberg, Phys.Rev. 116 , 1034, (1959)
Phys. Rev., 117 , 1095 , (1960)
Phys. Rev., 118 , 184, (1961).

(9) R.A. Buckingham et H.S.W. Massey. Proc.Roy.Soc.,A179,123 , (1941)

(10) E.A. Hylleraas et B. Undheim , Z.Physik, 65, 759, (1930)

(11) S. Borowitz et H. Greenberg, Phys.Rev., 108 , 716, (1957).

UNIVERSITE DE LIEGE BIBLIOTHEQUE

TABLE DES MATIERES.

CHAPITRE I : Introduction de la longueur de collision[1]

§1. Hypothèses générales 8

§2. Amplitude de diffusion et section efficace 9

§3. Constante de phase 11

§4. Longueur de collision 13

§5. Application au deutéron 16

CHAPITRE II : Méthodes variationnelles

§1. Méthode variationnelle de Hulthen[2] 19

§2. Méthode variationnelle de Kohn [4] 23

§3. Méthode variationnelle de Schwinger[5] 26

§4. Méthode variationnelle de Rubinow[6] 28

§5. Relation de Kato entre les méthodes de Hulthen et Schwinger 38

§6. Conclusions 42

CHAPITRE III : Etude de la borne supérieure de la longueur de collision dans le cas statique.

§1. Préliminaires 44

§2. Etude de la première identité de Kato 48

§3. Etude de la seconde identité de Kato 57

§4. Généralisation a des moments angulaires différents de zéro 61

CHAPITRE IV : Cas où le diffuseur est un système composé [9]

§1. Caractéristiques du système composé 66

§2. Généralisation de l'identité de Kato 69

§3. Recherche de la borne supérieure 71

§4. Cas particulier : diffusion n-D dans l'état quartet 77

CHAPITRE V : Cas d'existence d'états liés

§1. Notion d'état lié 81

§2. Cas d'existence d'un seul état lié 82

§3. Cas d'existence de plusieurs états liés 95

CONCLUSION 105

BIBLIOGRAPHIE 106