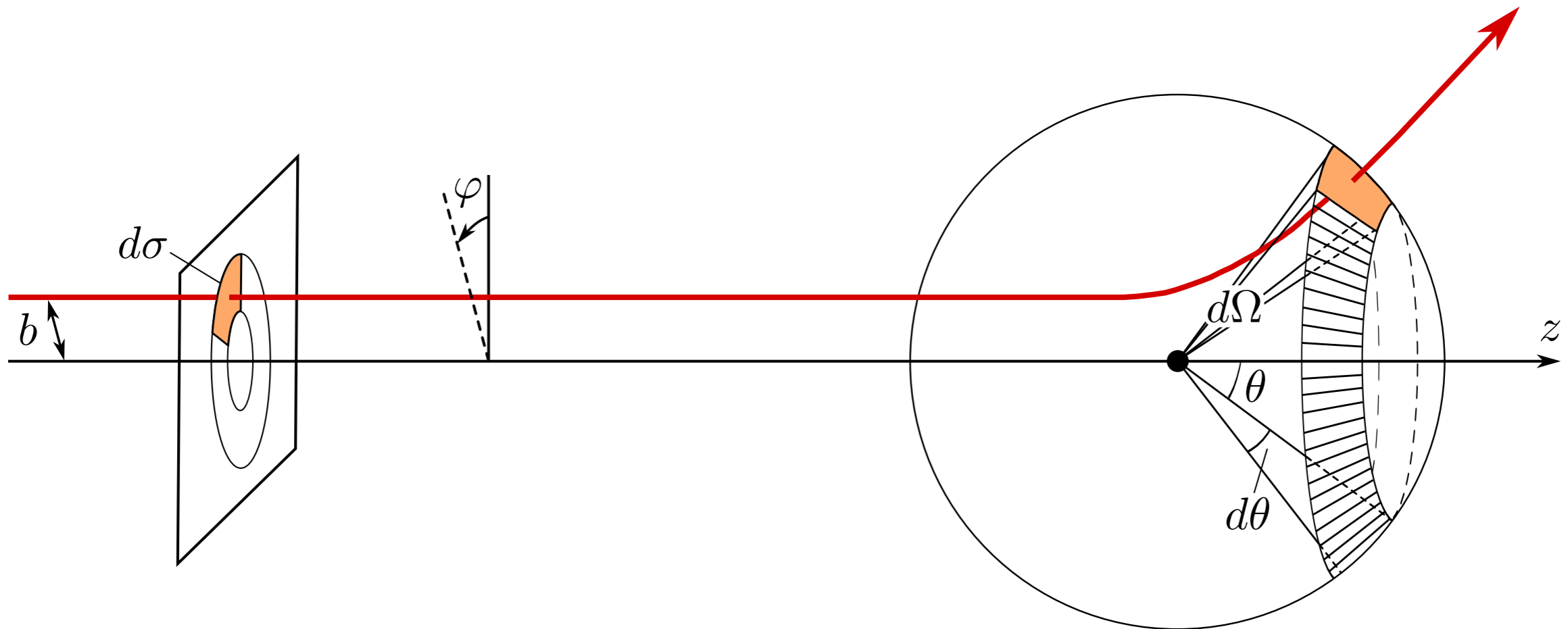


Section efficace de diffusion



- ▷ Pour un élément d'angle solide $d\Omega$ donné, $d\sigma$ est d'autant plus grand que le potentiel diffuse les particules incidentes
- ▷ Pour un potentiel d'interaction donné, $d\sigma \nearrow \Rightarrow d\Omega \nearrow : \frac{d\sigma}{d\Omega} > 0$
- ▷ Le coefficient de proportionnalité entre $d\sigma$ et $d\Omega$ définit la section efficace différentielle de diffusion : $\sigma(\theta, \varphi) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega}$

Harmoniques sphériques

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = A_{\ell m} e^{im\varphi} P_\ell^m(\cos \theta)$$

$$\ell = 0, 1, 2, \dots$$

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$$

$$\text{avec } A_{\ell m} = \epsilon_m \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(\ell - |m|)!}{4\pi(\ell + |m|)!}} \quad \text{où } \epsilon_m = \begin{cases} (-1)^m & m \geq 0 \\ 1 & m < 0 \end{cases}$$

- ▷ $P_\ell^m(x)$ sont les fonctions de Legendre associées et $P_\ell(x)$ les polynômes de Legendre ($-1 \leq x \leq 1$):

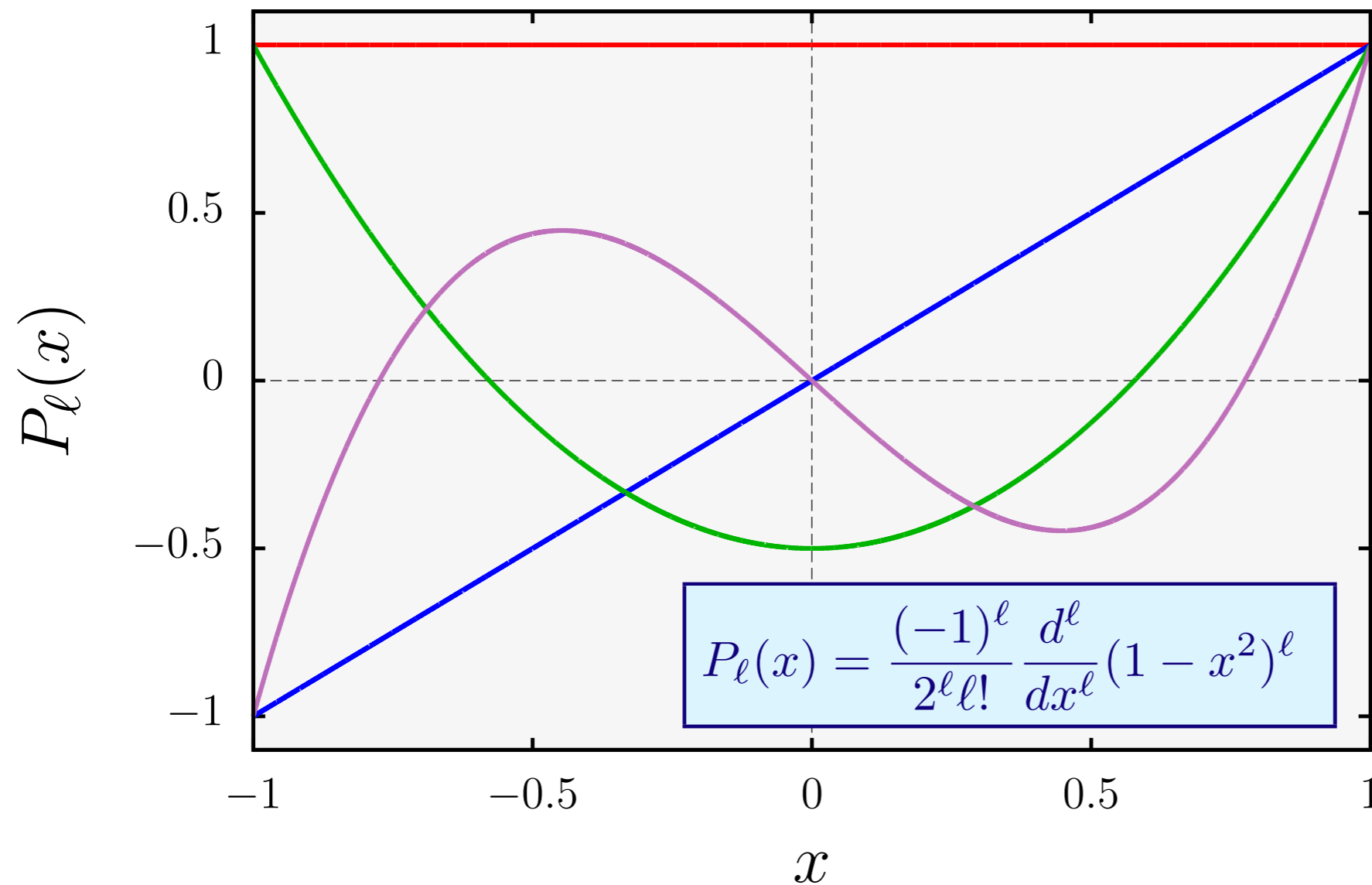
$$P_\ell^m(x) = \sqrt{(1-x^2)^m} \frac{d^m}{dx^m} P_\ell(x)$$

$$P_\ell(x) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \frac{d^\ell}{dx^\ell} (1-x^2)^\ell$$

- ▷ Toute fonction $f(\theta, \varphi)$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire d'harmoniques sphériques :

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell m} Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad \text{avec } c_{\ell m} = \int Y_\ell^m(\theta, \varphi)^* f(\theta, \varphi) d\Omega$$

Polynômes de Legendre



$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

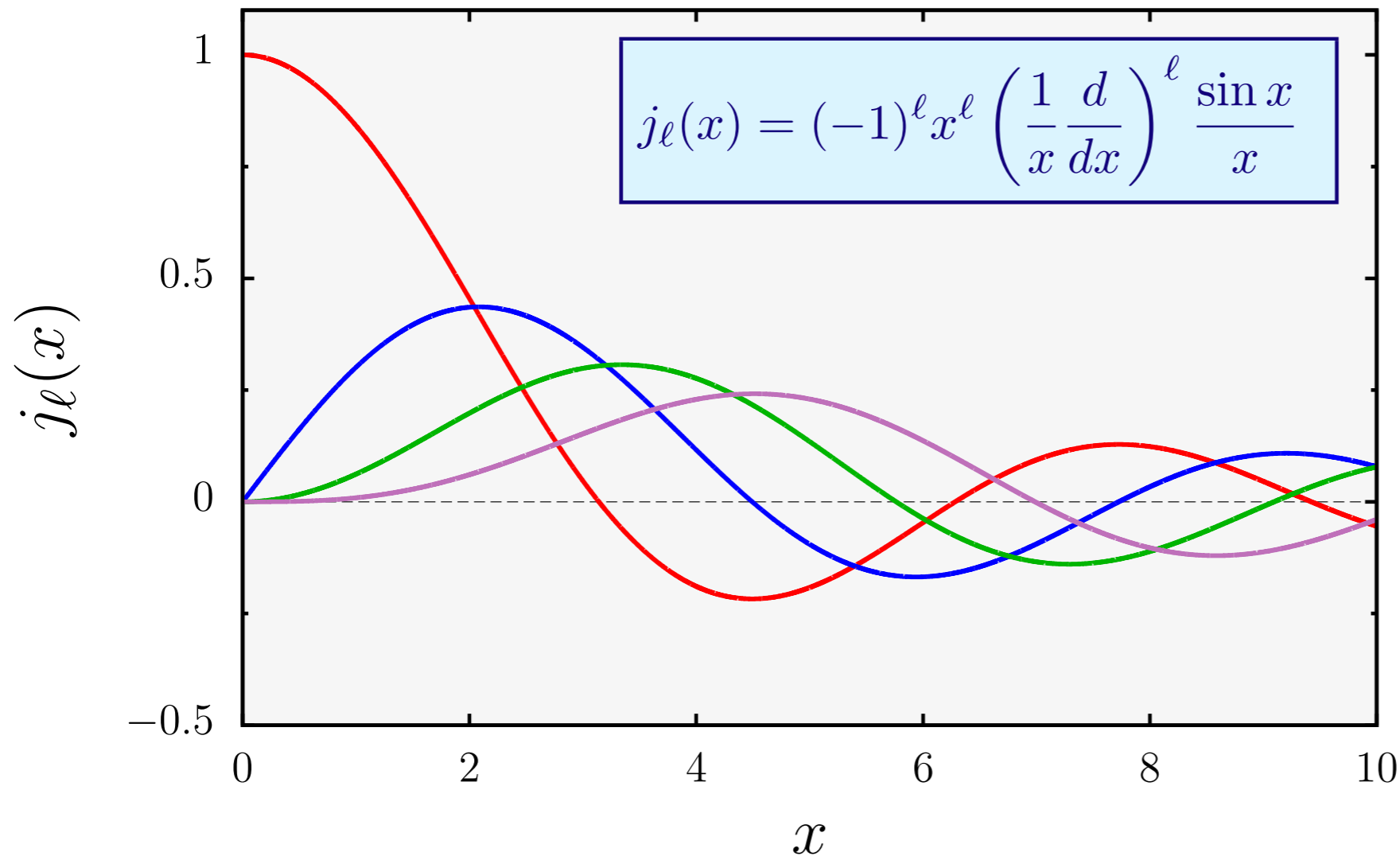
$$P_3(x) = \frac{1}{2}x(5x^2 - 3)$$

$$\vdots$$

Les premières harmoniques sphériques

ℓ	m	$Y_\ell^m(\theta, \varphi)$	ℓ	m	$Y_\ell^m(\theta, \varphi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	2	± 2	$\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi}$
1	0	$\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	3	0	$\sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
1	± 1	$\mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$	3	± 1	$\mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\varphi}$
2	0	$\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	3	± 2	$\sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\varphi}$
2	± 1	$\mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi}$	3	± 3	$\mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\varphi}$

Fonctions de Bessel sphériques



$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

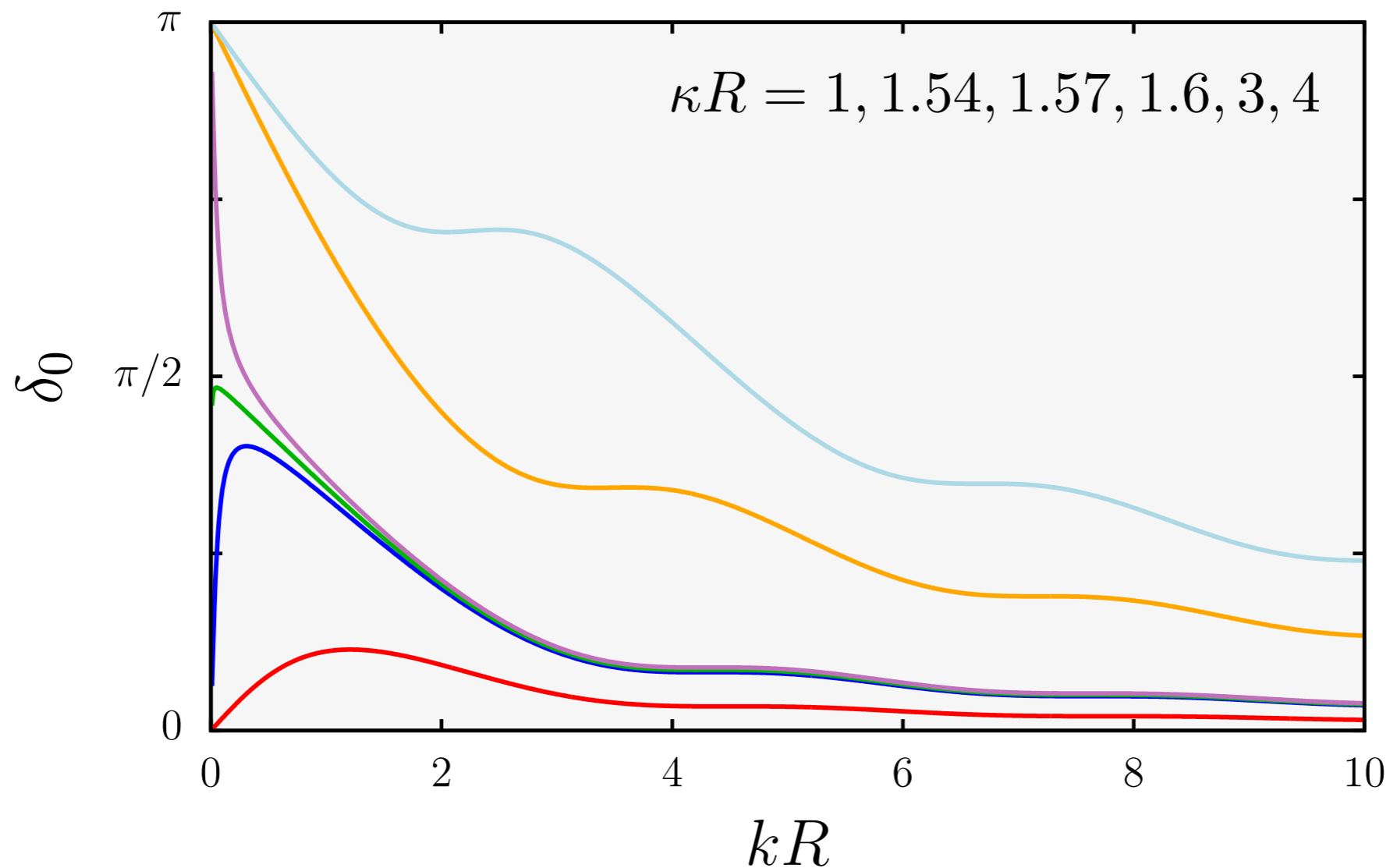
$$\vdots$$

$$j_\ell(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(x)$$

- ▷ $j_\ell(x) \approx x^\ell / (2\ell + 1)!!$ pour $x \rightarrow 0$
- ▷ $j_\ell(x) \approx \frac{1}{x} \sin\left(x - \ell\frac{\pi}{2}\right)$ pour $x \rightarrow \infty$

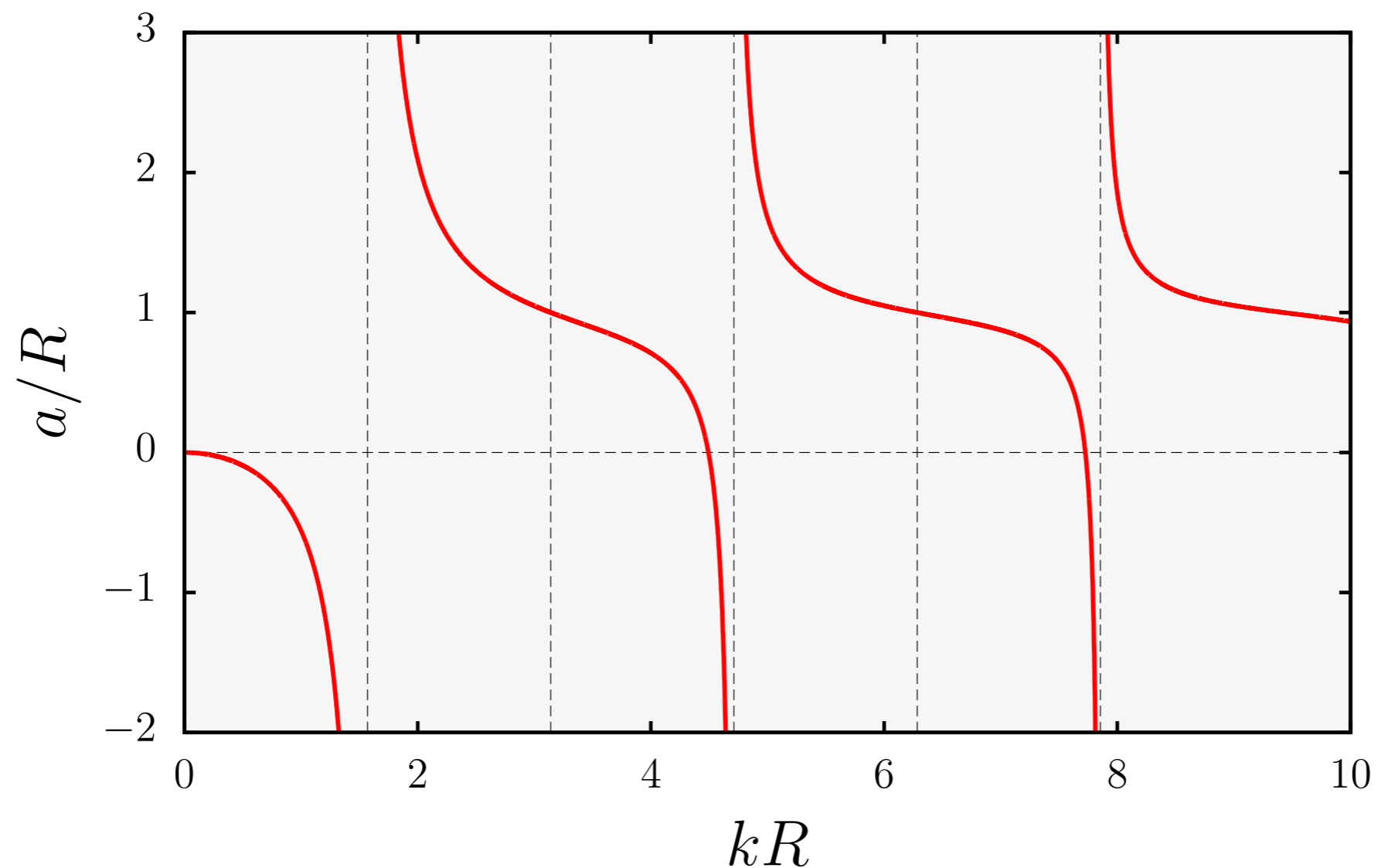
Déphasage ($l=0$) pour un puits sphérique

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq r \leq R \\ 0 & r > R \end{cases} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$



Longueur de diffusion pour un puits sphérique

$$a = R \left(1 - \frac{\tan(kR)}{kR} \right)$$



Approximation de Born

- ▷ Equation intégrale de la diffusion :

$$\psi^\pm(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi^\pm(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

- ▷ Potentiel de portée finie (R) :

$$\psi^+(\mathbf{r}) \approx \phi(\mathbf{r}) + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{pour } r \gg R$$

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi^+(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$$

- ▷ Approximation de Born :

Effet du diffuseur faible
(haute énergie incidente) \Rightarrow résolution itérative de
l'équation intégrale \Rightarrow série de Born

Approximation de Born au 1er ordre

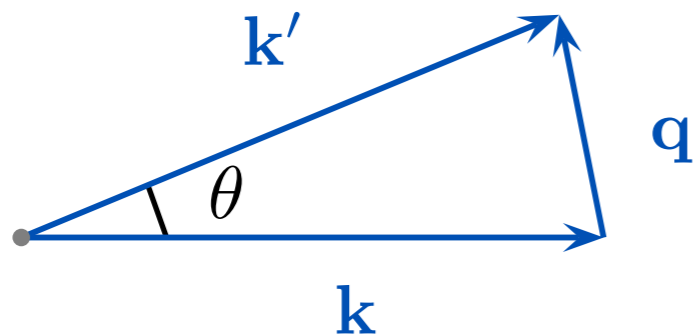
Approximation de Born au 1er ordre :

$\psi^+(\mathbf{r}') \rightarrow \phi(\mathbf{r}') = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$ (onde incidente) dans l'expression de $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} \propto \mathcal{F}_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}[V(\mathbf{r})]$$

▷ Potentiel à symétrie sphérique :

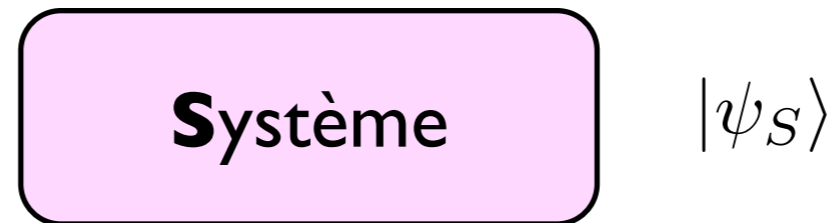
$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q(\theta)} \int_0^{+\infty} rV(r) \sin(q(\theta)r) dr$$



$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \Rightarrow q(\theta) = 2k \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

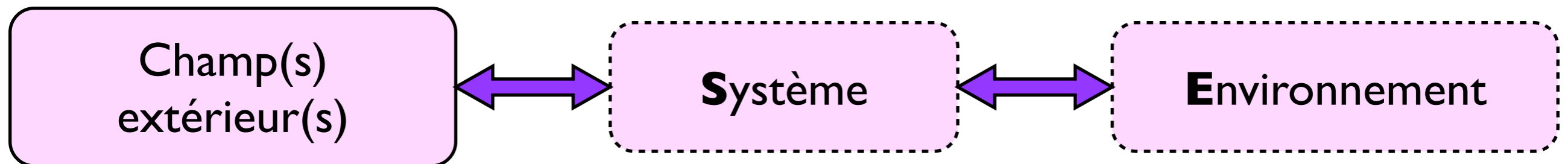
Dynamique des systèmes quantiques ouverts

Systemes fermés ou ouverts



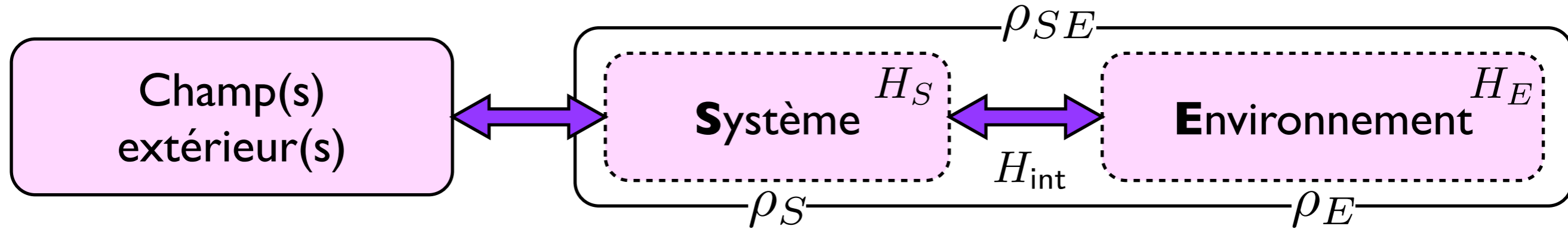
Postulat I. À tout instant t , l'état d'un système physique *fermé* est décrit par la donnée d'un ket $|\psi(t)\rangle$ normé appartenant à un espace d'Hilbert \mathcal{H} .

... et si le système physique n'est pas fermé ?



Exemple : atome excité (S) + champ électromagnétique ambiant (E)
+ faisceaux lasers

Systeme quantique ouvert

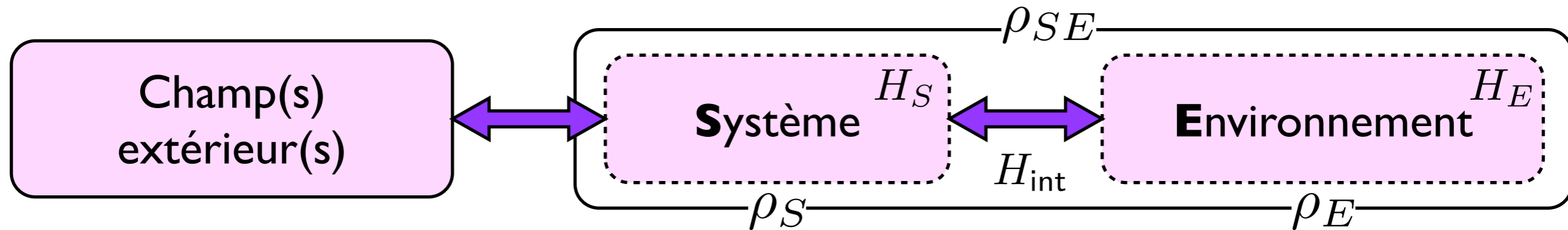


- ▷ Espaces d'Hilbert : \mathcal{H}_S pour le système (S), \mathcal{H}_E pour l'environnement (E) et $\mathcal{H}_{SE} = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ pour l'ensemble ($S + E$)
- ▷ Seul $S + E$ est fermé et peut être décrit par un vecteur d'état $|\psi_{SE}\rangle$ normé.
- ▷ Il est nécessaire, pour décrire l'état du système ouvert S , d'introduire un opérateur densité réduit ρ_S obtenu à partir de $\rho_{SE} = |\psi_{SE}\rangle\langle\psi_{SE}|$ par l'opération de trace partielle :

$$\rho_S = \text{Tr}_E(\rho_{SE}) = \sum_j \langle \phi_E^{(j)} | \rho_{SE} | \phi_E^{(j)} \rangle$$

où $\{|\phi_E^{(j)}\rangle\}$ forme une base orthonormée de \mathcal{H}_E .

Opérateur densité réduit



- ▷ L'opération de trace partielle $\text{Tr}_E(\cdot)$ est l'unique opération qui pour toutes observables O_S de S et $O = O_S \otimes \mathbb{1}_E$ de $S + E$ fournit les mêmes statistiques de mesures selon que O soit mesuré sur $S + E$ dans l'état ρ_{SE} ou que O_S le soit sur S dans l'état $\rho_S = \text{Tr}_E(\rho_{SE})$.
- ▷ En particulier, la valeur moyenne de l'observable O_S est donnée par

$$\langle O_S \rangle = \text{Tr}_S [O_S \rho_S] = \text{Tr}_{S+E} [(O_S \otimes \mathbb{1}_E) \rho_{SE}]$$
- ▷ Comme tout opérateur densité, ρ_S est un opérateur positif de trace unité : $\langle \phi_S | \rho_S | \phi_S \rangle \geq 0 \quad \forall |\phi_S\rangle$ ($\Rightarrow \rho_S = \rho_S^\dagger$) et $\text{Tr}_S(\rho_S) = 1$.

Evolution temporelle

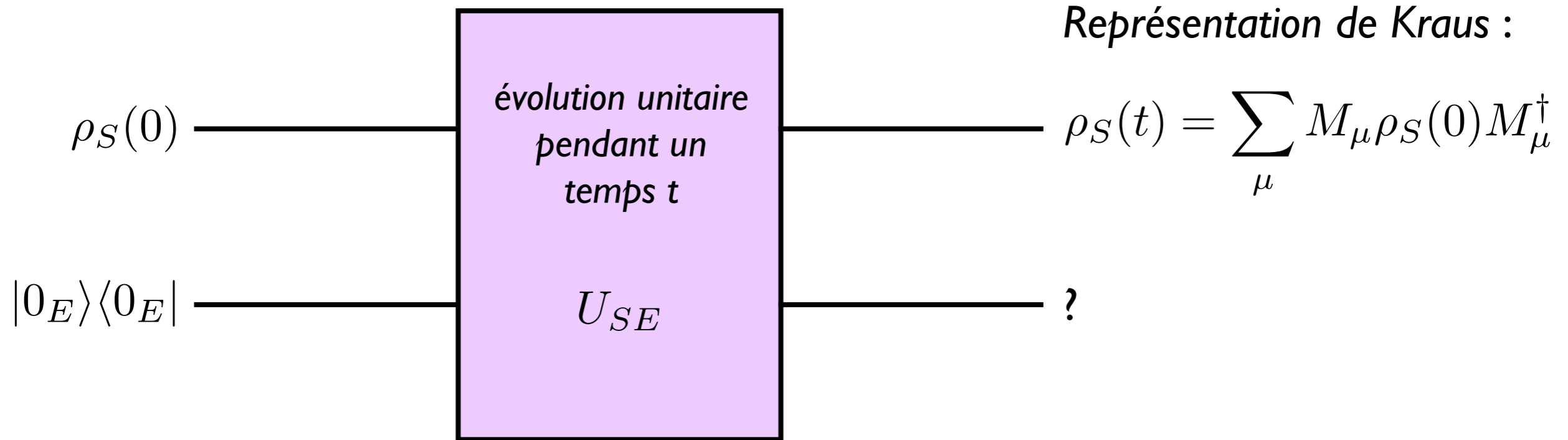
- ▷ La dynamique du système isolé $S + E$ est régie par l'équation de Liouville-von Neumann (qui découle de l'équation de Schrödinger pour $|\psi_{SE}\rangle$) :

$$\frac{d\rho_{SE}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H_{\text{tot}}, \rho_{SE}(t)]$$

avec $H_{\text{tot}} = H_S \otimes \mathbb{1}_E + \mathbb{1}_S \otimes H_E + H_{\text{int}}$

- ▷ L'équation d'évolution de ρ_S est obtenue en prenant la trace partielle sur l'environnement de l'équation de Liouville-von Neumann. Elle préserve la positivité et la trace unité de $\rho_S(t)$ à tout instant t .
- ▷ Une équation *pilote* ou *maîtresse* est une équation différentielle (et donc locale dans le temps) décrivant l'évolution temporelle de ρ_S . Ce type d'équation apparaît dans le cadre de l'approximation markovienne (qui revient à négliger les effets de mémoire)

Représentation de Kraus



où $M_{\mu} = \langle \mu_E | U_{SE} | 0_E \rangle$ avec $\sum_{\mu} M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} = \mathbb{1}_S$ (relation de fermeture)

- ▷ L'évolution de l'état du système peut s'interpréter comme celle résultant d'une opération de mesure sans qu'il soit pris connaissance du résultat
- ▷ La représentation de Kraus conserve l'hermiticité, la positivité et la trace unité de ρ_S à tout instant

Opérateurs de mesure

Postulat 3. Toute opération de mesure sur un système physique S (opération visant à faire interagir le système initialement fermé avec un système extérieur, typiquement un appareil de mesure, pour obtenir des informations sur l'état du système) ne peut donner qu'un ensemble déterminé de résultats et est décrite par la donnée d'un ensemble d'opérateurs $\{M_\mu\}$, dits *opérateurs de mesure*, agissant dans l'espace des états du système, l'indice μ se référant aux différents résultats de mesure possibles. Les opérateurs de mesure satisfont la relation de complétude

$$\sum_{\mu} M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} = \mathbb{1}_S \quad (1)$$

Si $\hat{\rho}_S$ est l'état du système *avant* l'opération de mesure, la probabilité d'obtenir le résultat μ vaut

$$p_{\mu} = \text{Tr}_S(M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} \rho_S) \quad (2)$$

et, si ce résultat a été obtenu, l'état du système juste *après* la mesure est donné par

$$\rho_{S,\mu} = \frac{M_{\mu} \rho_S M_{\mu}^{\dagger}}{\text{Tr}_S(M_{\mu}^{\dagger} M_{\mu} \rho_S)} \quad (3)$$

Etat du système après une “opération de mesure”

Si une opération de mesure sur un système est réalisée sans qu'il soit pris connaissance du résultat de mesure, alors l'état du système après la mesure est, *avec certitude*, l'état mixte

$$\rho_S \rightarrow \sum_{\mu} p_{\mu} \rho_{S,\mu} = \sum_{\mu} M_{\mu} \rho_S M_{\mu}^{\dagger}$$

C'est précisément la représentation de Kraus. Revenons aux opérateurs de mesure tels que définis par le biais de l'évolution unitaire du système $S + E$:

$$U_{SE}(t) |\varphi_S \otimes 0_E\rangle = \sum_{\mu} (M_{\mu}(t) \otimes \mathbb{1}_E) |\varphi_S \otimes \mu_E\rangle$$

Cette équation décrit un *saut quantique* : dans l'intervalle de temps $[0, t]$, le système $S + E$ "saute" de l'état $|\varphi_S \otimes 0_E\rangle$ à une superposition d'états $M_{\mu} |\varphi_S \otimes \mu_E\rangle$.

Interprétation physique :

Supposons que nous effectuions une mesure de l'environnement et que le résultat soit $|\mu\rangle$. Alors, après la mesure, le système S se trouve dans l'état $M_{\mu} |\varphi_S\rangle$: le saut quantique décrit l'évolution de S sous l'effet d'une mesure de l'environnement.