MÉMORIAL DES SCIENCES MATHÉMATIQUES

T. KAHAN
G. RIDEAU
P. ROUSSOPOULOS

Les méthodes d'approximation variationnelles dans la théorie des collisions atomiques et dans la physique des piles nucléaires

Mémorial des sciences mathématiques, fascicule 134 (1956)
<http://www.numdam.org/item?id=MSM_1956__134__1_0>

© Gauthier-Villars, 1956, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la collection « Mémorial des sciences mathématiques » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (http://www.numdam.org/conditions). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM
Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
http://www.numdam.org/

BSM 3152

MÉMORIAL
DES
SCIENCES MATHÉMATIQUES

PUBLIÉ SOUS LE PATRONAGE DE

L'ACADÉMIE DES SCIENCES DE PARIS,

DES ACADÉMIES DE BELGRADE, BRUXELLES, BUCAREST, COÏMBRE, CRACOVIE, KIEW, MADRID, PRAGUE, ROME, STOCKHOLM (FONDATION MITTAG-LEFFLER), DE LA SOCIÉTÉ MATHÉMATIQUE DE FRANCE, AVEC LA COLLABORATION DE NOMBREUX SAVANTS.

DIRECTEUR :
Henri VILLAT
Membre de l'Institut,
Professeur à la Sorbonne,
Directeur du « Journal de Mathématiques pures et appliquées ».

FASCICULE CXXXIV

Les méthodes d'approximation variationnelles dans la théorie des collisions atomiques et dans la physique des piles nucléaires

Par MM. T. KAHAN, G. RIDEAU et P. ROUSSOPOULOS
Maître de Recherches — Chargé de Recherches — Attaché de Recherches

PARIS
GAUTHIER-VILLARS, ÉDITEUR-IMPRIMEUR-LIBRAIRE
Quai des Grands-Augustins, 55

1956

FACULTÉ DES SCIENCES - DOMAINE UNIVERSITAIRE
SERVICE DE MATHÉMATIQUES PURES
38 - SAINT-MARTIN-D'HÈRES

© 1956 by Gauthier-Villars.
s droits de traduction, de reproduction et d'adaptation réservés
pour tous pays.

LES MÉTHODES
D'APPROXIMATION VARIATIONNELLES
DANS LA THÉORIE DES COLLISIONS ATOMIQUES
ET DANS LA PHYSIQUE
DES PILES NUCLÉAIRES

Par MM. T. KAHAN, G. RIDEAU
et P. ROUSSOPOULOS.

CHAPITRE I.

Le problème des collisions en mécanique ondulatoire.

1. **Introduction.** — Ces dernières années ont vu apparaître des méthodes d'approximation variationnelles nouvelles et puissantes pour l'étude des collisions atomiques, des réacteurs nucléaires et de la diffraction des ondes brogliennes, électromagnétiques et sonores. En effet, l'impossibilité où l'on se trouve habituellement de résoudre de manière rigoureuse les équations différentielles attachées à des problèmes de diffusion, nucléaires ou autres, a amené divers auteurs à proposer des méthodes de résolution approchées à l'aide de principes variationnels, d'aspect et de structure fort différents. L'objet du présent ouvrage est de présenter un exposé cohérent et clair de ces diverses méthodes dont l'importance va sans cesse en augmentant.

2. Le problème de collision en mécanique ondulatoire. — En mécanique classique, pour calculer la probabilité de choc dans l'intervalle de temps dt entre deux particules sphériques de diamètre a, on considère un cylindre ayant pour base πa^2 et une hauteur égale à la distance $dx = v\,dt$ parcourue par une particule pendant dt. La probabilité de choc est alors égale à la probabilité qu'a le centre de l'autre particule de se trouver dans ce volume cylindrique. Exprimée moyennant la densité des particules ρ, cette probabilité est

$$dP = \rho\pi a^2 v\,dt. \tag{1}$$

En toute rigueur, cette formule n'est valable que pour des intervalles de temps dt assez brefs pour que dP soit petit. La probabilité qu'une particule soit diffusée lorsqu'elle traverse une épaisseur donnée de matière dx, s'exprime d'habitude moyennant la « section efficace de choc ». Remarquons d'abord que chaque particule choquée offre à la particule incidente une aire de cible de $\sigma = \pi a^2$. Cette aire de cible est précisément la section droite du volume cylindrique dans lequel le choc a lieu, vu dans la direction de mouvement du pinceau incident.

Si l'on a affaire à un échantillon contenant de nombreuses molécules, l'aire de cible totale sera la somme des sections des molécules individuelles tant qu'il n'y a pas d'interférence entre les particules incidentes et que celles-ci sont assez éloignées les unes des autres pour que le processus de choc n'intéresse qu'une seule molécule à la fois. Une feuille de substance assez mince d'aire S et d'épaisseur dx, contenant $\rho S\,dx$ molécules, offrira donc une aire de cible efficace égale à $\rho S\sigma\,dx$. La fraction de l'aire totale S qui est « interceptée » par les molécules de la substance est alors $\frac{\rho\sigma\,dx}{S} = \rho\sigma\,dx$.

La probabilité qu'une particule incidente subisse un choc est précisément égale à cette fraction. Ainsi

$$dP = \rho\sigma\,dx = \rho\sigma v\,dt. \tag{2}$$

Ceci est égal à (1) si $\sigma = \pi a^2$. L'équation (2) fondamentale peut ainsi s'écrire $\frac{dP}{dt} = \rho\sigma v$.

Elle relie la probabilité de diffusion dP par unité de temps ($dt = 1$) à la section efficace (de choc) σ.

Comment se présente le problème de choc en Mécanique quantique? Nous allons considérer l'impact d'une particule de masse m sur un centre diffuseur tel qu'un atome ou un noyau en supposant ce centre assez lourd pour ne pas subir de recul, en nous bornant aux chocs élastiques. On peut alors représenter schématiquement le centre diffuseur par un champ de force dérivant d'un potentiel $V(r)$ de symétrie sphérique, r étant la distance comptée à partir du centre. Soit donc un pinceau de particules incidentes représenté par une onde broglienne progressive plane. Une partie de cette onde incidente sera déviée et, à partir de l'intensité de l'onde diffusée, on calculera la probabilité de diffusion. L'onde incidente sera décrite par la fonction d'onde

$$\psi_i = \psi_0 \exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right) = \exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right), \tag{3}$$

si l'on suppose $\psi_0 = 1$. Lorsque l'onde incidente pénètre dans le champ diffuseur, il se produit une onde diffusée $v(r)$, la fonction d'onde complète sera dès lors

$$\psi = \exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right) + v(r). \tag{4}$$

Comme le pinceau incident et le pinceau diffusé sont stationnaires, les probabilités deviennent indépendantes du temps et l'onde complète aura pour expression $\left(\hbar = \frac{h}{2\pi}\right)$

$$\Psi = \psi \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = \left[\exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right) + v(r)\right] \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \tag{5}$$

Si le potentiel $V(r)$ tend vers zéro lorsque $r \to \infty$, E est l'énergie cinétique du pinceau incident

$$E = \frac{p_2}{2m} = \frac{k^2\hbar^2}{2m}.$$

L'équation de Schrödinger correspondante a pour expression

$$H\psi = \left(\frac{p^2}{2m} + V\right)\psi = E\psi. \tag{6}$$

Comme $\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) \exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right) = 0$,

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) v(r) = -V(r)\left[\exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right) + v(r)\right] = -V(r)\psi(r), \tag{7}$$

soit

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{E}\right)\varphi(r) = \mathrm{V}\psi = \mathrm{V}\exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right) + \mathrm{V}\,\varphi(r). \tag{8}$$

Comme $\mathrm{V}(r) \to 0$, $r \to \infty$, les particules tendent vers un mouvement libre ($\mathrm{V} = 0$) lorsque $r \to \infty$. Comme l'onde incidente est déjà représentée par $\exp\left(i\vec{k}_0.\vec{r}\right)$, $\varphi(r)$ représente seulement le pinceau émergent (c'est-à-dire divergent à partir du centre). La fonction $\varphi(r)$ doit donc tendre asymptotiquement vers

$$\varphi(r) \underset{r \to \infty}{\to} f(\theta)\frac{\exp(ikr)}{r}, \tag{9}$$

θ étant l'angle polaire autour de la direction incidente prise pour axe polaire. La fonction $f(\theta)$ est appelée « amplitude de diffusion ».

Pour obtenir la section efficace de choc, calculons d'abord la densité de flux statistique incident (nombre de particules par centimètre carré par seconde). Celle-ci a pour expression [1]

$$\vec{s}_i = \frac{\hbar}{im}\left[\psi_i^* \nabla\psi_i - \psi_i \nabla\psi_i^*\right] = \frac{\hbar k_0}{m}.$$

Pour l'onde diffusée, le flux etant dirigé radialement, on a

$$\vec{s}_d = \frac{hk}{mr^2}|f(\theta)|^2\frac{\vec{r}}{r}.$$

En intégrant la densité de flux $\vec{s}_d$ sur une sphère S de rayon r, le flux total (densité de flux $\times$ S) de l'onde diffusée sera à travers S

$$\int_{\mathrm{S}} r^2 s_d\, d\Omega = \frac{2\pi hk}{m}\int_0^{\pi}|f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta,$$

$d\Omega = \frac{d\mathrm{S}}{r^2}$ étant l'élément d'angle solide. Le rapport du flux total diffusé à la densité de flux $s_i = \frac{\hbar k}{m}$ de l'onde plane incidente est par

---

(1) On peut encore dire que la densité de probabilité $\mathrm{P}_i = (\psi_i)^2 = 1$. La densite de flux est alors

$$\mathrm{P}_i v = v = \frac{\hbar k_0}{m}.$$

définition, la section efficace de l'obstacle

$$(10)\qquad \sigma = \frac{\int s_d r^2\, d\Omega}{s_i} = 2\pi \frac{|k|}{|k_0|} \int_0^\pi |f(\theta)|^2 \sin\theta\, d\theta,$$

avec $|k| = |k_0|$ dans notre hypothèse du choc élastique. Pour trouver σ, il faut donc résoudre l'équation différentielle (7) pour $v(r \to \infty)$. La solution a pour expression

$$(11)\qquad v(r) = \frac{2\pi m}{h^2} \int V(r')\,\psi(r')\, \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, dr'.$$

Pour $r \to \infty$, $|\vec{r}-\vec{r}'| \cong r - \vec{r}'\frac{\vec{r}}{r}$,

$$(12)\qquad \underset{r\to\infty}{v(r)} = -\frac{2\pi m}{h^2}\frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik\vec{n}.\vec{r}'} V(r')\,\psi(r')\, dr'.$$

Or le vecteur $\vec{k}'$ qui pointe dans la direction de l'onde émergente est égal à $k\vec{n}$; par conséquent

$$(13)\qquad \underset{r\to\infty}{v(r)} \to -\frac{2\pi m}{h^2}\frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(r')\,\psi(r')\, dr'.$$

Cela conduit, en vertu de (9), à

$$(14)\qquad f(\theta) = -\frac{2\pi m}{h^2} \int e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(r')\,\psi(r')\, dr'$$

et, partant, à

$$(15)\qquad \sigma = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{2\pi m}{h^2}\right)^2 \left| \int e^{-i\vec{k}'.\vec{r}'} V(r')\,\psi(r')\, dr' \right|^2.$$

L'équation (11) est une équation intégrale dont la solution satisfait à l'équation d'onde avec les conditions aux limites correctes. Comme $\psi = e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}} + v(r)$, il vient

$$(16)\qquad \begin{aligned} v(r) = &-\frac{2\pi m}{h^2} \int v(r')\, \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, V(r')\, dr' \\ &- \frac{2\pi m}{h^2} \int e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{r}'}\, \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\, V(r')\, dr'. \end{aligned}$$

Quelle est la signification physique de (11)? Remarquons pour le voir que $v(r)$ peut se concevoir comme la partie de la fonction

d'onde due au potentiel diffuseur. $v(r)$, par ailleurs, est une intégrale renfermant $\frac{\exp\left[ik\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right]}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}$.

Or c'est précisément une onde sphérique issue du point r', avec une longueur d'onde $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Chaque onde sphérique apparaît donc pondérée par le facteur amplitude $V(r')\psi(r')$. En d'autres termes, chaque point de l'espace fournit une contribution égale au produit du potentiel en ce point par la fonction d'onde $\psi(r')$, $\psi(r')$ étant l'onde totale, renfermant toutes les contributions dues aux ondes diffusées aussi bien qu'à l'onde incidente. Cette image correspond à la diffraction de Fresnel en Optique. De même, la forme asympto-

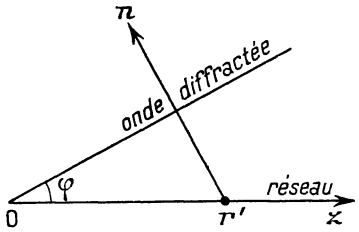

Fig. 1.

tique (13) de l'onde montre que l'onde émergente, se propageant (*fig.* 1) dans la direction $\vec{n}$ est la somme d'un ensemble de vaguelettes issues des points r'. Chaque point fournit une amplitude $V(r')\psi(r')$ et la phase varie suivant le facteur $\exp\left[-ik(\vec{n}.\vec{r}')\right]$. Cette image correspond exactement à la diffraction de Frauenhofer en Optique, c'est-à-dire à la diffraction aux grandes distances. Rappelons à cet effet que l'on calcule le système de diffraction d'un réseau en Optique en prenant une onde proportionnelle à l'amplitude d'onde existant sur le réseau et en superposant les contributions de chaque portion avec une phase

$$\exp\left[-ik(\vec{n}.\vec{r}')\right] = \exp\left[-ikz\sin\varphi\right],$$

où $\vec{n}$ la direction d'observation et z la coordonnée mesurée le long du réseau.

Les équations (13) et (14) peuvent être considérées comme

l'expression rigoureuse du principe d'Huyghens pour les ondes brógliennes.

3. **L'approximation de Born.** — L'approximation de Born (approximations successives) s'applique lorsque V est petit. Si, en effet, V est assez petit, le terme en $V(r')\,v(r')$ figurant au second membre de (16) est du second ordre (v étant déjà du premier ordre), donc négligeable. Cela revient à remplacer ψ par l'onde incidente : $\psi_i = \exp\left[i\left(\vec{k}_0 . \vec{r}\right)\right]$, ce qui est légitime lorsque l'onde diffusée est petite comparée à l'onde incidente. Lorsqu'on porte cette approximation dans (16), on obtient

$$v \simeq -\frac{2\pi m}{h^2}\int V(r')\, e^{i\vec{k}_0.\vec{r}}\,\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}\,dr' \tag{17}$$

et pour $r' \ll r$ [$V(r')$ tendant vers zéro lorsque $r' \to \infty$, toutes les contributions à cette intégrale viennent donc de valeurs bornées de r']

$$f(\theta) \cong -\frac{2\pi m}{h^2}\int e^{i(\vec{k}_0-\vec{k}').\vec{r}'}\, V(r')\,dr' \tag{18}$$

et

$$\sigma(\theta) \cong \left(\frac{2\pi m}{h_3}\right)^2 \left|\int e^{i\vec{K}.\vec{r}'}\, V(r')\,dr'\right|^2, \tag{19}$$

avec $\vec{K} = \vec{k}_0 - \vec{k}$ (1). $\vec{k}_0$ est le vecteur de module k qui a la direction

(1) Lorsque l'atome diffuseur a une masse M comparable à m, il suffit de remplacer m par $\mu = \frac{mM}{m+M}$ pour se ramener aux phénomènes ayant lieu dans le référentiel barycentrique de la particule incidente (m) et de la particule choquée (M). Si E_0 est l'énergie initiale de la particule incidente, M étant au repos initialement, l'énergie associée au mouvement relatif sera

$$E = \frac{m}{M+m}E_0 = \frac{mM}{m+M}v^2,$$

v étant la vitesse relative. L'équation (8) peut donc se concevoir comme décrivant le choc d'une particule de masse $\frac{mM}{m+M}$, de vitesse initiale v et d'énergie cinétique

$$E = \frac{1}{2}\frac{mM}{m+M}v^2,$$

avec un potentiel immobile $V(r)$, r étant le vecteur distance d'une particule fictive $\frac{mM}{M+m}$ au centre (origine) du potentiel diffuseur.

du pinceau incident (axe polaire) et $\vec{k}$ est un vecteur du même module k qui a la direction de l'angle polaire θ au point où l'amplitude de diffusion est mesurée : $|K| = 2k \sin\frac{\theta}{2}$. Sa signification physique est que $\hbar\vec{K}$ est l'impulsion cédée par la particule incidente au potentiel diffuseur durant la collision. Si l'on effectue ainsi une analyse par intégrale de Fourier du potentiel diffuseur en ondes sphériques harmoniques, il résulte de (18) que l'amplitude de diffusion dans une direction particulière est proportionnelle à la composante de Fourier du potentiel diffuseur correspondant à la variation d'impulsion de la particule pendant le choc.

4. Théorie rigoureuse des déphasages. — Le pinceau incident sera représenté comme précédemment, par une onde plane dont le vecteur $\vec{r}$ sera la distance entre le centre diffuseur M et le projectile m : $\exp(i\vec{k}\vec{r}) = \exp(ikz)$, l'axe z étant choisi parallèle à $\vec{k}$,

$$\vec{k} = \frac{mM}{m+M}\frac{\vec{v}}{\hbar} = \frac{\mu}{\hbar}\vec{v}.$$

L'onde plane est développable en fonctions sphériques harmoniques [1] (formule de Lord Rayleigh). Pour $kr \gg 1$,

$$(20)\quad \exp(ikz) \cong \frac{\sqrt{\pi}}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{2l+1}\, i^{l+1}\left\{\exp\left[-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right] - \exp\left[+i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right]\right\} Y_l^0(\theta).$$

Chaque composante est la superposition d'une onde sphérique incidente et d'une onde sphérique émergente d'égale intensité (premier et second terme de l'accolade).

Si une onde broglienne de cette forme frappe le centre diffuseur (atome ou noyau), cette superposition est modifiée de deux manières :

1° l'intensité de l'onde sphérique émergente se trouve réduite du

---

[1] L. DE BROGLIE, *De la Mécanique ondulatoire à la théorie des noyaux*, t. III, p. 21. Paris, Hermann, 1946.

fait de l'absorption des particules (dans notre choc élastique, cet effet est nul);

2° la phase de l'onde émergente est modifiée.

Les deux effets donnent lieu à une onde diflusée car l'onde émergente n'est plus capable d'interférer avec l'onde incidente pour redonner l'expression (20). Ainsi, après le choc, la fonction d'onde réelle ψ, au lieu d'avoir la forme asymptotique (20) aura pour expression

$$(21)\quad \psi_t \to \frac{\sqrt{\pi}}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{2l+1}\, i^{l+1}\left\{\exp\left[-i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right] - \varepsilon_l \exp\left[+i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right]\right\} Y_l^0(0) = \psi_i + \psi_d,$$

où le nombre ε traduit la modification subie, du fait du choc, par l'onde émergente de moment cinétique l. Comme pour une collision élastique l'intensité de l'onde sphérique émergente doit égaler celle de l'onde sphérique incidente $|\varepsilon| = 1$.

On pourra donc poser : $\varepsilon_l = \exp(2i\delta_l)$, δ_l étant le déphasage subi par l'onde sphérique émergente du fait du choc. L'onde diffusée ψ_d est la différence entre l'onde réelle (21) et l'onde incidente

$$(22)\quad \begin{aligned}\Psi_d = \psi_t - \psi_i &= \psi - \exp(ikz)\\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{2l+1}\, i^{l+1}[1-\exp(2i\delta_l)]\\ &\quad\times\left[\exp i\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)\right] Y_l^0(0).\end{aligned}$$

La section efficace de diffusion s'obtient en divisant le flux total S_d (nombre total de particules diffusées par seconde), par la densité de flux s des projectiles (nombre de projectiles par centimètre carré par seconde). Entourons, pour calculer S_d, le centre diffuseur par une grande sphère de rayon r et égalons S_d au flux de ψ_d à travers cette sphère

$$(23)\quad S_d = \frac{\hbar}{im}\int\left(\psi_d^*\frac{\partial\psi_d}{\partial r} - \psi_d\frac{\partial\psi_d^*}{\partial r}\right) r^2 \sin\theta\, d\theta\, d\Phi,$$

l'intégrale étant étendue à la sphère. En vertu des conditions d'orthonormalité des Y_l^0, on obtient

$$(24)\quad S_d = \frac{v\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,|1-\exp(2i\delta^l)|^2.$$

La valeur de la densité de flux est d'autre part (d'après la page 4) $S_d = v$, de sorte que la section efficace de diffusion sera

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \tag{25}$$

Ainsi le problème de la collision se trouve ramené au calcul des déphasages δ_l dont l'importance dans cette théorie est majeure. Ces déphasages sont définis de la façon suivante. Dans le champ radial du centre diffuseur, l'onde broglienne doit satisfaire à l'équation d'onde

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + [E - V(r)] \right\} \psi = 0, \tag{26}$$

soit

$$\{ \Delta + [k^2 - U(r)] \} \psi = 0, \qquad \text{avec} \quad U(r) = \frac{2m V(r)}{\hbar^2}. \tag{27}$$

En raison de la symétrie cylindrique du phénomène, ψ est développable de la manière suivante :

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos\theta) L_l(r), \tag{28}$$

P_l étant un polynome de Legendre et $L_l(r)$ devra être solution de l'équation

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dL_l}{dr} \right) + \left[k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] L_l = 0, \tag{29}$$

comme on le vérifie par substitution dans (27). Le théorème de Fuchs montre alors que pour chaque valeur de l, il y a une seule solution L_l de (29) qui soit régulière et finie à l'origine.

Or la solution de (29) a pour expression asymptotique

$$L_l(r)_{r \to \infty} \to \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right), \tag{30}$$

à condition que $U(r)$ tende vers zéro plus rapidement que $\frac{1}{r}$. L'équation (30) définit δ_l. On est ainsi ramené à la solution d'une équation différentielle de type (29) comportant une fonction potentielle $U(r)$ d'expression généralement fort compliquée et que l'on ne sait pas résoudre de manière rigoureuse. On conçoit dès lors le rôle éminent que sont appelées à jouer dans ce genre de problèmes les méthodes

d'approximation variationnelles dont il va être question dans les chapitres suivants.

Comment se présentent en effet les choses, dans la physique des collisions ? Dans l'interprétation des données de diffusion nucléaires l'on a été amené à procéder suivant le schéma.

(31) $\boxed{\text{Section efficace expérimentale}} \rightarrow \boxed{\text{Déphasages } \delta_l} \leftarrow \boxed{\text{Potentiel nucléaire théorique } V(r)}$

Les déphasages δ constituaient donc bien le terrain où se rencontraient théorie et expérience. L'analyse par méthodes variationnelles procédera par contre suivant le schéma

(32) $\boxed{\text{Section efficace de choc expérimentale}} \rightarrow \boxed{\text{Déphasages } \delta} \rightarrow \boxed{\text{Paramètres variationnels (fonctions d'essai)}} \quad \boxed{\text{Potentiel théorique } V(t)}$

Ici donc le terrain de rencontre entre théorie et expérience n'est plus les déphasages δ eux-mêmes, mais bien les paramètres variationnels impliqués par les déphasages. Cela simplifie le travail numérique, car seul un petit nombre de paramètres doit être calculé pour chaque choix fait pour l'énergie potentielle $V(r)$, au lieu d'avoir à évaluer un grand nombre de déphasages δ_l.

On peut parvenir de la sorte à une intelligence qualitative de ces paramètres de façon à prévoir la différence dans les propriétés de diffusion de divers points de potentiel par exemple. Le schéma (32) permet également de fournir un critère pour l'ajustement optimum aux données : on ajuste une forme fonctionnelle bien définie aux déphasages de manière à pouvoir déterminer les paramètres et les erreurs commises par la méthode des moindres carrés,

CHAPITRE II.

MÉTHODES VARIATIONNELLES OU THÉORIE QUANTIQUE DES COLLISIONS. VARIATIONS SUR UN THÈME FONDAMENTAL.

1. Introduction. — Le principe des méthodes variationnelles qui font l'objet de ce chapitre remonte à un travail de Volterra de l'année 1884 [14]. Il a été amené à cette méthode en étudiant le

problème de l'équilibre de l'électricité sur la calotte d'une surface conductrice de révolution, soumise à l'induction de corps non conducteur disposés symétriquement par rapport à l'axe de révolution. Ce problème appartient à une classe de problèmes qui se ramènent au suivant : trouver une fonction $\varphi(x)$ sommable telle que

$$(1) \qquad f(t) = \int_0^a \varphi(x) K(x, t)) \, dx \qquad (0 \leqq x \leqq a),$$

où $f(x)$ et $K(x, t)$ sont des fonctions connues, cette dernière étant une fonction de x sommable.

Supposons la fonction $K(x, t)$ symétrique par rapport à x et t, et $f(x)$ intégrable; alors le problème précédent se réduit à cet autre : déterminer $\varphi(t)$ de manière que la variation première de

$$(2) \qquad J[\varphi] = \frac{1}{2} \int_0^a \int_0^a \varphi(x) \varphi(t) K(x, t) \, dx \, dt - \int_0^a f(x) \varphi(x) \, dx$$

soit nulle; un problème de ce genre se réduit dans bien des cas à celui de la détermination des maxima et minima de J. En fait, en appliquant le calcul des variations, il vient

$$\begin{aligned} \delta J &= \frac{1}{2} \int_0^a \int_0^a \delta\varphi(x) \varphi(t) K(x, t) \, dx \, dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_0^a \int_0^a \delta\varphi(t) \varphi(s) K(x, t) \delta x \, dt - \int_0^a f(t) \delta\varphi(t) \, dt \\ &= \int_0^a \delta\varphi(t) \left[\int_0^a \varphi(x) K(x, t) \, dx - \int (t) \right] dt, \end{aligned}$$

et pour que $\delta J = 0$, il faudra avoir

$$(3) \qquad \int_0^a \varphi(x) K(x, t) \, dx - f(t) = 0,$$

C. Q. F. D.

On peut étendre la méthode de Volterra de la façon suivante.

Considérons l'expression

$$(4) \quad J[\varphi] = \int_D \int_D \varphi(t) K(s, t) \varphi(t) \, ds \, dt + \int_D [\varphi(s)]^2 \, ds - 2 \int \varphi(s) f(s) \, ds,$$

où $K(s, t)$ est une fonction symétrique continue des variables s, et t dans le pavé $D(a \leqq s \leqq b, \ a \leqq t \leqq b)$, $f(s)$ est une fonction

continue donnée de s (une onde incidente dans un problème de diffusion, par exemple) et $\varphi(s)$ la fonction continue recherchée (onde diffusée), toutes les intégrales étant prises sur D, et recherchons la valeur extrémale de (4) [1]. Posons à cet effet comme opérateur intégral H correspondant au noyau $K(s, t)$

$$(5) \qquad H = \int_D K(s, t) \{ \quad \} \, ds$$

et mettons (4) sous la forme

$$(4') \qquad J[\varphi] = (\varphi, H\varphi) + (\varphi, \varphi) - 2(\varphi, f),$$

d'où

$$\delta J = 2(\delta\varphi, H\varphi) + 2(\delta\varphi, \varphi) - 2(\delta\varphi, f) = 2(\delta\varphi, H\varphi - \varphi - f).$$

La condition d'extremum $\delta J = 0$ fournit l'équation d'Euler de l'équation intégrale (4)

$$(6) \qquad \varphi(t) = f - H\varphi = f(t) - \int_0 K(s, t)\varphi(t)\, ds,$$

soit

$$(6') \qquad \varphi = (1 + H)^{-1} f$$

l'opérateur $1 + H$ étant supposé posséder un inverse.

La valeur extrémale de J sera dès lors

$$\begin{aligned} J_e = J[(1+H)^{-1}f] &= ((1+H)^{-1}f, H(1+H)^{-1}f) \\ &- ((1+H)^{-1}f, (1+H)^{-1}f) - 2((1+H)^{-1}f, f). \end{aligned}$$

On est alors tout naturellement conduit à une fonctionnelle analogue à (4), mais où le facteur de normalisation ne jouera pas. On y parvient immédiatement en divisant les deux premiers termes du second membre de (4) par le carré du troisième terme et l'on obtient

$$(7) \qquad \begin{aligned} J[\varphi] &= -\frac{\int_D\int_D K(s, t)\,\varphi(s)\varphi(t)\, ds\, dt - \int [\varphi(s)]^2\, ds}{\left[\int_D \varphi(s) f(s)\, ds\right]^2} \\ &= -\frac{(\varphi, H\varphi) - (\varphi, \varphi)}{(\varphi, f)^2} = \frac{(\varphi, H\varphi - \varphi)}{(\varphi, f)^2}, \end{aligned}$$

[1] On peut aisément généraliser pour un domaine à plusieurs dimensions.

Comme (7) est maintenant « homogène » en φ, normons φ en imposant

$$(\varphi, f) = 1, \tag{8}$$

Il vient dès lors, en vertu de (7) et (8),

$$\delta J = 2(\delta\varphi, H\varphi - \varphi), \qquad (\delta\varphi, f) = 0,$$

d'où l'équation d'Euler de notre problème (7)

$$\left\{\begin{array}{l} \varphi(t) = \lambda f(t) - \int_D K(s, t)\,\varphi(s)\,ds, \\ \text{soit} \\ \quad \varphi = \lambda(1 + H)^{-1} f. \end{array}\right. \tag{9}$$

(λ = multiplicateur de Lagrange).

La valeur extrémale de (7) sera donc

$$J_e[(1 + H^{-1})f] = ((1 + H)^{-1} f, f). \tag{10}$$

Ceci établi, on procède, comme on le verra par la suite dans un problème de collision ou de diffusion de la façon suivante. On commence par mettre le problème sous la forme de solution d'une équation différentielle avec conditions aux limites pour transformer ensuite cette formulation en une équation intégrale à l'aide d'une fonction de Green. J. Schwinger a mis en œuvre à ce propos une méthode variationnelle qui ramène la solution de l'équation intégrale à la solution d'un problème variationnel. Or $\delta J = 0$ (7) traduit précisément la méthode de Schwinger. Il suffit, en effet, pour retrouver l'équation de cet auteur, de poser à titre de cas particulier de (4) ou (7) : [si $V(r)$ est le potentiel d'interaction dans un choix de nombre quantique azimutal $S = 0$]

$$\varphi = \sqrt{V}\,u, \qquad k^{-1}\sqrt{V}\sin kr = f,$$

pour que $k \operatorname{cotg}\eta$ [avec $u(r) \sim \sin(kr + \eta)$, $r \to \infty$] soit caractérisé par la valeur extrémale de la fonctionnelle $J[\varphi]$ de (7), avec

$$K(r, r') = \sqrt{V(r)}\,\mathcal{G}(r, r')\sqrt{V(r')},$$

$\mathcal{G}(r, r')$ étant la fonction de Green attachée au problème en question.

2. Position générale d'un problème de diffusion. — Dans le chapitre précédent nous avons étudié quel genre de problèmes s'est

jusqu'ici posé la théorie quantique des collisions et quelles ont été les méthodes de résolution couramment employées. Nous verrons maintenant quelles contributions les méthodes variationnelles peuvent apporter à cette théorie et quels avantages elles peuvent présenter.

En prenant pour fil conducteur un important Mémoire de MM. Schwinger et Lippmann [1] sur ce sujet, nous commencerons par poser dans toute sa généralité un problème de collision de la Mécanique quantique. Nous considérons donc un système S, susceptible, dans certaines conditions, de se décomposer en deux systèmes partiels S_1 et S_2, d'hamiltoniens particuliers H_0^1 et H_0^2 respectivement, et constituant les deux systèmes devant entrer en collision sous l'action d'un hamiltonien d'interaction H. Nous supposons ainsi, implicitement, la possibilité par H de ne pas toujours entrer en jeu, ou, tout au moins, de pouvoir être complètement négligé dans certaines circonstances; on doit noter que cette possibilité est essentielle à notre problème de collision car si nous ne pouvions jamais négliger H au cours de l'évolution temporelle de S, il n'y aurait aucun moment de son histoire où l'expérimentation pourrait y individualiser deux systèmes partiels ayant, par exemple, des énergies, ou des quantités de mouvement, bien définies, et donc, aucun moment où l'on pourrait parler de collisions entre ces systèmes.

Cela étant, nous poserons comme suit notre problème :

A un instant initial, que nous supposerons être $t = -\infty$, S_1 et S_2 sont, chacun, dans des états bien définis, représentés par des fonctions d'onde vérifiant leurs équations de Schrödinger respectives. En posant qu'alors l'interaction H est sans influence sur les évolutions de S_1 et S_2, la fonction d'onde de S sera le produit des fonctions de S_1 et S_2. Mais à un certain moment de l'évolution temporelle de S_1 et S_2, l'interaction H entrera en jeu et déterminera la collision. A l'instant final $t = +\infty$, nous effectuerons les mesures, la fonction d'onde de S étant de nouveau un produit des fonctions d'ondes de S_1 et S_2 par suite de la cessation de l'interaction de H après la collision.

Nous allons maintenant préciser cet énoncé par quelques remarques supplémentaires :

1° La non-intervention de H aux temps $t = \pm\infty$ est nécessaire

d'après ce qui a été dit plus haut, car à ces instants sont précisés deux ensembles de grandeurs attachés respectivement aux deux systèmes distincts S_1, S_2. L'action constante de H aurait pour effet de rendre impossible une telle distinction.

2° Il peut sembler peu physique de prendre $t = \pm \infty$ comme instants initial et final respectivement. Mais, en fait, les fonctions d'onde initiales de S_1 et S_2, qui expriment la façon particulière dont a été effectuée la préparation des systèmes en vue de l'expérience de collision, sont telles que cette interaction ne modifiera les évolutions temporelles de S_1 et S_2 qu'à partir d'un certain instant T. Pour rendre ceci plus clair, nous pouvons envisager le cas d'une expérience de collision entre deux nucléons. On sait que, par suite du court rayon d'action des forces nucléaires, ces deux particules doivent être suffisamment proches l'une de l'autre pour interagir. Aussi une manière de préparer le système sera-t-elle de localiser initialement chacune des particules dans des trains d'onde convenablement éloignés l'un de l'autre. Chacun de ces trains d'onde se déplacera en bloc suivant sa vitesse moyenne et l'on conçoit qu'avec un choix favorable des directions de propagation, ces trains d'onde se rencontreront à un certain moment qui sera alors celui où commencera la collision.

La même façon de voir vaut pour le choix de l'instant final à $t = + \infty$. En fait, les conditions aux limites imposées aux systèmes S_1 et S_2 par l'expérience de mesure entraîneront la fin du processus de collision à certain instant T', fonction de ces conditions mêmes. Ainsi, si, dans l'exemple précédent, nous mesurons les déviations angulaires dues à la collision, nous disposerons d'une couche de compteurs à particules tels que deux quelconques d'entre eux soient séparés par une distance supérieure à la portée des forces nucléaires. Nos particules sont alors assujetties à se localiser dans ces compteurs, évidemment sous forme de trains d'onde dont les directions de propagation ferait entre elles un angle suffisant pour que les interactions nucléaires entre les particules aient cessé avant leur arrivée sur la couche de compteurs.

3° On voit donc que la forme des fonctions d'onde initiales pour S_1 et S_2 ne serait pas, généralement, des fonctions propres de H_0^1 et H_0^2 respectivement, mais des combinaisons linéaires de ces

fonctions propres exprimant la préparation spéciale de S_1 et S_2. Quant aux fonctions d'onde finales que nous devrons envisager, ce seront d'autres combinaisons linéaires de fonctions propres exprimant, maintenant, les conditions aux limites du processus de mesure. Ce qui vient d'être dit fait soupçonner les difficultés de calcul de telles combinaisons linéaires et la quasi-impossibilité de leur définition précise. Aussi a-t-on recours à l'artifice de l'application adiabatique de H. On suppose que H est une fonction du temps à variations assez lentes et s'annulant pour $t = \pm \infty$. Comme généralement H est par lui-même indépendant du temps, on réalise cette application adiabatique en introduisant en facteur de H, une fonction $f(t)$ que nous appellerons fonction d'affaiblissement et dont un exemple bien connu est $\exp[-\varepsilon|t|]$ (ε positif), mais nous développerons les calculs sans prendre *a priori* une forme quelconque pour $f(t)$.

3. **Les formules de base.** — L'hypothèse d'application adiabatique de H permet de prendre comme vecteurs représentatifs de S_1 et S_2 à $t = \pm \infty$ les fonctions propres de H_0 que nous noterons Φ_α et, dès lors, les quantités qui nous intéresseront sont les probabilités de transition $|[\Phi_\alpha, \psi(+\infty)]|^2$ ou, ce qui revient au même, les amplitudes de transition $[\Phi_\alpha, \psi(+\infty)]$, quantités résultant le plus directement des équations.

L'évolution du système est gouvernée par l'équation de Schrödinger

$$i\frac{\partial\Phi(t)}{\partial t} = [H_0 + Hf(t)]\,\Phi(t) \qquad (H_0 = H_0^1 + H_0^2),$$

$\Phi(t)$ étant la fonction d'onde.

L'inconvénient de cette équation est de mélanger les variations du vecteur d'état $\Phi(t)$ liées à l'action de l'hamiltonien libre avec celles liées à l'action du potentiel perturbateur. Or ce sont ces dernières seules qui sont importantes pour nous. D'où l'intérêt d'une représentation où le nouveau vecteur d'état n'évoluerait que par l'entrée en jeu de la perturbation. Cette représentation est la représentation d'interaction. Elle s'obtient de façon aisée en effectuant sur $\Phi(t)$ une transformation canonique à l'aide de l'opérateur unitaire $\exp(-iH_0t)$. H_0 disparaît alors, comme il était demandé, et il reste à résoudre

$$i\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = H'(t)\,\psi(t),$$

FACULTÉ DES SCIENCES - DOMAINE UNIVERSITAIRE
SERVICE DE MATHÉMATIQUES PURES
38 - SAINT-MARTIN-D'HÈRES

équation d'évolution de la fonction d'onde $\psi(t)$ du système $S_1 + S_2$, écrite en représentation d'interaction [Schwinger et Lippmann] et en posant

$$H'(t) = \exp(iH_0 t) f(t) H \exp(-iH_0 t).$$

On peut aussi bien écrire l'équation précédente sous forme d'équation intégrale du type de Fredholm en introduisant l'échelon unité $Y(t)$ de Heaviside. Il vient alors

$$\psi(t) = \psi(-\infty) - i\int_{-\infty}^{+\infty} Y(t-t')\, H'(t')\, \psi(t')\, dt'. \tag{11}$$

Nous ne préciserons pas plus pour le moment la quantité $\psi(-\infty)$, ce dont nous verrons ultérieurement l'avantage.

Si maintenant nous notons $\Gamma^+(t, t')$ le noyau résolvant de (1), nous aurons la solution de (1) sous la forme [Goursat]

$$\psi(t) = \left\{ 1 - i\int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma^+(t, t')\, dt' \right\} \psi(-\infty). \tag{12}$$

D'après le calcul même qui définit $\Gamma^+(t, t')$, nous pouvons poser

$$\Gamma^+(t, t') = G^+(t, t')\, H'(t')$$

et, d'après les deux équations intégrales vérifiées par $\Gamma^+(t, t')$ (*cf.* [2]), on trouve pour déterminer $G^+(t, t')$

$$\left\{ \begin{aligned} G^+(t, t') &= Y(t-t') - i\int_{-\infty}^{+\infty} Y(t-t'')\, H'(t'')\, G^+(t'', t')\, dt'', \\ G^+(t, t') &= Y(t-t') - i\int_{-\infty}^{+\infty} dt''\, G^+(t, t'')\, H'(t'')\, Y(t''-t'). \end{aligned} \right. \tag{13}$$

Les quantités que nous voulons connaître sont les

$$S^+_{\beta f} = [\Phi_\beta, \psi(+\infty)] = [\Phi_\beta, \psi(-\infty)] - i\int_{-\infty}^{+\infty} [\Phi_\beta, G^+(\infty, t')\, H'(t')\, \psi(-\infty)]\, dt$$

en utilisant (12). Mais, d'après (13),

$$\int_{-\infty}^{+\infty} G^+(\infty, t')\, H'(t')\, dt' = \int_{-\infty}^{+\infty} H'(t')\, G^+(t', -\infty)\, dt'$$

et nous pouvons écrire

$$(14)\qquad S^{+}_{\beta f} = [\Phi_{\beta'}\psi(-\infty)] - i[\Phi_{\beta'} H \Psi^{+}(E_\beta)],$$

avec

$$(15)\qquad \Psi^{+}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[it(E - H_0)] f(t)\, G^{+}(t, -\infty)\, \psi(-\infty)\, dt,$$

le résultat (14) s'obtenant de façon immédiate quand on remonte à l'expression de $H'(t)$ donnée plus haut.

La détermination des amplitudes de transition est donc maintenant ramenée au calcul de $\Psi^{+}(E)$ et nous allons montrer que cette quantité est régie par une équation intégrale. En effet, introduisons les représentations de Fourier de $f(t)$ et de $\exp(-iH_0 t)\, G^{+}(t, -\infty)\, \psi(-\infty)$ sous la forme

$$(16)\qquad f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\tau) \exp(-i\tau t)\, d\tau, \qquad \varphi(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \exp(i\tau t)\, dt;$$

$$(17)\qquad \begin{cases} \exp(-iH_0 t)\, G^{+}(t, -\infty)\, \psi(-\infty) = \dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \gamma^{+}(\tau) \exp(-i\tau t)\, dt, \\ \gamma^{+}(\tau) = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-iH_0 t)\, G^{+}(t, -\infty)\, \psi(-\infty) \exp(i\tau t)\, dt. \end{cases}$$

En portant dans la dernière équation (17) l'équation intégrale déduite de (13) pour $G^{+}(t, -\infty)$ il vient

$$\begin{aligned} \gamma^{+}(\tau) = &\int_{-\infty}^{+\infty} \exp it(\tau - H_0)\, \psi(-\infty)\, dt \\ &- i\int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^{+\infty} dt'' \, Y(t - t'') \exp(i\tau t) \\ &\times \exp[-iH_0(t - t'')] f(t'')\, H \exp(-iH_0 t'')\, G^{+}(t'', -\infty)\, \psi(-\infty), \end{aligned}$$

ce qui donne, après le changement de variables $t - t'' = u$, $t'' = v$, et en posant

$$\delta_{+}(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{0}^{\infty} du \exp(iux),$$

$$\gamma^{+}(\tau) = 2\pi\delta(\tau - H_0)\, \psi(-\infty) - 2\pi i \delta_{+}(\tau - H_0)\, H \Psi^{+}(\tau).$$

Comme avec les relations (6) et (7), $\Psi^{+}(E)$ peut s'écrire

$$(18)\qquad \Psi^{+}(E) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E - \tau)\, \gamma^{+}(\tau)\, d\tau,$$

on obtient pour $\Psi^+(E)$ l'équation intégrale

$$(19)\qquad \Psi^+(E) = \varphi(E - H_0)\psi(-\infty) - i\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E - E')\,\delta_+(E' - H_0)\,H\Psi^+(E')\,dE' \quad (^1).$$

Il sera utile pour l'écriture ultérieure de principes variationnels, d'introduire le problème inverse du précédent, savoir la déduction de $\psi(-\infty)$ à partir de la connaissance de $\psi(+\infty)$. La quantité que nous voudrons connaître sera $S^-_{\alpha l} = (\Phi_\alpha, \psi(-\infty))$ et par un calcul tout analogue à celui qui vient d'être effectué, on montrera que $S^-_{\alpha l}$ est donné par

$$(20)\qquad S^-_{\alpha l} = (\Phi_\alpha, \Psi(+\infty)) + i(\Phi_\alpha, H\Psi^-(E_\alpha)),$$

la fonction $\Psi^-(E)$ vérifiant l'équation intégrale

$$(21)\qquad \Psi^-(E) = \varphi(E - H_0)\Psi(+\infty) + i\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E - E')\,\delta_+(H_0 - E')\,H\Psi^-(E')\,dE'.$$

Jusqu'à présent nous n'avons soumis la fonction $f(t)$ qu'à la condition d'être nulle à $t = \pm\infty$ et de varier suffisamment lentement. Nous avons vu, qu'en fait, elle est une façon de représenter en quelque sorte la moyenne à chaque instant des perturbations extérieures s'exerçant sur le système en collision et ainsi répercutées sur la constante de couplage. On conçoit que, durant la majeure partie de l'expérience, cette constante de couplage — charge électrique, charge mésique, ou autre — prenne sa pleine valeur, cette dernière n'étant sensiblement modifiée qu'au début ou à la fin de l'expérience, moments où, par ses mesures, l'observateur intervient de facon effective. Ici, nous avons pris d'emblée un intervalle d'expérimentation infini, si bien que l'on peut considérer que pour toute valeur finie

---

(1) *Remarque.* — Les équations (13) permettent d'écrire

$$1 - i\int_{-\infty}^{+\infty} G^+(t, t')\,H'(t')\,dt' = G^+(t, -\infty),$$

et il résulte alors de (12) que

$$\psi(t) = G^+(t, -\infty)\,\psi(-\infty).$$

$G^+(t, -\infty)$ est donc l'opérateur d'évolution du système, $G^+(\infty, -\infty)$ n'étant pas autre chose que la matrice S de Heisenberg.

de t, la fonction $f(t)$ est très proche de l'unité. Cette condition sera au mieux réalisée en faisant dépendre $f(t)$ d'un paramètre ε telle que $f(t, \varepsilon)$ tende vers l'unité pour toute valeur finie de t quand ε tend vers zéro. Les solutions de (19) et (21) dépendront de ce paramètre ε que nous ferons disparaître en faisant finalement tendre ε vers zéro. On peut remarquer que l'emploi d'une telle méthode revient à abandonner tout essai de description d'une situation physique réelle. Mais on peut ajouter que la considération de la collision abstraite à laquelle nous sommes ainsi conduits serait justifiée si l'on pouvait montrer la continuité uniforme du passage à la limite $\varepsilon \to 0$ puisque cela reviendrait à montrer que l'on peut trouver un problème concret aussi proche que l'on veut du problème académique calcule. Malheureusement, l'impossibilité de résoudre exactement (19) et (21) quelles que soient les valeurs de ε, dans la plupart des cas pratiques interdit une telle démonstration pour le présent et nous devrons nous contenter de l'admettre sans autres preuves.

Ces réserves faites, nous pouvons effectuer directement sur les équations (19) et (21) le passage à la limite $\varepsilon \to 0$. D'après ce qui vient d'être dit sur $f(t)$, il est manifeste que $\varphi(\tau)$ tendra vers $2\pi\delta(\tau)$ (au sens fonctionnel des distributions de Schwarz) de sorte que (20) et (22) deviennent

$$\Psi^+(E) = 2\pi\delta(E - H_0)\,\psi(-\infty) - 2\pi i\delta_+(E - H_0)\,H\Psi^+(E), \tag{22}$$

$$\Psi^-(E) = 2\pi\delta(E - H_0)\,\psi(+\infty) + 2\pi i\delta_+(H_0 - E)\,H\Psi^-(E). \tag{23}$$

Si nous exprimons $\psi(-\infty)$ et $\psi(+\infty)$ suivant le système des fonctions propres de H_0 supposé complet, nous aurons

$$\psi(-\infty) = \int \Phi(E)\,C^+(E)\,dE, \qquad \psi(+\infty) = \int \Phi(E)\,C^-(E)\,dE,$$

car dans les cas pratiques le spectre de H_0 est un spectre continu. En portant dans (22), l'on a à écrire :

$$\Psi^+(E) = 2\pi C^+(E)\,\Phi(E) - 2\pi i\delta_+(E - H_0)\,H\Psi^+(E)$$

et si l'on pose

$$\frac{1}{2\pi}\Psi^+(E) = C^+(E)\,\Psi_E^+,$$

Ψ_E^+ sera déterminée par

$$\Psi_E^+ = \Phi_E + 2\pi i\delta_+(E - H_0)\,H\Psi_E^+. \tag{24}$$

De même, on introduira Ψ_E^- vérifiant

$$\Psi_E^- = \Phi_E + 2\pi i \delta_+(H_0 - E) H \Psi_E^-. \tag{25}$$

et à partir de ces deux nouvelles quantités, nous introduirons les éléments de matrice,

$$T_{E'E}^+ = (\Phi_{E'}, H\Psi_E^+), \qquad T_{E'E}^- = (\Phi_{E'}, H\Psi_E^-), \tag{26}$$

les quantités cherchées $S_{\beta f}^+$ et $S_{\alpha i}^-$ s'écrivant dès lors

$$S_{\beta f}^+ = C^+(E_\beta)\{1 - 2\pi i T_{E_\beta E_\beta}^+\}, \qquad S_{\alpha i}^- = C^-(E_\alpha)\{1 + 2\pi i T_{E_\alpha E_\alpha}^-\}.$$

C'est à la détermination de ces $\mathbf{T}^+$ et $\mathbf{T}^-$ que nous aurons à appliquer des méthodes variationnelles ([1]).

4. **Les principes variationnels utilisés.** — Nous donnerons ici les formes générales des principes variationnels que nous utiliserons constamment par la suite. De telles formes générales ont été proposées par les auteurs [Kahan et Rideau] dans le cas particulier des opérateurs symétriques. Nous donnerons ici la généralisation qui en a été faite par M. Roussopoulos.

1° Considérons un opérateur linéaire L et l'équation

$$L\psi = 0, \tag{27}$$

avec sa transposée hermitique

$$L^*\Phi = 0. \tag{28}$$

Nous allons montrer que la quantité $I = \int \Phi'^* L\psi' d\tau$, nulle quand Φ', ψ' viennent coïncider avec les solutions Φ et ψ de (28) et (27) respectivement ne diffère de zéro que par des termes infiniment petits du second ordre quand Φ' et ψ' diffèrent de Φ et ψ par

([1]) Les quantités Ψ^+, Ψ^-, $\mathbf{T}^+$, $\mathbf{T}^-$ sont les mêmes que celles introduites dans l'article de Schwinger et Lippmann. La dérivation que nous en donnons ici nous semble préférable, l'introduction de trains d'onde pour $\psi(-\infty)$ et $\psi(+\infty)$ évitant de recourir à une division par $\delta(E - H_0)$, implicite dans l'article précité où ne sont utilisées que des ondes monochromatiques, division dont la signification et même la définition sont pour le moins incertaines. Signalons aussi qu'appliquées au cas particulier $f(t) = \exp(-\varepsilon|t|)$ les équations (19) et (21) fourniraient les formes exactes d'équations incorrectes chez Schwinger et Lippmann.

des infiniment petits du premier ordre. Posons, en effet,

$$\Phi' = \Phi + \delta\Phi, \qquad \psi' = \psi + \delta\psi.$$

Il vient alors

$$\delta I = \int (\delta\Phi)^* L\psi \, d\tau + \int \Phi^* L\,\delta\psi \, d\tau.$$

La première intégrale est nulle par (27). Quant à la seconde, elle peut s'écrire

$$\int \Phi^* L\,\delta\psi \, d\tau = \left[\int \delta\psi^* L^* \Phi \, d\tau \right]^* = 0$$

en appliquant la définition du transposé hermitique d'un opérateur et l'équation (28).

Le cas plus compliqué où ψ et Φ sont solutions de

$$L\psi = f, \tag{29}$$

$$L^*\Phi = g \tag{30}$$

se ramène au précédent en posant

$$\Psi = \psi - (L^{-1})f, \qquad \Phi = \Phi - (L^{-1})^*_g,$$

Ψ et Φ vérifiant maintenant des équations du type (27) et (28).

En développant les calculs et en tenant compte de la définition du transposé hermitique, il vient

$$\left\{ \begin{matrix} \int g^* \psi \, d\tau \\ \int \Phi^* f \, d\tau \end{matrix} \right\rangle = \text{V. S.} \left\{ \int \Phi'^* f \, d\tau + \int \psi' g^* \, d\tau - \int \Phi'^* L\psi \, d\tau \right\}, \tag{31}$$

la notation V. S. signifient que la quantité au premier membre est la valeur stationnaire de la fonctionnelle du second membre.

Les formules précédentes se simplifient quand L est un opérateur hermitique, car nous aurons à considérer comme équations

$$L\psi_1 = f_1, \qquad L\psi_2 = f_2$$

(31) s'écrivant dans ce cas

$$\left\{ \begin{matrix} \int f_2^* \psi_1 \, d\tau \\ \int \psi_2^* f_1 \, d\tau \end{matrix} \right\rangle = \text{V. S.} \left\{ \int \psi_1' f_2^* \, d\tau + \int \psi_2'^* f_1 \, d\tau - \int \psi_2'^* L\psi_1' \, d\tau \right\}. \tag{32}$$

Nous pouvons remarquer que le principe variationnel (31) contient comme cas particulier le principe variationnel pour opérateurs symétriques déjà donné par les auteurs [Kahan et Rideau]. Ce principe s'écrivait

$$(33)\quad \left\{\begin{matrix}\int \psi_1 \varphi_2 d\tau \\ \int \psi_2 \varphi_1 d\tau\end{matrix}\right\rangle = \text{V. S.}\left\{\int d\tau\, \psi_2' \varphi_1 + \int d\tau\, \psi_1' \varphi_2 - \int d\tau\, \psi_2' \mathrm{L}\psi_1\right\},$$

ψ_1' et ψ_2' étant des formes approchées de ψ_1, ψ_2 solution des équations

$$(34)\qquad \mathrm{L}\psi_1 = \varphi_1, \qquad \mathrm{L}\psi_2 = \varphi_2,$$

L étant un opérateur symétrique, donc tel que

$$\int f \mathrm{L} g\, d\tau = \int g \mathrm{L} f\, d\tau.$$

Nous montrerons aisément que (33) est identique à (31) en envisageant L sous forme d'un opérateur intégral

$$(35)\qquad \mathrm{L}\Phi = \int \mathrm{L}(\tau, \tau')\, \varphi(\tau')\, d\tau'.$$

On conçoit intuitivement la possibilité d'une telle expression pour les opérateurs habituels de la Mécanique quantique qui sont, soit déjà des opérateurs intégraux, soit des combinaisons de dérivées de divers ordres qu'il suffit alors de remplacer par des opérateurs intégraux dont les noyaux sont des dérivés de divers ordres de la fonction δ de Dirac. En fait le caractère d'opérateur intégral des opérateurs de la Mécanique quantique est exprimé par sa forme de Mécanique des matrices et la formule (35) n'est pas autre chose que l'application de cette dernière quand les fonctions de base choisies sont celles qui rendent diagonales les opérateurs coordonnées du système. Ceci étant dit, on déduira aisément que le noyau propre au transposé hermitique de L sera $\int d\tau' \{\quad\} \mathrm{L}^*(\tau', \tau)$, et que le noyau d'un opérateur symétrique sera lui-même une fonction symétrique de τ et τ'. Dès lors, la deuxième équation (34) qui s'écrit

$$\int \mathrm{L}(\tau, \tau')\, \psi_2(\tau')\, d\tau' = \varphi_2(\tau) = \int d\tau' \mathrm{L}(\tau', \tau)\, \psi_2(\tau')$$

pourra se mettre sous la forme

$$\int d\tau' \psi_2(\tau')^* L^*(\tau' \tau) = \varphi_2(\tau)^*,$$

ce qui permet de conclure que, dans le cas des opérateurs symétriques, les deux équations

$$L\psi_2 = \varphi_2, \qquad L^*\psi_2^* = \varphi_2^*$$

soit équivalentes (L^* notant le transposé hermitique de L).

Il suffit maintenant d'écrire le principe variationnel (31) en partant du couple d'équations

$$L\psi_1 = \varphi_1, \qquad L^*\psi_2^* = \varphi_2^*$$

pour retrouver le principe variationnel (33).

2° Comme il est bien connu, l'inconvénient des principes variationnels de la forme (31) ou (32) est de fournir une approximation dépendant de la normalisation particulière adoptée pour les fonctions d'essai. De plus, appliqués à la Mécanique quantique, ils fournissent une méthode de calcul qui ne diffère pas essentiellement du calcul des perturbations dont on sait, par ailleurs, les difficultés. Aussi donnerons-nous maintenant un principe variationnel général, extension du principe Ritz-Rayleigh [1] qui, dans son application à la

---

[1] Rappelons brièvement ce qu'est le principe de Ritz-Rayleigh, renvoyant pour les détails à Courant Hilbert, *Methoden des matematischen Physik*, ou à Schwinger. Le problème posé est celui de la détermination de la plus petite valeur propre de $A\psi = \lambda B\psi$, où A, B sont des opérateurs hermitiques définis positifs. En utilisant cette dernière hypothèse, on peut poser $\Phi = B^{\frac{1}{2}}\psi$, de sorte que nous sommes ramenés à

$$B^{-\frac{1}{2}} A B^{-\frac{1}{2}} \Phi = \lambda \Phi,$$

le problème de valeur propre le plus simple possible. On vérifie aisément que $A' = B^{-\frac{1}{2}} A B^{-\frac{1}{2}}$ est encore un opérateur hermitique défini positif.

On peut alors démontrer que

$$\lambda = \text{V. S.} \frac{(\Phi, A'\Phi)}{(\Phi, \Phi)}.$$

En effet

$$\delta \frac{(\Phi, A'\Phi)}{(\Phi, \Phi)} = \frac{1}{(\Phi, \Phi)^2} \{ (\Phi, \Phi)[(\delta\Phi, A'\Phi) + (\Phi, A'\delta\Phi)] - [(\delta\Phi, \Phi) + (\Phi, \delta\Phi)](\Phi, A'\Phi) \}$$

et en tenant compte de ce que $A'\Phi = \lambda\Phi$ donne $\lambda = \frac{(\Phi, A'\Phi)}{(\Phi, \Phi)}$ pour les solutions

Mécanique quantique, échappe aux objections précédentes. Un cas particulier a déjà été étudié de façon détaillée par Schwinger, Blatt et Jackson et utilisé pour la détermination des déphasages dans un champ de forces centrales.

Considérons donc de nouveau des équations de la forme

$$\text{(36)} \qquad L\psi = \varphi_1, \qquad L^*\Phi = \varphi_2,$$

la quantité que nous voulons calculer étant

$$C_2 = \int \varphi_2^* \psi \, d\tau = \int \varphi_1 \Phi^* d\tau,$$

on peut alors récrire les équations (36) sous la forme

$$\text{(37)} \qquad \begin{cases} L\psi = \dfrac{1}{C_2} \displaystyle\int \varphi_1(\tau)\, \varphi_2^*(\tau')\, \psi(\tau')\, d\tau, \\ L^*\Phi = \dfrac{1}{C_2^*} \displaystyle\int \varphi_2(\tau)\, \varphi_1^*(\tau')\, \Phi(\tau')\, d\tau', \end{cases}$$

les opérateurs intégraux du second membre étant bien conjugués hermitiques d'après ce qui a été dit plus haut.

Sous cette forme (37), la détermination de $\frac{1}{C_2}$ est ramenée à la résolution d'un problème de valeurs propres généralisées auquel peut évidemment s'appliquer le principe de Ritz-Rayleigh, tout au moins d'un point de vue formel, car le fait que les opérateurs intervenant dans (37) ne sont plus obiigatoirement définis positifs nous oblige à renoncer aux développements classiques sur la convergence de la méthode.

Nous obtiendrons donc

$$\text{(38)} \qquad \frac{1}{C_2} = \text{V. S.} \left\{ \frac{\displaystyle\int \Phi'^* L\psi' \, d\tau}{\left(\displaystyle\int \Phi'^* \varphi_1 \, d\tau\right)\left(\displaystyle\int \varphi_2^* \psi' \, d\tau\right)} \right\}$$

---

exactes Φ, on trouve après utilisation de l'hermiticité, une première variation nulle. On doit noter que dans cette démonstration, aucun usage n'a été fait du caractère d'opérateur défini positif de A'. Ceci n'entre en jeu que dans la suite de démonstrations permettant de conclure à la convergence du procédé vers la plus basse valeur propre du procédé.

qui pour le cas particulier de $\frac{1}{C_1}$ et pour L hermitique s'écrit

$$\frac{1}{C_1} = \text{V. S.} \frac{\int \psi'^* L \psi' d\tau}{\left| \int \psi'^* \varphi_1 d\tau \right|^2} \tag{39}$$

car dans ce cas la deuxième équation (36) étant $L\Phi = \varphi_1$, on doit prendre $\Phi' \equiv \psi'$. C'est un principe de la forme (39) qu'ont utilisé Schwinger, Blatt et Jackson dans le calcul des déphasages, l'opérateur L étant alors un opérateur intégral symétrique réel, donc hermitique.

3° Nous avons pu associer au même type d'équations deux formes de principes variationnels (31) et (38), sensiblement différents, pour le calcul de la même quantité. Aussi peut-on se demander si les principes (31) et (38) sont les deux seuls que l'on peut associer à des équations du type (29), (30) ou si, ou contraire, il serait possible d'en trouver un plus grand nombre. C'est cette deuxième partie de l'alternative qui se trouve réalisée.

En effet, posons

$$\alpha = \int \Phi^* f d\tau, \qquad \beta = \int \Phi'^* L \psi' d\tau, \qquad \gamma = \int \psi' g^* d\tau$$

et considérons une fonction analytique $F(\alpha, \beta, \gamma)$ à laquelle nous imposons d'être stationnaire vis-à-vis des variations de Φ' et ψ' autour des solutions exactes de (29) et (30) et de se réduire à la valeur correcte de α quand Φ' et ψ' coïncident avec ces solutions exactes.

Il suffit pour cela d'imposer la condition $F(\alpha, \alpha, \alpha) = \alpha$, quel que soit α, mais ceci entraîne

$$\frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \alpha} + \frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \beta} + \frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \gamma} = 1$$

et en tenant compte de $\delta\beta = \delta\alpha + \delta\gamma$, la condition de stationnarité donne, les variations $\delta\alpha$, $\delta\gamma$ étant arbitraires,

$$\frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \alpha} + \frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \beta} = \frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \beta} + \frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \gamma} = 0,$$

d'où résulte

$$\frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \alpha} = -\frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \beta} = \frac{\partial F(\alpha, \alpha, \alpha)}{\partial \gamma} = 1.$$

Mais F étant supposé analytique, il existe, au moins, une valeur α_0 de α, β, γ autour de laquelle elle est développable en série de Taylor. En portant les développements obtenus dans les dernières équations écrites, on obtient des relations entre les divers coefficients de la série telles qu'un arbitraire illimité subsiste dans le choix de ces coefficients.

Le résultat est tout autre si nous cherchons un principe variationnel $F(\alpha, \beta, \gamma)$ indépendant des normes particulières des fonctions d'essai ψ' et Φ', Si, en effet, la norme de Φ' est multiplié par λ, celle de ψ' par λ', α est changé en $\lambda\alpha$, γ en $\lambda'\gamma$ et β en $\lambda\lambda'\beta$. L'indépendance vis-à-vis de la norme entraîne que soit vérifiée quels que soient λ et λ'

$$F(\lambda\alpha, \lambda\lambda'\beta, \lambda'\gamma) = F(\alpha, \beta, \gamma).$$

Choisissons en particnlier $\lambda' = \frac{1}{\gamma}$, $\lambda = \frac{1}{\alpha}$, il vient

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = F\left(1, \frac{\beta}{\alpha\gamma}, 1\right)$$

et $F(\alpha, \beta, \gamma)$ doit être une fonction de la seule quantité $\frac{\alpha\gamma}{\beta}$ et la condition que $F(\alpha, \beta, \gamma) = \alpha$ quand $\alpha = \beta = \gamma$ conduit à prendre

$$F(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{\alpha\gamma}{\beta},$$

c'est-à-dire le principe (38). On voit donc que ce principe se distingue particulièrement de l'ensemble de tous les autres possibles [Rideau], ce qui, sans doute, a fait son intérêt et sa réussite.

5. **Principes variationnels généraux de la théorie des collisions.** — En écrivant sous différentes formes convenablement adaptées les équations fondamentales du paragraphe 3, nous allons pouvoir déduire tout un ensemble de principes variationnels applicables spécifiquement à la théorie des collisions. Ces principes ont déjà été énoncés par Schwinger, Schwinger et Lippmann, Goldberger, mais sans autre justification qu'une simple vérification.

Avant de passer à la déduction de ces princpes, quelques adjonctions doivent être apportées aux formules du paragraphe 3. En effet, nous devons tenir compte de la dégénérescence habituelle des niveaux

d'énergies qui fait que nous devrons noter une fonction propre à l'aide d'un indice supplémentaire et écrire $\Phi_{E,\varepsilon}$ au lieu de Φ_E simplement. On devra avoir

$$\psi(+\infty) = \int dE\, d\varepsilon\, C^+(E, \varepsilon)\, \Phi_{E,\varepsilon}, \qquad \psi(-\infty) = \int dE\, d\varepsilon\, C^-(E, \varepsilon)\, \Phi_{E,\varepsilon}.$$

On introduira alors des quantités $\Psi^+_{E\varepsilon}$, $\Psi^-_{E\varepsilon}$ vérifiant

$$(24') \qquad \Psi^+_{E\varepsilon} = \Psi^+_{E\varepsilon} - 2\pi i\, \delta_+(E - H_0)\, H\, \Psi^+_{E\varepsilon},$$

$$(25') \qquad \Psi^-_{E\varepsilon} = \Phi_{E\varepsilon} + 2\pi i\, \delta_+(-E + H_0)\, H\, \Psi^+_{E\varepsilon},$$

$\psi^+(E)$ s'exprimant par

$$\frac{1}{2\pi}\, \psi^+(E) = \int d\varepsilon\, C^+(E, \varepsilon)\, \Psi^+_{E\varepsilon}$$

et une formule similaire pour $\psi^-(E)$.

Enfin on introduira des quantités $T^+_{E\varepsilon', E\varepsilon}$ et $T^-_{E'\varepsilon', E\varepsilon}$ par

$$(26') \qquad T^+_{E'\varepsilon', E\varepsilon} = (\Phi_{E'\varepsilon'}, H\, \Psi^+_{E\varepsilon}), \qquad T^-_{E'\varepsilon', E\varepsilon} = (\Phi_{E'\varepsilon'}, H\, \Psi^-_{E\varepsilon})$$

et l'on devra écrire

$$S^+_{E_\beta\varepsilon, f} = [\Phi_{E_\beta\varepsilon}, \psi(+\infty)] = C^+(E_\beta, \varepsilon) - 2\pi i \int T^+_{E_\beta\varepsilon, E_\beta\varepsilon'}\, C^+(E_\beta, \varepsilon')\, d\varepsilon',$$

avec une formule similaire pour $S^-_{E_\alpha\varepsilon, i}$.

Bien entendu, dans ces formules, l'indice ε représente en fait l'ensemble des valeurs propres des opérateurs commutant avec H_0 et qu'il est nécessaire d'introduire pour définir sans indéterminations les fonctions propres de H_0.

1° Nous pouvons écrire (24')

$$(40) \qquad L_E\, \Psi^+_{E\varepsilon_1} = \Phi_{E\varepsilon_1},$$

après avoir posé

$$L_E = 1 + 2\pi i\, \delta_+(E - H_0)\, H.$$

Quant à l'équation (15') où nous remplaçons ε par ε_2, elle devient après introduction de $\Phi^-_{E\varepsilon_2} = H\, \Psi^-_{E\varepsilon_2}$,

$$(41) \qquad L^*_E\, \Phi^-_{E\varepsilon_2} = H\, \Phi_{E\varepsilon_2},$$

car, de par la définition même, $\delta_+(H_0 - E)$ est conjugué hermitique de $\delta_+(E - H_0)$, donc $1 - 2\pi i H\, \delta_+(H^0 - E)$ est conjugué hermitique

de $1 + 2\pi i\,\delta_+(E - H_0)\,H$. Nos équations (40) et (41) sont maintenant strictement analogues à (29) et (30), avec $\Psi^+_{E\varepsilon_1}$ pour ψ, $\Phi^-_{E\varepsilon_2}$ pour Φ, $\Phi^-_{E\varepsilon}$, pour f, $H\Phi_{E\varepsilon_2}$ pour g. L'application de (31) est alors immédiate et donne un premier principe variationnel

$$(42)\quad \left\{\begin{matrix} \mathbf{T}^+_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1} \\ (\mathbf{T}^+_{E\varepsilon_1,E\varepsilon_2})^* \end{matrix}\right\} = \text{V. S.} \left\{\begin{matrix} (\Phi^+_{E\varepsilon_1}, H\Psi^-_{E\varepsilon_2})^* + (\Phi_{E\varepsilon_2}, H\Psi^+_{E\varepsilon_1}) \\ -(\Psi^-_{E\varepsilon_2}, H\Psi^+_{E\varepsilon_1}) - 2\pi i(\Psi^-_{E\varepsilon_2}, H\delta_+(E - H_0)H\Psi^+_{E\varepsilon_1}), \end{matrix}\right.$$

c'est-à-dire le principe variationnel proposé par Schwinger et Lippmann et dont la présente méthode de déduction est due à M. Roussopoulos.

Un autre principe variationnel sera obtenu en partant des équations intégrales déterminant les quantités $\mathbf{T}^+_{E'\varepsilon',E\varepsilon}$ et $\mathbf{T}^-_{E'\varepsilon',E\varepsilon}$. Ces équations résultent de (24′) et (25′) par multiplication à gauche par H et produit scalaire avec $\Phi_{E'\varepsilon'}$. Si, de plus, à la place de $\mathbf{T}^-_{E'\varepsilon',E\varepsilon}$ on introduit $\mathfrak{T}^-_{E'\varepsilon',E\varepsilon} = \delta_+(E' - E)\,\mathbf{T}^-_{E'\varepsilon',E\varepsilon}$, il viendra

$$(43)\quad \left\{\begin{matrix} \mathbf{T}^+_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1} = \langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon_1\rangle - 2\pi i\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\delta_+(E - E'')\,\mathbf{T}^+_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_1}, \\ \mathfrak{T}^-_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2} = \langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon_2\rangle\delta_+(E' - E) \\ \qquad + 2\pi i\delta_+(E' - E)\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\mathbf{T}^-_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_2}, \end{matrix}\right.$$

la répétition des lettres doublement primées indiquant une intégration sur les variables qu'elles représentent.

La première équation intégrale (43) a pour noyau

$$-2\pi i\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\delta_+(E - E'')$$

et d'après ce qui a été vu au paragraphe 3, le transposé hermitique de l'opérateur intégral correspondant a pour noyau

$$2\pi i[\langle E''\varepsilon'' \,|\, H \,|\, E'\varepsilon'\rangle\delta_+(E - E')]^* = 2\pi i\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\delta_+(E' - E),$$

d'après l'hermiticité de H et la définition de δ_+, soit le noyau intégral de la seconde équation (43). Nous sommes donc ramenés à des équations du type (29) et (30) avec $\mathbf{T}^+_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1}$ pour ψ, $\mathfrak{T}^-_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2}$ pour Φ, $\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon_1\rangle$ pour f, $\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon_2\rangle\delta_+(E' - E)$ pour g et pour opérateur L un opérateur intégral de noyau

$$\delta(E' - E'')\,\delta(\varepsilon' - \varepsilon'') + 2\pi i\langle E'\varepsilon') \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\delta_+(E - E'').$$

On peut alors appliquer le principe variationnel (31), qui, dans le cas des solutions exactes donnera la valeur de

$$\langle E\varepsilon_2 \,|\, H \,|\, E'\varepsilon'\rangle\delta_+(E - E')\,\mathbf{T}^+_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1} = \langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon_1\rangle\delta_+(E - E')\,\mathbf{T}^{-*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2}.$$

Mais, d'après

$$\langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E'\varepsilon' \rangle \delta_+(E-E')\, \mathbf{T}^+_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1} = \frac{1}{2\pi i}\left\{ \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle - \mathbf{T}^+_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1} \right\},$$

$$\langle E'\varepsilon' \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle \delta_+(E-E')\, \mathbf{T}^{-*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2} = \frac{1}{2\pi i}\left\{ \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle - \mathbf{T}^{-*}_{E\varepsilon_1,E\varepsilon_2} \right\},$$

d'où il résulte pour finir (*cf.* Goldberger [8]

$$(44)\quad \left\{ \begin{array}{l} \left.\begin{array}{l} \mathbf{T}^+_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1} \\ \mathbf{T}^{-*}_{E\varepsilon_1,E\varepsilon_2} \end{array}\right\rangle = \text{V. S.} \left\{ \begin{array}{l} \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle + 2\pi i\, \mathbf{T}^{-*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2}\, \delta_+(E-E')\, \mathbf{T}^+_{E\varepsilon',E\varepsilon_1} \\ \quad - 2\pi i\, \mathbf{T}^{+*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2}\, \delta_+(E-E') \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle \\ \quad - 2\pi i \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E'\varepsilon' \rangle \delta_+(E-E')\, \mathbf{T}^+_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1} \\ \quad - 4\pi^2\, \mathbf{T}^{-*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2}\, \delta_+(E-E') \\ \qquad \times \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon'' \rangle \delta_+(E-E'')\, \mathbf{T}^+_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_1} \end{array}\right\}, \end{array}\right.$$

avec la convention que la répétition d'une variable primée indique une intégration sur cette variable.

Nous pouvons faire une estimation rapide et qualitative de la valeur relative des principes variationnels (42) et (44) en prenant comme fonctions d'essai la première approximation fournie par les équations (24′) et (25′) d'un côté, les équations (43) de l'autre. On obtient alors par (42) la seconde approximation de Born, tandis que (44) donne en plus les termes de la troisième. Mais si (54) semble fournir une méthode de calcul supérieur, il faut remarquer qu'il est d'un maniement plus lourd que (42), de sorte qu'en l'absence de méthodes d'itération et de toute preuve de convergence, la valeur pratique de (42) et (44) paraît équivalente.

2° Doublant les principes variationnels précédents, nous donnerons maintenant des principes indépendants de la norme et résultant de (38), et, pour cela, nous aurons à mettre nos équations sous une forme analogue à (37), ce qui se fera aisément en introduisant encore $\mathbf{\Phi}^-_{E\varepsilon} = H\mathbf{\Psi}^-_{E\varepsilon}$. Il viendra alors

$$(45)\quad \left\{ \begin{array}{l} \{1 + 2\pi i\, \delta_+(E-H_0)\, H\}\, \mathbf{\Psi}^+_{E\varepsilon+} \\ \quad = [\mathbf{T}^+_{E\varepsilon-,E\varepsilon+}]^{-1} \displaystyle\int \mathbf{\Phi}^+_{E\varepsilon+}(\tau)\, [H\mathbf{\Phi}_{E\varepsilon-}(\tau')]^*\, \mathbf{\Psi}^+_{E\varepsilon+}(\tau')\, d\tau', \\ \{1 - 2\pi i H\, \delta_+(H_0-E)\}\, \mathbf{\Phi}^-_{E\varepsilon-} \\ \quad = [\mathbf{T}^-_{E\varepsilon+,E\varepsilon-}]^{-1} \displaystyle\int [H\mathbf{\Phi}_{E\varepsilon-}(\tau)]\, \mathbf{\Phi}^*_{E\varepsilon+}(\tau')\, \mathbf{\Phi}^-_{E\varepsilon-}(\tau')\, d\tau' \end{array}\right.$$

en notant $\mathbf{\Phi}_{E\varepsilon+}$, $\mathbf{\Phi}_{E\varepsilon-}$ les fonctions propres de H_0 relatives à l'énergie E apparaissant dans (24′) et (25′). Nous avons bien des équations

du type (37) en prenant pour L l'opérateur $\{1 + 2\pi i\,\delta_+(E - H_0)\,H\}$, pour ψ la fonction $\Psi^+_{k\varepsilon+}$, pour Φ, la quantité $\Phi^-_{k\varepsilon-}$ et en remplaçant φ_1 et φ_2 par $\Phi_{k\varepsilon+}$ et $H\Phi_{k\varepsilon-}$. L'application de (38) est alors immédiate et donne (*cf.* [5])

$$(46)\quad \frac{1}{T^+_{k\varepsilon+,k\varepsilon+}} = \text{V. S.}\,\frac{(\Psi^-_{k\varepsilon-},\, H\Psi^+_{k\varepsilon+}) + 2\pi i(\Psi^-_{k\varepsilon-},\, H\delta_+(E - H_0)\,H\Psi^+_{k\varepsilon+})}{(\Psi^-_{k\varepsilon-},\, H\Phi_{k\varepsilon+})\,(\Phi_{k\varepsilon-},\, H\Psi^+_{k\varepsilon+})}.$$

Les équations (43) se ramènent aussi aisément à une forme analogue à (37), la quantité jouant le rôle de C_2 devant être ici

$$\langle E\varepsilon- \,|\, H \,|\, E'\varepsilon'\rangle\delta_+(E - E')\,T^+_{E'\varepsilon',k\varepsilon+} = \frac{1}{2\pi i}\{\langle E\varepsilon- \,|\, H \,|\, E\varepsilon+\rangle - T^+_{k\varepsilon-,k\varepsilon+}\}.$$

On obtient

$$\begin{aligned}
T^+_{E'\varepsilon',k\varepsilon+} = {} & \left[\frac{2\pi i}{\langle E\varepsilon- \,|\, H \,|\, E\varepsilon+\rangle - T^+_{k\varepsilon-,k\varepsilon+}}\right] \\
& \times \langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon+\rangle\langle E\varepsilon- \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\delta_+(E - E'')\,T^+_{E''\varepsilon'',k\varepsilon+} \\
& - 2\pi i\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\delta_+(E - E'')\,T^+_{E''\varepsilon'',k\varepsilon+}, \\
\mathfrak{T}^-_{E'\varepsilon',k\varepsilon-} = {} & \left[\frac{-2\pi i}{\langle E\varepsilon+ \,|\, H \,|\, E\varepsilon-\rangle - T^-_{k\varepsilon+,k\varepsilon-}}\right] \\
& \times \delta_+(E' - E)\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon-\rangle\langle E\varepsilon+ \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\mathfrak{T}^-_{E''\varepsilon'',k\varepsilon-} \\
& + 2\pi i\,\delta_+(E' - E)\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\mathfrak{T}^-_{E''\varepsilon',k\varepsilon-}
\end{aligned}$$

et l'on retrouve (37) avec pour L un opérateur intégral de noyau

$$\delta(E' - E'')\,\delta(\varepsilon' - \varepsilon'') + 2\pi i\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\delta_+(E - E''),$$

$T^+_{E'\varepsilon',k\varepsilon+}$ et $\mathfrak{T}^-_{E'\varepsilon',k\varepsilon-}$ jouant les rôles de ψ et Φ respectivement, $\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon+\rangle$ et $\delta_+(E' - E)\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon-\rangle$ ceux de φ_1 et φ_2. Dès lors la transcription de (38) est immédiate et donne

$$\begin{aligned}
(47)\quad & \frac{2\pi i}{\langle E\varepsilon+ \,|\, H \,|\, E\varepsilon-\rangle - T^+_{E\varepsilon+,k\varepsilon-}} \\
& = \text{V. S.}\,\frac{\left\{\begin{array}{l} T^{-*}_{E'\varepsilon',k\varepsilon-}\,\delta_+(E - E')\,T^+_{E'\varepsilon',k\varepsilon+} \\ \quad + 2\pi i\,T^{-*}_{E'\varepsilon',k\varepsilon-}\,\delta_+(E - E')\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\delta_+(E - E'')\,T_{E''\varepsilon'',k\varepsilon+}\end{array}\right\}}{\left\{\begin{array}{l}[T^{-*}_{E'\varepsilon',k\varepsilon+}\,\delta_+(E - E')\langle E'\varepsilon' \,|\, H \,|\, E\varepsilon+\rangle] \\ \quad \times [\langle E\varepsilon- \,|\, H \,|\, E''\varepsilon''\rangle\,\delta_+(E - E'')\,T^+_{E''\varepsilon'',k\varepsilon+}\end{array}\right\}}.
\end{aligned}$$

On peut faire sur (46) et (47) les mêmes remarques quant à leurs valeurs relatives, que celles faites à la fin de 1°. Mais nous devons ajouter que (46) et (47), outre de permettre l'emploi d'une norme quelconque pour les fonctions, se prêtent à une méthode d'itération

quand on les couple avec les équations intégrales dont ils se déduisent. Considérons, en effet, (46) et les équations (45). Si $(\Psi^{+}_{k\varepsilon+})^0$ et $(\Psi^{-}_{k\varepsilon-})^0$ sont les premières fonctions d'essai d'où résultera par (46) un $(\mathbf{T}^{+}_{k\varepsilon-,k\varepsilon+})^0$, on définira une deuxième fonction d'essai par

$$(\Psi^{+}_{1\varepsilon+})^1 = -2\pi i\,\delta_+(E - H_0)\,H(\Psi^{+}_{1\varepsilon+})^0 + \frac{1}{(\mathbf{T}^{+}_{1\varepsilon-,1\varepsilon+})^0}\int \Phi_{k\varepsilon+}(\tau)[H\Phi_{k\varepsilon-}(\tau')]^*(\Psi^{+}_{k\varepsilon+}(\tau')^0\,d\tau'$$

et une équation analogue pour $(\Psi^{-}_{1\varepsilon-})^1$. On en déduira un $(\mathbf{T}^{+}_{k\varepsilon-,k\varepsilon+})^1$ et en remplaçant dans l'équation précédente les exposants (o) par des exposants (1) on définira une troisième fonction d'essai $(\Psi^{+}_{k\varepsilon+})^2$. De même on définira $(\Psi^{-}_{k\varepsilon-})^2$, et ainsi de suite. On a pu montrer, dans un cas particulier (diffusion dans un état S par un potentiel radial) qu'en choisissant couvenablement les fonctions d'essai de départ, les valeurs successives obtenues pour la quantité cherchée (dans ce cas ce déphasage) convergeaient vers la valeur vraie (*cf.* T. Kato [9]).

6. **La fonction Ψ^1_k** [Schwinger-Lippmann]. — A côté des fonctions Ψ^{+}_k et Ψ^{-}_k, il est intéressant d'introduire (nous dirons tout à l'heure pourquoi) une fonction Ψ^1_k que l'on obtient à partir de l'opérateur

$$G^1(t) = 2G^+(t, -\infty)[1 + G^+(\infty, -\infty)]^{-1}. \tag{48}$$

Mais une autre expression est possible pour $G^1(t)$, en utilisant l'opérateur $G^-(t, +\infty)$ qui joue dans la définition de Ψ^-_k le même rôle que $G^+(t, -\infty)$ dans celle de Ψ^+_k. De même que $G^+(t, -\infty)$ nous est apparu comme permettant de déduire la fonction d'onde à l'instant t à partir de sa valeur à l'instant $t = -\infty$, $G^-(t, +\infty)$ apparaîtra comme l'opérateur faisant passer de la connaissance de la fonction d'onde à $t = +\infty$ à sa valeur à l'instant t, de sorte qu'il est immédiat de poser les relations

$$\begin{cases} G^+(t, -\infty) = G^-(t, +\infty)\,G^+(+\infty, -\infty), \\ G^-(t, +\infty) = G^+(t, -\infty)\,G^-(-\infty, +\infty), \end{cases} \tag{49}$$

ce qui permet d'écrire $G^1(t)$ sous la forme

$$G^1(t) = 2G^-(t, +\infty)\,G^+(\infty, -\infty)[1 + G^+(\infty, -\infty)]^{1-}. \tag{50}$$

Maintenant, $G^-(t, +\infty)$ vérifie l'équation intégrale

$$(51) \qquad G^-(t, +\infty) = 1 + i\int_{-\infty}^{+\infty} Y(t'-t)\,H'(t')\,G^-(t', +\infty)\,dt',$$

comme on le voit aisément en reprenant les calculs faits au paragraphe 3 sur l'opérateur $G^+(t, t')$ [1].

En conséquence de (48) et (50), $G^1(t)$ va vérifier deux équations intégrales distinctes, déduites des équations intégrales vérifiées par $G^+(t, -\infty)$ et $G^-(t, +\infty)$. Il vient

$$G_1(t) = 2[1 + G^+(\infty, -\infty)]^{-1} - i\int_{-\infty}^{+\infty} Y(t-t')\,H'(t')\,G^1(t')\,dt',$$

$$G^1(t) = 2G^+(\infty, -\infty)[1 + G^+(\infty, -\infty]^{-1} + i\int_{-\infty}^{+\infty} Y(t'-t)\,H'(t')\,G^1(t')\,dt',$$

ce qui, après addition et division par 2, donne notre équation de base

$$(52) \qquad G^1(t) = 1 + \frac{i}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} [Y(t'-t) - Y(t-t')]\,H'(t')\,G^1(t')\,dt'.$$

L'opérateur auquel nous nous intéressons est défini par

$$(53) \qquad K = \frac{i}{2}[G^1(+\infty) - G^1(-\infty)] = i\,\frac{G^+(\infty, -\infty) - 1}{G^+(\infty, -\infty) + 1}.$$

---

[1] Grâce à (51), on peut démontrer de façon directe les relations (49). En effet, par suite de

$$G^+(t, -\infty) = 1 - i\int_{-\infty}^{+\infty} Y(t-t')\,H'(t')\,G^+(t', -\infty)\,dt,$$

nous avons, pour $G^+(\infty, -\infty)$,

$$G^+(\infty, -\infty) = 1 - i\int_{-\infty}^{+\infty} H'(t')\,G^+(t'-\infty)\,dt'.$$

de sorte qu'en ajoutant et retranchant $G^+(\infty, -\infty)$ au deuxième membre de l'équation intégrale déterminant $G^+(t, -\infty)$, on met cette équation sous la forme

$$G^+(t, -\infty) = G^+(\infty, -\infty) + i\int_{-\infty}^{+\infty} [1 - Y(t-t')]\,H(t')\,G^+(t', -\infty)\,dt'.$$

Comme $1 - Y(t-t') = Y(t'-t)$, on obtient la même équation intégrale que celle que l'on déduirait de (51) pour l'opérateur $G^-(t, +\infty)\,G^+(+\infty, -\infty)$. D'où la première relation (49). Une démonstration similaire rendrait raison de la seconde équation (49).

Comme dans les paragraphes précédents, nous ferons agir K sur une fonction d'onde, superposition de fonctions propres de H_0 et que nous noterons conventionnellement $\Psi(-\infty)$. Il viendra alors

$$(54) \qquad \langle \Phi_\alpha, K\psi(-\infty)\rangle = \frac{1}{2}\langle \Phi_\alpha, H\Psi^1(E)\rangle,$$

$$(55) \qquad \Psi^1(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp it(E - H_0) - f(t)\, G^1(t)\, \Psi(-\infty)\, dt$$

et un calcul entièrement analogue à celui du paragraphe 3, donne alors, pour déterminer $\Psi^1(E)$, l'équation intégrale

$$(56) \quad \Psi^1(E) = \varphi(E - H_0)\,\varphi(-\infty) - \frac{i}{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(E - E')\,[\delta_+(E' - H_0) - \delta_+(H_0 - E')]\, H\Psi^1(E')\, dE'$$

et en effectuant le passage à la limite $\varepsilon \to 0$, supposé justifié, ceci devient

$$(57) \qquad \Psi^1(E) = 2\pi\delta(E - H_0)\,\psi(-\infty) + P\frac{1}{E - H_0} H\Psi^1(E)$$

le signe P indiquant que l'on doit prendre une partie principale.

En écrivant $\psi(-\infty)$ sous la forme

$$\psi(-\infty) = \int dE\, d\varepsilon\, C^1(E, \varepsilon)\, \Phi_{E\varepsilon},$$

on voit que (57) sera résolue si l'on peut résoudre les équations

$$(58) \qquad \Psi^1_{E\varepsilon} = \Phi_{E\varepsilon} + P\frac{1}{E - H_0} H\Psi^1_{E\varepsilon},$$

car on aura alors

$$\frac{1}{2\pi}\Psi^1(E) = \int d\varepsilon\, C^1(E, \varepsilon)\, \Psi^1_{E\varepsilon}$$

et en posant

$$(59) \qquad T^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon} = \langle \Phi_{E'\varepsilon'}, H\Psi^1_{E\varepsilon}\rangle$$

on mettra la quantité (54) sous la forme

$$(60) \qquad \langle \Phi_{E_\alpha\varepsilon'}, K\psi(-\infty)\rangle = \pi\int C^1(E_\alpha, \varepsilon')\, T^1_{E_\alpha\varepsilon, E_\alpha\varepsilon'}\, d\varepsilon'.$$

Ce sont donc les quantités $T^1_{E\varepsilon, E\varepsilon}$ qu'il nous faut connaître et au calcul desquelles nous allons appliquer des principes variationnels.

En effet, en introduisant $\Phi^1_{k\varepsilon_2} = H\Psi^1_{k\varepsilon_2}$, on peut écrire le couple d'équations

$$\Psi^1_{k\varepsilon_1} = \Phi_{k\varepsilon_1} + P\frac{1}{E - H_0}H\Psi^1_{k\varepsilon_1}, \qquad \Phi^1_{k\varepsilon_2} = H\Phi_{k\varepsilon_2} + HP\frac{1}{E - H_0}\Phi^1_{k\varepsilon_2},$$

équations du type (29), (30), avec $\Psi^1_{k\varepsilon_1}$, $\Phi^1_{k\varepsilon_2}$ en lieu et place de ψ et Φ respectivement, $\Phi_{k\varepsilon_1}$ et $H\Phi_{k\varepsilon_2}$ pour φ_1 et φ_2 et l'opérateur L étant $1 - P\frac{1}{E - H_0}H$. On peut donc appliquer le principe (31) qui donne

$$(61)\quad T^1_{k\varepsilon_2, k\varepsilon_1} = \text{V. S.}\Big\{\langle \Phi_{k\varepsilon_2}, H\Psi^1_{k\varepsilon_1}\rangle + \langle \Phi_{k\varepsilon_1}, H\Psi^1_{k\varepsilon_2}\rangle^* - \langle \Psi^1_{k\varepsilon_2}, H\Psi^1_{k\varepsilon_1}\rangle + \langle \Psi^1_{k\varepsilon_2}, HP\frac{1}{E - H_0}H\Psi^1_{k\varepsilon_1}\rangle\Big\}.$$

On notera en passant l'égalite

$$(62)\qquad T^1_{k\varepsilon_2\, k\varepsilon_1} = T^{1*}_{k\varepsilon_1, k\varepsilon_2},$$

d'où va résulter l'hermiticité de l'opérateur K. En effet, si f et g sont deux fonctions quelconques que l'on écrira

$$f = \int dE\, d\varepsilon\, \varphi(E\varepsilon)\Phi_{k\varepsilon}, \qquad g = \int dE\, d\varepsilon\, \gamma(E\varepsilon)\Phi_{k\varepsilon},$$

on obtiendra, par utilisation de (60),

$$\langle f, Kg\rangle = \pi\int dE\, d\varepsilon\, d\varepsilon'\, \varphi^*(E\varepsilon)\gamma(E\varepsilon')T^1_{k\varepsilon, k\varepsilon'},$$

$$\langle g, Kf\rangle = \pi\int dE\, d\varepsilon\, d\varepsilon'\, \gamma^*(E\varepsilon)\varphi(E\varepsilon')T^1_{k\varepsilon, k\varepsilon'},$$

mais par suite de (62) et en échangeant ε et ε', la dernière relation devient

$$\langle g, Kf\rangle = \pi\int dE\, d\varepsilon\, d\varepsilon'\, \varphi(E\varepsilon)\, \gamma^*(E\varepsilon')T^{1*}_{k\varepsilon\, k\varepsilon'} = \langle f, Kg\rangle^*,$$

soit la propriété caractéristique des opérateurs hermitiques. Comme de (53) on déduit aisément

$$(63)\qquad G^+(\infty, -\infty) = \frac{1 - iK}{1 + iK},$$

on conclut à l'unitarité de la matrice $S = G^+(\infty, -\infty)$.

C'est la relation (63) qui fait l'intérêt de l'opérateur K. En effet, en portant dans (63) les valeurs approchées de K que l'on peut tirer des principes variationnels tels que (61), on obtiendra une valeur

approchée de $G^+(\infty, -\infty)$ automatiquement unitaire, avantage que ne possédaient pas les principes variationnels du paragraphe précédent.

Maintenant comme précédemment, à côté du principe variationnel (61), nous en introduirons un autre déduit des équations vérifiées par les quantités (59). En posant

$$\mathfrak{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_2} = P\frac{1}{E-E'}\mathbf{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_2},$$

nous pourrons écrire

$$\mathbf{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_1} = \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle + \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon'' \rangle P\frac{1}{E-E''}\mathbf{T}^1_{E''\varepsilon'', E\varepsilon_1},$$

$$\mathfrak{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_2} = P\frac{1}{E-E'}\langle E'\varepsilon' \mid H \mid E\varepsilon_2 \rangle + P\frac{1}{E-E'}\langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon'' \rangle \mathfrak{T}^1_{E''\varepsilon'', E\varepsilon_2},$$

couple d'équations du type (29), (30), tel qu'on puisse appliquer (31) (la répétition des variables doublement primées indique une intégration sur ces variables). La quantité que l'on calculera ainsi par approximation sera

$$\int dE'\, d\varepsilon' \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E'\varepsilon' \rangle P\frac{1}{E-E'}\mathbf{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_1}$$

qui d'après les équations ci-dessus n'est autre que

$$\mathbf{T}_{E'\varepsilon_2, E\varepsilon_1} - \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle.$$

Donc, il viendra, pour finir,

$$\begin{aligned}(64)\quad \mathbf{T}^1_{E\varepsilon_2, E\varepsilon_1} = \text{V. S.}\Big\{ & \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1 \rangle + \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E'\varepsilon' \rangle P\frac{1}{E-E'}\mathbf{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_1} \\ & + \Big[\langle E\varepsilon_1 \mid H \mid E\varepsilon' \rangle P\frac{1}{E-E'}\mathbf{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_2} \Big]^* \\ & - \mathbf{T}^{1*}_{E'\varepsilon', E\varepsilon_2} P\frac{1}{E-E'}\mathbf{T}^1_{E'\varepsilon', E\varepsilon_1} + \mathbf{T}^{1*}_{E'\varepsilon', E\varepsilon_2} P\frac{1}{E-E'} \\ & \times \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon'' \rangle P\frac{1}{E-E''}\mathbf{T}^1_{E''\varepsilon'', E\varepsilon_1} \Big\},\end{aligned}$$

où la répétition des variables primées indique une intégration sur ces variables.

De même qu'au paragraphe 5, nous pouvons doubler les principes (61) et (64) par des principes variationnels indépendants de la norme des fonctions d'essai, présentant pour le calcul des $\mathbf{T}^1_{E\varepsilon_2, E\varepsilon_1}$ les mêmes avantages que ceux signalés plus haut, particulièrement pour

ce qui est des possibilités d'itération à partir des équations intégrales

$$(65)\quad \begin{cases} \Psi^1_{E\varepsilon_1} = P\dfrac{1}{E-H_0} H\Psi^1_{E\varepsilon_1} + \dfrac{1}{T^1_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1}} \displaystyle\int d\tau' \Phi_{E\varepsilon_1}(\tau)[H\Phi_{E\varepsilon_2}(\tau')]^* \Psi^1_{E\varepsilon_1}(\tau'), \\ \Phi^1_{E\varepsilon_2} = HP\dfrac{1}{E-H_0}\Phi^1_{E\varepsilon_2} + \dfrac{1}{T^1_{E\varepsilon_1,E\varepsilon_2}} \displaystyle\int d\tau' [H\Phi_{E\varepsilon_2}(\tau)]\Phi^*_{E\varepsilon_1}(\tau')\Psi_{E\varepsilon_2}(\tau'), \end{cases}$$

d'une part, et d'autre part [1]

$$(66)\quad \begin{cases} T^1_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1} = \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon''\rangle P\dfrac{1}{E-E''} T^1_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_1} \\ \qquad + \dfrac{1}{T^1_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1} - \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1\rangle} \langle E'\varepsilon' \mid H \mid E\varepsilon_1\rangle \\ \qquad \times P\dfrac{1}{E-E''}\langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E''\varepsilon''\rangle T^1_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_1}, \\ \mathfrak{T}^1_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2} = P\dfrac{1}{E-E'}\langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon''\rangle \mathfrak{T}^1_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_2} \\ \qquad + \dfrac{1}{T^1_{E\varepsilon_1,E\varepsilon_2} - \langle E\varepsilon_1 \mid H \mid E\varepsilon_2\rangle} P\dfrac{1}{E-E'}\langle E'\varepsilon' \mid H \mid E\varepsilon_2\rangle \\ \qquad \times \langle E\varepsilon_1 \mid H \mid E''\varepsilon''\rangle \mathfrak{T}^1_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_2} \end{cases}$$

les principes variationnels indépendants de la norme correspondant à (65) et (66) s'écrivant respectivement

$$(67)\quad \frac{1}{T^1_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1}} = \text{V. S.}\ \frac{(\Psi^1_{E\varepsilon_2}, H\Psi^1_{E\varepsilon_1}) - (\Psi^1_{E\varepsilon_2}, HP\dfrac{1}{E-H_0}H\Psi^1_{E\varepsilon_1})}{(\Phi^1_{E\varepsilon_1}, H\Psi^1_{E\varepsilon_2})^*(\Phi^1_{E\varepsilon_2}, H\Psi^1_{E\varepsilon_1})},$$

$$(68)\quad \frac{1}{T^1_{E\varepsilon_2,E\varepsilon_1} - \langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E\varepsilon_1\rangle}$$

$$= \text{V. S.}\ \frac{\left\{ \begin{array}{l} T^{1*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2} P\dfrac{1}{E-E'} T^1_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1} - T^{1*}_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2} \\ \times P\dfrac{1}{E-E'}\langle E'\varepsilon' \mid H \mid E''\varepsilon''\rangle P\dfrac{1}{E-E''} T^1_{E''\varepsilon'',E\varepsilon_1} \end{array} \right\}}{\left\{ \begin{array}{l} \left[\langle E\varepsilon_2 \mid H \mid E'\varepsilon'\rangle P\dfrac{1}{E-E'} T^1_{E'\varepsilon',E\varepsilon_1}\right] \\ \times \left[\langle E\varepsilon_1 \mid H \mid E'\varepsilon'\rangle P\dfrac{1}{E-E'} T^1_{E'\varepsilon',E\varepsilon_2}\right]^* \end{array} \right\}},$$

avec intégration sur toutes les variables primées, ou doublement primées, répétées.

7. Relations diverses. — Par suite des relations entre les opérateurs $G^+(t, -\infty)$, $G^1(t)$, $G^-(t, +\infty)$, les fonctions Ψ^+_E, Ψ^1_E, Ψ^-_E ne

[1] Dans (66), il n'y a intégration que sur les variables doublement primées.

sont pas indépendantes et il peut être intéressant de connaître ces relations.

Considérons donc, pour commencer, la première relation (49). En faisant agir les opérateurs sur une fonction quelconque écrite sous la forme d'une superposition de fonctions propres de H_0, soit

$$\int dE\, d\varepsilon\, C(E, \varepsilon)\, \Phi(E, \varepsilon),$$

puis ensuite, en multipliant par $\exp i(E - H_0)\, t$ et intégrant sur t, il vient, en tenant compte des expressions des éléments de la matrice en fonction de $\mathbf{T}^+$

$$\int d\varepsilon\, C(E, \varepsilon) \left[\Psi^+_{k\varepsilon} - \Psi^-_{k\varepsilon} + 2\pi i \int d\varepsilon'\, \mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon}\, \Psi^-_{k\varepsilon'} \right] = 0.$$

Les $C(E, \varepsilon)$ étant pris quelconques, on en déduit

$$\Psi^+_{k\varepsilon} - \Psi^-_{k\varepsilon} + 2\pi i \int d\varepsilon'\, \mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon}\, \Psi^-_{k\varepsilon'} = 0. \tag{69}$$

En multipliant (69) par H à gauche et en prenant le produit scalaire avec $\Phi_{k\varepsilon'}$, on la met sous la forme équivalente

$$\mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon} = \mathbf{T}^-_{k\varepsilon', k\varepsilon} - 2\pi i \int d\varepsilon''\, \mathbf{T}^-_{k\varepsilon', k\varepsilon''}\, \mathbf{T}^+_{k\varepsilon'', k\varepsilon}. \tag{70}$$

La méthode de calcul est la même pour tous les cas et en partant de la seconde équation (49), de (48) et de (50), on pourra écrire

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi^-_{k\varepsilon} &= \Psi^+_{k\varepsilon} + 2\pi i \int d\varepsilon'\, \mathbf{T}^-_{k\varepsilon', k\varepsilon}\, \Psi^+_{k\varepsilon'}, \\ \mathbf{T}^-_{k\varepsilon', k\varepsilon} &= \mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon} + 2\pi i \int d\varepsilon''\, \mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon''}\, \mathbf{T}^-_{k\varepsilon'', k\varepsilon}; \end{aligned} \right. \tag{71}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi^-_{k\varepsilon} &= \Psi^1_{k\varepsilon} + \pi i \int d\varepsilon'\, \mathbf{T}^-_{k\varepsilon', k\varepsilon}\, \Psi^1_{k\varepsilon'}, \\ \mathbf{T}^-_{k\varepsilon', k\varepsilon} &= \mathbf{T}^1_{k\varepsilon', k\varepsilon} + \pi i \int \mathbf{T}^1_{k\varepsilon', k\varepsilon''}\, \mathbf{T}^-_{k\varepsilon'', k\varepsilon}\, d\varepsilon''; \end{aligned} \right. \tag{72}$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi^+_{k\varepsilon} &= \Psi^1_{k\varepsilon} - \pi i \int d\varepsilon'\, \mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon}\, \Psi^1_{k\varepsilon'}, \\ \mathbf{T}^+_{k\varepsilon', k\varepsilon} &= \mathbf{T}^1_{k\varepsilon', k\varepsilon} - \pi i \int d\varepsilon''\, \mathbf{T}^1_{k\varepsilon', k\varepsilon''}\, \mathbf{T}^+_{k\varepsilon'', k\varepsilon}. \end{aligned} \right. \tag{73}$$

Ces formules présentent l'avantage de permettre des itérations dans

le cas des principes variationnels de la forme (42) ou (44), ou l'emploi simultané de principes portant sur Ψ^{+}_{k}, Ψ^{-}_{k} et Ψ^{1}_{k}.

L'itération de (42), par exemple, repose sur les équations (69) et (71). Partons, en effet, de fonctions d'essai pour $\Psi^{+}_{k\varepsilon}$ et $\Psi^{-}_{k\varepsilon}$ qui donnent, par (42) une valeur approchée de $\mathbf{T}^{+}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$ et de $\mathbf{T}^{-}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$. On obtiendra une nouvelle fonction d'essai pour $\Psi^{+}_{k\varepsilon}$ en remplaçant dans (69), $\mathbf{T}^{+}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$ par la valeur obtenue et $\Psi^{-}_{k\varepsilon}$ par la première fonction d'essai. De façon analogue, (71) donnera une nouvelle fonction d'essai pour $\Psi^{-}_{k\varepsilon}$. On pourra alors répéter le procédé à partir de ces nouvelles fonctions.

Les équations (72) et (73) peuvent être utilisées en même temps que les principes variationnels portant sur $\Phi^{+}_{k\varepsilon}$, $\Psi^{-}_{k\varepsilon}$ d'une part, $\Psi^{1}_{k\varepsilon}$ d'autre part. En effet, partons de fonctions d'essai pour $\Psi^{+}_{k\varepsilon}$, $\Psi^{-}_{k\varepsilon}$ et les valeurs de $\mathbf{T}^{+}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$, $\mathbf{T}^{-}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$ qu'on en déduit, soit par (42), soit par (46), et portons ces quantités dans (72) ou (73). On a alors des équations intégrales pour calculer $\Psi^{1}_{k\varepsilon}$. La fonction qu'on obtient ainsi sera prise comme fonction d'essai pour $\Psi^{1}_{k\varepsilon}$ dans les principes (64) ou (67). La valeur de $\mathbf{T}^{1}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$ qu'ils permettent de calculer peut être portée dans la deuxième colonne des équations (72) et (73); on peut alors en tirer, comme solutions d'équations intégrales deux autres valeurs approchées pour $\mathbf{T}^{+}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$, $\mathbf{T}^{-}_{k\varepsilon',k\varepsilon}$. On conçoit qu'avec un choix convenable des fonctions d'essai, les valeurs approchées ainsi obtenues sont suffisamment correctes pour qu'il n'y ait pas lieu de poursuivre les calculs.

8. Amplitudes de diffusion. Déphasages. — Dans ce paragraphe nous allons montrer comment, à partir des résultats généraux qui précèdent, il est possible de retrouver les résultats classiques de la théorie des collisions tels qu'ils sont exposés par exemple dans Mott et Massey : *Theory of Atomic Collisions*, et de déduire les méthodes variationnelles de calcul applicables dans ce cas.

Dans les unités adoptées ($\hbar = c = 1$), l'opérateur H_0 est le laplacien changé de signe, H une quantité scalaire fonction du rayon vecteur $\vec{r}$, en nous limitant au cas le plus courant de la diffusion d'une particule par un champ scalaire donné. Les fonctions propres de H_0 sont alors des ondes planes que nous noterons $\exp i\vec{k}_i.\vec{r}$, l'indice i rappelant qu'il s'agit, en quelque sorte, d'une forme initiale

de fonction d'onde. L'équation (24′) s'écrit alors

$$(74)\quad \begin{cases} \Psi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \exp i\vec{k}_i.\vec{r} - i\left[\int_0^\infty du \exp iu(k^2 - H_0)\right] H(\vec{r})\Psi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{r}) \\ \qquad\qquad \left(k = |\vec{k}_i|\right). \end{cases}$$

En utilisant la transformation de Fourier, nous pouvons écrire

$$(75)\quad \begin{cases} H(\vec{r})\Psi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{l}\,\varphi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{l}) \exp\left(-i\vec{l}\cdot\vec{r}\right), \\ \varphi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{l}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{r}\, H(\vec{r})\Psi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{r}) \exp i\vec{l}\cdot\vec{r} \end{cases}$$

et mettre (74) sous la forme

$$(76)\quad \Psi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \exp i\vec{k}_i.\vec{r} - \int K(\vec{r}, \vec{r}')\, H(\vec{r}')\, \Psi^{+}_{\vec{k}_i}(\vec{r}')\, d^3\vec{r}',$$

$$(77)\quad \begin{cases} K(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{i}{(2\pi)^3}\int_0^\infty du \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\vec{l} \exp iu(k^2 - l^2) \exp\left(-i\vec{l}.\vec{R}\right) \\ \qquad\qquad \left(\vec{R} = \vec{r} - \vec{r}'\right). \end{cases}$$

Reste à calculer le noyau $K(\vec{r}, \vec{r}')$. Pour cela, nous effectuerons d'abord l'intégration dans l'espace du vecteur $\vec{l}$, en prenant, dans cet espace, des coordonnées polaires dont l'axe est porté par $\vec{R}$. Il vient alors, après utilisation de la valeur des intégrales de Fresnel

$$K(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1-i}{4(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\int_0^\infty \frac{du}{u^{\frac{3}{2}}} \exp i\left(uk^2 + \frac{R^2}{4u}\right).$$

Après les changements de variables $v = \frac{2k}{R}u$, l'intégrale du second membre devient $\sqrt{\frac{2k}{R}}\int_0^\infty \frac{dv}{v^{\frac{3}{2}}} \exp i\frac{Rk}{2}\left(v + \frac{1}{v}\right)$, soit encore, en posant $v = e^\theta$,

$$\int_0^\infty \frac{du}{u^{\frac{3}{2}}} \exp i\left(uk^2 + \frac{R^2}{4u}\right) = \sqrt{\frac{2k}{R}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iRk\operatorname{ch}\theta}\, e^{-\frac{\theta}{2}}\, d\theta$$
$$= 2\sqrt{\frac{2k}{R}}\int_0^\infty e^{iRk\operatorname{ch}\theta} \operatorname{ch}\frac{\theta}{2}\, d\theta.$$

En posant $\omega = \operatorname{ch}\frac{\theta}{2}$ et en utilisant $\operatorname{ch}\theta = 2\operatorname{ch}^2\frac{\theta}{2} - 1$, la dernière

intégrale écrite devient

$$\int_0^\infty e^{ik\mathrm{R}\operatorname{ch}\theta} \operatorname{ch}\frac{\theta}{2}\, d\theta = 2\, e^{-ik\mathrm{R}} \int_1^{+\infty} e^{2i\mathrm{R}k\omega^2} \frac{\omega\, d\omega}{\sqrt{\omega^2 - 1}}$$
$$= e^{-ik\mathrm{R}} \int_1^\infty e^{2i\mathrm{R}kz} \frac{dz}{\sqrt{z-1}}$$

et pour finir

$$\int_0^\infty e^{i\mathrm{R}k\operatorname{ch}\theta} \operatorname{ch}\frac{\theta}{2}\, d\theta = e^{i\mathrm{R}k} \int_0^\infty e^{2i\mathrm{R}kx} \frac{dx}{\sqrt{x}}$$
$$= 2\, e^{+i\mathrm{R}k} \int_0^\infty e^{2i\mathrm{R}ky^2}\, dy.$$

D'après les valeurs connues des intégrales de Fresnel, nous avons donc

$$\int_0^\infty \frac{du}{u^{\frac{3}{2}}} \exp i\left(uk^2 + \frac{\mathrm{R}^2}{4u}\right) = 2\,\frac{e^{ik\mathrm{R}}}{\mathrm{R}}(1+i)\sqrt{\frac{\pi}{2}},$$

de sorte que $\mathrm{K}(\vec{r}, \vec{r}')$ a pour valeur.

$$\mathrm{K}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi}\,\frac{\exp ik\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|},$$

l'équation (76) est l'équation habituelle de la théorie des collisions de Born [10].

$$(78)\qquad \Psi^+_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \exp i\vec{k}_i.\vec{r} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\exp ik\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}\,\mathrm{H}(\vec{r}')\,\Psi^+_{\vec{k}_i}(\vec{r}')\, d^3\vec{r}'.$$

A partir de ce résultat, on trouve aisément

$$(79)\qquad \Psi^-_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \exp i\vec{k}_i.\vec{r} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\exp ik\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}\,\mathrm{H}(\vec{r}')\,\Psi^-_{\vec{k}_i}(\vec{r}')\, d^3\vec{r}',$$

de sorte que $\Psi^-_{\vec{k}_i}(\vec{r})$ est imaginaire conjuguée de $\Psi^+_{\vec{k}_i}(\vec{r})$ dans le cas où $\mathrm{H}(\vec{r})$ est une quantité réelle et de même

$$(80)\qquad \Psi^1_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = \exp i\vec{k}_i.\vec{r} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{\cos k\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}{\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|}\,\mathrm{H}(\vec{r}')\,\Psi^1_{\vec{k}_i}(\vec{r}')\, d^3\vec{r}'.$$

Avec ces équations (78), (79), (80), la signification des $\mathbf{T}^\pm$ et $\mathbf{T}^1$ est immédiate. Il suffit, en effet, de se reporter à la théorie des colli-

sions de Born pour constater que $\mathbf{T}^{+}_{\mathrm{E}\vec{k}_2,\mathrm{E}\vec{k}_1}$, par exemple, est, à un facteur près, l'amplitude de diffusion dans la direction $+\vec{k}_2$ d'une onde plane incidente suivant la direction $\vec{k}_1$. On sait que cette quantité est directement liée à la valeur de la section efficace et donc aux déphasages (pour les détails, *cf.* [10] et les chapitres précédents du présent Ouvrage). Les principes variationnels des paragraphes précédents vont donc nous offrir des moyens variés de calculer ces dernières quantités.

Nous donnerons ces principes dans le cas où le potentiel $\mathrm{H}(\vec{r})$ est une quantité réelle. Dans ce cas on a la relation déjà signalée :

$$\Psi^{-}_{\vec{k}_1}(\vec{r}) = \left[\Psi^{+}_{\vec{k}_1}(\vec{r})\right]^{*}. \tag{81}$$

De plus,

$$\mathbf{T}^{+}_{\mathrm{E}\vec{k}_2,\mathrm{E}\vec{k}_1} = -4\pi f\left(\vec{k}_1, +\vec{k}_2\right),$$

en notant $f\left(\vec{k}_1, -\vec{k}_2\right)$ l'amplitude de diffusion suivant $+\vec{k}_2$ de l'onde plane incidente suivant $\vec{k}_1$ (¹). La transcription de (42) donne alors

$$\begin{aligned}(82)\quad -4\pi f\left(\vec{k}_1, -\vec{k}_2\right) = \mathrm{V.S.}\Big\{ & \int d^3\vec{r}\, \exp i\vec{k}_1.\vec{r}\, \mathrm{H}(\vec{r})\, \Psi^{+}_{\vec{k}_2}(\vec{r}) \\ & + \int \exp i\vec{k}_2.\vec{r}\, \mathrm{H}(\vec{r})\, \Psi^{+}_{\vec{k}_1}(\vec{r})\, d^3\vec{r} \\ & - \int d^3\vec{r}\, \Psi^{+}_{\vec{k}_2} \mathrm{H}(\vec{r}) \Psi^{+}_{\vec{k}_1} \\ & - \frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}'\, \Psi^{+}_{\vec{k}_2}(\vec{r}) \mathrm{H}(\vec{r}) \\ & \times \frac{\exp ik\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|} \mathrm{H}(\vec{r}')\, \Psi^{+}_{\vec{k}_1}(\vec{r}') \Big\},\end{aligned}$$

avec, sous entendu, $\left|\vec{k}_1\right| = \left|\vec{k}_2\right| = k$.

La transcription de (44) va nous donner un principe indépen-

(¹) Nous rappelons que l'amplitude de diffusion apparaît dans la forme asymptotique de $\Psi^{+}_{\vec{k}_1}$ pour $(\vec{r})$ très grand. On écrit, en effet,

$$\Psi^{+}_{\vec{k}_1}(\vec{r}) \approx \exp i\vec{k}_1.\vec{r} + f\left(\vec{k}_1, \vec{k}\right) \frac{\exp ik\left|\vec{r}\right|}{\left|\vec{r}\right|}$$

dant de la norme des fonctions d'essai, sous la forme

$$(83)\quad -\frac{1}{4\pi f(\vec{k}_1, -\vec{k}_2)} = \text{V.S.}\frac{\left\{\begin{array}{l}\int \Psi^+_{\vec{k}_2} H(\vec{r})\Psi_{\vec{k}_1} d^3\vec{r} + \frac{1}{4\pi}\int d^3\vec{r}\int d^3\vec{r}'\Psi^+_{\vec{k}_2}(\vec{r})H(\vec{r}) \\ \times \frac{\exp ik|\vec{r}-\vec{r}'|}{|\vec{r}-\vec{r}'|} H(\vec{r}')\Psi^+_{\vec{k}_1}(\vec{r}')\end{array}\right\}}{\left\{\begin{array}{l}\left[\int \exp i\vec{k}_1.\vec{r} H(\vec{r})\Psi^+_{\vec{k}_2}(\vec{r})d^3\vec{r}\right] \\ \times\left[\int \exp i\vec{k}_2.\vec{r} H(\vec{r})\Psi^+_{\vec{k}_1}(\vec{r})d^3\vec{r}\right]\end{array}\right\}}.$$

En posant de façon générale

$$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = -\frac{1}{4\pi}\int \exp(-i\vec{k}_2, \vec{r})\, H(\vec{r})\Psi^+_{\vec{k}_1}(\vec{r})\, d^3\vec{r},$$

quelles que soient les largeurs respectives de $\vec{k}_1$ et de $\vec{k}_2$, on transcrirait les principes variationnels (44) et (47). Ce sont les principes variationnels qu'on obtiendrait en posant le problème de collision dans l'espace des moments. Mais on doit prendre garde au fait que la quantité $\delta(k^2 - k'^2)$ qui s'introduit alors est susceptible de plusieurs significations. Aussi cette ambiguïté possible nous paraît-elle limiter l'intérêt pratique de principes variationnels obtenus par transcription de (44) et (47), que nous laisserons aux soins du lecteurs.

Nous pouvons particulariser encore plus le problème en considérant des potentiels $H(\vec{r})$, dépendant uniquement de la quantité $|\vec{r}|$. Dans ce cas, les valeurs exactes de $\Psi^+_{\vec{k}_1}$ et $\Psi^+_{\vec{k}_2}$ se mettent sous la forme

$$(84)\quad \left\{\begin{array}{l}\Psi^+_{\vec{k}_1} = \sum_0^\infty (2n+1) i^n P_n(\cos\theta) L_n(r), \\ \Psi^+_{\vec{k}_2} = \sum_0^\infty (2n+1) i^n P_n\left(\cos \widehat{\vec{k}_2, \vec{r}}\right) L_n(r),\end{array}\right.$$

la direction k_1 ayant été prise comme axe des z; θ, φ, r étant les coordonnées polaires de $\vec{r}$, tandis que Θ et o désigneront celles de la direction $\vec{k}_2$. Les quantités $P_n(\cos\theta)$ sont les habituels polynomes

de Legendre, et les $L_n(r)$ les solutions de l'équation différentielle radiale relative à la valeur n du moment angulaire [Mott et Massey].

Nous introduirons alors dans les principes variationnels (82) et (83), des fonctions d'essai pour $\Psi^+_{\vec{k}_1}$ et $\Psi^+_{\vec{k}_2}$ ayant une forme analogue à (84), avec, simplement, le remplacement de $L_n(r)$ par une valeur approchée $\Lambda_n(r)$. Nous définissons ainssi une variation des solutions exactes, qui n'est pas la variation la plus générale, mais c'est la seule importante ici puisque, grâce à la symétrie sphérique du problème, nous connaissons exactement la dépendance angulaire des solutions. $L_n(r)$ ayant comme forme asymptotique $\frac{e^{i\eta_n}}{kr}\sin\left(kr - n\frac{\pi}{2} + \eta_n\right)$, où les constantes η_n sont les déphasages, la valeur approchée $\Lambda_n(n)$ devra avoir une forme asymptotique analogue, la constante η_n y étant remplacée par une valeur approchée η'_n. Maintenant, en utilisant les relations

$$(85)\quad \begin{cases} +\dfrac{1}{4\pi}\dfrac{\exp ik\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}{\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|} \\ = +\dfrac{1}{4\pi}\displaystyle\sum_0^\infty \dfrac{2n+1}{k}\dfrac{\zeta_n(kr_>)}{r_>}\dfrac{\zeta_n(kr_<)}{r_<}P_n\left(\cos\widehat{\vec{r}.\vec{r}'}\right), \\ \xi_n(kr) = \sqrt{\dfrac{\pi kr}{2}}J_{n+\frac{1}{2}}(kr), \\ \zeta_n(kr) = \sqrt{\dfrac{\pi kr}{2}}\left\{iJ_{n+\frac{1}{2}}(kr) + (-)^n J_{-n-\frac{1}{2}}(kr)\right\}, \end{cases}$$

$$(86)\quad P_n\left(\cos\widehat{\vec{r}.\vec{r}'}\right) = P_n(\cos\theta)\,P_n(\cos\theta') + 2\sum_1^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!}P_n^m(\cos\theta)\,P_n^m(\cos\theta')\cos m(\varphi-\varphi')$$

et grâce aux relations d'orthogonalité entre polynomes de Legendre, le second membre de (82) s'écrit

$$(87)\quad 4\pi\sum_0^\infty(2n+1)(-)^n P_n(\cos\theta) \times\left[\frac{2}{k}\int_0^\infty\sqrt{\frac{nkr}{2}}J_{n+\frac{1}{2}}(kr)\,\Gamma_n(r)\,H(r)\,dr - \int_0^\infty[\Gamma_n(r)]^2 H(r)\,dr - \frac{1}{k}\int\Gamma_n(r)\,H(r)\,\zeta_n(kr_>)\,\xi_n(kr_<)\,H(r')\,\Gamma_n(r')\,dr\,dr'\right]$$

la notation $r_<$ indiquant que l'on doit prendre le plus petit des nombres r et r', la notation $r_>$ ayant alors la signification opposée, et $\Gamma_n(r)$ étant $r\Lambda_n(r)$. Quand $\Gamma_n(r)$ prend sa valeur exacte, le crochet du second membre a pour valeur la quantité $-\frac{\exp 2i\eta_n - 1}{2ik^2}$. Et si, finalement, on tient compte de nouveau des relations d'orthogonalités entre polynomes de Legendre, on déduit de (82)

$$(88)\quad \frac{1-\exp 2i\eta_n}{2ik^2} = \text{V.S.}\left\{\frac{2}{k}\int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr)\Gamma_n(r)\,H(r)\,dr \right.$$
$$-\int_0^\infty [\Gamma_n(r)]^2 H(r)\,dr$$
$$\left. -\int \Gamma_n(r)H(r)\zeta_n(kr_>)\xi_n(kr_<)H(r')\Gamma_n(r')\,dr\,dr'\right\}$$

permettant le calcul approché des déphasages η_n, en même temps que l'on en tire comme équation intégrale vérifiée par l'exacte solution $G_n(r)$

$$(89)\qquad G_n(r) = \frac{1}{k}\sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr) - \frac{1}{k}\int_0^\infty \zeta_n(kr_>)\,\xi_n(kr_<)H(r')G_n(r')\,dr'.$$

Une équation plus simple sera obtenue en introduisant $\mathcal{G}_n(r)$ par

$$\mathcal{G}_n(r) = kG_n(r)\frac{e^{-i\eta_n}}{\cos\eta_n}.$$

Le calcul, fait à l'aide des définitions (85) de $\xi_n(r)$ et $\zeta_n(r)$, donne pour déterminer $\mathcal{G}_n(r)$ l'équation intégrale

$$(90)\qquad \mathcal{G}_n(r) = \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr) - \frac{(-)^n}{k}\int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi kr_<}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr_<)$$
$$\times\sqrt{\frac{\pi kr_>}{2}}\, J_{-n-\frac{1}{2}}(kr_>)\,H(r')\,\mathcal{G}_n(r')\,dr'$$

et pour sa forme asymptotique

$$\sin\left(kr - \frac{n\pi}{2}\right) + \cos\left(kr - \frac{n\pi}{2}\right)\operatorname{tg}\eta_n.$$

A partir de (90), on tire une méthode de calcul approché de η_n

analogue à (88) et qui s'écrit

$$(91)\qquad \operatorname{tg}\eta_n = \text{V.S.}\left\{2\int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr)\, H(r)\, \mathcal{G}'_n(r)\, dr \right.$$
$$-\int_0^\infty [\mathcal{G}'_n(r)]^2 H(r)\, dr$$
$$-\frac{(-)^n}{k}\int \mathcal{G}'_n(r) H(r) \sqrt{\frac{\pi kr_<}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr_<)$$
$$\left.\times\sqrt{\frac{\pi kr_>}{2}}\, J_{-n-\frac{1}{2}}(kr_>)\, H(r')\, \mathcal{G}_n(r')\, dr\, dr'\right\}$$

la fonction d'essai $\mathcal{G}'(r)$ ayant comme forme asymptotique

$$\sin\left(kr - \frac{n\pi}{2}\right) + \text{const.}\left(kr - \frac{n\pi}{2}\right).$$

Cette dernière condition sur la forme asymptotique des fonctions d'essai étant plus simple que celle nécessaire dans (88) tend à rendre préférable l'emploi du principe sous la forme (91).

La déduction des principes variationnels pour η_n à partir de (83) est un peu plus délicate, mais il suffit d'écrire (83) comme une équation déterminant $f(\vec{k}_1, -\vec{k}_2)$ et de poser pour cette dernière quantité un développement analogue à (84). On obtient alors une forme bilinéaire suivant les polynomes de Legendre, et en tenant compte de nouveau des relations d'orthogonalité entre ces polynomes, on obtient le principe indépendant de la norme correspondant à (88), sous la forme

$$(92)\qquad \frac{\exp 2i\eta_n - 1}{2i}$$
$$= \text{V.S.}\,\frac{\left[\int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr)\, H(r)\, \Gamma_n(r)\, dr\right]^2}{\left\{\begin{array}{l}\int_0^\infty [\Gamma_n(r)]^2 H(r)\, dr \\ +\frac{1}{k}\int \Gamma_n(r) H(r) \zeta_n(kr_>) \xi_n(kr_<) H(r') \Gamma_n(r')\, dr\, dr'\end{array}\right\}},$$

mais ici on peut prendre comme forme asymptotique de la fonction d'essai $\Gamma_n(r)$ une quelconque combinaison linéaire de $\sin\left(kr - \frac{n\pi}{2}\right)$ et $\cos\left(kr - \frac{n\pi}{2}\right)$.

De même, un principe indépendant de la norme peut être écrit en correspondance avec (91), ce qui donne alors

$$(93)\quad -\operatorname{tg}\eta_n = \text{V.S.}\ \frac{\left[\int_0^\infty \sqrt{\frac{\pi kr}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr)\, H(r)\, \mathcal{G}'_n(r)\, dr^2\right]}{\left\{\begin{array}{l}\int_0^\infty [\mathcal{G}'_n(r)]^2 H(r)\, dr + \frac{(-)^n}{k}\int \mathcal{G}'_n(r) H(r) \sqrt{\frac{\pi kr_<}{2}}\, J_{n+\frac{1}{2}}(kr_<) \\ \times \sqrt{\frac{\pi kr_>}{2}}\, J_{-n-\frac{1}{2}}(kr_>) H(r') \mathcal{G}'_n(r')\, dr\, dr'\end{array}\right\}},$$

c'est-à-dire le principe variationnel donné par Schwinger et étudié en détail par Blatt et Jackson.

Jusqu'ici aucun compte n'a été tenu de la statistique particulière à laquelle obéissent les particules du système. Mais on sait que la section efficace pour des particules obéissant aux statistiques de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac est liée aux combinaisons d'amplitude $\left[f(\vec{k}_1, -\vec{k}_2) + f(\vec{k}_1, +\vec{k}_2)\right]$ et $\left[f(\vec{k}_1, -\vec{k}_2) - f(\vec{k}_1, +\vec{k}_2)\right]$ respectivement. Il est alors aisé de montrer qu'on obtient un principe variationnel conduisant directement à ces quantités si, dans les formules (82) et (83), on introduit des fonctions d'essai symétriques (statistique de Bose) ou antisymétriques (statistique de Fermi-Dirac) tandis qu'on symétrise ou antisymétrise les ondes planes incidentes $\exp i\vec{k}_1 . \vec{r}$ et $\exp i\vec{k}_2 . \vec{r}$.

9. **Généralisation.** — Dans ce qui précède, les principes variationnels généraux du paragraphe 4 ont été appliqués au cas où, dans le problème physique considéré, n'intervenait qu'une seule fonction inconnue dérivée au plus une fois par rapport au temps. Nous montrerons maintenant brièvement comment étendre nos énoncés à des cas plus généraux grâce à une réécriture des équations les ramenant formellement à prendre l'aspect d'une équation de Schrödinger (*cf.* Schwartz).

Soient donc $U_i(t)$ les fonctions inconnues décrivant un système physique. Nous supposerons que leur évolution est régie par des équations aux dérivées partielles du type suivant :

$$(94)\quad \frac{\partial^{l_i}}{\partial t^{l_i}} U_i(t) + \sum_{k=1}^{k=N} \sum_{\lambda < l_k} A_{i,k\lambda}(t) \frac{\partial^\lambda}{\partial t^\lambda} U_k(t) = B_i(t) \qquad (i = 1, 2, \ldots, N),$$

où $A_{i,k}(t)$ est un certain opérateur, qui peut, par exemple, prendre la forme d'un polynome de dérivation, agissant sur les variables définissant le système étudié. $B_i(t)$ est un second membre qui, souvent, sera nul et l'on remarquera que le système (94) est tel que les dérivées temporelles de $U_k(t)$ sont, partout ailleurs que dans la $k^{\text{ième}}$ équation, d'un ordre inférieur à l_k.

Cette circonstance va nous permettre de nous ramener à un système où tous les l_k sont égaux à 1. Il suffit pour cela de considérer le système d'équations déduit de (94) par l'introduction de l'ensemble d'inconnues $\frac{\partial^\lambda}{\partial t^\lambda} U_k (\lambda = 0, 1, 2, \ldots, l_k - 1;\ k = 1, 2, \ldots, N)$. On obtient alors un système de la forme

$$\frac{\partial}{\partial t} U_i(t) + \sum_{k=1}^{k=N} A_{i,k}(t) U_k(t) = B_i(t), \tag{95}$$

où $A_{i,j}(t)$ est un opérateur ayant la même signification que plus haut.

Dès lors, si nous désignons l'ensemble des $U_i(t)$ par $\psi(t)$, matrice colonne à N lignes et si $A(t)$ est une matrice dont l'élément (ik) sera l'opérateur $A_{i,k}(t)$, nous condenserons le système (95) en l'unique équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(t) + A(t)\psi(t) = B(t), \tag{96}$$

$B(t)$ étant la matrice colonne à N lignes formée avec les $B_i(t)$. On voit bien que, sous sa forme intégrale, l'équation (96) est du type de l'équation (1). Nous pourrons, en conséquence, lui appliquer directement tous les développements et résultats du paragraphe 5.

CHAPITRE III

LE CHOC MULTIPLE ET LES MÉTHODES VARIATIONNELLES. L'APPROXIMATION DE PERCUSSION.

Par « choc multiple » nous entendons le choc d'une particule (o) contre un système complexe (S), constitué de N particules formant un système quantique stable (molécule, atome, noyau). Ce système peut avoir un certain nombre d'états quantifiés distincts et nous devons considérer la possibilité d'un réarrangement interne (transi-

tion dans un état excité, par exemple) au cours du choc. Dans le cas où la configuration interne de (S) reste la même dans l'état final (choc élastique), nous pouvons montrer que le problème se ramène au problème de diffusion de la particule incidente par un potentiel $v(\vec{r}_0)$, en général complexe, fonction de la seule variable de position de la particule incidente (les variables de position sont toujours rapportées dans ce qui suit, au centre de gravité du système total).

En effet, soit H_0 l'opérateur d'énergie du système particule $(0)+(S)$, sans tenir compte du couplage $(0)-(S)$ (hamiltonien libre). Nous aurons

$$H_0 = K_0 + K_S + U_S, \tag{1}$$

K_0 étant l'opérateur d'énergie cinétique de la particule incidente, K_S l'opérateur d'énergie cinétique totale des N particules du système (S), U_S l'opérateur qui correspond à l'énergie interne du système (S). Nous désignerons par 0 la variable de position (variable vectorielle) de la particule incidente; par 1, 2, ..., N les variables de position des N particules du système (S).

Soit $\Phi_\alpha(0, 1, \ldots, N)$, E_a les fonctions et valeurs propres de H_0; $\varphi_\alpha(1, 2, \ldots, N)$, W_A et $\chi_m(0)$, ε_m les fonctions et valeurs propres de $K_S + U_S$ et K_0. Nous pouvons écrire

$$\Phi_\alpha(0, 1, \ldots, N) = \chi_m(0)\varphi_A(1, 2, \ldots, N) \qquad (\alpha = m, A), \tag{2}$$

$$E_\alpha = W_A + \varepsilon_m. \tag{3}$$

La probabilité de la transition $\alpha \to \beta$ par unité de temps (avec $E_\alpha = E_\beta$) sera proportionnelle à $|R_{\beta\alpha}|^2$ avec

$$R_{\beta\alpha} = (\Phi_\beta, H_1 \Psi_\alpha^+) \qquad (\beta = A', m'). \tag{4}$$

Ψ_α^+ vérifie l'équation intégrale (*voir* la Note en fin du chapitre)

$$\Psi_\alpha^+ = \Phi_\alpha + (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} H_1 \Psi_\alpha^+, \tag{5}$$

avec

$$H_1 = V_1(0, 1) + V_2(0, 2) + \ldots + V_N(0, N),$$

$V_j(0, j)$ étant le potentiel d'interaction de la $j^{\text{ième}}$ particule de (S) avec la particule diffusée (0).

Le cas du choc élastique correspond au fait que nous considérons seulement le cas où $\beta = A$, m' $(A' = A)$.

Soit $\mathcal{R}$ l'espace de variables 0, 1, ..., N; f, g, ... des fonctions

de carré sommable sur $\mathcal{R}$. Nous pouvons écrire

$$f = \Sigma \chi_n \varphi_A (\chi_n \varphi_A, f), \tag{6}$$

avec

$$(f, g) = \int f^* g \, do \, d_1 \ldots dN.$$

A partir de f et g, nous définirons une fonction $\langle f, g \rangle$ de la variable o par l'équation

$$\langle f, g \rangle = \int f^* g \, d_1 \ldots dN. \tag{7}$$

Enfin nous définirons un opérateur P_A, opérant dans l'espace des $f, g, \ldots$, par l'équation

$$P_A f = \varphi_A \langle \varphi_{A'} f \rangle. \tag{8}$$

En tenant compte de (6) et (8), nous pouvons vérifier les relations opératorielles presque évidentes

$$P_A(W_A - K_S - U_S) = (W_A - K_S - U_S) P_A = o, \qquad P_A K_0 = K_0 P_A.$$

Il en résulte que

$$P_A(E_\alpha - H_0 + i\varepsilon) = (\varepsilon_m - K_0 + i\varepsilon) P_A \qquad (E_\alpha = W_A + \varepsilon_m). \tag{9}$$

En multipliant l'équation (9) à gauche par $(\varepsilon_m - K_0 + i\varepsilon)^{-1}$ et à droite par $(E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1}$, nous avons

$$P_A(E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} = (\varepsilon_m - K_0 + i\varepsilon)^{-1} P_A. \tag{10}$$

L'équation (10) va nous permettre de ramener le problème du choc élastique multiple au problème de la diffusion par un potentiel convenable. En effet, l'amplitude de probabilité de la transition $A, m \to A, m'$ est

$$f_{Am, Am'} = (\chi_{m'} \varphi_A, \Psi_\alpha^+) = (\chi_{m'} \varphi_A, P_A \Psi_\alpha^+).$$

La dernière égalité vient du fait que

$$(\chi_{m'} \varphi_A, P_A \Psi_\alpha^+) = (\chi_{m'} \varphi_A, \varphi_A \langle \varphi_A, \Psi_\alpha^+ \rangle) = \int \chi_{m'}^* \langle \varphi_A, \Psi_\alpha^+ \rangle \, do = (\chi_{m'} \varphi_A, \Psi_\alpha^+).$$

Mais, l'équation (5) donne en tenant compte de (10)

$$P_A \Psi_\alpha^+ = \chi_m \varphi_A + (\varepsilon_m - K_0 + i\varepsilon)^{-1} P_A H_1 \Psi_\alpha^+. \tag{11}$$

FACULTÉ DES SCIENCES - DOMAINE UNIVERSITAIRE
SERVICE DE MATHÉMATIQUES PURES
38 - SAINT-MARTIN-D'HÈRES

Il en résulte que, en posant

$$\omega^+ = \langle \varphi_A, \Psi_a^+ \rangle, \tag{12}$$

$$v(0) = \langle \varphi_A, H_1 \Psi_\alpha^+ \rangle \langle \varphi_A, \Psi_a^+ \rangle^{-1}, \tag{13}$$

d'une part

$$f_{Am\,Am'} = \int \chi_{m'}^*(0)\, \omega^+(0)\, do \tag{14}$$

et, d'autre part,

$$\omega^+ = \chi_m + (\varepsilon_m - K_0 + i\varepsilon)^{-1} v(0) \omega^+. \tag{15}$$

D'après (4), nous aurons

$$R_{\beta\alpha} = \int \chi_m^*\, v(0) \omega^+ do \qquad (\beta = A,\ m';\ \alpha = A,\ m). \tag{15a}$$

Nous avons donc ramené le problème du choc élastique multiple [éq. (5), (4)] au problème de la diffusion de la particule incidente (o) par un potentiel $v(0)$ [éq. (15) et (15a)]. Toutefois nous pouvons avoir seulement une expression approchée de ce potentiel. En première approximation ($\Psi_\alpha^+ \approx \chi_m \varphi_A$), nous avons

$$v(0) = \int \varphi_A^* H_1(0, 1, \ldots, N) \varphi_A\, d_1 \ldots dN. \tag{16}$$

C'est le potentiel moyen déjà utilisé par divers auteurs, mais sans justification analytique.

Revenons maintenant au cas général du choc inélastique ($\beta = A'$, m', $\alpha = A$, m). Supposons que, au cours du choc, la particule incidente (o) interagit seulement avec la $j^{\text{ième}}$ particule du système (S). C'est ce que nous appellerons « choc simple lié ». La probabilité de la transition $\alpha \to \beta (E_\alpha = E_\beta)$ par unité de temps sera proportionnelle à $|R_{\beta\alpha}^{(j)}|^2$, avec

$$R_{\beta\alpha}^{(j)} = (\Phi_\beta, V_j \Psi_{\alpha,j}^+), \tag{17}$$

$$\Psi_{\alpha\,j}^+ = \Phi_\alpha + (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_j \Psi_{\alpha,j}^+. \tag{18}$$

De (5), nous tirons ($H_1 = V_1 + \ldots + V_N$)

$$H_1 \Psi_\alpha^+ = \sum_j \{ V_j \Phi_\alpha + V_j (E_\alpha + H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_j \Psi_\alpha^+ \}$$
$$+ \sum_{j \neq k} \sum V_j (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_k \Psi_\alpha^+.$$

Comme, d'autre part,

$$V_j \Psi^+_{\alpha,j} = V_j \Phi_a + V_j (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_j \Psi^+_{\alpha,j},$$

il en résulte que

$$(19) \qquad H_1 \Psi^+_\alpha = \sum_j V_j \Psi^+_{\alpha,j} + \sum_j V_j (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_j (\Psi^+_\alpha - \Psi^+_{\alpha,j}) + \sum_{j \neq k} \sum V_j (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_k \Psi^+_\alpha.$$

Si les forces de liaison de (S) ont un rayon d'action beaucoup plus grand que celui qui correspond aux forces d'interaction (o)—(j), la double somme du second membre de la dernière équation est négligeable vis-à-vis de deux autres termes. Dans ce cas

$$H_1 \Psi^+_a \approx \sum_j V_j \Psi^+_{\alpha,j} + \sum_i V_j (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_j (\Psi^+_a - \Psi^+_{a,j}) \approx \sum_j V_j \Psi^+_{\alpha,j}$$

(en effet $\Psi^+_a - \Psi^+_{a,j}$ est de l'ordre de V; en première approximation $\Psi^+_\alpha \approx \Psi^+_{a,j}$). Il en résulte que

$$(20) \qquad R_{\beta\alpha} = R^{(1)}_{\beta\alpha} + \ldots + R^{(N)}_{\beta\alpha}.$$

Notre hypothèse revient donc à l'hypothèse des chocs simples (liés) successifs dans le temps de Chew et Wick qui leur permet d'écrire (20).

Cette hypothèse, nous permet, en définitive, de ramener le choc multiple au choc simple lié (calcul de $R^{(j)}_{\beta\alpha}$). En faisant une seconde hypothèse, d'ailleurs compatible avec la première, nous ramènerons avec Chew et Wick le choc simple lié au choc entre deux particules.

En effet, reprenons les équations qui décrivent le choc simple lié [particule n° 1 en interaction avec la particule (o)]

$$(21) \qquad \Psi^+_{\alpha,1} = \Phi_a + (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_1 \Psi^+_{a,1},$$

$$(22) \qquad R^{(1)}_{\beta\alpha} = (\Phi_\beta, V_1 \Psi^+_{a,1}) = (\Phi_\beta, R^{(1)} \Phi_a).$$

En l'absence des forces de liaison de la particule 1 avec le reste du

système (S), le choc serait décrit par les équations

$$\chi^{+}_{m,1} = \chi^{0}_{m} + (w^{0}_{m} - K_0 - K_S + i\varepsilon)^{-1} V_1 \chi^{+}_{m,1}, \tag{23}$$

$$r^{(1)}_{mn} = (\chi^{0}_{m}, V_1 \chi^{+}_{n,1}) = (\chi^{0}_{m}, r^{(1)} \chi^{0}_{n}), \tag{24}$$

avec

$$(K_0 + K_S)\chi^{0}_{n} = w^{0}_{n} \chi^{0}_{n}.$$

Faisons maintenant une seconde hypothèse : l'interaction V_1 de la particule incidente (o) avec la particule n° 1 du système (S) est très forte vis-à-vis des forces de liaison décrites par U_S. Dans ce cas, ces dernières joueront un rôle faible au cours du choc et nous pourrons écrire

$$R^{(1)} \approx r^{(1)}. \tag{25}$$

L'équation (25) nous permet alors de calculer une fonction d'essai pour $\Psi^{+}_{\alpha,1}$. Nous pourrons ensuite, avec cette fonction approchée, calculer $R^{(1)}_{\beta\alpha}$ avec une meilleure approximation en utilisant les principes variationnels. C'est là le principe de l'approximation de percussion.

Voici la marche du calcul : (25) et (22) nous donnent

$$R^{(1)}_{\beta\alpha} = (\Phi_\beta, r^{(1)} \Phi_\alpha), \tag{26}$$

soit

$$V_1 \Psi^{+}_{\alpha,1} = r^{(1)} \Phi_\alpha. \tag{27}$$

Or,

$$r^{(1)} \Phi_\alpha = r^{(1)} \sum_n \chi^{0}_{n} (\chi^{0}_{n}, \Phi_\alpha) = \sum_n r^{(1)} \chi^{0}_{n} (\chi^{0}_{n}, \Phi_\alpha)$$
$$= V_1 \sum_n \chi^{+}_{n,1} (\chi^{0}_{n}, \Phi_\alpha).$$

Donc

$$\Psi^{+}_{\alpha 1} = \Sigma \chi^{+}_{n,1} (\chi^{0}_{n}, \Phi_\alpha) = \Omega \Phi_\alpha ; \tag{28}$$

Ω étant défini par

$$\Omega_{mn} = (\chi^{0}_{m}, \Omega \chi^{0}_{n}) = (\chi^{0}_{m}, \chi^{+}_{n,1}). \tag{29}$$

En introduisant la fonction $\Psi^{-}_{\beta,1}$, définie par l'équation

$$\Phi^{-}_{\beta,1} = \Phi_\beta = (E_\beta - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_1 \Psi^{-}_{\beta,1} \qquad (E_\alpha = E_\beta), \tag{30}$$

le principe variationnel de Lippmann et Schwinger donne alors pour

valeur approchée de $R^1_{\beta\alpha}$

$$(31)\quad R^1_{\beta\alpha} = (\Phi_\beta, V_1 \Psi^+_{\alpha,1}) + ([\Psi^-_{\beta,1}, V_1 \Phi_\alpha + (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_1 \Psi^+_{\alpha,1} - \Psi^+_{\alpha,1}]).$$

En utilisant pour $\Psi^+_{\alpha,1}$ la fonction approchée donnée par (28), nous trouvons

$$(32)\qquad R^1_{\beta\alpha} = (\Phi_\beta, V_1 \Omega \Phi_\alpha) + (\Psi^-_{\beta,1}, V_1 \Psi'_{\alpha 1}),$$

avec

$$(33)\qquad \Psi'_{\alpha,1} = \Phi_\alpha + (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_1 \Omega \Phi_\alpha - \Omega \Phi_\alpha.$$

Mais nous pouvons écrire aussi

$$\Omega \Phi_\alpha = \sum_n \chi^+_{n,1} (\chi^0_n, \Phi_\alpha) = \Phi_\alpha + \sum_n (w^0_n - K_0 - K_S + i\varepsilon)^{-1} V_1 \chi^+_{n,1} (\chi^0_n, \Phi_\alpha).$$

D'autre part,

$$(E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_1 \Omega \Phi_\alpha = \sum_n (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} V_1 \chi^+_{n,1} (\chi_n, \Phi_\alpha).$$

Il en résulte que

$$\Psi'_{\alpha,1} = \sum_n (\chi_n, \Phi_\alpha) \{ (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} - (w^0_n - K_0 - K_S + i\varepsilon)^{-1} \} V_1 \chi^+_{n,1}$$

$$= \sum_n (\chi_n, \Phi_\alpha) (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} (w^0_n - E_\alpha + U_S) (w^0_n - K_0 - K_S + i\varepsilon)^{-1} V_1 \chi^+_{n,1}$$

[nous avons utilisé l'identité opératorielle $A^{-1} - B^{-1} = A^{-1}(B - A)B^{-1}$].

En définitive :

$$\Psi'_{\alpha,1} = (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} \sum_n (w^0_n - E_\alpha + U_S)(\chi^+_{n,1} - \chi^0_n)(\chi^0_n, \Phi_\alpha).$$

En tenant compte du fait que

$$(E_\alpha - w^0_n)(\chi^0_n, \Phi_\alpha) = (\chi^0_n, U_S \Phi_\alpha),$$

la dernière égalité nous donne

$$(34)\qquad \Phi'_{\alpha,1} = (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} [U_S, \Omega] \Phi_\alpha.$$

De (32) et (34) nous tirons alors

$$R^{(1)}_{\beta\alpha} = (\Phi_\beta, V_1 \Omega \Phi_\alpha) + (\Psi^-_{\beta,1}, V_1 (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} [U_S, \Omega] \Phi_\alpha).$$

Or, à la limite de nos approximations,

$$\psi_{3.1}^{-} \approx r^{(1)+}\Phi_\beta.$$

Par conséquent,

$$R_{\beta\alpha}^{1} = (\Phi_\beta, \overline{R}^1 \Phi_\alpha),$$

avec

$$\overline{R}^1 = r^{(1)} + r^{(1)} V_1 (E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)^{-1} [U_S, \Omega]. \tag{35}$$

La dernière équation permet de ramener le calcul de $R_{\beta\alpha}^{1}$ au calcul de la matrice $r^{(1)}$ qui correspond au choc libre.

Note. — Nous pouvons prendre

$$2\pi i\,\delta_+(H_0 - E_\alpha) = i\int_0^\infty \exp[i\lambda(E_\alpha - H_0 + i\varepsilon)]\,d\lambda$$
$$= -\frac{1}{E_\alpha - H_0 + i\varepsilon} \qquad \text{avec} \quad \varepsilon \to 0.$$

CHAPITRE IV.

APPLICATIONS DES MÉTHODES VARIATIONNELLES EN THÉORIE DE DIFFUSION DES ONDES ET EN THÉORIE DES COLLISIONS.

Diffraction d'une onde électromagnétique à travers un écran plan troué.

1. Soit une onde électromagnétique harmonique variant suivant $\exp(i\omega t)$ qui vient frapper un écran plan occupant le plan $z = 0$. Cet écran, infiniment mince comporte un trou (σ); il est par ailleurs supposé parfaitement conducteur. La partie pleine sera désignée comme obstacle (τ). On utilisera des coordonnées cylindriques, u, v, z $(u = x,\ v = y)$, ou bien $u = r$, $v = \varphi$ (coordonnées polaires).

Une condition nécessaire pour que les équations de Maxwell que nous écrirons sous la forme

$$\left\{\begin{array}{l} \operatorname{rot}\vec{H}(u, v, z) = \quad i\beta\varphi\,\vec{E}(u, v, z), \\ \operatorname{rot}\vec{E}(u, v, z) = -\,i\beta\varphi\,\vec{H}(u, v, z), \\ \operatorname{div}\vec{H}(u, v, z) = 0, \qquad \operatorname{div}\vec{E}(u, v, z) = 0, \\ \qquad\qquad \beta = \dfrac{\omega}{c}, \qquad \zeta = \sqrt{\dfrac{\varepsilon}{\mu}} \end{array}\right. \tag{1}$$

soient vérifiées est que soit satisfaite l'équation d'Helmholtz vectorielle

$$(2) \qquad (\Delta + \beta^2)\begin{Bmatrix} \vec{E}(u, v, z) \\ \vec{H}(u, v, z) \end{Bmatrix} = 0.$$

Dans l'étude suivante (Miles, etc.), il sera commode de s'occuper seulement des champs transverses $\vec{E}_{tr}$ et $\vec{H}_{tr}$ (par rapport à Oz) qui peuvent se séparer de $\vec{E}$ et de $\vec{H}$ en posant

$$(3) \qquad \vec{E}(u, v, z) = \vec{E}_{tr}(u, v, z) + \vec{k}\, E_z(u, v, z),$$

$$(4) \qquad \vec{H}(u, v, z) = \vec{H}_{tr}(u, v, z) + \vec{k}\, H_z(u, v, z),$$

$\vec{k}$ étant un vecteur unitaire pointant dans la direction des z positifs. Comme $\vec{k}$ est fixe en direction, E_z et H_z satisfont l'un et l'autre à l'équation d'Helmholtz, et en portant (3) et (4) dans (2) on obtient

$$(5) \qquad (\Delta + \beta^2)\begin{Bmatrix} \vec{E}_{tr}(u, v, z) \\ \vec{H}_{tr}(u, v, z) \end{Bmatrix} = 0.$$

On peut se borner à étudier les champs transverses, car les champs axiaux E_z et H_z se déduisent directement des équations de Maxwell.

a. Conditions aux limites. — Il s'agit de trouver des solutions de (1) qui satisfassent aux conditions aux limites suivantes :

$$(6) \qquad \lim_{\delta \to 0} \vec{E}_{tr}(u, v, \pm\delta) = 0 \qquad (u, v) \text{ sur } \tau,$$

$$(7) \qquad \lim_{\delta \to 0} \vec{E}_{tr}(u, v, -\delta) - \vec{E}_{tr}(u, v, +\delta) = 0 \qquad (u, v) \text{ sur } \sigma,$$

$$(8) \qquad \lim_{\delta \to 0} \left[\vec{H}_{tr}(u, v, -\delta) - \vec{H}_{tr}(u, v, +\delta)\right] = 0 \qquad (u, v) \text{ sur } \sigma.$$

L'équation (6) exprime que le champ électrique tangentiel s'annule sur l'obstacle (τ); (7) et (8) expriment que les champs électrique et magnétique doivent être continus à travers le trou (σ), bien qu'il soit parfois nécessaire de garder δ, quantité constante petite mais positive, finie pendant les étapes intermédiaires des calculs. Le

champ magnétique $\vec{H}_{tt}$ sera en général discontinu à travers l'obstacle en raison du courant qui y circule. En outre, à la frontière entre σ et τ on ne peut pas postuler que les champs soient finis ou continus puisqu'on a supposé que l'écran est infiniment mince, idéalisation qu'il convient de traiter avec circonspection.

Nous allons maintenant partager les solutions des équations de Maxwell en deux classes (*cf.* T. Kahan). Ces classes seront désignées comme transverses magnétiques (TM ou indice supérieur 1) et transverses électriques (TE ou indice supérieur 2) correspondant à l'absence des composantes z du champ magnétique ou du champ électrique. Les fonctions propres associées au champ électrique transverse seront désignées par $\vec{\Phi}_\lambda(u, v)$, λ étant la valeur propre,

$$(9)\qquad \begin{cases} (\Delta_{uv} + \lambda^2)\vec{\Phi}_\lambda(u, v) = 0, \\ \vec{\Phi}^{(2)} = \vec{k} \wedge \vec{\Phi}_\lambda^{(1)}, \end{cases}$$

λ doit être considéré comme réel et distribué sur un spectre à deux dimensions.

Superposons maintenant les solutions élémentaires à l'aide des transformées vectorielles sur le spectre de λ. Ainsi si $\vec{f}(u, v)$ est le champ électrique dans le trou σ et si $F(\lambda)$ représente sa distribution sur le spectre λ, les relations de transformation peuvent s'écrire

$$(10)\qquad \vec{f}(u, v) = \mathbf{T}\{F(\lambda)\} = \int_\lambda dS(\lambda)\, F(\lambda)\, \vec{\Phi}_\lambda(u, v),$$

$$(11)\qquad F(\lambda) = \mathbf{T}^{-1}\{\vec{f}(\xi, \eta)\} = \int_\sigma dS(\xi, \eta)\, \vec{f}(\xi, \eta)\, \vec{\Phi}_\lambda^*(\xi, \eta),$$

où $\mathbf{T}$ représente l'opérateur de transformation vectorielle. L'intégration par rapport aux coordonnées d'espace (ξ, η) ne s'étend que sur σ en vertu de la condition aux limites (6), bien que, généralement, l'opérateur de transformation entraîne une intégration sur le domaine entier de la fonction transformée. L'intégration par rapport à λ est effectuée à la fois sur le spectre TM et TE.

Ceci étant, une solution de (1) pour le champ transverse des deux côtés de l'écran $z = 0$, dû à l'onde incidente $(\vec{E}_{tr\,i}, \vec{H}_{tr\,i})$ dans $z < 0$,

est donnée par

$$(12)\qquad \vec{E}_{tr}(u, v, z) = \begin{Bmatrix} \vec{H}_0(u, v, z) \\ 0 \end{Bmatrix} + \mathbf{T}\left\{ F(\lambda)\exp\left[\pm i(\beta^2-\lambda^2)^{\frac{1}{2}} z\right]\right\} \qquad (z \lessgtr 0),$$

$$(13)\qquad \vec{H}_{tr}(u, v, z) = \begin{Bmatrix} \vec{H}_0(u, v, z) \\ 0 \end{Bmatrix} \mp \zeta \vec{k}\mathbf{T}\left\{ Y(\lambda)F(\lambda)\exp\left[\pm i(\beta^2-\lambda^2)^{\frac{1}{2}} z\right]\right\} \qquad (z \lessgtr 0),$$

où le signe supérieur et inférieur se rapportent respectivement aux z négatifs et positifs et où

$$(14)\qquad Y^{(1)}(\lambda) = \left[1-\left(\frac{\lambda}{\beta}\right)^2\right]^{-\frac{1}{2}},$$

$$(15)\qquad Y^{(2)}(\lambda) = \left[1-\left(\frac{\lambda}{\beta}\right)^2\right]^{\frac{1}{2}}.$$

Les points de ramification $\lambda = \pm\beta$ doivent être contournés de façon à satisfaire à la condition de rayonnement de Sommerfeld, à savoir

$$(16)\qquad Y^{(1)}(\lambda) = i\left[\left(\frac{\lambda}{\beta}\right)^2-1\right]^{-\frac{1}{2}} \qquad (|\lambda| > \beta),$$

$$(17)\qquad Y^{(2)}(\lambda) = -i\left[\left(\frac{\lambda}{\beta}\right)^2-1\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (|\lambda| > \beta);$$

$\left(\vec{E}_0, \vec{H}_0\right)$ représente le champ correspondant à une réflexion totale de $\left(\vec{E}_{tr\,i}, \vec{H}_{tr\,i}\right)$ dans $z < 0$. Comme $E_0(u, v, 0)$ s'annule par définition, $\vec{E}_{tr}(u, v, z)$ donné par (12) se réduit au champ dans le trou $f(u, v)$ en $z = 0$.

En imposant les conditions aux limites (6), (8) aux équations (12) et (13), on obtient

$$(18)\qquad \mathbf{T}\{F(\lambda)\} = 0 \qquad (u, v) \text{ sur } \tau,$$

$$(19)\qquad \vec{k} \wedge \mathbf{T}\{Y(\lambda)F(\lambda)\} = (2\zeta)^{-1}\vec{H}_0(u, v, 0) = \zeta^{-1}\vec{H}_{tr\,i}(u, v, 0), \quad (u, v) \text{ sur } \sigma.$$

Les équations (18), (19) sont des équations intégrales « duales » pour la détermination de $F(\lambda)$.

En pratique, il peut être commode d'exiger la continuité de $\vec{H}_{tt}(u, v, z)$ à travers une feuille mince limitée par $z = \mp \delta$, en vue de garder un facteur dominant $\exp(-\delta|\lambda|)$ dans le noyau.

En multipliant vectoriellement à gauche par $\vec{k}$ les deux membres de (19) et en prenant la transformée inverse de (19) et de (20), on obtient

$$\vec{f}(u, v) = 0, \qquad (u, v) \text{ sur } \tau, \tag{20}$$

$$S_\sigma \{ \mathbf{G}_\sigma(u, v; \xi, \eta) \vec{f}(\xi, \eta) \} = \vec{h}(u, v), \qquad (u, v) \text{ sur } \sigma \quad (^1), \tag{21}$$

$$\mathbf{G}_\sigma(u, v; \xi, \eta) = \mathbf{T} \left\{ Y(\lambda) \vec{\Phi}^*_\lambda(\xi, \eta) \right\} = \int_\lambda dS(\lambda) Y(\lambda) \vec{\Phi}_\lambda(u, v) \vec{\Phi}^*(u, v), \tag{22}$$

$$\vec{h}(u, v) = \zeta^{-1} \vec{H}_{tr\,t}(u, v, 0) \wedge \vec{k} = \mathbf{T} \{ H(\lambda) \}, \tag{23}$$

où $\int_\sigma$ désigne l'intégration sur (ξ, η) dans σ.

$\mathbf{G}_\sigma$ est un noyau dyadique pour l'équation intégrale vectorielle (21). Remarquons que la transformation de (19) en (21) est une généralisation du théorème de composition pour les transformées de Fourier scalaire ([2]).

En raison des conditions aux limites sur le bord du trou, $f(u, v)$ passera de σ à τ de manière, en général, discontinue, et il sera nécessaire de prendre des valeurs principales de Cauchy dans les intégrales prises sur σ.

La puissance complexe transmise par le trou est donnée par

$$W_t = \int_\sigma \left\{ \vec{k} . \vec{E}_{tr}(u, v, 0) \wedge \vec{H}^*_{tr}(u, v, 0) \right\}, \tag{24}$$

soit

$$W_t = \zeta \int_\sigma \left\{ \vec{f}(u, v) . \vec{h}^*(u, v) \right\}. \tag{25}$$

Or, en vertu d'une généralisation du théorème de Parseval relatif aux

---

([1]) Dans la notation tensorielle usuelle (avec sommation sur indices muets), les vecteurs champs deviennent des tenseurs d'une a trois composantes, et les fonctions de Green dyadiques, des tenseurs d'ordre deux, symétriques à neuf composantes. Ainsi (21) peut s'écrire

$$\int_\sigma dS\, \mathcal{G}_{ij} f_j = h_i \ldots.$$

([2]) TITCHMARCH, Fourier Integrals, p. 1-51.

transformées de Fourier

$$(26)\qquad \int_{uv} \left\{ \vec{f}_1(u, v) . \vec{f}_2^*(u, v) \right\} = \int_\lambda \{ F_1(\lambda) F_2^*(\lambda) \},$$

par conséquent (25) peut aussi s'écrire

$$(27)\qquad W_l = \varphi \int_\lambda \{ F(\lambda) H^*(\lambda) \}.$$

Si l'on tire $\vec{h}$ de (21) pour le porter dans (25), et qu'on divise le résultat par le carré de (25), on obtient

$$(28)\qquad W_l^{-1} = \frac{\varphi^{-1} \int_\sigma \left\{ \vec{f}^*(u, v) G_\sigma(u, v; \xi, \eta) \vec{f}(\xi, \eta) \right\}}{\left| \int_\sigma \left\{ \vec{f}(u, v) \vec{h}^*(u, v) \right\} \right|^2}.$$

De même,

$$(29)\qquad W_l^{-1} = \frac{\zeta^{-1} \int_\lambda \{ Y(\lambda) | F(\lambda) |^2 \}}{\left| \int_\lambda \{ F(\lambda) H^*(\lambda) \} \right|^2}.$$

Les équations (28) et (29) sont variationnelles en ce sens que leurs parties réelles et imaginaires sont stationnaires par rapport aux variations des parties à la fois réelles et imaginaires de $f(u, v)$ ou de $F(\lambda)$ autour des solutions exactes des équations intégrales (18), (19) et (20) à (23). Cela résulte de notre méthode variationnelle (chap. II). Comme les parties reelles de $Y^{(1)}(\lambda)$ et de $Y^{(2)}(\lambda)$ sont positives, la partie reelle de W_l^{-1} (c'est-à-dire $\mathcal{G}_\sigma$) est une forme définie positive et, par conséquent, un minimum absolu.

2. Considérons maintenant la diffraction d'une onde scalaire incidente arbitraire $u_0(x, y, z)$ à travers un trou T pratiqué dans un ecran plan infini E d'épaisseur infime. Le plan T + S étant supposé situé dans le plan $z = 0$, soit u_0 le champ primaire, solution de l'équation d'onde, supposé se propager dans le sens de gauche à droite ($z < 0$).

Bornons-nous au problème où la fonction d'onde s'annule sur E supposé dénué de toute rigidité. Dans ce cas on a pour le champ total

$$(30)\qquad u(x, y, z) = \begin{cases} u_0(x, y, z) - u_0(x, y, -z) + \Phi_1(x, y, -z) & (z \leqq 0), \\ \Phi(x, y, z) & (z \geqq 0), \end{cases}$$

où Φ n'est défini que pour $z \geqq 0$ et jouit des propriétés suivantes :

1° Φ est une solution de l'équation d'onde $\Delta\Phi + k^2\Phi = 0$ pour $z > 0$;

2° $\Phi = 0$ sur E;

3° Φ vérifie la condition de rayonnement de Sommerfeld à l'infini;

4° $\frac{\partial\Phi}{\partial z} = \frac{\partial u_0}{\partial z}$ dans T;

5° Φ est borné partout;

6° $\Delta\Phi$ est de carré sommable dans une région d'espace à trois dimensions, y compris les bords du trou T.

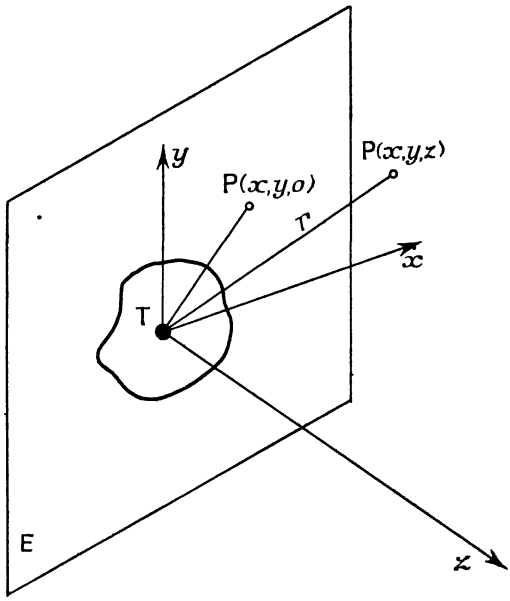

Fig. 2. — Trou T dans un écran plan infini E.

Comme l'écran ne contribue pas à l'intégrale, si F est une surface fermée, toute solution de u régulière s'exprime moyennant les valeurs aux limites sur F de u,

$$u = -\frac{1}{2\pi}\int u\frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)dF, \tag{31}$$

Φ est aussi solution de l'équation intégrale

$$\Phi = \frac{1}{2\pi}\int_T \Phi \frac{\partial}{\partial n}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right) dF, \tag{32}$$

l'intégration étant prise sur le plan $z = 0$ et r étant la distance entre le point de champ (x, y, z) et le point de source (x', y', z'); $\frac{\partial}{\partial n}$ signifie dérivation par rapport à z' en faisant dans la dérivée $z' = 0$.

En appliquant la propriété 4°, on obtient une équation intégrale pour les valeurs inconnues sur T, ce qui ramène notre problème à un problème à deux dimensions.

On obtient alors l'équation intégro-différentielle

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + k^2\right]\int_T \mathcal{G}(x, y; x', y')\,\Phi(x', y', 0)\,dx'\,dy' = 2\pi\frac{\partial}{\partial z}u_0(x, y, 0), \tag{33}$$

avec $u(x, y, O) \in T$.

Une forme équivalente de (33) s'écrit

$$k^2\int \Phi\mathcal{G}\,dF - \int \nabla\Phi.\nabla\mathcal{G}\,dF = 2\pi\frac{\partial u_0}{\partial z}, \tag{33'}$$

où les deux ∇ doivent être pris par rapport aux coordonnées du point de source.

Si l'onde incidente est plane,

$$u_0 = \exp[iu(\alpha_0 x + \beta_0 y + \gamma_0 z], \qquad \gamma_0 = \sqrt{1 - \alpha_0^2 - \beta_0^2},$$

l'on a

$$\int_T \mathcal{G}(x, y; x', y')\,\Phi(x', y', 0)\,dx'\,dy' = \frac{2\pi i}{k\gamma_0}\exp[ik(\alpha_0 x + \beta_0 y)] + \chi(xy) \tag{34}$$

$\chi(x, y)$ étant une solution de l'équation à deux dimensions dans T.

Une autre solution est de la forme

$$u = u_0 - \frac{1}{2\pi}\int_E \left(\frac{\partial\Phi}{\partial n} - \frac{\partial u_0}{\partial n}\right)\frac{e^{ikr}}{r}\,dF. \tag{35}$$

Il suffit donc de connaître dès lors les valeurs de $\left(\frac{\partial\Phi}{\partial n} - \frac{\partial u_0}{\partial n}\right)$ sur l'écran E; soit $h(x, y)$ cette valeur. Comme u_1 doit s'annuler sur E,

il vient

$$(36)\qquad \int_E \mathcal{G}(x, y; x', y')\, h(x', y')\, dx'\, dz' = 2\pi\, u_0(x, y, 0) \qquad [(x, y, 0) \in E].$$

On peut aussi représenter le champ diffusé sous forme d'un spectre angulaire d'ondes planes. Développons la fonction de Green de l'espace libre où un système d'ondes planes se propage dans toutes les directions, y compris des directions complexes

$$(37)\qquad \frac{e^{ikr}}{r} = \frac{2\pi}{ik}\int_\Omega \exp\{k[\alpha(x-x') + \beta(y-y') + \gamma(z-z')]\}\, d\Omega,$$

$$[\alpha = \sin\theta\cos\varphi,\ \beta = \sin\theta\sin\varphi,\ \gamma = \cos\theta \text{ (cosinus directeurs)}]$$

et $d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$ est l'élément de surface d'une sphère complexe unité Ω : les limites d'intégration pour φ sont o et 2π et pour θ : o et $\frac{\pi}{2} - i\infty$.

On trouve en portant (37) dans (32)

$$(38)\qquad \Phi = \frac{2\pi}{ik}\int_\Omega A(\alpha, \beta)\exp[ik(\alpha x + \beta y + \gamma z)]\, d\Omega$$

et

$$(39)\qquad \Phi = \frac{ik}{2\pi}\int\int_{-\infty}^{+\infty} A(\alpha, \beta)\exp[ik(\alpha x + \beta y + \gamma z)]\, d\alpha\, d\beta/\gamma,$$

où

$$(40)\qquad A(\alpha, \beta) = -\frac{ik\gamma}{2\pi}\int_T \exp[-ik(\alpha x' + \beta y')]\, \Phi(x', y', 0)\, dx'\, dy.$$

Pour des distances R grandes au trou T, l'onde diffractée devient sensiblement sphérique. Le coefficient de $\frac{e^{ikR}}{R}$ dans l'expression asymptotique de Φ est l'amplitude $A(\alpha, \beta)$ qui définit le diagramme polaire comme fonction des cosinus directeurs α et β. En développant la fonction exponentielle dans (32) et en remarquant que

$$r \simeq R - (\alpha x' + \beta y'),$$

on trouve que l'amplitude est identique à (40). En comparant (39) pour $z \doteq 0$ à (40), on voit que la distribution, sur T, $\Phi(x, y, 0)$ et l'amplitude (modifiée) $\left(\frac{i}{\gamma}\right) A(\alpha, \beta)$ sont des transformées de Fourier associées.

Remarquons que $\gamma = \sqrt{1 - \alpha^2 - \beta^2}$ pour les composantes d'ondes planes homogènes et que $\gamma = i\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 1}$ pour les ondes planes

non homogènes, celles-ci correspondant aux ondes de surface ou ondes évanescentes.

Pour obtenir l'énergie transmise à travers le trou T, intégrons le carré du module de A sur toutes les directions réelles dans le demi-espace $\alpha, \beta \geqq 0$. On a

$$(41) \qquad -\frac{1}{ik}\int_T \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial n}\, dF = \int_\Omega |A|^2\, d\Omega.$$

La partie réelle de (41) est la section efficace de transmission σ du trou T : c'est le rapport de la puissance totale transmise à la puissance incidente sur T par unité de surface normale à la direction de l'onde incidente

$$(42) \qquad \sigma(\alpha_0, \beta_0) = -\frac{2\pi}{k}\mathcal{I}_m[A(\alpha_0, \beta_0)]$$

($\mathcal{I}_m\, x =$ partie imaginaire de x), où l'onde incidente est

$$u_0 = \exp[ik(\alpha_0 x + \beta_0 y + \gamma_0 z)].$$

Levine et Schwinger ont indiqué une méthode pour calculer la diffraction scalaire pour des trous pratiqués dans un écran plan, qui permet d'évaluer de manière approchée l'amplitude de l'onde diffractée ainsi que la section efficace de transmission dans une large bande de fréquences.

Soit $A_1(\vec{n}, \vec{n}')$ l'amplitude de l'onde diffractée Φ_1 par un trou circulaire frappé par une onde incidente normale, pour des grandes distances au trou T, $\vec{n}$ et $\vec{n}'$ étant les vecteurs unités dans la direction d'observation et dans la direction de propagation de l'onde incidente. Soient, en outre, θ et θ' les angles que font l'axe des z positifs et $\vec{n}$ et $\vec{n}'$. Il résulte de (40)

$$(43) \qquad A(\vec{n}, \vec{n}') = \left(-\frac{ik}{2\pi}\right)\cos\theta \int_T \Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}')\exp(-ik\vec{n}.\vec{\rho}')\, dF,$$

ou $\Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}')$ est la valeur de Φ_1 dans le trou avec, en vertu de (33'),

$$(44) \qquad \begin{aligned} &2\pi ik\cos\theta'\exp(ik\vec{n}.\vec{\rho}) \\ &= k^2\int \Phi_{\vec{n}'}(\rho')\mathcal{G}(\vec{\rho}, \vec{\rho}')\, dF' - \int \nabla'\Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}').\nabla'\mathcal{G}(\vec{\rho}, \vec{\rho}')\, dF', \end{aligned}$$

où $\vec{\rho}$ est dans le trou et

$$\mathcal{G}(\rho, \rho') = \frac{\exp(ik|\rho - \rho'|)}{|\rho - \rho'|}.$$

En multipliant (44) par $\Phi_{\vec{n}''}(\vec{\rho})$, $\Phi_{\vec{n}''}(\vec{\rho})$ étant une solution pour une onde plane dans la direction $\vec{n}''$, et en intégrant sur le trou, il vient

$$(45)\qquad \begin{aligned} &2\pi i k \cos\theta' \int \Phi_{\vec{n}''} \exp(ik\vec{n}.\vec{\rho})\, d\mathrm{F} \\ &= k^2 \int \Phi_{\vec{n}''}(\vec{\rho})\, \mathcal{G}(\vec{\rho}, \vec{\rho}')\, \Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}')\, d\mathrm{F}\, d\mathrm{F}' \\ &\quad - \int \nabla\Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}).\nabla' \Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}').\mathcal{G}(\vec{\rho}, \vec{\rho}')\, d\mathrm{F}\, d\mathrm{F}'. \end{aligned}$$

Comme le second membre de (45) est symétrique en $\vec{n}'$ et $\vec{n}''$, il en est de même du premier. Si donc on divise (45) par ce premier membre et par un terme analogue dans lequel $\vec{n}'$ et $\vec{n}''$ sont permutés et si l'on utilise ensuite (43), il vient

$$(46)\quad \begin{aligned} &\mathrm{A}_1(\vec{n}'', \vec{n}') = \mathrm{A}_1(-\vec{n}', -\vec{n}'') \\ &= \frac{\cos\theta' \cos\theta'' \int \Phi_{\vec{n}}(\vec{\rho}) \exp(-ik\vec{n}''.\vec{\rho})\, d\mathrm{F} \int \Phi_{-\vec{n}'}(\vec{\rho}) \exp(ik\vec{n}'.\vec{\rho})\, d\mathrm{F}}{\int \left[\Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho})\, \Phi_{-\vec{n}}(\vec{\rho}') - k^{-2} \nabla\Phi_{\vec{n}'}(\vec{\rho}).\nabla' \Phi_{-\vec{n}}(\vec{\rho}')\right] \mathcal{G}(\vec{\rho}, \vec{\rho}')\, d\mathrm{F}\, d\mathrm{F}'}. \end{aligned}$$

En vertu des théorèmes du chapitre II, le second membre de (46) est stationnaire par rapport à des petites variations indépendantes de $\Phi_{\vec{n}'}$ et $\Phi_{-\vec{n}}$ autour de leurs valeurs correctes. Seules sont admissibles les variations qui sont compatibles avec la condition $\Phi_1 = 0$ sur le bord du trou.

Le caractère stationnaire de (46) se prête a des calculs approchés. Un choix judicieux des distributions sur le trou dans (46) peut conduire en effet à une valeur raisonnablement correcte pour A_1 sans avoir à résoudre l'équation intégro-différentielle originale.

Comme (46) est homogène de degré zéro, les facteurs de normalisation ne jouent pas de rôle. Les mêmes remarques s'appliquent à la section efficace de transmission qui résulte de (42)

$$(47)\quad \sigma(\vec{n}) = -\frac{2\pi}{k} \cos^2\theta\, \mathcal{I}_m \left[\frac{\left\{ \begin{array}{l} \int \Phi_{\vec{n}}(\vec{\rho}) \exp(-ik\vec{n}.\vec{\rho})\, d\mathrm{F} \\ \times \int_{-\vec{n}} \Phi(\vec{\rho}) \exp(ik\vec{n}.\vec{\rho})\, d\mathrm{F} \end{array} \right\}}{\left\{ \begin{array}{l} \int \Phi_{\vec{n}}(\vec{\rho})\, \Phi_{-\vec{n}}(\vec{\rho}') \\ -\left[k^{-2} \nabla\Phi_{\vec{n}''}(\vec{\rho}).\nabla' \Phi_{-\vec{n}}(\vec{\rho}')\right] \mathcal{G}(\vec{\rho}, \vec{\rho}')\, d\mathrm{F}\, d\mathrm{F}' \end{array} \right\}} \right].$$

Dans le cas statique, le terme principal de (47) est

$$(48)\qquad \sigma(\vec{n}) \approx \frac{2\pi}{3} k^4 \cos^2\theta \frac{\left[\int \Phi(\vec{\rho})\, dF\right]^4}{\left[\int \frac{\nabla\Phi(\vec{\rho})\nabla'.\Phi(\vec{\rho}')}{|\vec{\rho}-\vec{\rho}'|} dF\, dF'\right]^2} \qquad (k \to 0)$$

qui est l'illustration de la loi de Rayleigh en λ^{-4} pour des trous de faibles dimensions.

On peut étendre (*cf.* n° 1) la technique variationnelle relative a des ondes scalaires à des problèmes mettant en jeu la diffraction électromagnétique par un trou dans un ecran parfaitement conducteur. L'analyse est totalement analogue a l'analyse précédente relative au problème scalaire.

Pour conclure, signalons la grande utilité des méthodes variationnelles dans les problèmes de diffraction de diverses espèces. Ainsi, de très nombreux problèmes fort importants dans la technique des guides d'ondes et des antennes ont trouvé des solutions satisfaisantes grâce à l'emploi judicieux de cette technique.

3. En dernier lieu, prenons le cas d'un problème de collision (nucléaire) quantique : calcul de la section efficace de diffusion de deux particules en interaction de Yukawa. Ce problème correspondrait à l'interaction ^1S neutron-proton (*voir* aussi [ ] pour plus de détails, et discussion de l'approximation obtenue suivant les méthodes différentes que nous pouvons employer).

Si $\vec{r}$ est le vecteur qui correspond aux coordonnées relatives et μ la masse réduite, le potentiel $V(r)$ aura la forme

$$(49)\qquad V(r) = g^2 \frac{e^{-\frac{r}{a}}}{r}.$$

En utilisant la variable sans dimensions $\vec{x} = \frac{\vec{r}}{\alpha}$, les équations intégrales de diffusion s'écriront, avec les notations de Lippman-Schwinger :

$$(50)\qquad \psi^+_{\vec{K}_1}(\vec{x}) = e^{i\vec{K}_1\vec{x}} + \int d\vec{x}'\, G(\vec{x}, \vec{x}')\, u(\vec{x}')\, \psi^+_{\vec{K}_1}(\vec{x}'),$$

$$(51)\qquad \psi_{\vec{K}_2}(\vec{x}) = e^{i\vec{K}_2\vec{x}} + \int d\vec{x}'\, G^*(\vec{x}, \vec{x}')\, u(\vec{x}')\, \psi^-_{\vec{K}_2}(\vec{x}'),$$

avec

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{iK_0|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}, \tag{52}$$

$$K_0^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} a^2, \quad u(x) = -\frac{2\mu}{\hbar^2} a^2 V(\alpha x) = u_0 \frac{e^{-x}}{x}, \quad |\vec{K}_1| = |\vec{K}_2| = K_0. \tag{53}$$

E est l'énergie cinétique du système par rapport au centre de gravité. Soit $\vec{K}_1$ la direction d'incidence. Pour calculer l'amplitude de la probabilité de diffusion dans la direction $\vec{K}_2$, nous utiliserons le principe variationnel associé aux deux équations (50) et (51).

$$\text{V. S.}\left\{\left(e^{i\vec{K}_2\cdot\vec{x}} u \psi^{+}_{\vec{K}_1}\right)\right\} = \begin{cases} (54a) & \dfrac{A.B}{C_1 - C_2}, \\ (54b) & A + B - (C_1 - C_2), \end{cases}$$

avec

$$A = \left(e^{i\vec{K}_2\cdot\vec{x}} u \psi^{(+)}_{\vec{K}_1}\right), \tag{55}$$

$$B = \left(\psi^{(-)}_{\vec{K}_2} u\, e^{i\vec{K}_1\cdot\vec{x}}\right), \tag{56}$$

$$C_1 = \left(\psi^{(-)}_{\vec{K}_2} u \psi^{(+)}_{\vec{K}_1}\right), \tag{57}$$

$$C_2 = \left(\psi^{(-)}_{\vec{K}_2} u L u \psi^{(+)}_{\vec{K}_1}\right); \tag{58}$$

L est l'opérateur intégrale défini par

$$Lf = \int d\vec{x}' G(\vec{x}, \vec{x}') f(\vec{x}').$$

Nous désignons par $\psi^{(+)}_{\vec{K}_1}$, $\psi^{(-)}_{\vec{K}_2}$ les fonctions d'essai que nous prendrons à la place de fonctions exactes $\psi^{+}_{\vec{K}_1}$, $\psi^{-}_{\vec{K}_2}$.

Nous admettrons pour $\psi^{(+)}_{\vec{K}_1}$, $\psi^{(-)}_{\vec{K}_2}$ les expressions

$$\psi^{(+)}_{\vec{K}_1} = e^{i\vec{p}_1\cdot\vec{x}}, \qquad \vec{p}_1 = \frac{\vec{K}_1}{K_0} p, \tag{59}$$

$$\psi^{(-)}_{\vec{K}_2} = e^{i\vec{p}_2\cdot\vec{x}}, \qquad \vec{p}_2 = \frac{\vec{K}_2}{K_0} p. \tag{60}$$

Pour $p = K_0$, il s'agit de l'approximation « zéro » et alors la formule (54b) donnerait directement la seconde approximation de Born. Nous discuterons à la fin de ce chapitre le choix $p \neq K_0$ pour le cas de l'interaction Yukawa,

Pour le calcul de quantités A, B, C_1, C_2, utilisons les transformés

de Fourier tridimensionnelles des fonctions $u(x)$ et $G(\vec{x}, \vec{x}')$

$$u(\vec{x}) = \frac{u_0}{2\pi^2} \int d\vec{K} \frac{e^{i\vec{K}.\vec{x}}}{1+K^2}, \tag{61}$$

$$G(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{K} \frac{e^{i\vec{K}(\vec{x}-\vec{x}')}}{K^2 - K_0^2} \qquad (K_0 \to K_0 + i\varepsilon). \tag{62}$$

Nous avons pour A, par exemple

$$\begin{aligned} A &= \int d\vec{x}\, e^{-i\vec{K}_2 \vec{x}} u(\vec{x})\, e^{i\vec{p}_1 \vec{x}} \\ &= \frac{u_0}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{K}}{1+K^2} \int d\vec{x}\, e^{i\vec{x}(\vec{K}-\vec{K}_2+\vec{p}_1)} \\ &= 4\pi u_0 \int d\vec{K} \frac{1}{1+K^2} \delta(\vec{K} - \vec{K}_2 + \vec{p}_1) \\ &= \frac{4\pi u_0}{1+(\vec{K}_2 - \vec{p}_1)^2}. \end{aligned}$$

En posant donc

$$\chi(p, K_0, \theta_0) = \frac{1}{1+p^2+K_0^2 - 2pK_0\cos\theta_0} \qquad \left(\theta_0 = \widehat{\vec{K}_1.\vec{K}_2}\right),$$

nous aurons

$$A = 4\pi\chi(p, K_0, \theta_0) u_0. \tag{63}$$

D'une façon analogue, nous obtiendrons

$$B = 4\pi\chi(p, K_0, \theta_0) u_0, \tag{64}$$

$$C_1 = 4\pi\chi(p, p, \theta_0) u_0; \tag{65}$$

c' est le calcul de C_2 qui présente des difficultés à cause de la présence du noyau $G(\vec{x}, \vec{x}')$. En tenant compte de (61) et (62), nous avons

$$\begin{aligned} C_2 &= \int d\vec{x}\, d\vec{x}'\, e^{-i\vec{p}_2 \vec{x}} u(\vec{x}) G(\vec{x}, \vec{x}') u(\vec{x}')\, e^{i\vec{p}_1 \vec{x}} \\ &= \frac{2}{\pi} u_0^2 \int d\vec{K} \frac{1}{\left[1+(\vec{p}_2 - \vec{K})^2\right]\left[K^2 - K_0^2\right]\left[1+(\vec{p}_1 - \vec{K})^2\right]}. \end{aligned}$$

En coordonnées sphériques telles que

$$\vec{p}_1 = \begin{cases} 0, \\ 0, \\ p; \end{cases} \quad \vec{p}_2 = \begin{cases} p\sin\theta_0, \\ 0, \\ p\cos\theta_0; \end{cases} \quad \vec{K} = \begin{cases} K\sin\theta\cos\varphi, \\ K\sin\theta\sin\varphi, \\ K\cos\theta \end{cases}$$

et après intégration par rapport à θ et φ, nous trouvons

$$C_2 = -\frac{u_0^2}{2p\sin\frac{\theta_0}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{K\,dK}{K^2-K_0^2}\,\frac{1}{S(K)}\,\mathrm{Log}\left\{f(K)\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right\},$$

avec

$$f(K) = \frac{S(\alpha+\beta\cos\theta_0)+2S^2\sin\frac{\theta_0}{2}-\alpha(\alpha+\beta)\sin\frac{\theta_0}{2}}{S(\alpha-\beta\cos\theta_0)+2S^2\sin\frac{\theta_0}{2}-\alpha(\alpha-\beta)\sin\frac{\theta_0}{2}},$$

$$S^2 = \alpha^2-\beta^2\cos^2\frac{\theta_0}{2}, \qquad S = +\sqrt{S^2},$$

$$\alpha = 1+p^2+K^2, \qquad \beta = 2pK.$$

Il est facile de voir que les seules singularités de la fonction sous le signe $\int_{-\infty}^{+\infty}$ dans le demi-plan $Im(k) \geqq 0$ sont le pôle $K = K_0 + i\varepsilon$, les deux points de ramification σ_1 et σ_2, racines de l'équation $S^2 = 0$, et les deux points de ramification de la fonction Log qui correspondent aux racines ρ_1 et ρ_2 des équations $\alpha+\beta = 0$ et $\alpha-\beta = 0$.

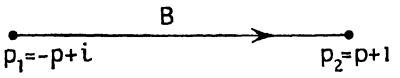

Fig. 3.

Il en résulte que dans le demi-plan supérieur du plan complexe, privé de domaines D_1, D_2, limités par les contours L_1, L_2 entourant les racines σ_1, σ_2 et ρ_1, ρ_2, la fonction sous le signe $\int_{-\infty}^{+\infty}$ est méromorphe. Un calcul simple montre que l'intégrale sur L_1^+ est identiquement nulle. L'intégrale sur L_2^+ se trouve égale à $-2\pi i\int_B \frac{K\,dK}{K^2-K_0^2}\,\frac{1}{S(K)}$, **B** étant le chemin d'intégration indiqué figure 3.

Le théorème des résidus donne alors

$$C_2 = -\frac{u_0^2}{2p\sin\frac{\theta_0}{2}}\left\{\frac{i\pi}{S(K_0)}\,\mathrm{Log}\left[f(K_0)\frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right]-2\pi i\int_B\frac{K\,dK}{K^2K_0^2}\,\frac{1}{S(K)}\right\}.$$

Dans la fonction Log, α et β sont pris pour $K = K_0$.

Il ne nous reste donc que le calcul de $\int_B \frac{K\,dK}{K^2-K_0^2}\,\frac{1}{S(K)}$. Nous pouvons la calculer par les méthodes élémentaires

$$\int_B \frac{K\,dK}{K^2-K_0^2}\,\frac{1}{S(K)} = -\frac{1}{S(K_0)}\,i\arg\left\{\frac{S^2(K_0)+S(K_0)S(K)+B(K^2-K_0^2)}{K^2-K_0^2}\right\}_{K=\rho}$$

avec

$$B = 1+p^2+K_0^2-2p^2\cos^2\frac{\theta_0}{2}.$$

En définitive, l'on a donc

$$(66)\qquad C_2 = \frac{\pi u_0^2}{p\,S(K_0)\sin\frac{\theta_0}{2}}\left(\arg\left\{\frac{S^2(K_0)+S(K_0)S(\rho_0)+B(\rho_2^2-K_0^2)}{\rho_2^2-K_0^2}\right\} - \frac{i}{2}\operatorname{Log}\left[f(K_0)\frac{a-\beta}{a+\beta}\right]\right);$$

l'argument étant compris entre $-\frac{\pi}{2}$ et $+\frac{\pi}{2}$, $\rho_2 = p+i$.

Nous rappelons que dans cette formule

$$S^2(K) = a^2-\beta^2\cos^2\frac{\theta_0}{2},\qquad S = +\sqrt{S^2},$$
$$\alpha = 1+p^2+K^2,\qquad \beta = 2p\,K,$$

$f(K)$ étant donné par la formule de la page 00.

En posant

$$C_2 = 4\pi u_0^2\,\Phi(K_0, p, \theta_0),$$

nous avons, compte tenu de (54_a) et (54_b),

$$\text{V. S.}\left(e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{x}},\ u\psi_{\vec{k}_1}^{+}\right) = \begin{cases} 4\pi u_0\dfrac{\chi^2(p, K_0, \theta_0)}{\chi(p, p, \theta_0)-u_0\Phi(K_0, p, \theta_0)} \\ \text{ou} \\ 4\pi\left\{2\chi(p, K_0, \theta_0)-\chi(p, p, \theta_0)+u_0\Phi(K_0, p, \theta_0)\right\}u_0. \end{cases}$$

Remarque. — Les résultats numériques dépendent évidemment du choix que l'on fait de la valeur de p. Nous choisirons avec E. Gerjuoy et D. S. Saxon,

$$(67)\qquad p^2 = K_0^2 \equiv p_1^2,$$

$$(68)\qquad p^2 = K_0^2+\frac{1}{2}u_0 \equiv p_2^2;$$

(67) correspond à la particule libre; (68) est défini par la condition

$$\int d\vec{x}\, u(x)\, e^{-i\vec{p}.\vec{x}}[\nabla^2 + K_0^2 + u(x)]\, e^{i\vec{p}.\vec{x}} = 0.$$

Elle exprime le fait que les fonctions d'essai ne vérifient l'équation de Schrödinger que dans un espace limité par les propriétés du potentiel de Yukawa.

Avec $a = 1,35.10^{-13}$ cm, $u_0 = 2\,365$ (interaction ^1S neutron-proton), Gerjuoy et D. S. Saxon trouvent :

Section efficace différentielle de diffusion.

K_0	Énergie (MeV)	Angle.	Méthode variationnelle (54a) p_1.	p_2.	Approx. Born.	Exact.
0,6630	20.....	0	8,61	3,73	5,60	3,99
		$\frac{\pi}{2}$	1,51	1,36	1,58	2,28
		π	0,41	0,25	0,74	2,27
1,048	50.....	0	6,81	4,38	5,60	4,58
		$\frac{\pi}{2}$	0,345	0,372	0,546	0,752
		π	0,071	0,064	0,192	0,531
1,406	90.....	0	6,27	4,74	5,60	5,07
		$\frac{\pi}{2}$	0,121	0,137	0,227	0,309
		π	0,023	0,024	0,071	0,151
1,624	120.....	0	6,10	4,90	5,60	5,25
		$\frac{\pi}{2}$	0,072	0,081	0,142	0,190
		π	0,013	0,014	0,028	0,048
1,816	150.....	0	6,00	5,01	5,60	5,31
		$\frac{\pi}{2}$	0,048	0,054	0,097	0,127
		π	0,009	0,010	0,028	0,048

La colonne « Exact » a été obtenue par intégration numérique de l'équation de Schrödinger.

La courbe ci-contre (*fig.* 4) donne l'allure de la variation de la section efficace différentielle de diffusion en fonction de l'angle θ de

diffusion pour une énergie de 150 MeV. Nous remarquons que l'accord entre les différentes méthodes est très bon pour les grandes énergies.

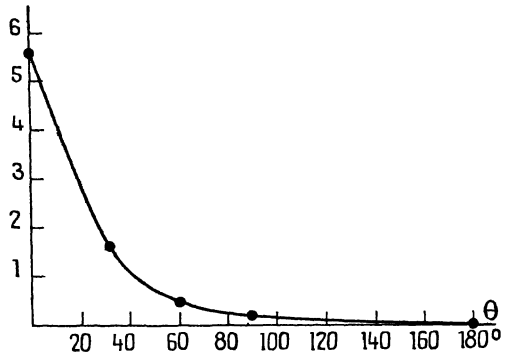

Fig. 4. — La courbe (A) correspond au résultat « exact » ; les points correspondent à l'approximation de Born.

CHAPITRE V.

MÉTHODE VARIATIONNELLE DANS LA PHYSIQUE DES PILES ATOMIQUES (RÉACTEURS).

Il s'agit ici de méthodes utiles pour le calcul de la taille critique des réacteurs (piles atomiques) dite de puissance nulle. Comme tous les réacteurs à énergie nulle ont un petit volume, les dimensions du cœur étant de l'ordre de quelques parcours libres moyens neutronique, le dimensionnement précis des caractéristiques d'un tel réacteur impose parfois l'emploi de méthodes autres que la théorie de la diffusion simple.

Nous donnerons dans ce qui suit, la méthode basée sur l'équation de transport exacte de Boltzmann, fonction de l'énergie, ainsi que sa solution par des méthodes variationnelles.

Nous allons commencer par décrire la théorie mathématique qui nous permettra de prévoir la densité du flux de neutrons dans un réacteur à neutrons rapides (c'est un réacteur où il se produit peu de ralentissement et où la fission s'induit en premier lieu par les neutrons rapides qui ont perdu relativement peu de l'énergie avec laquelle ils ont été libérés) en fonction de l'espace et de l'énergie.

L'équation exacte de la théorie de transport peut se mettre sous la forme d'une équation intégro-différentielle (Boltzmann) ou sous la forme d'une équation intégrale.

Pour les problèmes basés sur le concept d'un seul groupe de vitesses neutroniques et de la diffusion isotrope, on obtient une équation intégrale pour le flux neutronique.

Si $\vec{v}$ est la vitesse d'un neutron d'énergie E, $\vec{\Omega}$ un vecteur définissant sa direction et si $\vec{r}(x, y, z)$ est le vecteur position au point (x, y, z), $N\, dv\, d\Omega$ sera le nombre de neutrons par centimètre cube au point $\vec{r}$ à l'instant t doués d'une vitesse comprise dans $(v, v + dv)$ et situé dans le cône élémentaire $d\Omega$ autour de $\vec{\Omega}$.

La grandeur

$$\Phi(\vec{r}) = \iint v\, N\, dv\, d\Omega \tag{1}$$

sera le flux au point $\vec{r}$.

Le courant de neutrons à travers une surface dont la normale est définie par un vecteur unitaire $\vec{u}$ sera

$$J_u(\vec{r}) = \iint v\, \vec{\Omega}.\vec{u}\, N\, dv\, d\Omega. \tag{2}$$

C'est le nombre de neutrons net qui passent par seconde à travers 1 cm² perpendiculaire à $\vec{n}$.

Lorsqu'un neutron subit un choc, il peut interagir avec un noyau de plusieurs façons. Il peut être diffusé élastiquement ou inélastiquement, il peut induire une fission ou peut être capturé.

Soit σ_e, σ_{in}, σ_f et σ_c les sections efficaces relatives à ces processus.

Soit, en outre, l le libre parcours moyen neutronique et α son inverse; c le nombre de secondaires par choc, et β le nombre de secondaires par unité de parcours. S'il y a n noyaux par centimètre cube, on aura

$$\alpha = \frac{1}{l} = n(\sigma_e + \sigma_{in} + \sigma_f + \sigma_c), \tag{3}$$

$$\beta = c\alpha = \frac{c}{l} = n(\sigma_e + \sigma_{in} + \nu\sigma_f), \tag{4}$$

ou ν est le nombre de neutrons créés par fission.

Soit $cf\left(v', \vec{\Omega}' \to v, \vec{\Omega}\right) dv\, d\Omega$, le nombre probable de neutrons

produits dans l'intervalle de vitesse dv et dans le cône élémentaire $d\Omega$ lorsqu'un neutron de vitesse v' et de direction Ω' subit un choc. Pour les divers processus indiqués dans ce qui précède, la fonction f prend les formes suivantes.

Au cours de la fission, les neutrons sont émis de manière isotrope

$$f_f\left(v', \vec{\Omega}' \to v, \vec{\Omega}\right) = \frac{F(v)}{4\pi}, \tag{5}$$

ou $F(v)$ désigne le spectre des neutrons de fission.

Nous admettrons, en outre, qu'après le choc inélastique, le neutron est émis également de manière isotrope, c'est-à-dire

$$f_{in}\left(v', \vec{\Omega}' \to v, \vec{\Omega}\right) = \frac{g(v' \to v)}{4\pi}, \tag{6}$$

$g(v' \to v)$ étant la probabilité de voir un neutron diffusé dans la bande de vitesse dv.

Au cours d'une collision élastique, le neutron peut être diffusé de manière anisotrope. Soit alors $f_e(\mu)$ la distribution angulaire de neutrons diffusés, où μ est le cosinus de l'angle que font $\vec{\Omega}$ et $\vec{\Omega}'$. Nous ne nous préoccuperons pas, dans ce qui suit, de la distribution angulaire détaillée $f_e(\mu)$. Nous supposerons la diffusion isotrope et nous remplaçerons la section efficace σ_e par σ'_e, où

$$\sigma'_e = \sigma_e\left[1 - \int_{-1}^{+1} \mu f_e(\mu)\, d\mu\right]. \tag{7}$$

Définissons encore la section efficace de transport σ_{tr} de la manière suivante :

$$\sigma_{tr} = \sigma'_e + \sigma_{in}. \tag{8}$$

L'expression de $cf\left(v', \vec{\Omega}' \to v, \vec{\Omega}\right)$ en fonction de f_f, f_{in} et f_e sera dès lors la suivante :

$$cf\left(v', \vec{\Omega}' \to v, \vec{\Omega}\right) = \nu p_f f_f + p_{in} f_{in} + p_e f_e, \tag{9}$$

où p_f, p_{in} et p_e sont les probabilités de voir un choc se transformer respectivement en fission, en diffusion inélastique ou en diffusion élastique.

Si l'on se propose de calculer, dans un élément de volume dV_r

repéré au point $\vec{r}$ la fuite des neutrons, le nombre de neutrons subissant des chocs et le nombre de neutrons diffusés dans une bande de vitesse particulière dv dans la direction $\vec{\Omega}$, l'on est amené à démontrer que $N(\vec{r}, v, \vec{\Omega})$ obéit à l'équation suivante de Boltzmann :

$$(10) \qquad \frac{\partial N(\vec{r}, v\vec{\Omega})}{\partial t} + v\vec{\Omega}.\vec{\nabla} N(r, v, \vec{\Omega}) + v\alpha N(r, v, \vec{\Omega}) + (\text{Sources}) = \iiint \beta v' N(\vec{r}, v', \vec{\Omega}') f(v', \Omega' \to v, \vec{\Omega})\, dv'\, d\vec{\Omega}'.$$

Le premier terme du premier membre représente la variation du nombre des neutrons par unité de temps; le second terme, la fuite des neutrons hors du volume élémentaire; le troisième terme représente le nombre de neutrons subissant des chocs et le quatrième terme (Sources), le nombre de neutrons issus d'une source présente. Le second membre représente tous les processus par lesquels un neutron peut être créé dans la bande de vitesse dv et dans le cône élémentaire $d\Omega$, à savoir par fission, par diffusion élastique ou par diffusion inélastique.

Dans le cas stationnaire (régime permanent), $\frac{\partial N}{\partial t}$ est nul.

La plupart des calculs ont été effectués pour des systèmes de symétrie sphérique et pour la diffusion isotrope. Dès lors, notre fonction N devient une fonction d'une seule coordonnée d'espace, la distance r du point observé au centre du système et d'une coordonnée angulaire μ qui est le cosinus de l'angle entre le rayon vecteur $\vec{r}$ et la direction $\vec{\Omega}$. L'équation de Boltzmann (10) se trouvera donc ramenée, dans le cas de diffusion isotrope, à la forme suivante :

$$(11) \qquad v\mu \frac{\partial N}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} v \frac{\partial N}{\partial \mu} + v\alpha N(r, v, \mu) = \frac{1}{2} \iiint \beta v' N(r, v', \mu') f(v' \to v)\, dv'\, d\mu'.$$

Dans un problème plan, c'est-à-dire lorsque N dépend seulement de la coordonée x, le terme de fuites sera donné par $\mu \frac{\partial N}{\partial x}$.

Dans les problèmes envisagés dans la théorie à un groupe, on

admet que les sections efficaces sont constantes; on peut dès lors intégrer (11) par rapport à v pour obtenir

$$(12)\qquad \mu\frac{\partial\Phi}{\partial r}+\frac{1-\mu^2}{r}\frac{\partial\Phi}{\partial r}+\alpha\Phi(r,\mu)=\frac{\beta}{2}\int_{-1}^{+1}\Phi(r,\mu')\,d\mu',$$

avec

$$\Phi(r,\mu)=\int v\,\mathrm{N}(r,v,\mu)\,dv.$$

Cette équation peut être résolue par la méthode des fonctions sphériques, en développant la distribution angulaire du flux neutronique Φ en une série de fonctions sphériques :

$$(13)\qquad \Phi(r,\mu)=\frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\,\mathrm{P}_n(\mu)\,\Phi_n(r).$$

En multipliant (12) par $\mathrm{P}_n(\mu)$ et en intégrant sur tous les μ, on obtient la relation de réccurrence suivante entre les $\Phi_n(r)$

$$(14)\quad (n+1)\,\mathrm{T}_1\Phi_{n+1}(r)+n\,\mathrm{T}_2\Phi_{n+1}(r)+\alpha(2n+1)\,\Phi_n(r)=\beta\delta_{on}\Phi(r),$$

où T_1 est l'opérateur $\left(\frac{d}{dr}+\frac{n+2}{r}\right)$ et

$$\mathrm{T}_2=\left(\frac{d}{dr}-\frac{n-1}{r}\right).$$

Dans une approximation $\mathrm{P}_{2\mathrm{N}+1}$, on arrête la série pour $\Phi(r,\mu)$ au terme $\mathrm{P}_{2n+1}(\mu)$.

Les équations (14) pour $n=0,\ 2,\ \ldots,\ \mathrm{N}+1$, nous fournissent le nombre nécessaire pour déterminer $\Phi_n(r)$ d'équation, si l'on néglige le terme $\Phi_{2n+2}(r)$ dans la dernière équation.

Les solutions pour les fonctions Φ_n peuvent s'exprimer à l'aide des fonctions de Bessel

$$\Phi_0=\sum_{i=0}^{\mathrm{N}}[\mathrm{A}_i\,\mathrm{H}_0(\nu_i\alpha r)-\mathrm{B}_i\,\mathrm{H}_0(-\nu_i\alpha r)],$$

où

$$\mathrm{H}_n-(\nu_i\alpha r)\equiv-\sqrt{\frac{2}{\pi\nu_i\alpha r}}\,\mathrm{K}_{n+1}(\nu_i\alpha r).$$

Ayant ainsi esquissé dans ses grandes lignes le principe d'une solution directe de l'équation de Boltzmann, venons-en à l'étude du

problème relatif aux réacteurs rapides à l'aide d'une équation intégrale relative aux flux neutronique. Cette équation s'obtient par l'intégration de l'équation de transport de Boltzmann, mais on peut aussi y parvenir par une méthode directe.

Considérons à cet effet un milieu réacteur uniforme et supposons que les sections efficaces nucléaires soient indépendantes de l'énergie de sorte que la théorie à un groupe soit applicable. Soit $\Phi(\vec{r})$ le flux de neutrons en un point quelconque $\vec{r}$ et soient α et β les paramètres nucléaires tels qu'ils ont été définis dans ce qui précède.

Le nombre de neutrons subissant des chocs par seconde dans l'élément de volume dV_r au point $\vec{r}$ sera $\alpha\Phi(\vec{r})\,dV_r$. Chacun de ces neutrons peut-être considéré comme ayant atteint directement $\vec{r}$ venant de quelque point $\vec{r}'$ où il aura été émis au cours d'une fission ou diffusé vers $\vec{r}$.

Or, le nombre de neutrons total émis par seconde, par fission et par diffusion par élément de volume dV'_r au point $\vec{r}'$ est $\beta\Phi(\vec{r}')\,dV'_r$.

En admettant une émission isotrope, on peut montrer directement que la probabilité de voir ces neutrons subir leur choc suivant dans dV_r situé au point $\vec{r}$ est

$$\alpha \exp(-\alpha R)\frac{dV_r}{4\pi R^2},$$

où $R = |\vec{r} - \vec{r}'|$ est la distance entre les points $\vec{r}$ et $\vec{r}'$. En combinant ces résultats et en ajoutant toutes les contributions dues à tous les points $\vec{r}'$ du milieu, le nombre total de chocs ayant lieu par seconde dans dV_r au point $\vec{r}$ sera

$$N_t = \alpha\beta\, dV_r \underbrace{\iiint}_{\vec{r}'} \Phi(\vec{r}')\frac{e^{-\alpha R}}{4\pi R^2}\, dV'_r. \tag{15}$$

En égalant cette grandeur à $\alpha\Phi(\vec{r})\,dV_r$, on parvient à l'équation intégrale cherchée pour un flux de neutron $\Phi(\vec{r})$ en régime permanent

$$\Phi(\vec{r}) = \beta \iiint \Phi(\vec{r}')\, K(\vec{r}, \vec{r}')\, dV'_r, \tag{16}$$

où le noyau $K(\vec{r}, \vec{r}')$ est défini par

$$K(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{-\alpha R}}{4\pi R^2}. \tag{17}$$

L'intégrale dans (16) doit être étendue sur la région occupée par le milieu réacteur. L'équation (16) est une équation aux valeurs propres; seule, toutefois, la solution $\Phi(\vec{r})$ correspondant à la plus petite valeur propre positive β présente de l'intérêt car on peut montrer que toutes les autres solutions deviennent négatives quelque part dans le milieu réacteur et doivent par conséquent être rejetées pour des raisons physiques.

Dans le cas d'une diffusion non isotrope, on se contente, à titre d'approximation, de faire appel à une équation intégrale de la forme (16) qui n'est strictement parlant valable que pour la diffusion isotrope, en remplaçant la section efficace de diffusion par la section efficace de transport définie précédemment.

Il est difficile d'obtenir des solutions exactes de l'équation intégrale (16) et nous nous contenterons de décrire, dans ce qui suit, une méthode d'approximation basée sur la méthode variationnelle.

La méthode variationnelle permet de déterminer une solution approximative pour la valeur propre positive minimum de l'équation intégrale (16) : elle est basée sur le fait que la fonctionnelle $F[\psi(\vec{r})]$ définie par

$$F[\psi(\vec{r})] = \frac{\iiint \psi^2(\vec{r})\, dV_r}{\iiint \psi(\vec{r})\, dV_r \iiint K(\vec{r}, \vec{r}')\, \psi(\vec{r}')\, dV'}, \tag{18}$$

où $\psi(\vec{r})$ est une fonction arbitraire, est stationnaire et passe par une valeur mininum égale à β lorsque $\psi(\vec{r})$ est égal à la distribution $\Phi(\vec{r})$ du flux neutronique. Les intégrales dans (18) doivent être étendues à tout le milieu réacteur.

En d'autres termes,

$$\beta = \text{V.S.} \left\{ \frac{\iiint \psi^2(\vec{r})\, dV_r}{\iiint \psi^2(\vec{r})\, dV_r \iiint K(\vec{r}, \vec{r}')\, \psi(\vec{r}')\, dV'_r} \right\}. \tag{19}$$

Les méthodes exposées dans le Chapitre II permettent de justifier ce résultat.

En pratique, nous l'avons vu pour d'autres problèmes, on introduit une fonction d'essai $\Phi'(\vec{r})$ convenablement choisie pour la fonction $\psi(\vec{r})$, et l'on calcule ensuite $F[\Phi'(r)]$ à l'aide de (18).

Le résultat de ces calculs sera une valeur approchée β^* de la valeur propre cherchée β.

Nous avons vu que si l'erreur commise pour $\Phi^*(\vec{r})$, c'est-à-dire $\Phi(\vec{r}) - \Phi'(\vec{r})$ est de l'ordre d'une petite quantité ε, il résulte de la nature extrémale de $F[\psi(\vec{r})]$ que l'erreur sur β sera de l'ordre de $\Delta\beta = \beta - \beta' \sim \varepsilon^2$, quantité de l'ordre de ε^2. Ainsi, une approximation grossière sur $\psi(\vec{r})$ pour la distribution du flux peut fournir une valeur tout à fait correcte pour β. On remarquera que puisque $F[\psi(\vec{r})]$ est in extrémum minimum pour $\psi(\vec{r}) = \Phi(\vec{r})$, on aura

$$F[\Phi^*(\vec{r})] \geqq F[\Phi(\vec{r})], \qquad \text{c'est-à-dire que} \quad \beta' \geqq \beta.$$

En d'autres termes, notre méthode variationnelle fournit une estimation par excès de la valeur propre β.

M. H. L. Pryce a utilisé la fonction d'essai de la forme

$$\Phi'(r) = 1 - qr^2 \tag{20}$$

pour $\Phi(r)$ dans les problèmes relatifs aux conditions critiques pour une pile sphérique sans réflecteur, où r désigne la distance radiale mesurée à partir du centre de la sphère et q est un paramètre. On calcule $F[\Phi'(\vec{r})]$ à partir de (18), et l'on détermine ensuite q de façon à rendre minimum l'expression résultante. Cette valeur extrémale (minimum) de $F[\Phi'(r)]$ est l'approximation recherchée pour β. On peut représenter les résultats numériques obtenus par Pryce dans l'intervalle $1,5 < \frac{\beta}{\alpha} < \infty$ par la formule empirique

$$\beta R_c = \frac{1,814}{\sqrt{1 - \frac{\alpha}{\beta}}} + 0,16\sqrt{1 - \frac{\alpha}{\beta}} - 0,697, \tag{21}$$

où R_c est le rayon critique de la sphère.

On peut utiliser la méthode variationnelle pour déterminer de la même façon la taille critique d'un réacteur cubique, cylindrique, dépourvu de réflecteur, en fonction de α et β.

La méthode esquissée dans ce qui précède, relative à un réacteur démuni de réflecteur peu être généralisée au problème d'un cœur sphérique noyé dans un réflecteur. On suppose, ce faisant, d'une part que le matériau réflecteur diffuse sans capturer les neutrons et, d'autre part, que le libre parcours moyen total est constant dans tout le réacteur.

On choisit la fonction d'essai pour $\Phi(r)$ de manière à avoir dans le cœur la forme parabolique (20), et, dans le réflecteur, la solution déduite de la théorie de la diffusion

$$\Phi'(r) = A + \frac{\beta}{r}, \tag{22}$$

A et B étant deux constantes dont on peut disposer.

On impose la condition que $\Phi'(r)$ soit continue à la surface de séparation cœur-réflecteur $r = R_c$.

Les résultats des calculs relatifs à ce cas, lorsque le réflecteur est infini, se représentent sous la formule empirique suivante :

$$\beta R_c = \frac{0{,}907}{\sqrt{1 - \frac{\alpha}{\beta}}} + 0{,}370\left(1 - \frac{\alpha}{\beta}\right). \tag{23}$$

Cette formule donne une valeur pour le rayon critique R_c qui est en accord avec la théorie de la diffusion lorsque $\frac{\beta}{\alpha} \to 1$.

Dans le cas d'une multiplication très grande $\left(\frac{\beta}{\alpha} \to \infty\right)$, donc lorsque le réflecteur aura un effet négligeable, le résultat s'accorde avec celui relatif à une sphère dépourvue de réflecteur, c'est-à-dire $R_c\beta \to 1{,}277$.

Il y a lieu de faire remarquer que la méthode variationnelle telle qu'elle vient d'être exposée n'a qu'une valadité restreinte pour le problème relatif aux réacteurs à neutrons rapides, car elle est malaisée à appliquer lorsque les libres parcours moyens sont différents dans le cœur et dans le réflecteur. Par ailleurs, les intégrations mises en jeu sont, en général, fort laborieuses. La méthode variationnelle fournit néanmoins dans de nombreux cas des approximations fort utiles, en particulier dans le calcul des piles à structure réticulaire.

BIBLIOGRAPHIE SOMMAIRE.

BLATT et JACKSON, *Phys. Rev.*, t. 71, 1947, p. 66 et *Rev. Mod. Phys.*, t. 22, 1950, p. 77.

BROGLIE (L. DE), Problèmes de propagation guidée des ondes, 2e édit., Gauthier-Villars, Paris.

DAVISON (B.), *Phys. Rev.*, t. 71, 1947, p. 694.

CHEW (G. F.) et WICK (G. C.), *Phys. Rev.*, t. 83, 1952, p. 636.

CHEW (G. F.) et GOLDBERGER (M. L.), *Phys. Rev.*, t. 87, 1952, p. 778.

GERJUOY (E.) et SAXON (D. S.), *Phys. Rev.*, t. 85, 1952, p. 939.

GOLDBERGER (M. L.), *Phys. Rev.*, t. 84, 1951, p. 929.

GOURSAT (E.), *Cours d'Analyse*, t. III, Gauthier-Villars, Paris.

MARSHAK, *Phys. Rev.*, t. 71, 1947, p. 688.

KAHAN (T.), *C. R. Acad. Sc.*, t. 236, 1953, p. 1000.

KAHAN (T.), *Mémorial des Sciences Physiques*, fasc. 52 et 60.

KAHAN (T.), *Physique des réacteurs nucléaires* (sous presse).

KAHAN (T.) et RIDEAU (G.), *C. R. Acad. Sc.*, t. 233, 1951, p. 849.

KAHAN (T.) et RIDEAU (G.), *J. Phys. Rad.*, t. 13, 1952, p. 329.

KATO (K.), *Phys. Rev.*, t. 80, 1950, p. 475.

KATO (K.), *Progr. Theor. Phys.*, t. 6, 1951, p. 295.

KOHN (W.), *Phys. Rev.*, t. 74, 1948, p. 1763.

LEVINE (H.) et SCHWINGER (J.), *Phys. Rev.*, t. 73, 1948, p. 383; t. 74, 1948, p. 958 et 1212; t. 75, 1949, p. 1423 et 1608.

LIPPMANN (B. A.) et SCHWINGER (J.), *Phys. Rev.*, t. 79, 1950, p. 469.

MILES (J. W.), *J. Appl. Phys.*, t. 20, 1949, p. 760.

MOTT (N. F.) et MASSEY (H. S. W.), *Theory of Atomic Collisions*, 2e édit. (méthode de Hulthèn, p. 128 et suiv.), Oxford, 1949.

MOWER (L.), *Phys. Rev.*, t. 99, 1955, p. 1065.

RIDEAU (G.), *C. R. Acad. Sc.*, t. 237, 1953, p. 1646.

ROUSSOPOULOS (P.), *C. R. Acad. Sc.*, t. 236, 1953, p. 1859.

SCHWARTZ (L.), *Théorie des Distributions*, 2 vol. Herman, Paris.

SCHWINGER (J.), *Lectures. Nucl. Phys.*, Harvard University, 1947.

VOLTERRA (V.), *Nuov. Cim.*, t. 16, 1884, p. 49 et *Opere Matematiche*, vol. 1, p. 188.