Diffusion élastique sur une densité de charge

Dans le formalisme de la théorie de la diffusion

On prend une source de particules en $z=-\infty$ **non-relativistes**, d'impulsion $\vec{p_i}=p\,\vec{u_z}$, de masse m, diffusant sur un potentiel $V(\vec{r})$. Le potentiel doit décroitre suffisemment vite à l'infini (plus vite que r^{-1}) ce qui n'est pas le cas d'un potentiel coulombien. Pour faire un traitement correct, on prend une particule de charge Ze un potentiel écranté (de Yukawa, de distance d'écrantage $1/a$, et on prendra la limite $a\to 0$ à la fin) de distribution de charge $\rho(\vec{r})\,e$:

$$V(\vec{r}) \,=\, \mathrm{e}^{-ar}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\,\frac{Z\,\rho(\vec{r}\,')\,e^2}{4\pi\,\varepsilon_0\,\|\vec{r}-\vec{r}\,'\|} \tag{1}$$

On notera $\alpha=e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c$ dans la suite.

On se place dans le cadre de la théorie de la diffusion élastique, sans prendre en compte les effets de recul. Le hamiltonien de la particule diffusée est $\boldsymbol{H}=\frac{\vec{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\vec{\boldsymbol{r}})$. Sur cible mince, la section efficace différentielle dans la direction $\vec{u}_{\theta,\phi}$ ($\vec{p_f}=p\,\vec{u}_{\theta,\phi}$, p conservé car élastique) est

$$\sigma_d(\theta,\phi) \,=\, |f(\theta,\phi)|^2 \tag{2}$$

où $f(\theta,\phi)$ est l'amplitude de diffusion, définie par la forme asymptotique de la fonction d'onde diffusée

$$\psi(\vec{r}) \underset{r\to\infty}{\propto\!\!\!\sim} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}+f(\theta,\phi)\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} \quad (p=\hbar k)$$

Amplitude de diffusion dans la **première approximation de Born** :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\,f^{(1)}(\theta,\phi) \,=\, -\tfrac{1}{4\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,V(\vec{r})\,\mathrm{d}^3\vec{r} \,=\, -\tfrac{1}{4\pi}\,\mathcal{FT}[V](\vec{q}) \quad \text{où} \quad \vec{q}=\vec{k_f}-\vec{k_i} \tag{3}$$

Il reste à faire le calcul pour notre potentiel :

$$\begin{aligned}
\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,V(\vec{r})\,\mathrm{d}^3\vec{r} \;&=\; \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,\mathrm{e}^{-ar}\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\,\frac{\alpha\hbar c\,Z\,\rho(\vec{r}\,')}{\|\vec{r}-\vec{r}\,'\|}\\
\text{[interversion } \vec{r}/\vec{r}\,' \text{]} \qquad &=\; Z\,\alpha\hbar c\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}\,'}\,\rho(\vec{r}\,')\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot(\vec{r}\,'-\vec{r})}\,\frac{1}{\|\vec{r}-\vec{r}\,'\|}\,\mathrm{e}^{-ar}\\
\text{[chang' de variable } \vec{r}\,'-\vec{r}\mapsto\vec{r} \text{]} \qquad &=\; Z\,\alpha\hbar c\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}\,'}\,\rho(\vec{r}\,')\underbrace{\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}}{\|\vec{r}\|}\,\mathrm{e}^{-a\,\|\vec{r}\,'-\vec{r}\|}}_{=:I}
\end{aligned}$$

Calculons I à la limite $a\to 0$ (écrantage nul) :

$$\begin{aligned}
I \underset{1/a\gg r'}{\simeq} \iiint \mathrm{d}^3\vec{r}\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}}{r}\,\mathrm{e}^{-ar} \;&=\; \int_0^\infty\!\mathrm{d}r\int_0^\pi r\,\mathrm{d}\vartheta\int_0^{2\pi} r\sin\vartheta\,\mathrm{d}\varphi\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\vartheta}}{r}\,\mathrm{e}^{-ar}\\
&=\; 2\pi\int_0^\infty\!\mathrm{d}r\int_0^\pi\!\mathrm{d}\vartheta\,\sin\vartheta\,r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}qr\cos\vartheta}\mathrm{e}^{-ar}\\
\text{[chang' de var. } {\scriptstyle u=-\cos\vartheta \atop \scriptstyle \mathrm{d}u=\sin\vartheta\,\mathrm{d}\vartheta} \text{]} \qquad &=\; 2\pi\int_0^\infty \mathrm{d}r\,r\,\mathrm{e}^{-ar}\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qru}\\
&=\; 4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\mathrm{e}^{-ar}\,r\,\frac{\sin(qr)}{qr}\\
\text{[chang' de var. } \xi=q\,r \text{]} \qquad &=\; \frac{4\pi}{q^2}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\,\mathrm{e}^{-{}^a\!/_q\,\xi}\sin\xi\\
\text{[IPP; sans écrantage, ça ne serait pas défini]} \qquad &=\; \frac{4\pi}{q^2}\,\frac{1}{1+({}^a\!/_q)^2} \;\xrightarrow[a\to 0]{}\; \frac{4\pi}{q^2}
\end{aligned}$$

car

$$\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}u\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta u}=\left[\frac{-1}{\mathrm{i}\,\beta}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta u}\right]_{-1}^{+1} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta}}{2\,\mathrm{i}\,\beta}=\frac{2\sin\beta}{\beta}$$

Donc, à écrantage nul (potentiel coulombien nu),

$$\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\,V(\vec{r})\,\mathrm{d}^3\vec{r} \;=\; \frac{4\pi}{q^2}\,Z\,\alpha\hbar c\,F(\vec{q}) \quad \text{avec} \quad \boxed{F(\vec{q}) := \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}\,'}\,\rho(\vec{r}\,')}$$

le **facteur de forme** de la distribution de charge (sans dimension). Ainsi, avec (3),

$$f^{(1)}(\theta,\phi) \;=\; -\frac{2\,m}{4\pi\,\hbar^2}\,4\pi\,\frac{Z\,\alpha\hbar c}{q^2}\,F(\vec{q}) \;=\; -\frac{2mc}{\hbar\,q^2}\,Z\,\alpha\,F(\vec{q})$$

donc dans la première approximation de Born, avec (2), on a

$$\boxed{\sigma_d(\theta,\phi,q) \;=\; \Big(\frac{2mc}{\hbar\,q^2}\Big)^2\,(Z\alpha)^2\,|F(\vec{q})|^2}$$

Pour retrouver une forme plus habituelle, on va développer le q^2 au dénominateur :

$$\begin{aligned}\hbar^2\,q^2 = (\vec{p_f}-\vec{p_i})^2 \;&=\; p_f^2 - 2\,p_f\,p_i\cos\theta + p_i^2\\ &=\; 2\,p^2\,(1-\cos\theta)\\ &=\; 2\,p^2\,2\sin^2{}^{\theta}\!/\!_2\end{aligned}$$

car $p_i = p_f = p$ (diffusion élastique) et où θ est l'angle de diffusion, angle entre $\vec{p_i} = p\,\vec{u_z}$ et $\vec{p_f} = p\,\vec{u}_{\theta,\phi}$. En non-relativiste, on a $p^2 = 2\,m\,E_{\mathsf{k}}$, où E_{k} est l'énergie cinétique des particules diffusées. Au final,

$$\frac{2\,m\,c}{\hbar\,q^2} = \frac{2\,m\,\hbar\,c}{4\,p^2\sin^2{}^{\theta}\!/\!_2} = \frac{\cancel{m}\,\hbar\,c}{4\,\cancel{m}\,E_{\mathsf{k}}\sin^2{}^{\theta}\!/\!_2} \quad \text{et} \quad q = 2\,\frac{\sqrt{2mE_{\mathsf{k}}}}{\hbar}\sin{}^{\theta}\!/\!_2$$

donc

$$\boxed{\sigma_d(\theta,\phi,E_{\mathsf{k}}) \;=\; \sigma_d^{\mathsf{Ruth}}(\theta,E_{\mathsf{k}})\,|F(\vec{q})|^2 \quad \text{avec} \quad \sigma_d^{\mathsf{Ruth}}(\theta;E_{\mathsf{k}}) = \left(\frac{Z\alpha\,\hbar c}{4\,E_{\mathsf{k}}\sin^2{}^{\theta}\!/\!_2}\right)^2 = \frac{d_0^2}{16\sin^4{}^{\theta}\!/\!_2} \;\text{où}\; d_0 = \frac{Z\,e^2}{4\pi\varepsilon_0\,E_{\mathsf{k}}}}$$

Pour une charge ponctuelle, $\rho(\vec{r}) = \delta^{(3)}(\vec{r})$ et $F(\vec{q}) \equiv 1$: on retombe bien sur la diffusion de Rutherford.

Développement pour un transfert d'impulsion petit ($q^{-1} \gg$ étendue typique de $\rho(\vec{r})$, et en particulier θ proche de 0, "forward angle") et une distribution à symétrie sphérique :

$$\begin{aligned}F(\vec{q}) \;&=\; \iiint \mathrm{d}^3\vec{r}\;\rho(r)\,\big(1 - \mathrm{i}\,\vec{q}\cdot\vec{r} - \tfrac{1}{2}\,(\vec{q}\cdot\vec{r})^2 + o(q^2)\big)\\ &\simeq\; \underbrace{\iiint \mathrm{d}^3\vec{r}\;\rho(r)}_{=1} - 2\pi\mathrm{i}\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\,q\,r\,\rho(r)\underbrace{\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin\theta\cos\theta}_{=0} - \tfrac{2\pi}{2}\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\,q^2\,r^2\,\rho(r)\underbrace{\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin\theta\cos^2\theta}_{=2/3}\\ &=\; 1 - \frac{q^2}{6}\,4\pi\int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\,r^2\,\rho(r) \;=\; 1 - \frac{q^2}{6}\iiint \mathrm{d}^3\vec{r}\,r^2\,\rho(r)\end{aligned}$$

Donc

$$\boxed{F(\vec{q}) = 1 - \frac{q^2}{6}\,\langle r^2\rangle_\rho + o(q^2) \quad \text{avec} \quad \langle r^2\rangle_\rho = \iiint \mathrm{d}^3\vec{r}\,r^2\,\rho(r) \quad \text{rayon quadratique moyen de la distribution}}$$

Pour une sphère de densité de charge constante et de rayon R, on a $\langle r^2\rangle_\rho = \frac{3}{5}\,R^2$.