Annales de la Fondation Louis de Broglie,
Vol. 9, n° 3, 1984

LA DIFFUSION D'UN ÉLECTRON PAR UN ION ET LA THÉORIE DU GUIDAGE

par J. SALMON, P. VERZEAUX
Conservatoire National des Arts et Métiers,
Laboratoire de Physique Générale,
292 rue Saint-Martin
75141 PARIS CEDEX 03

(manuscrit reçu le 15 Juin 1984)

Résumé : Le problème de la diffusion d'un électron par un ion est examiné dans le cadre de la théorie du guidage.

La solution obtenue n'est pas conforme à l'expérience par suite de la persistance de l'onde incidente. Il conviendrait de reprendre l'étude à partir d'un paquet d'ondes initiales de largeur finie.

1) INTRODUCTION

On sait que l'application des principes de la mécanique classique à l'étude de la diffusion électron-ion conduit à une détermination des trajectoires d'où l'on déduit la formule de la section efficace établie par Rutherford et bien vérifiée par l'expérience.

En mécanique quantique usuelle la résolution de l'équation de Schrödinger se fait en séparant les variables et la fonction d'onde ψ qui en résulte s'obtient au moyen d'une fonction hypergéométrique confluente. On sépare celle-ci en une partie incidente ψ_i et une partie diffusée ψ_d. Le développement asymptotique de ψ_d permet d'obtenir une formule de section efficace identique à celle de Rutherford ce qui est considéré comme très satisfaisant. Toutefois il faut noter qu'on élimine arbitrairement la quantité ψ_i à grande distance du centre diffuseur.

Nous allons reprendre le problème en théorie du guidage de Louis de Broglie et montrer que l'équation différentielle de la trajectoire obtenue à partir de l'expression de ψ s'intègre à l'aide de la fonction Coulombienne sphérique d'ordre zéro. Malheureusement, on ne retrouve pas la trajectoire correcte mais nous verrons que c'est très probablement le type d'onde choisi au départ (et non la méthode) qui est en cause.

2) SOLUTION DU PROBLEME EN MECANIQUE CLASSIQUE

Considérons un électron de masse m et de charge $-e$ venant de l'infini à gauche avec un vecteur vitesse $\vec{v}_0$. En un point O se trouve un ion de charge Ze et de masse très grande devant m. L'axe Ox est parallèle au support de $\vec{v}_0$ et de même sens. Les coordonnées polaires d'un point courant de la trajectoire de l'électron sont r et θ. Le potentiel d'interaction est ϕ_C avec :

$$\phi_C = -\frac{Z e^2}{4\pi \varepsilon_0 r} \qquad (1)$$

L'équation du mouvement est en désignant par t le temps

$$m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\frac{Z e^2}{4\pi \varepsilon_0 r^3} \vec{r} \qquad (2)$$

La trajectoire correspondante est une hyperbole. Celle-ci possède une asymptote parallèle à Ox et située à une distance b de O appelée paramètre d'impact, un sommet correspondant à une valeur θ_m de θ et une asymptote oblique correspondant à un angle de déviation θ_F tel que :

$$\theta_F = 2\theta_m - \pi \qquad (3)$$

Posons :

$$b_0 = \frac{Z e^2}{4\pi \varepsilon_0 m v_0^2} \qquad (4)$$

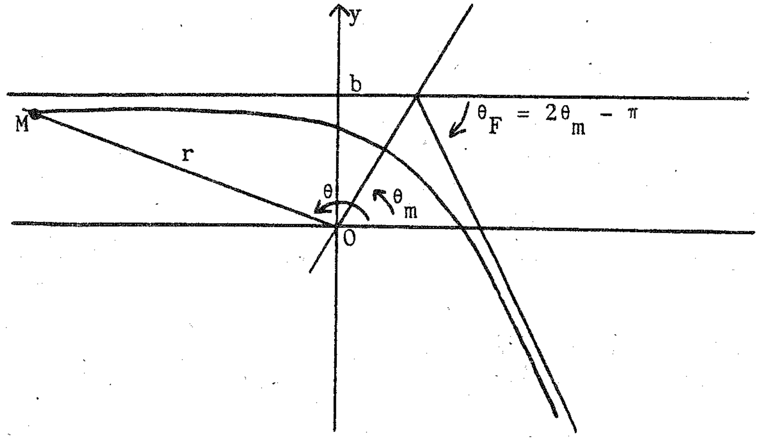

FIGURE 1

L'équation de la trajectoire est (Figure 1)

$$r = \frac{b^2}{b_0(1 + \cos\theta) + b \sin\theta}$$

L'angle θ_m est donné par la formule

$$\theta_m = \text{Arc tg} \frac{b}{b_0} \qquad (6)$$

et l'angle de déviation θ_F a pour expression

$$\theta_F = 2\theta_m - \pi = 2 \text{ Arc tg} \frac{b_0}{b} \qquad (7)$$

La section efficace est donnée par la formule de Rutherford

$$\sigma(\theta_F) = \frac{Z^2 e^4}{64\pi^2 \varepsilon_0^2 m^2 v_0^4 \sin^4 \frac{\theta_F}{2}} \qquad (8)$$

3) SOLUTION DU PROBLEME EN MECANIQUE QUANTIQUE USUELLE

En mécanique quantique il faut résoudre l'équation de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{Z\,e^2}{4\pi\,\varepsilon_0\,r}\,\psi = E_0\,\phi \qquad (9)$$

avec

$$E_0 = \frac{1}{2}\,m\,v_0^2\ . \qquad (10)$$

On pose

$$K_0 = \frac{m\,v_0}{\hbar} \quad (11) \qquad \gamma = -\frac{Z\,e^2}{\hbar\,v_0} \quad (12)$$

et on prend comme variables de position à la place de r et θ les quantités x et ρ avec :

$$\rho = \frac{K_0}{2}(r - x) = \frac{K_0}{2}\,r(1 - \cos\theta) \qquad (13)$$

On montre que la fonction d'onde se met sous la forme :

$$\psi = e^{iK_0x}\,F_1(2\,i\rho) \qquad (14)$$

La fonction F_1 obéit à l'équation différentielle

$$\rho\,\frac{d^2F_1}{d\rho^2} + (1 - 2\,i\rho)\,\frac{d\,F_1}{d\rho} - 2\gamma\,F_1 = 0 \qquad (15)$$

On choisit la solution régulière à l'origine ou fonction hypergéométrique confluente soit :

$$F_1(-i\gamma,\ 1,\ 2i\rho) = 1 + 2\rho\gamma + \gamma(\gamma + i)\rho^2 + \dots$$

$$\dots + \left[\frac{(-i\gamma)(-i\gamma + 1)\dots(-i\gamma + n - 1)}{n\,!}\right]\frac{(2i\rho)^n}{n\,!} \qquad (16)$$

La fonction d'onde a pour expression

$$\psi = e^{i\,K_0x}\,F_1(-i\gamma,\ 1,\ i\,K_0(r - x)) \qquad (17)$$

Elle peut être mise sous la forme d'une somme de deux fonctions ψ_i et ψ_d

$$\psi = \psi_i + \psi_d \qquad (18)$$

dont les développements asymptotiques sont

$$\psi_i = e^{i[K_0x + \gamma\,\mathrm{Log}\,K_0(r - x)]}\left[1 + \frac{\gamma^2}{i\,K_0(r - x)} + \dots\right] \qquad (19)$$

$$\psi_d = -\frac{\gamma}{K_0(r - x)}\,\frac{\Gamma(1 + i\gamma)}{\Gamma(1 - i\gamma)}\,e^{i[K_0x - \gamma\mathrm{Log}\,K_0(r - x)]}$$

$$\left[1 + \frac{(1 + i\gamma)^2}{i\,K_0(r - x)} + \dots\right] \qquad (20)$$

Le vecteur densité de courant de probabilité étant $\vec{j}$ avec

$$\vec{j} = -\,i\,\frac{\hbar}{2m}\,[\psi^+\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^+] \qquad (21)$$

On associe la fonction ψ_i à la particule incidente et la fonction ψ_d à la particule diffusée. On retrouve ainsi la formule de Rutherford. Cette méthode efficace n'est pas satisfaisante sur le plan des principes puisque la fonction d'onde n'est pas conservée dans son intégralité comme pour les états liés mais découpée en deux parties dont on ne garde que la seconde pour retrouver le résultat expérimental. Nous allons reprendre le problème en théorie du guidage.

4) SOLUTION DU PROBLEME EN THEORIE DU GUIDAGE

Dans cette théorie due à Louis de Broglie on admet que la particule est guidée par l'onde associée. La fonction d'onde étant mise sous la forme

$$\psi = a\,e^{i\frac{S}{\hbar}} \qquad (22)$$

la trajectoire est obtenue au moyen de la relation suivante dans laquelle $\vec{v}$ est le vecteur vitesse de la particule

$$\vec{v} = \frac{1}{m}\,\vec{\nabla}S \qquad (23)$$

On pourrait déterminer S à partir de la relation (17)

$$\psi = e^{i\,K_0 x}\,F_1(-i\gamma,\ 1,\ iK_0(r - x)) \qquad (17)$$

mais il est préférable d'utiliser la fonction Coulombienne sphérique d'ordre zéro F_0 car on obtient une expression remarquable.

Considérons tout d'abord la fonction $F_2(1 - i\gamma,\ 2,\ 2i\rho)$

$$F_2 = 1 + 2(\gamma + i)\rho + \ldots + \left[\frac{(1 - i\gamma)(2 - i\gamma)\ldots(n - i\gamma)}{n + 1\,!}\right] \frac{(2i\rho)^n}{n\,!} \qquad (24)$$

et définissons F_0 au moyen de la relation

$$F_0 = \rho\, e^{-i\rho}\, F_2 \qquad (25)$$

On établit les relations

$$F_1 = e^{i\rho}(F_0' - i\,F_0) \quad (26) \qquad F_0'' + \left(1 - 2\,\frac{\gamma}{\rho}\right) F_0 = 0 \quad (27)$$

avec

$$F_0' = \frac{d\,F_0}{d\rho} \quad (28) \qquad F_0'' = \frac{d^2\,F_0}{d\rho^2} \quad (29)$$

et on met la fonction ψ sous la forme

$$\psi = \left[\frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma} - 1}\right]^{1/2} e^{i\,K_0(\rho + x)}\,(F_0' - i\,F_0) \qquad (30)$$

Substituons aux coordonnées polaires r et θ les coordonnées ρ et σ définies par :

$$\rho = \frac{K_0\,r}{2}\,(1 - \cos\theta) \quad (31) \qquad \sigma = \frac{K_0\,r}{2}\,(1 + \cos\theta) \quad (32)$$

Ces nouvelles variables ρ et σ permettent d'intégrer complètement les équations du mouvement et d'aboutir à une relation du genre :

$$\sigma = f(\rho) \qquad (33)$$

donc à une expression de la trajectoire de la forme

$$\frac{K_0\,r}{2}\,(1 + \cos\theta) = f\left(\frac{K_0\,r}{2}\,(1 - \cos\theta)\right) \qquad (34)$$

L'expression de S déduite de (30) est :

$$S = \hbar\left[K_0 \quad - \text{Arc tg}\,\frac{F_0}{F_0'}\right] \qquad (35)$$

La formule du guidage (23) conduit aux équations :

$$m\,\frac{dr}{dt} = \frac{\partial S}{\partial r} = \frac{\hbar\,K_0}{2}\left[1 + \cos\theta + \left(\frac{F_0''F_0 - F_0'^2}{F_0^2 + F_0'^2}\right)(1 - \cos\theta)\right] \qquad (36)$$

$$m\,r\,\frac{d\theta}{dt} = \frac{1}{r}\,\frac{\partial S}{\partial\theta} = \frac{\hbar\,K_0}{2}\left[-\sin\theta + \left(\frac{F_0''F_0 - F_0'^2}{F_0^2 + F_0'^2}\right)\sin\theta\right] \qquad (37)$$

Posons :

$$H = \frac{F_0''F_0 - F_0'^2}{F_0^2 + F_0'^2} \qquad (38)$$

et divisons (36) par (37). Il vient :

$$\frac{1}{r}\frac{dr}{d\theta} = \frac{1 + \cos\theta + H(1 - \cos\theta)}{\sin\theta(H - 1)} \tag{39}$$

Puisque :

$$K_0\, r = \rho + \sigma \quad (40) \qquad \cos\theta = \frac{\sigma - \rho}{\sigma + \rho} \tag{41}$$

on a

$$K_0\, dr = d\rho + d\sigma \quad (42) \qquad \sin\theta\, d\theta = \frac{\sigma d\rho - \rho d\sigma}{(\sigma + \rho)^2} \tag{43}$$

Reportons dans (39). Il vient :

$$\frac{d\rho + d\sigma}{2\left[\dfrac{\sigma d\rho - \rho d\sigma}{(\sigma + \rho)^2}\right]} = \frac{2(\sigma + H\rho)}{(H - 1)\,\dfrac{4\rho\sigma}{(\sigma + \rho)^2}} \tag{44}$$

Cette équation se simplifie et conduit à une relation remarquable

$$H\rho\, d\sigma = \sigma d\rho \tag{45}$$

Les variables se séparent et il vient

$$\frac{d\sigma}{\sigma} = \frac{d\rho}{H\rho} \quad (46) \qquad \int \frac{d\sigma}{\sigma} = \int \frac{d\rho}{H(\rho)d\rho} \tag{47}$$

Nous allons obtenir un autre résultat inattendu. Explicitons le second membre de (47)

$$\int \frac{d\rho}{\rho H(\rho)} = \int \left[\frac{F_0^2 + F_0'^2}{F_0''F_0 - F_0'^2}\right] \frac{d\rho}{\rho} \tag{48}$$

Nous allons montrer qu'au signe près le numérateur est la dérivée du dénominateur. En effet puisque d'après (27)

$$F_0'' = \left[2\,\frac{\gamma}{\rho} - 1\right]F_0 \tag{49}$$

on a

$$\rho(F_0''F_0 - F_0'^2) = (2\gamma - \rho)F_0^2 - \rho F_0'^2 \tag{50}$$

Dérivons

$$\frac{d}{d\rho}[(2\gamma - \rho)F_0^2 - \rho F_0'^2] = (2\gamma - \rho)2F_0F_0' - (F_0^2 + F_0'^2) - 2\rho F_0'F_0''$$

$$= (2\gamma - \rho)2F_0F_0' - (F_0^2 + F_0'^2)$$

$$- 2\rho F_0'F_0(2\gamma - \rho) = -(F_0^2 + F_0'^2) \tag{51}$$

On a donc

$$\frac{d}{d\rho}(H\rho) = \frac{d}{d\rho}\,\rho(F_0''F_0 - F_0'^2) = -(F_0^2 + F_0'^2) \tag{52}$$

et l'intégrale (48) prend la forme simple

$$\int \frac{d\rho}{\rho H} = -\mathrm{Log}\left|2\gamma F_0^2 - \rho(F_0^2 + F_0'^2)\right| \tag{53}$$

L'équation (46) s'intègre donc complètement et puisque est négatif on peut écrire C désignant une constante arbitraire :

$$\mathrm{Log}\sigma + \mathrm{Log}(\rho(F_0^2 + F_0'^2) - 2\gamma F_0^2) = C \tag{54}$$

d'où l'équation de la trajectoire

$$\sigma\rho(F_0^2 + F_0'^2) - 2\gamma F_0^2\sigma = e^C = C_1 \tag{55}$$

avec

$$\rho = \frac{K_0\, r}{2}\,(1 - \cos\theta) \quad (31) \qquad \sigma = \frac{K_0\, r}{2}\,(1 + \cos\theta) \tag{32}$$

Il reste à déterminer C_1. Dans ce but écrivons

$$\sigma\rho = \frac{K_0^2\, r^2}{4}\,(1 - \cos^2\theta) = \frac{K_0^2\, y^2}{4} \tag{56}$$

$$\rho = \frac{K_0}{2}\left((x^2 + y^2)^{1/2} - x\right) \tag{57}$$

Nous avons besoin du comportement de F_0 aux limites de ρ :

$$\rho \to 0 \qquad F_0 \to C_0\,\rho \qquad C_0 = \left[\frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma} - 1}\right]^{1/2} \tag{58}$$

$$\rho \to \infty \qquad F_0 \to \sin\rho \qquad F_0^2 + F_0'^2 \to 1 \tag{59}$$

Lorsque x tend vers moins l'infini $\sigma\rho$ tend vers $\frac{K_0^2\, b^2}{4}$, $(F_0^2 + F_0'^2)$ vers l'unité et σ vers zéro d'où :

$$\sigma\rho = \frac{K_0^2\, y^2}{4} + \frac{K_0^2\, b^2}{4} = C_1 \tag{60}$$

Lorsque x tend vers $+\infty$ on a :

$$\rho = \frac{K_0\, x}{2}\left[\left(1 + \frac{y^2}{x^2}\right)^{1/2} - 1\right] \to \frac{K_0\, y^2}{4x} \to 0 \tag{61}$$

F_0 tend vers $C_0\,\rho$ et F_0' vers C_0 d'où :

$$\sigma\rho = \frac{K_0^2\, y^2}{4} = \frac{C_1}{F_0'^2} = \frac{K_0^2\, b^2}{4C_0^2} \tag{62}$$

y tend vers $\frac{b}{C_0}$ et puisque C_0 est plus grand que l'unité on a

$$x \to -\infty \qquad y \to b \qquad x \to +\infty \qquad y \to \frac{b}{C_0} < b \tag{63}$$

La trajectoire est située entre les asymptotes horizontales d'ordonnées b et $\frac{b}{C_0}$ (figure 2).

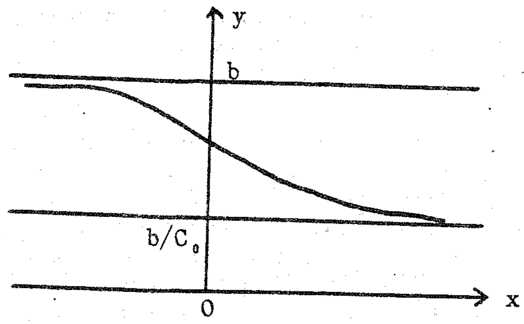

FIGURE 2

Ce résultat n'est pas en accord avec l'expérience. La trajectoire prévue par la théorie du guidage ne traverse pas l'axe des abscisses. Un faisceau d'électrons semblerait devoir être focalisé alors qu'en mécanique classique et en mécanique quantique usuelle il est diffusé conformément à la formule de Rutherford qui est vérifiée par l'expérience.

La mécanique classique trouve cette formule en déterminant une trajectoire hyperbolique. La mécanique quantique usuelle la retrouve à travers le dualisme onde-corpuscule mais de l'expression complète de la fonction d'onde elle ne retient que la partie correspondant à une onde diffusée pour obtenir le bon résultat. Certains trouvent normal ce procédé. D'autres le déplorent.

La théorie du guidage au contraire conserve l'expression complète de la fonction d'onde pour guider la particule ce qui est très satisfaisant. Malheureusement elle n'obtient pas la déviation observée expérimentalement et prévue par les autres théories.

Mais en réalité, ce n'est pas le principe du calcul qui est en cause : c'est le choix d'une fonction d'onde plane incidente en $e^{iK_0 x}$. Cette onde, en effet, est d'étendue infinie, elle vient recouvrir "en avant" l'onde sphérique diffusée et c'est sans doute elle qui est responsable de l'écrasement des trajectoires de guidage le long de la direction de l'onde incidente, après la collision. C'est pour éviter cet inconvénient que la théorie habituelle ignore tout simplement la partie de l'onde e^{iK_0x} dans le calcul de la diffusion. Mais ceci est inadmissible car cette troncature arbitraire signifie en réalité que le calcul s'effectue sur une fonction qui n'est plus la bonne solution de l'équation de Schrödinger. Il semble donc que le calcul correct, utilisant la bonne solution de l'équation tout en évitant l'influence néfaste de l'onde plane incidente, exige que l'onde incidente soit non plus une onde monochromatique mais un paquet d'ondes dont on suivra l'évolution. Cette approche fera l'objet d'un prochain travail.

BIBLIOGRAPHIE

1. J. SALMON, A. GERVAT, Mécanique quantique, T. 1, p. 138-139 (Masson)

2. ERDELYI, Higher transcendental functions, T. 1 (Mac Graw Hill)

3. ABRANOWITZ STEGUN, Handbook of Mathematical functions, Dover (Gannon)

4. C.E. FROHBERG, Rev. of Mod. Physics, Oct. 1955, p. 399

5. Y. MARTIN, P. PAILLERE, J. SALMON, Diffusion d'un électron négatif par un ion en théorie du guidage, C.R. Acad. Sciences t. 284, 6 Juin 1977, Série A, p. 1417.