

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

Département de Physique



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique des Matériaux

Par

M^{elle} Leboukh imane

Sur le thème

Application du principe variationnel de Schwinger (PVS) pour l'ionisation simple de l'hydrogène par impact de particule chargée

Soutenu le /07/2019 devant le jury composé de :

M. BOUDRAA Kamel-Eddine	M.C.A	U. Saïda	Président
M. SAH LAOUI Mohammed	M.C.A	ESSA-Tlemcen	Encadreur
M. LASRI Boumediene	Professeur	U. Saïda	Co-Encadreur
M. SAHABI TOUFIK	M.C.B	U. Saïda	Examineur

Année Universitaire 2018 - 2019



Dédicaces

A maman Que Dieu ait pitié d'elle



A ma chère famille

Remerciement

Tout d'abord, je tiens à remercier le bon Dieu le tout Puissant de m'avoir donné la force et le courage de mener à bien ce modeste travail, également je remercie infiniment mes sœurs, qui m'ont encouragé et aidé à arriver à ce stade de mes études

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à notre cher professeur et encadreur M. Sahloui pour son suivi et pour son énorme soutien, qu'il n'a cessé nous prodiguer tout au long de la période du mémoire

Je tiens à remercier également mon Co-encadreur M. Lasri pour le temps qu'il m'a prodigué avec intérêt et compréhension

J'adresse aussi mes vifs remerciements aux membres du jury Mr. Boudraa Kamel-Eddine ainsi que Mr. SAHAB Toufik pour avoir bien voulu examiner et juger ce travail.

Résumé :

Ce Mémoire traite l'étude de la précision du formalisme théorique de la forme fractionnel du principe variationnel de Schwinger. Nous choisissons la réaction d'ionisation la plus simple qui est la réaction de la simple ionisation par impact d'électron, connue par la réaction $(e,2e)$, de la cible atomique la plus simple qui n'est autres que l'atome d'hydrogène. L'étude a été basée sur les calculs des sections efficaces et spécifiquement la section efficace triplements différentielle

Mots Clés : la théorie de la réaction $(e, 2e)$, section efficace, principe variationelle de Schwinger

Table des matières

Introduction générale	(01)
Bibliographie	(02)
I : Théorie de la Réaction (e, 2e)	(03)
1. Introduction	(03)
2. Terminologie et notations.....	(04)
3. Collision (e, 2e).....	(05)
4. Les expériences (e, 2e)	(07)
1. Géométrie symétrique	(08)
1. Géométries coplanaire symétrique.....	(08)
2. Géométries symétrique non coplanaire.....	(10)
2. Géométrie asymétrique.....	(12)
1. Géométrie asymétrique coplanaire.....	(12)
2. Géométrie asymétrique non coplanaire.....	(13)
Bibliographie.....	(14)
II : Section efficace d'ionisation	(16)
1. Introduction.....	(16)
2. Notion de section efficace.....	(17)
3. Section efficace triplement différentielle.....	(19)
4. Section efficaces doublement différentielle.....	(20)
5. Section efficaces simplement différentielle.....	(21)
6. Théorie.....	(22)
1. L'approximation de Born.....	(24)
Bibliographies	(28)
III : Section Efficace de la Simple Ionisation	(30)
1. Introduction.....	(30)
2. Section efficace triplement différentielle.....	(30)
3. approximation dite du cœur gelé	(32)

Bibliographie	(36)
IV : Principe Variationnel de Schwinger	(37)
1. Introduction.....	(37)
2. Principe variationelle de Schwinger.....	(39)
3. Calculs de la section efficace triplement différentielle	(43)
4. Atome avec un seul électron dans la couche externe	(45)
Bibliographies	(50)
V : Résultats et Discussion	(51)
1. Introduction.....	(51)
2. Résultats et discussions.....	(52)
Bibliographies	(61)
Conclusion	(62)

Introduction Générale.

Un formalisme théorique qui décrit avec grande précision la réaction de particule chargées avec une cible atomique ou moléculaire est actuellement très demandé, puisque des données précises sur les différentes sections efficaces sont très utiles pour différents domaines comme l'astrophysique, la physique des plasmas et la radiobiologie. Pour cette raison nous consacrons ce travail à l'étude de la précision du formalisme théorique de la forme fractionnel du principe variationnel de Schwinger.

Le principe variationnel de Schwinger [1,2] est l'une des formalismes les plus intéressantes parmi de nombreuses méthodes variationnelles proposées dans l'étude des collisions atomiques pour le calcul des amplitudes de transitions. La méthode, est basée sur l'utilisation des équations intégrales de Schwinger de la diffusion. Ces derniers profitent de propriétés remarquables [3] ce qui rend le formalisme de Schwinger particulièrement bien adaptée aux applications. Cependant, malgré les avantages de la méthode et les résultats encourageants dans les calculs des sections efficaces de l'excitation de cibles atomiques, elle n'a pas trouvé un grand intérêt chez les chercheurs dans les calculs des amplitudes de transitions, que dans un petit nombre de travaux [4-12]. La raison de ce fait provient de ce que la méthode de Schwinger introduit des éléments de matrice de transitions du second ordre en les potentiels d'interaction, analogues à ceux de la deuxième approximation de Born qui sont généralement difficiles à évaluer analytiquement et numériquement.

Il a été prouvé que l'approche variationnelle de Schwinger, représente un outil d'investigation très puissant pour étudier l'excitation électronique d'atomes par impact d'ion [7-12]. Nous dans ce travail et dans d'autres travaux prévus dans l'avenir, nous voulons étendre cette approche à l'étude des processus d'ionisation de cibles atomiques par impact de particules chargées. Nous avons commencé donc par la réaction d'ionisation la plus simple qui est la réaction de la simple ionisation par impact d'électron, connue par la réaction $(e,2e)$, de la cible atomique la plus simple qui n'est autre que l'atome d'hydrogène.

Bibliographie introduction générale

- [1] Schwinger J. *Phys. Rev.* **72**, 742 (1947).
- [2] Lippmann B. A. et Schwinger J. *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950).
- [3] Moe M et Saxon D. S. *Phys. Rev.* **111**, 950 (1958).
- [4] Gerjuoy E et Saxon D. S. *Phys. Rev.* **85**, 704 (1952).
- [5] Lucchese R. R. et McKoy V. *J. Phys. B* **12**, L421 (1979).
- [6] Lucchese R. R., Watson D. R. et McKoy V. *Phys. Rev. A* **22**, 421 (1980).
- [7] Brendlé B, Gayet R. et Woher K. *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2007 (1985).
- [8] Wohrer K *et col. J. Phys. B.* **19** 1997 (1986).
- [9] Gayet R et Bouamoud M. *Nuc Instr Met in Phys Res B* **42** 515 (1989).
- [10] Lasri B, Bouamoud M and Gayet R. *Phys. Chem News J.* **20**, 12 (2004).
- [11] Lasri B, Bouserhane A, Bouamoud M. et Gayet R., *Phys. Chem News J*, **28**, 97 (2006).
- [12] Lasri B, Bouamoud M et Gayet R. *Nuc. Inst. Meth. Phys Res B*, **251**, 62 (2006).

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

I-1 Introduction

La collision d'un électron qui vient avec une grande vitesse avec une cible atomique (ou moléculaire) peut induire une ionisation d'un ou plusieurs électrons de la cible. L'ionisation fournit une diversité de phénomènes qui peuvent dépendre du domaine dans lequel se trouvent les conditions cinématiques de l'état final. Les études sur l'ionisation par l'effet d'une radiation ionisante comme la radiation β^+ ou β^- sont actuellement très importants, pour plusieurs domaines comme la physique des plasmas, l'astrophysique et la radiobiologie.

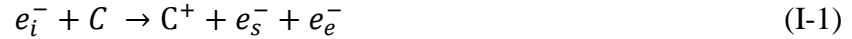
Dans le travail actuel nous nous intéressons plus particulièrement à la simple ionisation par impact d'électron. Ce processus important en physique atomique et moléculaire connue surtout par la réaction (e,2e) est induit lorsqu'un faisceau d'électron monochromatique est projetée avec une grande vitesse sur une cible atomique ou moléculaire. Le résultat de la collision est une simple ionisation d'un électron de la cible et la diffusion de faisceau électroniques incident.

La description théorique de la réaction (e,2e) est un outil indispensable pour décrire et comprendre le mécanisme de ce type de réaction. La théorie et l'expérience travail côte à côte afin de bien comprendre la dynamique de l'ionisation d'une cible atomiques. Pour cette raison il est important d'avoir une idée claire sur les conditions cinématiques dans lesquelles les expériences sont effectuées. C'est cette cause qui nous a pousser a consacré le premier chapitre pour présenter les notations et la terminologie utilisées lors des calculs théoriques et les conditions cinématiques choisies dans une expérience de collision (e,2e).

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

I-2 Terminologie et notations

La simple ionisation par impact électronique peut être représentée par l'équation suivante



où C représente la cible atomique ou moléculaire, C^+ l'ion résiduel. e_i^- , e_s^- et e_e^- représentent les électrons incident, diffusé et éjecté, respectivement. Les quantités des énergies et les vecteur quantités de mouvement de ces électrons sont notes par (E_i, \mathbf{k}_i) , (E_s, \mathbf{k}_s) et (E_e, \mathbf{k}_e) . Les deux particules diffusé et éjecté sont des électrons, donc ce sont des particules indiscernables. Par conséquent les termes diffusé et éjecté sont équivalents. Cependant, il est d'usage dans la théories de la réaction (e,2e) de designer le plus rapide comme étant le diffusé (*s pour scattered*), et le plus lent comme étant celui éjecté par la cible (*e pour ejected*).

Dans les expériences de collision (e,2e) les deux électrons sortants sont analysés en énergie et détectés en double coïncidence pour deux directions bien déterminées. Pour cette raison que ces expériences sont dites complètes, puisque tous les paramètres cinématiques sont déterminés (excepté le spin de l'électron). Dans ce type d'expériences les contraintes cinématiques sont alors la conservation de l'énergie et la conservation de la quantité de mouvement :

$$E_i = E_s + E_e + E_r + PI \quad (\text{I-2})$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_e + \mathbf{Q} \quad (\text{I-3})$$

Les énergies d'excitation de la cible dans les états initial et final sont supposées nulles, la cible étant considérée dans son état fondamental.

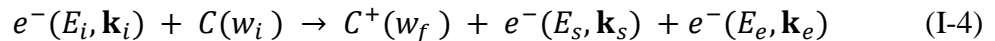
Dans l'équation (I-2) : PI représente l'énergie d'ionisation qui correspond au minimum d'énergie nécessaire pour extraire un électron de l'orbitale ionisée. E_r représente l'énergie de recul de l'ion qui est supposée ici très petite comparée aux énergies E_e et E_s des électrons éjecté et diffusé, elle peut donc être négligée dans le bilan énergétique.

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

Dans l'équation (I-3) : le vecteur \mathbf{Q} représente le moment de recul de l'ion et la grandeur vectorielle $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ est connue par moment de transfert qui n'est autre que la quantité de mouvement transférée à la cible par l'effet de la collision avec le projectile ou précisément le moment perdu par l'électron rapide (diffusé).

I-3 Collision (e,2e)

Dans ce type de collision on est en face une réaction entre un électron projectile et une cible atomique ou moléculaire. Connue par la réaction (e,2e), cette collision est caractérisée par le fait que la cinématique des particules incident, diffusé et éjecté est complètement déterminée. Dans la théorie de la réaction (e,2e), il est d'usage de considérer l'électron le plus rapide comme étant celui qui est diffusé, et l'électron le plus lent celui qui est éjecté. La réaction (e,2e), peut être résumé dans l'équation suivante :



où (E_i, \mathbf{k}_i) sont l'énergie et le vecteur moment de l'électron incident, (E_s, \mathbf{k}_s) sont l'énergie et le vecteur moment de l'électron diffusé et (E_e, \mathbf{k}_e) sont l'énergie et le vecteur moment de l'électron éjecté par la cible. Les énergies sont liées aux quantités de mouvement par les équations (données en unités atomiques (u.a)):

$$E_i = \frac{k_i^2}{2}, \quad E_s = \frac{k_s^2}{2} \quad \text{et} \quad E_e = \frac{k_e^2}{2} \quad (\text{I-5})$$

Dans l'équation (I-4) $C(w_i)$ représente la cible dans son état initial d'énergie w_i et $C^+(w_f)$ représente l'ion résiduel dans l'état d'énergie w_f .

Les expériences de la réaction (e,2e) sont basées sur la technique de coïncidence des deux électrons sortants. Cette technique est capable de connaître tous les paramètres cinématiques d'un processus en question puisqu'elle donne en même temps la mesure des énergies et des directions des deux électrons induit de la même collision. Les contraintes cinématiques de cette réaction sont données dans les équations (I-2) et (I-3).

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

La condition de conservation donnée dans l'équation (I-2) peut être réécrite sous la forme

$$E_i + w_i = E_s + E_e + w_f + E_r \quad (\text{I-6})$$

L'énergie de recul de l'ion est définie par $E_r = Q^2 / (2M_c)$ ou M_c est la masse de la cible. Remarquons que cette masse est très grande devant celles des électrons ce qui nous conduit à dire que l'énergie E_r est très petite devant les énergies E_e et E_s des électrons éjecté et diffusé. L'énergie de recul peut donc être négligée dans le bilan énergétique donné dans l'équation (I-6) :

$$E_i + w_i = E_s + E_e + w_f \quad (\text{I-7})$$

la figure I.1 montre un schéma simplifié de la réaction (e,2e) :

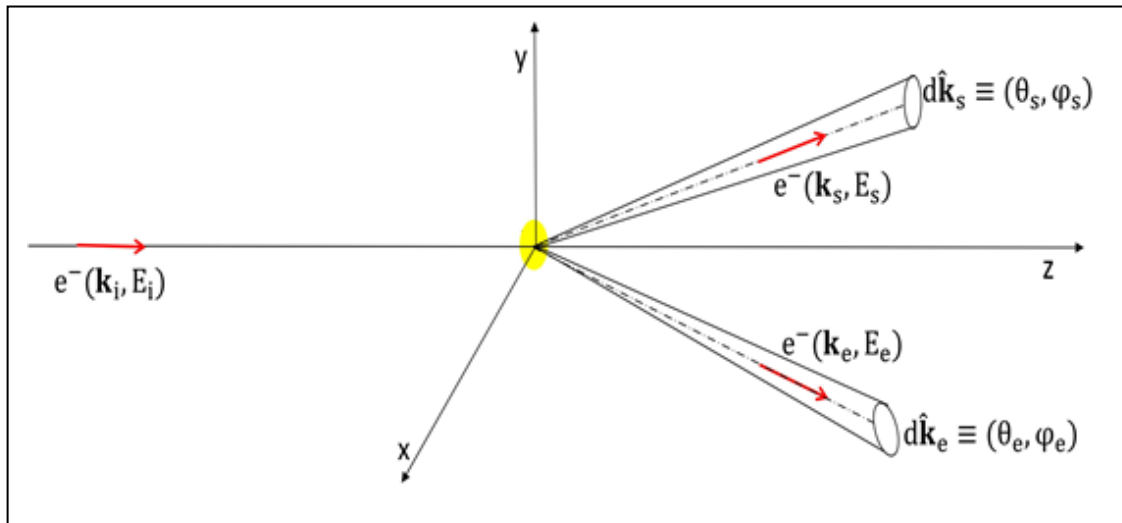


Figure I.1 – Schéma de la réaction (e,2e)

Cette figure montre un électron incident avec un moment \mathbf{k}_i et une énergie E_i . Après la collision cet électron diffuse avec une énergie E_s dans la direction \mathbf{k}_s définie par les angles polaires θ_s et φ_s . Si l'énergie transférée à la cible est supérieure que le potentiel d'ionisation $IP = w_i - w_f$, un électron, souvent connue par l'électron actif, va s'éjecté avec une énergie E_e dans la direction \mathbf{k}_e définie par les angles polaires θ_e et φ_e . Dans la figure (I.1) $d\hat{\mathbf{k}}_s = \sin(\theta_s) d\theta_s d\varphi_s$ et $d\hat{\mathbf{k}}_e = \sin(\theta_e) d\theta_e d\varphi_e$ représentent des éléments des angles solides centrés sur les directions (θ_s, φ_s) et (θ_e, φ_e) , respectivement.

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

I-4 Les expériences (e,2e)

Le principe de réaction (e,2e) consiste à ioniser par impact d'électron une cible atomique ou moléculaire qui est généralement dans son état fondamental. Il en résulte de la collision un ion résiduel et deux électrons dans la voie de sortie notés e_s et e_e . Le processus peut être schématisé comme le montre la figure suivante :

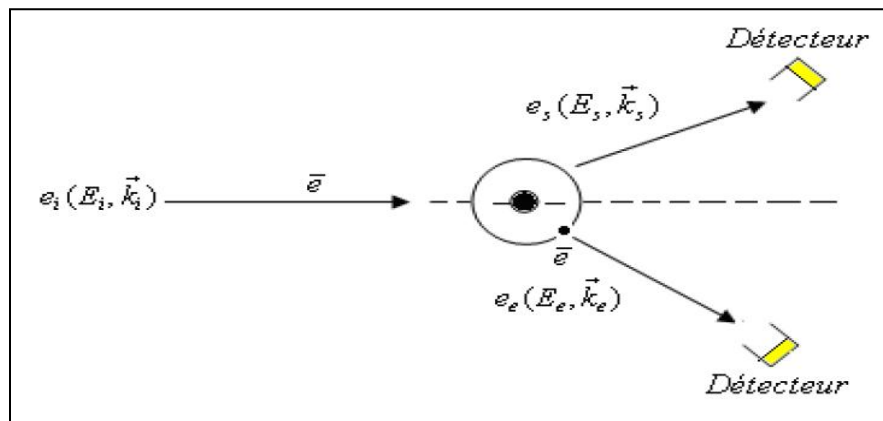


Figure I.2 : Schéma d'une collision (e, 2e)

La réaction (e,2e) dépend en général des énergies mises en jeu ainsi que de la valeur du moment de transfert. Ce type de collisions (e,2e), peuvent fournir directement des informations sur la cible. Les premières expériences ont été réalisées à partir de 1969 par Armaldi *et col* [1] et Ehrhardt *et col* [2]. Le principe de ces expériences consiste à détecter en coïncidence les deux particules issues d'une ionisation simple. Pour des conditions cinématiques particulières, ces expériences permettent d'obtenir des informations sur la densité d'impulsion de la cible. La plupart des expériences de la réaction (e,2e) sont réalisées dans des conditions géométriques coplanaires, ou les trois électrons incident diffusé et éjecté sont détectés dans le même plan. Mais on préfère actuellement de réaliser des expériences (e,2e) des conditions géométriques non coplanaires.

Dans les collisions (e,2e), dit spectroscopique, peuvent être réalisé de deux façons différentes :

- les collisions (e,2e) symétriques (Weigold et McCarty (1978)) [3] pour lesquelles l'électron diffusé à la même énergie que l'électron éjecté. Ce

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

type de collisions peut être réalisé dans des conditions géométriques coplanaire ou non coplanaire. Elles sont dites coplanaires si les vecteurs quantités de mouvement des électrons incident, éjecté et diffusé se trouvent dans le même plan. Elles sont dites non coplanaires dans le cas où l'un des vecteurs se trouve à l'extérieur de ce plan.

- les collisions (e, 2e) asymétriques coplanaires où l'électron diffusé est bien plus rapide que l'électron éjecté.

I-4-1 Géométrie symétrique

Dans cette géométrie, les deux électrons diffusé et éjecté sont détectés avec des énergies égales $E_s = E_e = \frac{E_i - PI}{2}$ ($PI = w_f - w_i$, étant l'énergie potentielle d'ionisation.).

I-4-1-1 Géométrie coplanaire symétrique

Dans ce type d'expériences, les deux électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision ($\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s$) et sont détectés dans des directions symétriques par rapport à la direction d'incidence (cf Figure I.4).

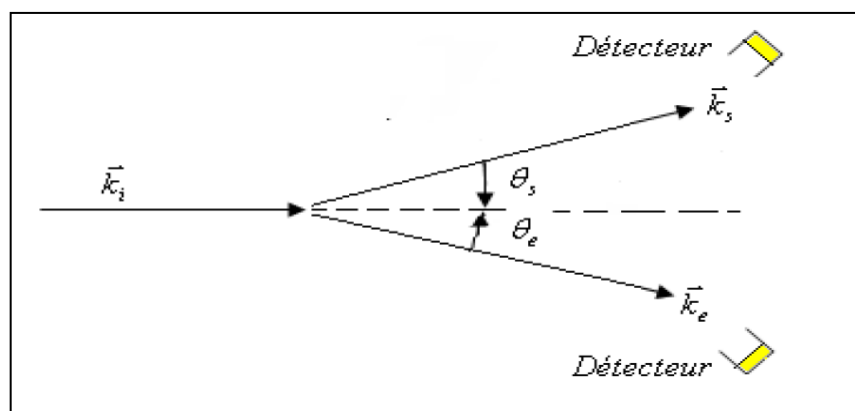


Figure I.3: Collision (e, 2e) avec une géométrie coplanaire symétrique

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

Dans les expériences effectuées dans la géométrie coplanaire symétrique, les énergies de diffusion et d'éjection sont, évidemment, égales $E_s = E_e$ et petites devant celle de l'électron incident. L'angle de diffusion θ_s varie simultanément avec l'angle d'éjection θ_e (tel que $\theta_s = \theta_e$) pour des angles azimutaux fixes : $\varphi_s = 0^\circ$, $\varphi_e = 180^\circ$. Dans ces conditions géométriques, la quantité de mouvement de l'ion résiduel $\mathbf{Q} = \mathbf{q} - \mathbf{k}_e$ (voir équation (I-3) avec le vecteur $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ est le moment de transfert) sera telle que :

$$Q = k_i - 2k_s \cos \theta_s \text{ (car } k_s = k_e \text{)} \quad (\text{I-8})$$

Cette quantité q sera nulle pour $\cos \theta_s = \frac{k_i}{2k_s}$.

La conservation de l'énergie donnée par l'équation (I-7) avec l'équation (I-5) donne

$$E_i + w_i = E_s + E_e + w_f \quad (\text{I-7})$$

$$\frac{k_i^2}{2} = \frac{k_s^2}{2} + \frac{k_e^2}{2} + PI = k_s^2 + PI \quad (\text{I-9})$$

et en supposant que le potentiel d'ionisation $PI = w_f - w_i$ est négligeable devant k_s^2 :

$$\frac{k_i^2}{2} \approx k_s^2 \text{ soit } \cos \theta_s \approx \frac{\sqrt{2}}{2} \text{ d'où } \theta_s \approx 45^\circ \quad (\text{I-13})$$

L'impulsion Q est faible pour θ_s inférieur à 60° et tend vers zéro pour $\theta_s \approx 45^\circ$. et lorsque θ_s est supérieur à 90° , Q devient plus grande et la collision est caractérisée par de grands moments de transfert q . La répulsion électrostatique entre l'électron diffusé et l'électron éjecté (interaction poste-collision) est à prendre en compte si l'angle θ_s est faible.

Cette géométrie, proposée par Armaldi et col. (1969) [1], a été largement suivie durant les années suivantes. Par exemple, Camilloni et col. (1978) [4] et Stefani et al. (1979) [5] utilisèrent des valeurs de l'angle polaire allant de 25° à 75° et une énergie incidente assez élevée (environ 2 keV) entraînant une valeur assez grande du moment de transfert (4-7 u.a.) et assez petite de la quantité de mouvement de recul (inférieur que 2 u.a.). Le mécanisme de

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

la réaction est dans ce cas bien décrit par les théories du premier ordre. Pochat et col. (1983) [6] et Tweed (1984) [7] utilisèrent de plus basses énergies (entre 100 et 200 eV) sur la cible d'hélium avec un angle polaire allant jusqu'à 117° . L'impulsion de recul est plus considérable dans ce cas. Les résultats ne sont interprétés dans ce cas que par les effets d'ordres supérieurs (Byron et col. (1983)) [8]. En effet, en plus du pic binaire pour 45° , un pic de recul se manifeste à 135° et ne s'explique que par une théorie incluant la deuxième approximation de Born. Ce résultat peut se comprendre aisément si on suppose un mécanisme de double diffusion, interprété dans le cadre de la seconde approximation de Born comme suit : dans un premier temps, l'électron incident subit une collision binaire directe avec l'électron de la cible supposé être au repos, la conservation de l'énergie et de l'impulsion indiquent alors que les électrons diffusé et éjecté émergeront chacun avec un angle $\theta = 45^\circ$; ce mécanisme réactionnel est responsable du pic observé à 45° . Le second mécanisme fait intervenir un processus collisionnel double dans lequel l'électron incident est rétro diffusé par le noyau de façon élastique vers l'arrière puis subit une autre collision avec l'électron de la cible. Les deux électrons émergeront cette fois à 45° par rapport à la direction $(-\mathbf{k}_i)$, c'est-à-dire à 135° par rapport à celle de $(+\mathbf{k}_i)$.

I-4-1-2 Géométrie symétrique non coplanaire

Bien sûr nous avons $E_s = E_e$ donc $k_s = k_e$ et dans cette symétrie non coplanaire les angles azimutaux ne sont pas nuls (cf Figure I.4). L'angle azimutal φ_e varie ($\varphi_s = 0$) alors que $\theta_e = \theta_s = 45^\circ$.

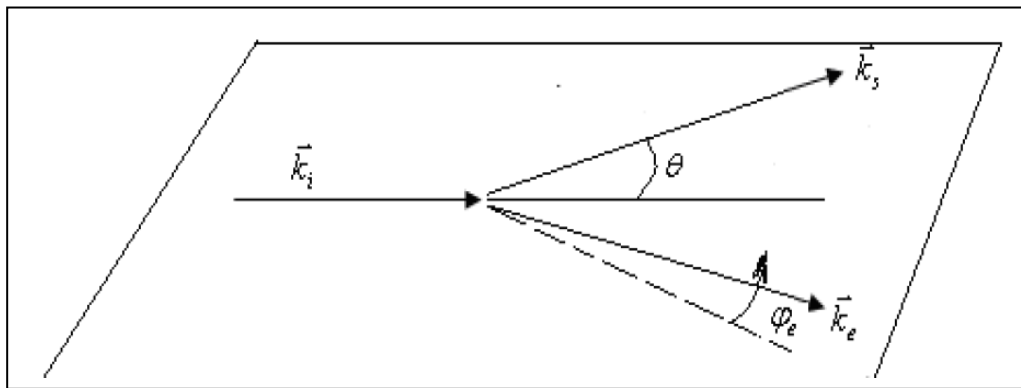


Figure I.5 : Schéma d'une collision(e, 2e) à géométrie symétrique non coplanaire

En utilisant l'équation de la conservation de la quantité de mouvement :

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_e + \mathbf{Q} \quad (\text{I-14})$$

Les composantes du moment de recul s'écrivent :

$$Q_x = -k_s \sin \theta_s [\cos \varphi_s + \cos \varphi_e] \quad (\text{I-15})$$

$$Q_y = -k_s \sin \theta_s [\sin \varphi_s + \sin \varphi_e] \quad (\text{I-16})$$

$$Q_z = k_i - 2k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-17})$$

L'expression du moment de recul dans ce type d'expériences s'écrit alors :

$$Q^2 = (k_i - 2k_s \cos \theta_s)^2 + 4k_s^2 \sin^2 \theta_s \cos^2 \left(\frac{\varphi_e}{2} \right) \quad (\text{I-18})$$

Si on suppose que $k_i^2/2 \approx k_s^2$ et sachant que $\cos 45^\circ = \sin 45^\circ = \sqrt{2}/2$ alors

$$Q^2 = 2k_s^2 \cos^2 \left(\frac{\varphi_e}{2} \right) = k_i^2 \cos^2 \left(\frac{\varphi_e}{2} \right) \quad (\text{I-19})$$

Dans ce type d'expérience φ_e varie peu autour de 180° (généralement $\pm 20^\circ$) et l'interaction électron diffusé-électron éjecté peut être négligée si $E_s \gg E_e$. Cette géométrie est caractérisée par de grands moments de transfert et est généralement utilisée dans les mesures de densité de moment électronique qu'on appelle spectroscopie de moment électronique Electron Momentum Spectroscopy (EMS) ou spectroscopie (e,2e) (Brion (1986)) [9]. Ce type d'expériences (e,2e) symétriques spectroscopiques nécessite une énergie incidente trente fois supérieure à l'énergie d'ionisation de la couche étudiée. La Section Efficace Triplement Différentielle (SETD) est déterminée en fonction de Q ou de Φ tels que $\Phi = \pi - |\varphi_s - \varphi_e|$ avec $\Phi = |\varphi_s - \varphi_e|$ étant l'angle azimutal relatif entre l'électron diffusé et l'électron éjecté. Le moment de transfert est constant (il est maximum lorsque $\theta_s = 45^\circ$).

Cette technique est un moyen très efficace pour les mesures d'énergies de liaison (ou d'ionisation) et les distributions de moments électroniques des orbitales de valence dans les atomes et les molécules (McCarthy et Weigold (1988)) [10].

La technique EMS s'avère alors en mesure de fournir des informations qui ne peuvent être obtenues par aucune autre technique car elle offre aussi un moyen de remonter à la structure

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

de la cible. En effet, la SETD est proportionnelle à la densité électronique de moment correspondant à l'orbitale à partir de laquelle l'électron a été éjecté aussi bien dans le cas atomique que moléculaire (McCarthy et col. (1976)) [11].

I-4-2 Géométrie asymétrique

Dans le cas de la géométrie asymétrique, les deux électrons sont détectés avec des énergies très différentes, un électron diffusé avec l'énergie E_s proche de l'énergie incidente E_i et un électron est éjecté avec l'énergie E_e assez faible.

Les collisions (e,2e) asymétriques dites spectroscopiques, nécessitent que la norme du vecteur moment de transfert q soit proche de celle du vecteur quantité de mouvement de l'électron éjecté k_e ($q \approx k_e$) de façon que la quantité de mouvement transférée à l'ion (Q) soit la plus petite possible. L'énergie de l'électron éjecté doit être au moins égale à $10 \times PI$ et $E_i \geq 30 \times PI$ où PI est l'énergie potentielle d'ionisation.

I-4-2-1 Géométrie asymétrique coplanaire

Dans ce type d'expériences les électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision (k_i, k_s), l'angle de diffusion restant faible ($\theta_s \leq 15^\circ$) alors que l'angle d'éjection est variable entre 0 et 360° (cf Figure I.6).

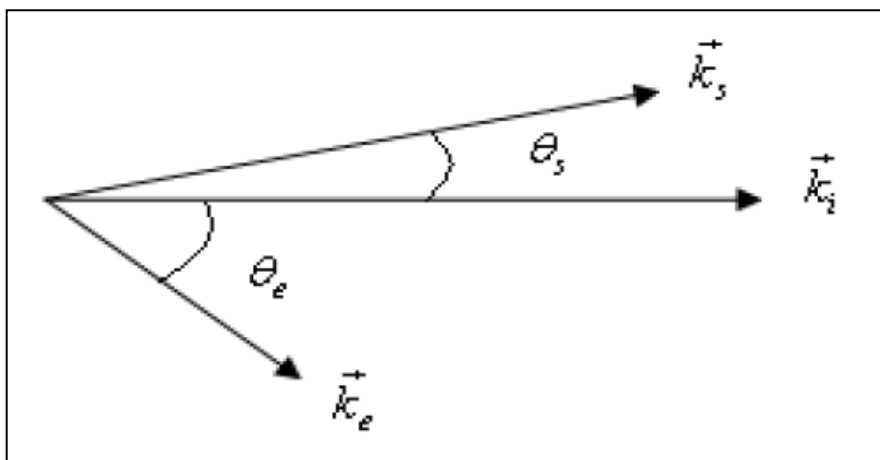


Figure I.6 : Géométrie coplanaire asymétrique

Cette cinématique, connue aussi sous le nom de géométrie d'Ehrhardt (Ehrhardt et col. (1969) [12]) décrit essentiellement les réactions du régime dipolaire caractérisées par un

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

faible moment de transfert. Elle a été réalisée à des énergies assez variées, très basses (Fournier-Lagarde et col. (1984)[13], quelques centaines d'électrons volts (Ehrhardt et col. (1986)) [14] puis jusqu'à 8 keV (Lahmam-Bennani et col.1984)[15]. Ces diverses conditions expérimentales permettent d'avoir suffisamment de données pour l'étude de la dynamique du processus d'ionisation. A partir de 1983, cette géométrie et sous certaines conditions (Lahmam-Bennani et col. (1984b, 1986))[15, 16] et (Avaldi et col. (1987))[17], s'est même révélée en mesure de donner des informations sur la structure de la cible en plus de l'étude de la dynamique de la collision et offre encore d'autres avantages tels qu'une moindre influence des effets d'échange. Ces expériences ont surtout été réalisées sur des cibles atomiques assez simples dont la structure est supposée connue tels que l'hydrogène (Weigold et col. (1979))[18], l'hélium (Ehrhardt et col. (1972))[19] et l'hydrogène moléculaire (Jung et col. (1975))[20] et (Chérid et col. (1989))[21] permettant ainsi une étude théorique plus aisée.

I-4-2-2 Géométrie asymétrique non coplanaire

Dans ce type d'expérience, les électrons diffusé et éjecté sont détectés avec des énergies différentes, les angles polaires sont également différents et ils sont détectés en dehors du plan de collision (cf Figure I.7).

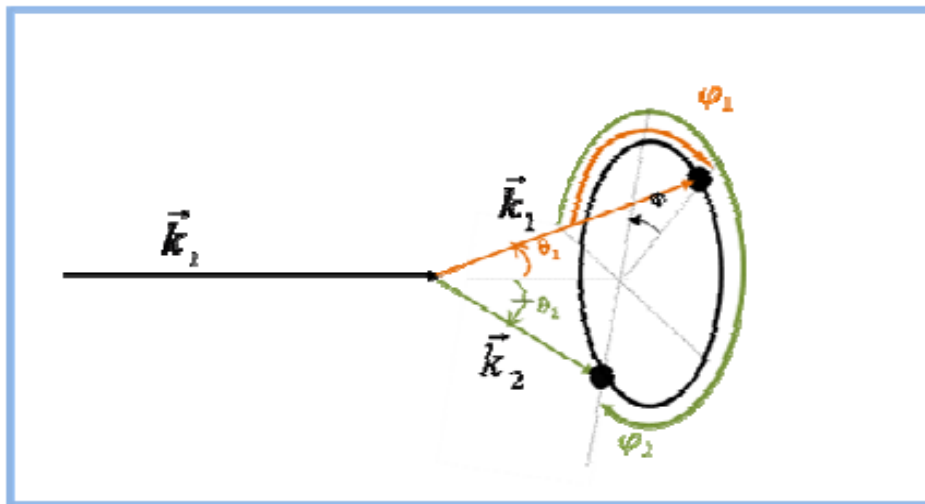


Figure I.7 : Géométrie asymétrique non coplanaire

Bibliographie du chapitre I

- [1] Araldi U Jr, Egidi A, Marconero R and Pizzella G, *Phys. Rev. Sci. Instru* **40**, 1001 (1969).
- [2] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaat T and Willmann K, *Phys. Rev. Lett* **22**, 89-82 (1969).
- [3] Weigold E and McCarthy I E, *J. Phys. B* **14**, 127 (1978)
- [4] Camilloni R, Giardini-Guidoni A, McCarthy I E and Stefani G. *Phys. Rev. A* **17** (1978).
- [5] Stefani G, Camolloni R and Giardini- Guidoni A, *J. Phys. B* **12** 2583 (1979).
- [6] Pochat A, Tweed R J, Joacahin C J, Piraux B and Byron F W Jr *J. Phys. B* **16** L775 (1983).
- [7] Tweed R J, Lecture Notes in Chemistry Vol. 35, Ed, Gianturco F A and Stefani G (Berlin: Springer) p.220 (1984).
- [8] Byron F W Jr and Joachain C J, *J. Phys. Rep.* **34C**, 233 (1983).
- [9] Brion C E *Int. J. Quantum Chem.* **2**, 1397 (1986).
- [10] McCarthy I E and Weigold E, *Rept. Prog. Phys.* **51**, 299 (1988).
- [11] McCarthy I E and Weigold E, *Phys. Rep.* **27C**, 275 (1976).
- [12] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Sshlemmer P, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1807 (1969).
- [13] Fournier-Lagarde P, J. Mazeau and A. Huetz, *J. Phys. B* **17**, L591 (1984).
- [14] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Sshlemmer P, *Z. Phys. D* **1**, 3 (1986).
- [15] Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Dal Cappello C and Rouault M and Duguet A, *J. Phys. B* **16** 2219 (1984b)

Chapitre I : Théorie de la Réaction (e,2e)

[16] Lahmam-Bennani A, Duguet A and Dal Cappello C, *J. Elect. Spec. and Rel. Phenom* **40**,141 (1986).

[17] Avaldi L, Camilloni R, Fainelli E and Stefani G, *J. Phys. B* **20**, 4163 (1987).

[18] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I, *J. Phys. B* **12**,291 (1979).

[19] Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, Schultz M and Willmann K, *J. Phys. B* **5**, 2107 (1972).

[20] Jung K, Schubert E, Paul D A L and Ehrhardt H, *J. Phys. B* **8**, 1330 (1975).

[21] Chérid M, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Zuraes R W, Lucchese R R, Dal Cappello M C and Dal Cappello C. *J. Phys. B* **22**, 3483 (1989).

Chapitre II : Section efficace d'ionisation

I-1 Introduction

Parmi les moyens les plus puissants pour l'investigation de la structure de la matière les collisions de particules chargées avec les atomes et les molécules. L'interaction de ces derniers avec une radiation forme un processus de base en physique atomique puisqu'il est de grande importance pour plusieurs domaines comme l'astrophysique, la physique des plasmas et la radiobiologie.

La grandeur essentielle pour la compréhension des processus d'ionisation est connue par la section efficace triplement différentielle. Cette grandeur est un élément de base pour les études sur le processus d'ionisation simple d'une cible atomique ou moléculaire car elle peut remonter à des informations détaillées sur ce processus. Afin de comprendre les mécanismes de la réaction $(e,2e)$ plusieurs méthodes théoriques ont été élaborées depuis les premières mesures [1,2]. Parmi les premiers travaux sur la réaction on trouve les travaux théoriques de Bethe [3] et de Massey et Mohr [4], qui ont établi les fondements du calcul de la section efficace de diffusion dans la première approximation de Born. Dans un processus d'ionisation ce sont les corrélations entre les particules et les électrons de la cible sont d'importance capitale pour la description structurelle de la cible. L'intérêt de l'étude de ces corrélations a été conforté par l'évolution des modèles théoriques et des techniques expérimentales. Dans ce chapitre nous allons parler de notion de section efficace qui est une grandeur physique importante pour la théorie des collisions atomiques et moléculaires.

Chapitre II : Section Efficace d'Ionisation

II-2 Notion de section efficace

La section efficace n'est autre que la probabilité indépendante du temps pour qu'un processus particulier s'effectue lors d'une collision. Nous pouvons définir cette probabilité en effectuant une mesure sur le nombre de particules qui ont subi une diffusion dans une direction spatiale. Le rapport entre ce nombre et le nombre de particules incidentes donne la probabilité en question. L'interaction effective entre un électron incident et les électrons de la cible atomiques ou moléculaire doit naturellement dépendre de l'énergie de l'électron incident et de l'angle de diffusion.

Supposant qu'un flux d'un nombre de N_i électrons par unité de temps et de surface, d'énergie E_i et de moment cinétique \mathbf{k}_i . Ce flux effectue une collision avec un nombre N_t de cibles atomiques. Ces derniers sont considérés au repos et très lourdes par rapport aux électrons incidents. Après la collision, un nombre de N_s électrons d'énergies entre E_s et $E_s + dE_s$ est diffusés par unité de temps dans la direction du vecteur moment \mathbf{k}_s définie par les angles polaires θ_s et φ_s . Nous pouvons donc écrire que

$$N_s dE_s d\hat{\mathbf{k}}_s = d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s) N_i N_t \quad (\text{II-1})$$

Où $d\hat{\mathbf{k}}_s$ est l'élément d'angle solide centré sur la direction du vecteur \mathbf{k}_s . La section efficace doublement différentielle de diffusion est alors définie par

$$\frac{d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)}{dE_s d\hat{\mathbf{k}}_s} = \frac{N_s}{N_i N_t} \quad (\text{II-2})$$

Lors d'une expérience de collision un détecteur est placé suivant la direction $d\hat{\mathbf{k}}_s = \sin\theta_s d\theta_s d\varphi_s$ afin de détecter l'intensité et l'énergie du flux d'électrons qui diffusent. Le nombre N_s d'électrons qui diffusent par unité de temps dans l'angle solide $d\hat{\mathbf{k}}_s$ est donc proportionnel au flux $J_{\mathbf{k}_s}$ de ces particules.

En mécanique quantique le flux de probabilité pour une fonction d'onde quelconque $\psi(\mathbf{r})$ est défini par la formule

Chapitre II : Section Efficace d'Ionisation

$$J_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{[\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\nabla\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\nabla\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})]}{2i} \quad (\text{II-3})$$

la forme asymptotique de l'onde diffusée est la suivante

$$\varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s) \frac{\exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r})}{r}, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (\text{II-4})$$

L'amplitude $f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$ est connue par l'amplitude de transition. Le courant radial sortant peut être déduit en utilisant l'équation (II-3). Pour une position \mathbf{r} très loin du centre (r très grand $r \rightarrow \infty$), nous pouvons négliger le terme d'ordre r^{-3} , nous avons donc

$$J_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}) = k_s |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (\text{II-5})$$

Le nombre d'électrons qui diffusent par unité de temps dans l'angle solide $d\hat{\mathbf{k}}_s$ et dans l'intervalle d'énergie $[E_s, E_s + dE_s]$ est ainsi proportionnel a

$$N_s \propto k_s |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2 d\hat{\mathbf{k}}_s \quad (\text{II-6})$$

La fonction d'onde de l'électron incident peut être normalisée dans le sens que la probabilité de le trouver dans un volume fini de l'espace est l'unité :

$$\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II-7})$$

En utilisant la formule (II-3), nous pouvons trouver le flux de probabilité pour la fonction d'onde $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$ qui est le suivant :

$$J_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = k_i \quad (\text{II-8})$$

Le nombre N_i des électrons incidents est ainsi proportionnel a k_i :

$$N_i \propto k_i \quad (\text{II-9})$$

En injectant les résultats (II-6) et (II-9) dans l'équation (II-2) nous pouvons trouver la section efficace doublement différentielle de la diffusion par une cible atomique ($N_t = 1$) :

$$\frac{d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)}{dE_s d\hat{\mathbf{k}}_s} = \frac{k_s}{k_i} |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2 \quad (\text{II-10})$$

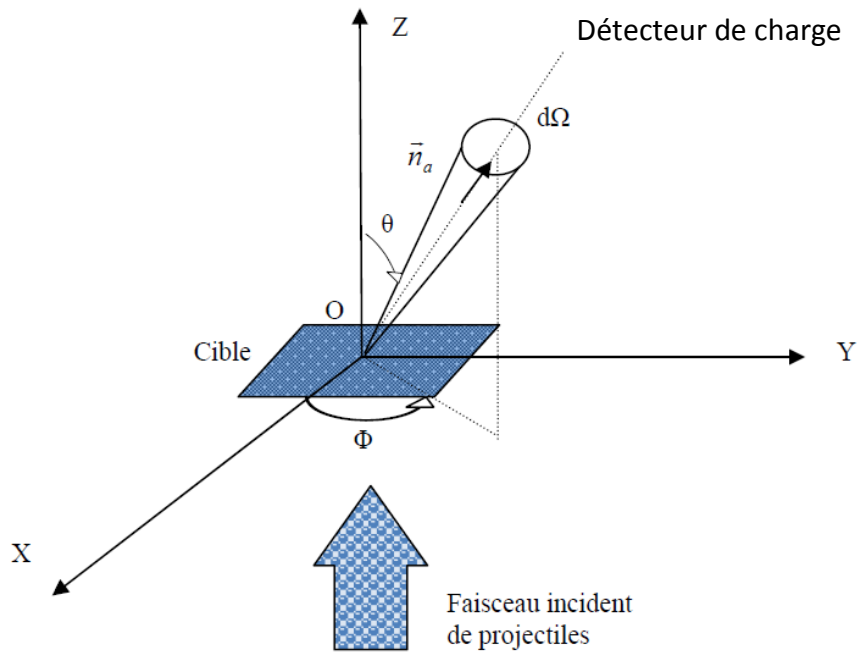


Figure II.1 : Schéma simplifié relatif à la notion de section efficace.

II-3 Section efficace triplement différentielle

La section efficace triplement différentielle est la mesure de la probabilité que dans une réaction (e,2e) un électron incident avec une énergie E_i et un moment \mathbf{k}_i excite un électron de la cible vers un état de continuum d'énergie E_e et un moment \mathbf{k}_e . L'électron incident diffuse après la collision avec une énergie E_s et un moment \mathbf{k}_s . Les directions des électrons

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

diffusé et éjecté sont $\widehat{\mathbf{k}}_s$ et $\widehat{\mathbf{k}}_e$, respectivement. Cette section efficace peut être définie par la relation :

$$\frac{d^3\sigma}{d\widehat{\mathbf{k}}_s d\widehat{\mathbf{k}}_e dE_e} = \frac{k_s k_e}{k_i} |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e)|^2 \delta(E_i - E_s - E_e + IP) \quad (\text{II-11})$$

Si c'est l'énergie d'éjection qui est détecté dans l'expérience. Ou

$$\frac{d^3\sigma}{d\widehat{\mathbf{k}}_s d\widehat{\mathbf{k}}_e dE_s} = \frac{k_s k_e}{k_i} |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e)|^2 \delta(E_i - E_s - E_e + IP) \quad (\text{II-12})$$

Si c'est l'énergie de diffusion qui est détecté dans l'expérience. Rappelons que

$$\delta(E_i - E_s - E_e + IP) = \begin{cases} 0 & \text{si } (E_i - E_s - E_e + IP) \neq 0 \\ 1 & \text{si } (E_i - E_s - E_e + IP) = 0 \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

Avec $E_i - E_s - E_e + IP = 0$ représente l'équation de conservation de l'énergie (voir chapitre I).

La section efficace triplement différentielle (SETD) c'est une grandeur mesurable par l'expérience dans une réaction (e,2e) si les deux électrons de l'état final sont analysés aussi bien suivant leurs directions que leurs énergies respectives. C'est une quantité qui fournit une description complète sur la cinématique du processus de l'ionisation puisqu'elle fait intervenir tous les paramètres cinématiques entrants en jeu, à savoir les énergies E_i , E_s , et E_e ainsi que les angles de diffusion (θ_s , φ_s) et les angles d'éjection (θ_e , φ_e). Elle est dite complètement différentielle puisqu'elle fait intervenir tous les paramètres cinématiques entrant en jeu, à savoir les énergies E_0 , E_a , E_b ainsi que les angles solides Ω_a et Ω_b . La SETD fournit le teste le plus fiable de la théorie (e,2e), ainsi elle permet de tester les différents modèles théoriques proposés. Pour s'assurer que les électrons diffusé et éjecté proviennent du même événement ionisant, dans une expérience de la simple ionisation, ces électrons doivent être détectés en coïncidence temporelle (au même instant) [5,6].

II-4 Section efficaces doublement différentielle

Chapitre II : Section Efficace d'Ionisation

Si, lors d'une expérience de réaction (e,2e), seulement un électron est détecté, et on peut mesurer son énergie suivant sa direction d'émission. Alors la section efficace doublement différentielle (SEDD) est obtenue. Celle-ci est donnée par l'équation

$$\frac{d^2\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s dE_s} = \int_0^{4\pi} d\hat{\mathbf{k}}_e \frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s d\hat{\mathbf{k}}_e dE_s} \quad (\text{II-14})$$

si on s'intéresse à l'angle et l'énergie de l'électron diffusé. L'intégration sur l'angle solide $d\hat{\mathbf{k}}_e$ signifie que durant l'expérience le détecteur mesure l'intensité (ou l'énergie E_s) d'un faisceau constitué de plusieurs électrons, de tel sorte que pour chaque électron diffusé correspond un électron éjecté dans une direction quelconque, ainsi toutes les directions sont possibles. Si c'est l'intensité du faisceau d'électrons diffusés qui est mesurée :

$$\frac{d^2\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} = \int_0^{4\pi} d\hat{\mathbf{k}}_s \frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} \quad (\text{II-15})$$

La SEDD est une grandeur est moins significative que la section efficace triplement différentielles puisqu'elle ne peut fournir que la description cinématique des particules diffusées ou éjectées après la collision.

Même si les particules sortantes sont indiscernables, on peut, dans certaines conditions cinématique affirmé si la particule détectée est diffusée ou éjectée. Les théories utilisées pour décrire les sections efficaces doublement différentielles doivent inclure tous les processus d'ionisation possibles et tous les états pouvant contribuer aux sections efficaces.

II-5 Section efficaces simplement différentielle

Si lors d'une expérience de la réaction (e,2e) un faisceau de particules diffusés ou éjectée est détectée sélectivement dans une certaine direction, avec une énergie comprise entre E_{min} et

E_{max} on parle de la section efficace simplement différentielle (SESD) en angle

$$\frac{d\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE_s \frac{d^2\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s dE_s} \quad (\text{II-16})$$

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

Si on s'intéresse à un faisceau d'électrons diffusés, et

$$\frac{d\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_e} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE_e \frac{d^2\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} \quad (\text{II-17})$$

Si on s'intéresse à un faisceau d'électrons éjectés.

La SESD quantité contient évidemment moins d'informations sur le processus d'ionisation comparée à celles donnée par les sections efficaces doublement et triplement différentielles, mais elle présente un grand intérêt dans, par exemple, l'étude des structures moléculaire. Si on s'intéresse au spectre de déperdition d'énergie, on définit une section efficace simplement différentielle en énergie.

$$\frac{d\sigma}{dE_s} = \int_0^{4\pi} d\hat{\mathbf{k}}_s \frac{d^2\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s dE_s} \quad (\text{II-18})$$

Si on s'intéresse au spectre énergétique d'un faisceau d'électrons diffusés, et

$$\frac{d\sigma}{dE_e} = \int_0^{4\pi} d\hat{\mathbf{k}}_e \frac{d^2\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} \quad (\text{II-19})$$

Si on s'intéresse au spectre énergétique d'un faisceau d'électrons éjectés.

La SESD représente un outil majeur dans l'investigation de divers champs de la physique telle que l'étude de perte d'énergie des électrons dans l'ionosphère terrestre.

II-6 Théorie

Le but de la théorie de collision est de trouver un modèle qui peut définir l'évolution du système de collision dans la région d'interaction. Les résultats donnés par ce modèle doivent être comparable avec des observations mesurées par les expériences. Pour construire ce type de modèle il faut établir un rapport entre les fonctions d'ondes qui décrivent les états initial et final du système. Les modèles théoriques simplifiés peuvent fournir une compréhension superficielle du procédé d'ionisation ou la dynamique du système de collision est régie par

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

les principes de la mécanique quantique. Le hamiltonien H est l'observable du système qui correspond à l'énergie totale pour un système conservatif.

Soit la collision d'un électron avec une cible atomique de N électrons, le hamiltonien de ce système est donnée par

$$H = H_0 + V \quad (\text{II-20})$$

Avec H_0 est un opérateur qui décrit les deux sous-systèmes charge incidente et cible atomique sans interaction. Nous avons donc $H_0 = H_t + K_0$ avec

$$K_0 = -\frac{1}{2}\nabla_0^2 \quad (\text{II-21})$$

est l'opérateur énergie cinétique de l'électron incident, et

$$H_T = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{N}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (\text{II-22})$$

est l'opérateur hamiltonien qui décrit le système de la cible sans la perturbation V provoquée par l'électron incident

$$V = \left(-\frac{N}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i|} \right) \quad (\text{II-23})$$

Avec \mathbf{r}_0 le vecteur position de l'électron incident par rapport à l'origine qui est supposé confondu avec le noyau atomique, les \mathbf{r}_i sont les vecteurs positions des électrons de la cible atomique. Cependant la cible est supposée électriquement neutre avec une charge nucléaire $Z = N$.

Nous pouvons définir la matrice de transition par la formule

$$T_{fi} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{II-24})$$

avec $|\Psi_i\rangle$ et $|\Psi_f\rangle$ les états initial et final, respectivement, du système de $(N+1)$ électrons. La matrice de transition relie la fonction d'onde qui décrit le système avant la collision à la

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

fonction d'onde qui décrit le système après la collision. La relation entre la matrice de transition et l'amplitude de transition est la suivante :

$$f_{fi} = -(2\pi)^2 T_{fi} \quad (\text{II-25})$$

Ainsi la section efficace triplement différentielle, donnée dans la relation (II-11), peut être écrite sous la forme

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{II-25})$$

Il est très compliqué de faire une étude théorique détaillée du processus d'ionisation, c'est pour cela que des méthodes approximatives sont souvent utilisées pour évaluer les éléments de la matrice T_{fi} . C'est la raison pour laquelle nous pouvons trouver plusieurs modèles dans la littérature qui décrivent la réaction (e,2e). Nous pouvons mentionner quelques uns comme le modèle une fonction de Coulomb, le modèle deux fonctions de Coulomb [5,7], le modèle 3 fonctions de Coulomb connu aussi par le modèle BBK qui a été proposé par Brauner, Briggs et Klar [8] pour la première fois pour étudier le processus d'ionisation de l'atome d'hydrogène, et le modèle *Convergent Close Coupling* (CCC) qui a été proposé par Massey et Mohr [4] qui ont donné un formalisme général pour traiter les processus d'excitation vers les états atomiques discrets. Successivement développé par différents auteurs [9-21].

II-6-1 L'approximation de Born

Dans le cas de l'ionisation d'une cible atomique, l'état propre de la cible avant la collision est gouverné par l'équation de Schrödinger

$$H_T |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (\text{II-26})$$

où E_n est l'énergie de l'état $|\phi_n\rangle$. Soit un électron incident avec un moment \mathbf{k}_i sur la cible atomique dans l'état $|\phi_i\rangle$. La fonction d'onde $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ du système de $(N+1)$ électrons doit satisfaire l'équation différentielle

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

$$H|\Psi^{(+)}\rangle = \left(\frac{k_i^2}{2} + E_i\right)|\Psi^{(+)}\rangle \quad (\text{II-26})$$

La fonction d'onde $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ satisfait la condition an limite

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle \xrightarrow{r_0 \rightarrow \infty} |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle + \text{onde sortante} \quad (\text{II-27})$$

Avec

$$|\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle|\phi_i\rangle = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})|\phi_i\rangle \quad (\text{II-28})$$

Dans l'équation (II-28) l'électron incident est considéré très rapide et donc ceci justifie qu'il peut être comme une onde plane

$$|\mathbf{k}_i\rangle = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II-29})$$

L'équation de Schrödinger (II-26) avec la condition à la limite (II-27) peut être transformée en équation intégrale, connue par l'équation de Lippmann Schwinger :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle + G_0^{(+)}V|\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{II-30})$$

ou $G_0^{(+)}$ est l'opérateur de Green. La solution formelle de l'équation (II-29) est une série en puissance de V obtenue par itération :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = \left(1 + G_0^{(+)}V + (G_0^{(+)}V)^2 + \dots + (G_0^{(+)}V)^p + \dots\right)|\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle \quad (\text{II-31})$$

Cette série est connue par la série de Born pour une fonction d'onde.

Dans cette approximation l'effet de l'électron incident est considéré comme une perturbation. Ceci implique que cet électron va diffuser avec une énergie suffisamment grande pour que l'état finale $\langle\Psi_f|$ loin de la cible peut-être écrit sous la forme de produit de deux fonction d'ondes :

$$\langle\Psi_f| = \langle\mathbf{k}_i, \phi_i| = \langle\mathbf{k}_i|\langle\phi_i| \quad (\text{II-32})$$

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

Rappelons maintenant que l'amplitude de transition est définie dans l'équation (II-24), et que en introduisant les relations données dans les équations (II-31) et (II-32) dans la relation de l'amplitude de transition on trouve le développement de Born de l'amplitude de transition

$$T_{fi}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V + V G_0^{(+)} V + V (G_0^{(+)} V)^2 + \dots + V (G_0^{(+)} V)^p + \dots | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{II-33})$$

En se limitant au premier terme du développement de cette série on définit l'amplitude de transition dans la première approximation de Born

$$T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{II-34})$$

Le modèle de la première approximation de Born est le plus simple qu'on peut utiliser pour étudier la dynamique de la réaction (e,2e). Dans ce modèle la contribution des termes en puissances supérieures à 1 pour le potentiel d'interaction sont négligés. Ce modèle est valable dans le cas où l'énergie des électrons incidents est suffisamment élevée devant les potentiels d'ionisation des orbitales de la cible.

Si on ne retient que les deux premiers termes du développement dans la série de Born, donnée dans équation (II-34), on obtient la deuxième approximation de Born. L'amplitude de transition est définie dans ce cas comme :

$$T_{fi}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) + T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \quad (\text{II-35})$$

avec le premier terme T_{fi}^{B1} est définie dans l'équation (II-34), et le deuxième terme est définie par

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V G_0^{(+)} V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{II-36})$$

Le second terme de Born T_{fi}^{B2} joue un rôle très important dans la réaction (e, 2e). Précisément dans la description des transitions vers les états intermédiaires.

Pour calculer le terme T_{fi}^{B2} il est utile de faire une résolution spectrale de l'opérateur de Green $G_0^{(+)}$, selon la relation

Chapitre II : Section Efficace d'ionisation

$$G_0^{(+)} = -\sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{4\pi^3} \int dk \frac{|k, \phi_n\rangle \langle k, \phi_n|}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \quad (\text{II-37})$$

Ici la sommation est sur tous les états discrets et continus $|\phi_n\rangle$ de la cible atomique, k_n est définie par

$$k_n^2 = k_i^2 + 2(E_i - E_n) \quad (\text{II-38})$$

La substitution de l'équation (II-37) dans l'équation (II-36) donne

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \frac{-1}{4\pi^3} \sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int d\mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k}, \phi_n \rangle \langle \mathbf{k}, \phi_n | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \quad (\text{II-39})$$

L'une des difficultés du calcul de ce terme est de faire la somme sur tous les états intermédiaires $|\phi_n\rangle$. Pour trouver une bonne approximation pour le calcul de ce terme, on attribue aux états intermédiaires une énergie moyenne \bar{E} , ainsi k_n^2 devient indépendant de n

$$\bar{k}^2 = k_i^2 + 2(E_i - \bar{E}) \quad (\text{II-40})$$

Maintenant la relation de fermeture :

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (\text{II-41})$$

peut être utilisée pour s'affranchir trivialement de la somme et trouver l'approximation suivante :

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = -\frac{1}{4\pi^3} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int d\mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - \bar{k}^2 - i\eta} \quad (\text{II-42})$$

Souvent appelée l'approximation de Born simplifier.

Bibliographie du chapitre II

- [1] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaas T and Willmann K. *Phys. Rev. Lett.* **22**, 89 (1969).
- [2] Amaldi V, Egidi A, Marconero R and Pizzella G. *Rev. Sci. Instr.* **40**, 1001 (1969).
- [3] Bethe H A. *Ann. Phys.* **5**, 325 (1930).
- [4] Massey H S W and Mohr C. *Proc. Roy. Soc. A.* **141**, 434 (1933).
- [5] Peterkop R K. *Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact*. Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder, (1977).
- [6] Weigold E and McCarthy I E. *Electron Momentum Spectroscopy*. Kluwer Academic. Plenum Publishers, New York (1999)
- [7] Peterkop R K. *Opt. Spectr.* **13**, 1220 (1961)
- [8] Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989)
- [9] Bray I, McCarthy I E, Mitroy J, and Ratnavelu K. *Phys. Rev. A.* **39**, 4998 (1989).
- [10] Bray I, Madison D H and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **41**, 5916 (1990).
- [11] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **43**, 1301 (1991).
- [12] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **43**, 5878 (1991).
- [13] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **44**, 5586 (1991).
- [14] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **44**, 7179 (1991).
- [15] Bray I and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **46**, 5916 (1992).
- [16] Bray I and Stelbovics A T. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 53 (1992).
- [17] Bray I and Stelbovics A T. *Phys. Rev. A.* **46**, 6995 (1992).

Chapitre II : Section Efficace d'Ionisation

[18] Bray I and Stelbovics A T. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 746 (1993).

[19] Bray I, Fursa D V and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **47**, 1101 (1993).

[20] Fursa D V and Bray I. *Phys. Rev. A.* **52**, 1279 (1995).

[21] Bray I Fursa D V. *Phys. Rev. A.* **54**, 2991 (1996).

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation.

III-1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter la section efficace d'ionisation d'un seul électron par impact d'électron. La structure de la cible atomique est constituée d'un noyau et de plusieurs électrons. Pour cette raison le problème de collision d'un électron avec une cible atomique est un problème de plusieurs électrons. Ce type de problème est connu par être parmi les problèmes les plus compliqués en physique. C'est pour cette raison que des approximations sont nécessaires afin de trouver une solution au problème de la réaction (e,2e).

Afin de réduire le problème de plusieurs électrons dans la réaction de la simple ionisation par impact électronique, l'approximation dite du cœur gelé (frozen-core approximation) est souvent utilisée pour réduire le problème à deux électrons. Pour calculer l'amplitude de transition l'approximation de Born est un outil très puissant.

III-2 Section efficace triplement différentielle

La section efficace triplement différentielle est définie pour un processus de l'ionisation d'une cible atomique par impact électronique par l'équation :

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\hat{k}_e d\hat{k}_s} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_e k_s}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{III-1})$$

Ou $\hat{k}_s \equiv (\theta_s, \varphi_s)$ et $\hat{k}_e \equiv (\theta_e, \varphi_e)$ sont les angles solides qui donnent les directions de diffusion et d'éjection, respectivement, et E_e représente l'énergie avec laquelle l'électron

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation

actif est éjecté. T_{fi} est un élément de la matrice de transition du système projectile-cible de l'état initial $|\Psi_i\rangle$ à l'état final $|\Psi_f\rangle$, définie par :

$$T_{fi} = \langle \Psi_f | (V + VG_0^{(+)}V) | \Psi_i \rangle \quad (\text{III-2})$$

Où $G_0^{(+)}$ est l'opérateur de Green et V l'énergie d'interaction entre la particule incidente et la cible atomique

$$V = -\frac{Z}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|r_0 - r_i|} \quad (\text{III-3})$$

Où \mathbf{r}_0 est le vecteur position de l'électron incident, \mathbf{r}_i est le vecteur position du $i^{\text{ème}}$ électron de la cible, Z le nombre atomique N est le nombre des électrons de la cible. L'état initial qui correspond à une particule incidente et N électrons liés peut être décrit par le produit :

$$|\Psi_i\rangle = \varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0)\Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{III-4})$$

Où \mathbf{k}_i est le moment de la particule incidente. L'état final est caractérisé par :

$$|\Psi_f\rangle = \varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}_0)\Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{III-5})$$

Où \mathbf{k}_s est le moment de la particule diffusée. Dans l'approximation de Born, les fonctions $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0)$ et $\varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}_0)$ sont des ondes planes

$$\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0) = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0) \quad (\text{III-6})$$

$$\varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}_0) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0) \quad (\text{III-7})$$

Pour des petites angles entre les deux directions de diffusion et d'éjection l'interaction poste-collision entre les particules diffusée et éjectée devienne importante. Alors nous avons besoin d'inclure cette interaction dans la section efficace mais sans compliquer les calculs. Une solution pour ce problème a été donnée par Kheifets et col [1] où il est démontré que l'effet le plus large de l'interaction poste-collision est contenu dans le facteur de normalisation de la fonction de Coulomb, connu par le facteur de Gamow

$$\left| D_{\xi_{se}}^{(-)} \right|^2 = \frac{2\pi\xi_{se}}{\exp(2\pi\xi_{se}) - 1} \quad (\text{III-8})$$

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation

Où $\xi_{se} = 1/q_{se}$ et $\mathbf{q}_{se} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e$. Ainsi la SETD donnée dans l'équation (III-1) doit être multipliée par le facteur de donnée dans l'équation (III-8)

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\mathbf{k}_e d\mathbf{k}_s} = \frac{1}{(2\pi)} \frac{k_e k_s}{k_i} \frac{2\pi\xi_{se}}{(\exp(2\pi\xi_{se})-1)} |T_{fi}|^2 \quad (\text{III-9})$$

III-3 approximation dite du cœur gelé

Il est difficile de traiter le problème de plusieurs particules (supérieurs que 2), pour cette raison nous allons utiliser l'approximation dite du cœur gelé (frozen-core approximation) pour réduire le problème à seulement un électron incident et un électron actif. Comme l'électron incident est considéré très rapide l'interaction de cet électron avec un électron de la cible s'effectue dans un temps très court. La distribution des autres électrons peut donc être considérée comme pratiquement inchangée durant la réaction. C'est sur cette propriété que se fonde l'approximation du cœur gelé. L'avantage de cette approximation est que le nombre d'électron apparaissant de manière explicite dans les calculs est fortement réduit; seuls les électrons actifs sont pris en compte. Nous supposons aussi que l'électron éjecté est plus lent que l'électron diffusée d'où la détection discernable des deux électrons. Avec cette supposition nous pouvons sans risque négliger l'effet d'échange entre les deux électrons sortants.

Les fonctions d'ondes données dans les équations (III-4) et (III-5) qui décrivent les états initial et final du système de collision sont donc réduites par l'approximation du cœur gelé aux formes simples suivantes :

$$\Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0)\phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \quad (\text{III-10})$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0)\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \quad (\text{III-11})$$

Où $\phi_{AO}(\mathbf{r}_1)$ est l'orbitale atomique (OA) qui va être ionisée et \mathbf{r}_1 le vecteur position de l'électron actif lequel est décrit après éjection par la fonction d'onde du continuum $\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1)$ avec \mathbf{k}_e son moment. V est aussi réduit à :

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation

$$V = -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|r_0 - r_1|} \quad (\text{III-12})$$

L'élément de matrice T_{fi} est donc réduit à la somme des deux termes de l'approximation de Born suivant :

$$T^{B1} = \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \middle| V \middle| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{III-13})$$

$$T^{B2} = \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \middle| V G_0^{(+)} V \middle| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{III-14})$$

Une résolution spectrale de l'opérateur de Green $G_0^{(+)}$ [2,3] mène à écrire le terme T^{B2} sous la forme :

$$T^{B2} = -\frac{1}{4\pi^3} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \middle| V \middle| \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \phi_n(\mathbf{r}_1) \right\rangle \\ \times \left\langle \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \phi_n(\mathbf{r}_1) \middle| V \middle| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{III-15})$$

Où $\eta \rightarrow 0^+$. La somme est sur tous les états discrets et continus $\phi_n(\mathbf{r}_1)$ de la cible atomique et k_n définie par $k_n^2 = k_i^2 - 2(E_n - E_{OA})$, E_n étant la valeur propre de l'hamiltonien atomique qui correspond au vecteur propre $|\phi_n\rangle$. En utilisant l'intégrale suivante

$$\int \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}_0 = \frac{4\pi}{q^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{III-16})$$

connue par l'intégrale de dite de Bethe [4], nous pouvons déduire les résultats suivants :

$$T^{B1} = \frac{4\pi}{q^2} \left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \middle| e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} - 1 \middle| \phi_{AO}(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (\text{III-17})$$

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_n \int d\mathbf{k} \frac{\left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \middle| e^{i\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{r}} - 1 \middle| \phi_n(\mathbf{r}) \right\rangle \left\langle \phi_n(\mathbf{r}) \middle| e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}} - 1 \middle| \phi_{AO}(\mathbf{r}) \right\rangle}{(k^2 - k_n^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{III-18})$$

Où $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ est le moment de transfert, $\mathbf{q}_i = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}$ et $\mathbf{q}_s = \mathbf{k} - \mathbf{k}_s$. Notons que pour simplifier l'écriture l'indice du vecteur position \mathbf{r}_1 est omis puisqu'il ne reste que l'intégration sur une seule variable. Utilisons maintenant dans l'équation (III-18) l'approximation de fermeture, où la différence $E_n - E_{OA}$ est remplacée par une moyenne \bar{w}

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation

sur les énergies d'excitations. Dans ce cas la relation de fermeture $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1$ peut être utilisée, et nous arrivons à écrire le résultat suivant :

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_n \int d\mathbf{k} \frac{\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | (e^{i\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{r}} - 1)(e^{i\mathbf{q}_I \cdot \mathbf{r}} - 1) | \phi_{AO}(\mathbf{r}) \rangle}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{III-19})$$

L'état du continuum $\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r})$ de l'électron éjecté est décrit ici par la fonction d'onde de Coulomb qui satisfait la condition aux limites sortantes :

$$\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{D_{\xi_e}^{(-)}}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}) {}_1F_1[i\xi_e; 1; -i(\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r} + k_e r)] \quad (\text{III-20})$$

Avec $D_{\xi_e}^{(-)} = e^{-\frac{\pi\xi_e}{2}} \Gamma(1 - i\xi_e)$ $i\xi_e = -Z_{eff}/k_e$ est le paramètre de Sommerfeld où Z_{eff} représente la charge ionique effective. La fonction d'onde qui décrit une orbitale atomique peut être développée sur une base de type-Slater

$$\phi_{AO}(\mathbf{r}) = \sum_{v=1}^{N_{OA}} w_v R_{n_v}^{\alpha_v}(r) Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{III-21})$$

Où les w_v sont les coefficients de contribution de chaque élément de base, N_{OA} le nombre des éléments de base nécessaire pour décrire l'orbitale atomique $\phi_{AO}(\mathbf{r})$, $Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}})$ est l'harmonique sphérique normalisée et

$$R_{n_v}^{\alpha_v}(r) = \frac{(2\alpha_v)^{n_v+1/2}}{\sqrt{(2n_v)!}} r^{n_v-1} e^{-\alpha_v r} \quad (\text{III-22})$$

avec α_v un paramètre variationnel. En injectant dans les équations (III-17) et (III-19) les fonctions d'ondes données dans les équations (III-20) et (III-21) nous pouvons écrire T^{B1} et T^{B2} sous les formes :

$$T^{B1} = \frac{4\pi}{q^2} \sum_{v=1}^{N_{OA}} w_v [F_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}) - P_{n_v l_v m_v}] \quad (\text{III-23})$$

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_{v=1}^{N_{OA}} \int d\mathbf{k} \frac{F_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}) + P_{n_v l_v m_v} - H_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i)}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{III-24})$$

Ou

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation

$$F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}) = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \left| e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right| R_{n_\nu}^{\alpha_\nu}(r) Y_{l_\nu}^{m_\nu}(\hat{\mathbf{r}}) \right\rangle \quad (\text{III-25})$$

$$P_{n_\nu l_\nu m_\nu} = \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \left| R_{n_\nu}^{\alpha_\nu}(r) Y_{l_\nu}^{m_\nu}(\hat{\mathbf{r}}) \right\rangle \quad (\text{III-26})$$

et

$$H_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i) = F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_s) + F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_i) \quad (\text{III-27})$$

Les formes analytiques des fonctions d'ondes des états initial et final choisis ici nous permettent de résoudre analytiquement les intégrales tridimensionnelles qui figurent dans les équations (III-25), (III-26) et (III-27) [5-8].

Le deuxième terme de l'approximation de Born T^{B2} donnée dans l'équation (III-24) contient une intégrale tridimensionnelle singulière souvent difficile à résoudre numériquement. Ce terme peut être résolu numériquement en utilisant l'approche donnée par Sahlaoui et Bouamoud [7] et ou celle donnée par Marchalant et col [9]. L'intégrale tridimensionnelle singulière suivante :

$$I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s; -i\bar{k}) = \int \frac{dk}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta)q_i^2 q_s^2} \quad (\text{III-28})$$

Qui figure dans l'équation (III-24) peut être déduit à partir du travail effectué par Byron et col [10], qui peut être exactement évaluée en utilisant la méthode des résidus de Lewis [11].

Chapitre III : Section Efficace de la Simple Ionisation

Bibliographie du chapitre III

- [1] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 41, 145201. (2008).
- [2] Landau L et Lifchitz E. Mécanique Quantique vol III. Editions Mir. (1967).
- [3] Mc Dowell M R C and Coleman J P. Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions, North-Holland Publishing Company, Amsterdam. (1970).
- [4] Bethe H A. Ann. Phys. 5, 325 (1930).
- [5] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 88, 905–910 (2010)
- [6] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 89, 723–727(2011).
- [7] Sahlaoui M and Bouamoud M. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** 085201 (2012).
- [8] Sahlaoui M, Lasri B and Bouamoud M. Can. J. Phys. **92** 136–140 (2014)
- [9] Marchalant J P, Whelan C T and Walters H R J. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 31, 1141–1178 (1998).
- [10] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 18, 3203 (1985).
- [11] Lewis R R Jr. Phys. Rev. 102, 537–543 (1956).

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger.

IV-1 Introduction

Un principe variationnel est une certaine expression algébrique stationnaire qui peut définir des solutions inconnues d'un problème en termes de certaines quantités inconnues. Si des solutions exactes sont employées à la place des quantités inconnues, le principe variationnel devient une identité. Employer des approximations pour ces quantités inconnues mène à un résultat précis. Si les approximations choisies sont prises avec des petites erreurs, le principe variationnel mène à un résultat avec une erreur de second ordre par rapport aux erreurs des approximations choisies.

Un principe variationnel est extrêmement puissant pour l'amélioration successive de la solution d'un problème quand la solution approximative est connue. Un principe variationnel peut être formé pour la solution d'un problème algébrique, pour trouver un inverse, pour résoudre un problème de valeur propre en mécanique quantique, ou pour résoudre une équation intégrale.

Pour mieux faire comprendre au lecteur la puissance d'une formule variationnelle nous illustrons d'abord deux problèmes algébriques simples : le calcul de l'inverse d'un nombre et la solution d'une équation algébrique linéaire.

Un principe variationnel pour le calcul de l'inverse d'un nombre X peut être écrit sous la forme de l'identité suivante :

$$\frac{1}{x} = \left(\frac{1}{x}\right)_{t_1} + \left(\frac{1}{x}\right)_{t_2} - \left(\frac{1}{x}\right)_{t_1} x \left(\frac{1}{x}\right)_{t_2} + \Delta_1 x \Delta_2 \quad (\text{IV-1})$$

Ou

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

$$\Delta_1 = \frac{1}{x} - \left(\frac{1}{x}\right)_{t_1} \quad (\text{IV-2})$$

$$\Delta_2 = \frac{1}{x} - \left(\frac{1}{x}\right)_{t_2} \quad (\text{IV-3})$$

qui est valable pour des nombres arbitraires $(x^{-1})_{t_1}$ et $(x^{-1})_{t_2}$. Si nous choisissons $(x^{-1})_{t_1}$ et $(x^{-1})_{t_2}$ comme deux approximations pour le nombre x^{-1} , le dernier terme dans l'équation (IV-1) est de second ordre pour les différences Δ_1 et Δ_2 . En négligeant ce dernier terme nous pouvons écrire le principe variationnel de l'inverse d'un nombre sous la forme :

$$\left[\frac{1}{x}\right] = \left(\frac{1}{x}\right)_{t_1} + \left(\frac{1}{x}\right)_{t_2} - \left(\frac{1}{x}\right)_{t_1} x \left(\frac{1}{x}\right)_{t_2} \quad (\text{IV-4})$$

Les crochets dans cette expression indiquent qu'elle est stationnaire. Si nous choisissons $(x^{-1})_{t_1} = (x^{-1})_{t_2} = x^{-1}$ cette expression devienne une identité. La propriété de stationnarité de l'expression (IV-4) peut être vérifiée en considérant les estimations indépendantes $(x^{-1})_{t_1} = (x^{-1})_E + \Delta_1$ et $(x^{-1})_{t_2} = (x^{-1})_E + \Delta_2$, où $(x^{-1})_E$ est la valeur exacte et Δ_1 et Δ_2 sont deux petits écarts par rapport à la valeur exacte. Par ces estimations d'essai nous retrouvons

$$\left[\frac{1}{x}\right] = \left(\frac{1}{x}\right)_E - \Delta_1 x \Delta_2 \quad (\text{IV-5})$$

l'écart dans (IV-5) est quadratique pour les écarts Δ , donc plus ces écarts sont petits plus l'expression (IV-5) converge rapidement vers la valeur exacte. L'équation (IV-4) est le principe variationnel désiré, qui est basé sur l'identité (IV-1). Si par exemple nous considérons l'inverse du nombre $x = 3$, c'est-à-dire $x^{-1} = 0.33333333 \dots$, l'injection de l'estimation approximative $(x^{-1})_{t_1} = (x^{-1})_{t_2} = 0.3$ dans l'équation (IV-4) mène au résultat $[x^{-1}] = 0.33$. Si ce résultat est injecté une autre fois dans l'équation (IV-4) pour les deux estimations $(x^{-1})_{t_1}$ et $(x^{-1})_{t_2}$ mène à un résultat plus amélioré $[x^{-1}] = 0.3333$. Cette procédure peut être continuée indéfiniment jusqu'à ce que le résultat exact ou un résultat avec une précision désirée soit obtenu. Une réduction quadratique d'une petite erreur sur le résultat est effectuée après chaque itération.

Soit maintenant la solution x de l'équation algébrique

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

$$A x = B \quad (IV-6)$$

qui peut être exprimée sous forme du principe variationnel suivant

$$[x] = x_t + (A^{-1})_t B - (A^{-1})_t A x_t \quad (IV-7)$$

où x_t et $(A^{-1})_t$ sont des estimations d'essai. L'exemple avec $A = 3$ et $B = 2$ mène au résultat exact $x = 0.6666666 \dots$ qui peut être utilisé pour illustrer l'avantage d'employer le principe variationnel. Quand nous utilisons dans le principe variationnel (IV-7) les estimations $x_t = 0.6$ et $(A^{-1})_t = 0.3$ nous trouvons le résultat amélioré $x = 0.66$. Une estimation améliorée de $(A^{-1})_t$ peut-être trouvée de l'équation $A^{-1} = x/B$ ou par l'utilisation du principe variationnel (IV-4). Dans l'un ou l'autre cas, l'utilisation de ces résultats améliorés mène à une évaluation précise de x .

IV-2 Principe variationnelle de Schwinger

Le principe variationnel de Schwinger a été originalement proposé pour le calcul du déphasage de diffusion. Cependant, il peut être modifié pour calculer les éléments de la matrice de transition. Considérons une collision élastique ou inélastique, l'hamiltonien du système s'écrit sous la forme

$$H = H_0 + V \quad (IV-8)$$

où H_0 décrit les deux systèmes indépendants qui entrent en collision et V l'énergie d'interaction. L'élément de la matrice de transition est défini par

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \quad (IV-9)$$

Où $|\Phi_i\rangle$ et $\langle \Phi_f|$ sont les ondes libres initiale et finale tandis que $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ et $\langle \Psi_f^{(-)}|$ sont les

deux solutions des équations de Lippmann-Schwinger suivantes :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\Phi_i\rangle + G_0^{(+)} V |\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (IV-10)$$

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

$$\langle \Psi_f^{(-)} | = \langle \Phi_i | + \langle \Psi_f^{(-)} | V G_0^{(+)} \quad (\text{IV-11})$$

Avec

$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \quad (\text{IV-12})$$

les deux opérateurs de Green associés à l'hamiltonien H_0 . Les expressions intégrales données dans l'équation (IV-11) pour l'amplitude de transition sont exactes pour les solutions $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ et $\langle \Psi_f^{(-)} |$ exactes pour l'équation de Schrödinger. Cependant, ces expressions ne sont pas stationnaires pour des solutions approchées. Plusieurs expressions stationnaires ont été proposées pour calculer la matrice de transition, parmi elles on trouve le principe variationnel de Schwinger définie par l'identité suivante :

$$\begin{aligned} T_{fi} = & \langle \Psi_f^{(-)A} | V | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+A)} \rangle - \langle \Psi_f^{(-)A} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+A)} \rangle \\ & + \langle \Psi_f^{(-)A} - \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+A)} - \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (\text{IV-13}) \end{aligned}$$

Où $|\Psi_i^{(+A)}\rangle$ et $\langle \Psi_f^{(-)A} |$ sont de approximations pour les solutions exacts $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ et $\langle \Psi_f^{(-)} |$, respectivement. L'équation (IV-13) est une identité indépendante de $|\Psi_i^{(+A)}\rangle$ et $\langle \Psi_f^{(-)A} |$. Cependant, si ces dernières sont des bonnes approximations pour les fonctions d'ondes exactes, le dernier terme dans l'équation (IV-13) est de second ordre pour l'écart par rapport a la valeur exacte. Gardons seulement les termes de premier ordre de l'écart dans l'équation (IV-13) et supprimons l'indice A des fonctions d'ondes approximatives. Nous obtenons la forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger :

$$[T_{fi}] = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle - \langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (\text{IV-14})$$

Ce sont les fonctions d'ondes d'essai approximatives qui sont employées dans ce principe variationnel. Les équations (IV-13) et (IV-14) devraient être comparées aux équations (IV-1) et (IV-4), respectivement. Il y a trois termes dans l'équation (IV-14), si des fonctions

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

d'ondes exactes sont employées dans cette équation, chacun de ces trois termes devient égal à la valeur exacte de la matrice de transition T_{fi} et l'équation (IV-14) devient une identité.

Vérifions maintenant que la forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger donnée dans l'équation (IV-14) est stationnaire, c.-à-d la différentiation $\delta[T_{fi}] = 0$, pour des variations arbitraires du bra $\langle \Psi_f^{(-)} |$ et du ket $|\Psi_i^{(+)}\rangle$, autour de leurs valeurs exactes. Variions d'abord le bra $\langle \Psi_f^{(-)} |$ de la quantité $\langle \delta \Psi_f^{(-)} |$, nous trouvons :

$$\delta[T_{fi}] = \langle \delta \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle - \langle \delta \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (\text{IV-15})$$

Cependant, la fonction d'onde $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ satisfait l'équation de Lippmann-Schwinger (IV-10), d'où $\delta[T_{fi}] = 0$. Similairement, en variant le ket $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ autour de sa valeur exacte, nous trouvons que $\delta[T_{fi}] = 0$ est vérifiée si le bra $\langle \Psi_f^{(-)} |$ satisfait l'équation de Lippmann-Schwinger (IV-11). Nous pouvons immédiatement tirer profit du principe variationnel (IV-14) en choisissant les fonctions d'essais

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle \rightarrow A |\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{IV-16})$$

$$\langle \Psi_f^{(-)} | \rightarrow \langle \Psi_f^{(-)} | B \quad (\text{IV-17})$$

où A et B sont des paramètres variationnels. Insérons les expressions (IV-16) et (IV-17) dans la forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger donnée dans l'équation (IV-14) nous trouvons la formule :

$$[T_{fi}] = B \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle + A \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle - AB \langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (\text{IV-18})$$

Variions maintenant A et B respectivement, c.-à-d.

$$\frac{\partial}{\partial A} [T_{fi}] = 0 \quad (\text{IV-19})$$

$$\frac{\partial}{\partial B} [T_{fi}] = 0 \quad (\text{IV-20})$$

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

nous obtenons les résultats

$$B = \frac{\langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(-)} \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle} \quad (\text{IV-21})$$

$$A = \frac{\langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle} \quad (\text{IV-21})$$

En remplaçant ces quantités dans l'expression stationnaire (IV-14), nous obtenons la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger

$$[T_{fi}] = \frac{\langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(-)} \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle} \quad (\text{IV-22})$$

Notons que ce principe variationnel, de même que la forme bilinéaire (IV-14), n'exige pas aux fonctions d'ondes de satisfaire les conditions aux limites, ainsi la forme fractionnelle (IV-22) est indépendante de la normalisation adoptée pour les fonctions d'ondes initiale et finale.

Comme illustration de la forme fractionnelle du principe variationnel de Schwinger, remplaçons dans l'expression (IV-22) les fonctions d'ondes exactes inconnues $\langle \Psi_f^{(-)} |$ et $| \Psi_i^{(+)} \rangle$ par les fonctions d'ondes de l'approximation de Born correspondantes $\langle \Phi_f |$ et $| \Phi_i \rangle$. Avec ce simple choix des fonctions d'essai, l'équation (IV-22) prend la forme

$$[T_{fi}] = T^{B1} \left(1 - \frac{T^{B1}}{T^{B1}} \right)^{-1} \quad (\text{IV-23})$$

Avec

$$T^{B1} = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle \quad (\text{IV-24})$$

$$T^{B1} = \langle \Phi_f | (V G_0^{(+)} V) | \Phi_i \rangle \quad (\text{IV-25})$$

Qui sont, respectivement, le premier et le deuxième terme de l'approximation de Born.

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

Si la quantité $\frac{T^{B1}}{T^{B1}}$ est petite, nous pouvons développer l'expression (IV-23) et obtenir le résultats

$$[T_{fi}] = T^{B1} + T^{B2} + \dots \quad (\text{IV-26})$$

qui est en accord avec la série de Born d'ordre 2 si on néglige les termes d'ordres supérieurs.

Cependant, nous pouvons remarquer que l'expression (IV-26), qui est basée sur le principe variationnel, avec seulement deux termes de l'approximation de Born donne un résultats plus précis que la deuxième approximation de Born.

IV-3 Calculs de la section efficace triplement différentielle

Lors du processus de l'ionisation d'une cible atomique par impact électronique la SETD est donnée par l'équation :

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\hat{k}_e d\hat{k}_s} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_e k_s}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{IV-27})$$

Où $\hat{k}_s \equiv (\theta_s, \varphi_s)$ et $\hat{k}_e \equiv (\theta_e, \varphi_e)$ sont les angles solides qui donnent les directions de diffusion et d'éjection, respectivement, et E_e l'énergie avec laquelle l'électron actif est éjecté. T_{fi} est un élément de matrice qui d'écrit la transition du système projectile-cible de l'état initial $|\Psi_i\rangle$ à l'état final $|\Psi_f\rangle$, définie par :

$$T_{fi} = \langle \Psi_f | (V + V G_0^{(+)} V) | \Psi_i \rangle \quad (\text{IV-28})$$

Où $G_0^{(+)}$ est l'opérateur de Green et V l'énergie d'interaction entre la particule incidente et la cible atomique

$$V = -\frac{Z}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|r_0 - r_i|} \quad (\text{IV-29})$$

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

Où \mathbf{r}_0 est le vecteur position de l'électron incident, \mathbf{r}_i est le vecteur position du $i^{\text{ème}}$ électron de la cible, Z le nombre atomique N est le nombre des électrons de la cible. L'état initial qui correspond à une particule incidente et N électrons liés est décrit par le produit :

$$|\Psi_i\rangle = \varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0)\Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{IV-30})$$

Où \mathbf{k}_i est le moment de la particule incidente. L'état final est caractérisé par :

$$|\Psi_f\rangle = \varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}_0)\Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{IV-31})$$

Où \mathbf{k}_s est le moment de la particule diffusée. Dans l'approximation de Born, les fonctions $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0)$ et $\varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}_0)$ sont approximées par des ondes planes

$$\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0) = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0) \quad (\text{IV-32})$$

$$\varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}_0) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0) \quad (\text{IV-33})$$

Nous avons besoin d'inclure dans la section efficace l'interaction poste-collision entre les particules diffusée et éjectée sans compliquer les calculs. Une solution a été donnée par Kheifets et col [1] où ils ont démontrés que la majorité de l'effet de l'interaction poste-collision est contenu dans le facteur de normalisation de la fonction de Coulomb, connue par le facteur de Gamow

$$\left|D_{\xi_{se}}^{(-)}\right|^2 = \frac{2\pi\xi_{se}}{e^{2\pi\xi_{se}-1}} \quad (\text{IV-34})$$

Où $\xi_{se} = 1/q_{se}$ et $\mathbf{q}_{se} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e$ est le moment de transfert. Ainsi pour prendre en compte l'interaction poste-collision, la SETD donnée dans l'équation (IV-27) doit être multipliée par le facteur de Gamow

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\hat{\mathbf{k}}_e d\hat{\mathbf{k}}_s} = \frac{1}{(2\pi)} \frac{k_e k_s}{k_i} \frac{\xi_{se}}{(e^{2\pi\xi_{se}-1})} |T_{fi}|^2 \quad (\text{IV-35})$$

Il est difficile de traiter le problème de N électrons, pour cette raison nous allons utiliser l'approximation dite du cœur gelé (frozen-core approximation) pour réduire le problème à un ou deux électrons actif. Comme l'électron incident est considéré très rapide l'interaction de cet électron avec un électron de la cible s'effectue dans un temps très court. La distribution

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

des autres électrons peut donc être considérée comme pratiquement inchangée (gelé) durant l'interaction. C'est sur cette propriété que se fonde l'approximation du cœur gelé qui considère comme particules actives que les électrons qui occupent l'orbitale qui va être ionisée. L'avantage de cette approximation est que le nombre d'électron apparaissant de manière explicite dans les calculs se trouve fortement réduit; seuls les électrons actifs sont pris en compte.

Il y a deux manières de considérer les électrons actifs durant la réaction (e,2e). Nous pouvons considérer tous simplement que l'électron ionisé est le seul électron actif. Mais nous pouvons aussi, dans le cas où l'orbitale qui va être ionisée contient deux électrons, considéré les deux électrons comme actifs puisque ces deux particules sont indiscernables.

Dans ce qui va suivre nous allons présenter un modèle où nous considérons dans l'approximation du cœur gelé que l'orbitale atomique qui va être ionisée contient un seul électron actif. Ce modèle est bien adapté aux cibles atomiques qui ne contiennent qu'un seul électron dans la couche externe. Nous supposons aussi que l'électron éjecté est plus lent que l'électron diffusée d'où la détection discernable des deux électrons. Avec cette supposition nous pouvons sans risque négliger l'effet d'échange entre les deux électrons sortants.

IV-4 Atome avec un seul électron dans la couche externe :

Dans le cas où l'orbitale externe ne contient qu'un seul électron, les fonctions d'ondes données dans les équations (IV-30) et (IV-31), qui décrivent les états initial et final du système de collision, se réduits par l'approximation du cœur gelé aux formes simples suivantes :

$$\Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0)\phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-36})$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0)\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-37})$$

Où $\phi_{AO}(\mathbf{r}_1)$ est l'orbitale atomique (OA) qui va être ionisée et \mathbf{r}_1 est le vecteur position de l'électron actif lequel est décrit après éjection par la fonction d'onde $\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1)$ avec k_e son moment. V est aussi réduit à :

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

$$V = -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|r_0 - r_1|} \quad (\text{IV-38})$$

L'élément de matrice T_{fi} définie précédemment dans l'équation (IV-23) par la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger est fonction des deux termes suivant :

$$T^{B1} = \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \middle| V \middle| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{IV-39})$$

$$T^{B2} = \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \middle| V G_0^{(+)} V \middle| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{IV-40})$$

Une résolution spectrale de l'opérateur de Green $G_0^{(+)}$ mène à écrire le terme T^{B2} sous la forme :

$$T^{B2} = -\frac{1}{4\pi^3} \sum_n \int \frac{dK}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \middle| V \middle| \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \phi_n(\mathbf{r}_1) \right\rangle \\ \times \left\langle \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \phi_n(\mathbf{r}_1) \middle| V \middle| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{IV-41})$$

Où $\eta \rightarrow 0^+$. La somme est sur tous les états discrets et continus $\phi_n(\mathbf{r}_1)$ de la cible atomique et k_n est définie par $k_n^2 = k_i^2 - 2(E_n - E_{OA})$, E_n étant la valeur propre de l'hamiltonien atomique qui correspond à la fonction propre $\phi_n(\mathbf{r}_1)$. En utilisant l'intégrale dite de Bethe [2]

$$\int \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|} d\mathbf{r}_0 = \frac{4\pi}{q^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-42})$$

Nous pouvons déduire les résultats suivants :

$$T^{B1} = \frac{4\pi}{q^2} \left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \middle| e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} - 1 \middle| \phi_{AO}(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (\text{IV-43})$$

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_n \int d\mathbf{k} \frac{\left\langle \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \middle| e^{i\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{r}} - 1 \middle| \phi_n(\mathbf{r}) \right\rangle \left\langle \phi_n(\mathbf{r}) \middle| e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}} - 1 \middle| \phi_{AO}(\mathbf{r}) \right\rangle}{(k^2 - k_n^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-44})$$

Où $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ est le moment de transfert, $\mathbf{q}_i = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}$ et $\mathbf{q}_s = \mathbf{k} - \mathbf{k}_s$. Notons que pour simplifier l'écriture l'indice du vecteur position est omis puisqu'il ne reste que l'intégration sur une seule variable. Utilisons maintenant l'approximation de fermeture dans l'équation (IV-44), où la différence d'énergies $E_n - E_{OA}$ est remplée par une moyenne \bar{w} sur les

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

énergies d'excitations. Dans ce cas la relation de fermeture $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1$ peut être utilisée, nous arrivons à déduire le résultat suivant :

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_n \int d\mathbf{k} \frac{\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{r}} - 1 | e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}} - 1 | \phi_{AO}(\mathbf{r}) \rangle}{(k^2 - k_n^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-45})$$

L'état du continuum $\psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r})$ de l'électron éjecté est d'écrit ici par la fonction d'onde de Coulomb qui satisfait la condition aux limites sortantes :

$$\psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} D_{\xi_{se}}^{(-)} e^{i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}} {}_1F_1[i\xi_e; 1; -i(k_e r + \mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r})] \quad (\text{IV-46})$$

Avec $D_{\xi_e}^{(-)} = e^{-\frac{\pi\xi_e}{2}} \Gamma(1 - i\xi_e)$, $\xi_e = -Z_{eff}/k_e$ est le paramètre de Sommerfeld où Z_{eff} est la charge ionique effective. Nous supposons que la fonction d'onde qui décrit l'électron actif peut être développée sur une base de fonctions de type-Slater

$$\phi_{AO}(\mathbf{r}) = \sum_{v=1}^{N_{OA}} w_v \phi_{n_v l_v m_v}^{\alpha_v}(\mathbf{r}) \quad (\text{IV-47})$$

Où les w_v sont des coefficients qui indiquent la magnitude de contribution de chaque élément de base $\phi_{n_v l_v m_v}^{\alpha_v}(\mathbf{r})$ et N_{OA} le nombre des éléments de base nécessaire pour décrire l'orbitale atomique $\phi_{AO}(\mathbf{r})$. Un élément de base de type Slater prend la forme suivante :

$$\phi_{AO}(\mathbf{r}) = R_{n_v}^{\alpha_v}(r) Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{IV-48})$$

Avec

$$R_{n_v}^{\alpha_v}(r) = \frac{(2\alpha_v)^{n_v+0.5}}{\sqrt{(2n_v)!}} r^{n_v-1} e^{-\alpha_v r} \quad (\text{IV-49})$$

ou α_v est un paramètre variationnel, n_v un entier positif et $Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}})$ est l'harmonique sphérique normalisée.

En injectant dans les équations (IV-43) et (IV-45) les fonctions d'ondes données dans les équations (IV-46) et (IV-47) nous pouvons écrire T^{B1} et T^{B2} sous les formes :

$$T^{B1} = \frac{4\pi}{q^2} \sum_{v=1}^{N_{OA}} w_v [F_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}) - P_{n_v l_v m_v}] \quad (\text{IV-50})$$

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_{\nu=1}^{NOA} \int d\mathbf{k} \frac{F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}) + P_{n_\nu l_\nu m_\nu} - H_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i)}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-51})$$

Ou

$$F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}) = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \left| e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} - 1 \right| \phi_{n_\nu l_\nu m_\nu}^{\alpha_\nu}(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (\text{IV-52})$$

$$H_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i) = F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_s) + F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_i) \quad (\text{IV-53})$$

et

$$P_{n_\nu l_\nu m_\nu} = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \left| e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right| \phi_{n_\nu l_\nu m_\nu}^{\alpha_\nu}(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (\text{IV-54})$$

Les formes analytiques des fonctions d'ondes des états initial et final choisis ici nous permet de résoudre analytiquement les intégrales tridimensionnelles dans $F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q})$, $H_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i)$, et $P_{n_\nu l_\nu m_\nu}$ (voir les références [3-6]).

Le terme T^{B2} dans l'équation (IV-51) contient une intégrale tridimensionnelle singulière souvent difficile à résoudre numériquement. Ce terme peut être résolu numériquement en utilisant l'approche donnée par Marchalant et col [7] où les singularités $K = K_i$ et $K = K_s$ peuvent être éliminées en utilisant les coordonnées sphéroïdales allongées. Cependant, cette approche ne permet pas de profiter des calculs analytiques du premier terme dans l'équation (IV-51)

$$T_1^{B2} = -\frac{4}{\pi} I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s; -i\bar{k}) \sum_{\nu=1}^{NOA} (F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q}) + P_{n_\nu l_\nu m_\nu}) \quad (\text{IV-55})$$

Où nous avons les mêmes intégrales $F_{n_\nu l_\nu m_\nu}(\mathbf{q})$ et $P_{n_\nu l_\nu m_\nu}$ qui figurent dans l'équation (IV-50). L'intégrale tridimensionnelle singulière :

$$I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s; -i\bar{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-56})$$

A aussi un résultat analytique qui peut être déduit à partir du travail de Byron et col [8]. Cette intégrale peut être exactement évaluée en utilisant le résultat de Lewis [9] (voir annexe5). Pour calculer le terme

Chapitre IV : Principe Variationnel de Schwinger

$$T_2^{B2} = \frac{4}{\pi} \sum_{v=1}^{N_{OA}} \int d\mathbf{k} \frac{H_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i)}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-57})$$

nous avons utilisé dans ce travail la méthode semi analytique présentée dans le travail de Sahlaoui et col [5-6]. Dans cette approche les singularités sont éliminées analytiquement en séparant les deux singularités $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i$ et $\mathbf{k} = \mathbf{k}_s$ et en déplaçant la singularité $k = \bar{k}$ pour trouver une forme simple à résoudre numériquement.

Bibliographie du chapitre IV

- [1] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 145201. (2008).
- [2] Bethe H A. *Ann. Phys.* **5**, 325 (1930).
- [3] Sahlaoui M and Bouamoud M. *Can. J. Phys.* **88**, 905–910 (2010).
- [4] Sahlaoui M and Bouamoud M. *Can. J. Phys.* **89**, 723–727(2011).
- [5] Sahlaoui M and Bouamoud M. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 085201 (2012).
- [6] Sahlaoui M. Thèse Doctorat : *Application du Formalisme Variationnel à l'ionisation de la Molécule d'Eau*. Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen. Algérie. 2012 (on line <http://dspace.univ-tlemcen.dz/bitstream/112/3757/1/these-SAHLAOUI-Mohammed.pdf>)
- [7] Marchalant J P, Whelan C T and Walters H R J. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 1141–1178 (1998).
- [8] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **18**, 3203 (1985).
- [9] Lewis R R Jr. *Phys. Rev.* **102**, 537–543 (1956)

Chapitre V : Résultats et Discussions.

V-1 Introduction

Ce chapitre est consacré aux résultats de calculs de la section efficace triplement différentielle de la simple ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron. Les résultats théoriques sont calculés dans le cadre du principe variationnel de Schwinger. Ces résultats sont comparés avec les résultats théoriques des calculs numériques de la deuxième approximation de Born et les résultats expérimentaux de Ehrhardt *et col* [1,2] et Weigold *et col.* [3]. Afin d'avoir une bonne idée sur la précision des calculs des sections efficaces dans le cadre du principe variationnel de Schwinger nous avons présenté cinq figures. Chaque figure contienne des courbes qui présentent la distribution de la section efficace triplement différentielle dans la géométrie coplanaire asymétrique pour différents conditions cinématiques. Dans la figure V.1 pour l'énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et l'énergie d'éjection $E_e = 3$ eV nous avons trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ, 10^\circ$ et 16° . Dans la figure V.2 pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV nous avons aussi les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ, 10^\circ$ et 16° . Dans la figure V.3, nous avons aussi les mêmes conditions géométriques et la même énergie d'incidence des figures V.1 et V.2 mais l'énergie d'éjection $E_e = 10$ eV. Dans la figure V.4 les résultats sont présentées pour deux conditions cinématique pour une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV nous avons les deux angles de diffusion $\theta_s = 3^\circ$ et 8° . Tous les résultats de ces figures contiennent les données expérimentaux de de Ehrhardt *et col* [1,2], qui sont étalés un intervalle d'angles d'éjection θ_e qui varient de 0° jusqu'à 360° . Dans la figure V.5 nous avons cinq conditions cinématiques, pour une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 50$ eV les résultats sont tracés pour les cinq angles de

Chapitre V : Résultats et Discussions

diffusion $\theta_s = 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$ et 35° sur l'intervalle d'angles d'éjection θ_e qui varient de 30° jusqu'à 100° dans la région de collision binaire.

V-2 Résultats et discussions

Dans la figure V.1 nous avons présenté les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron. Ces résultats sont obtenus dans le cadre du principe variationnel de Schwinger la et la deuxième approximation de Born. Ces résultats sont comparés avec les résultats des expériences (e,2e) de Ehrhardt *et col* [1,2] réalisées dans des géométries coplanaires asymétriques. Dans la figure V.1 nous avons trois conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 3$ eV l'expérience a été effectuée pour les trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ, 10^\circ$ et 16° . Les mesures de la section efficace triplement différentielle sont obtenues dans chaque expérience pour plusieurs angles d'éjection θ_e . Les résultats théoriques sont obtenus aussi dans la géométrie coplanaire asymétrique pour les mêmes conditions cinématiques mais pour une distribution étalée sur des angles d'éjection θ_e qui varient de 0° jusqu'à 360° .

Dans la figure V.1 nous avons une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV qui est très élevée devant le potentiel d'ionisation, et une énergie d'éjection $E_e = 3$ eV relativement petite. Mais l'approximation de Born est dans ces conditions justifiée. Pour discuter les résultats donnés dans la figures V.1 nous avons besoin de partager les courbes théoriques en deux parties : la région de collision binaire située dans l'intervalle d'angle d'éjection $180^\circ \leq \theta_e \leq 360^\circ$) et la région de recule située dans l'intervalle $0^\circ \leq \theta_e \leq 180^\circ$. Nous remarquons que dans la région de recule la deuxième approximation de Born est en très bon accord avec l'expérience. Il paraît que Le principe variationnel de Schwinger diverge pour certains angles d'éjection $120^\circ < \theta_e < 240^\circ$, mais à l'extérieur de cette intervalle les deux théories sont en bon accord entre eux et avec l'expérience. Dans la région de collision binaire il est bien remarquable que c'est le principe variationnel de Schwinger qui est en très bon accord

Chapitre V : Résultats et Discussions

avec l'expérience. Malgré que la courbe de la deuxième approximation de Born est proche des données expérimentaux, on peut remarquer un petit décalage de cette courbe qui a bien été corrigé par le principe de Schwinger. Nous pouvons donc dire que le principe variationnel de Schwinger décrit la région de collision binaire nettement mieux que la deuxième approximation de Born.

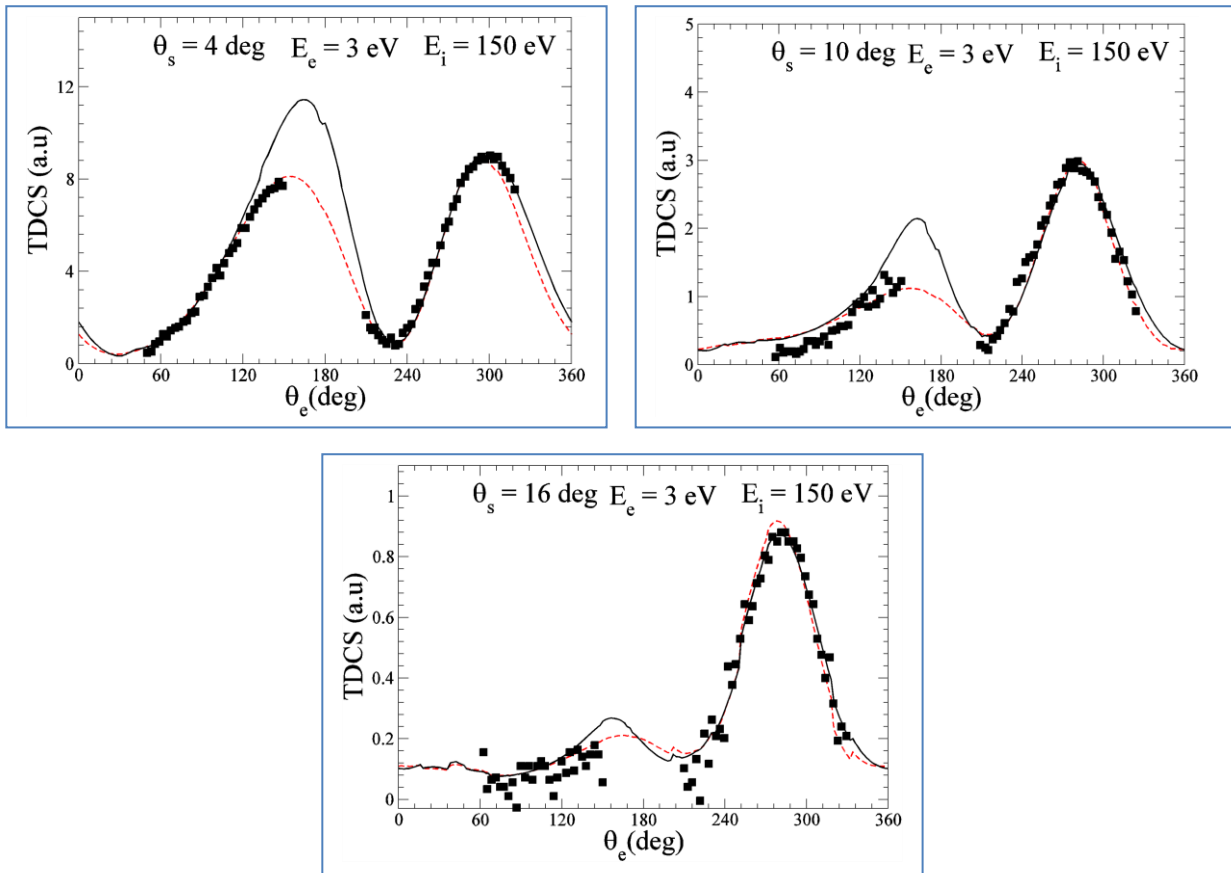


Figure V.1 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome hydrogène par impact d'électron, pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 3$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne continue est le résultat du principe variationnel de Schwinger. La courbe en ligne discontinue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [1,2] pour la réaction $(e,2e)$.

Malgré l'apparition que la deuxième approximation de Born décrit le processus de collision mieux que le principe variationnel de Schwinger dans certains angles d'éjection $120^\circ <$

Chapitre V : Résultats et Discussions

$\theta_e < 240^\circ$, le manque de données expérimentaux nous laisse incapable de donner une conclusion définitive sur lequel des théories est la plus précise.

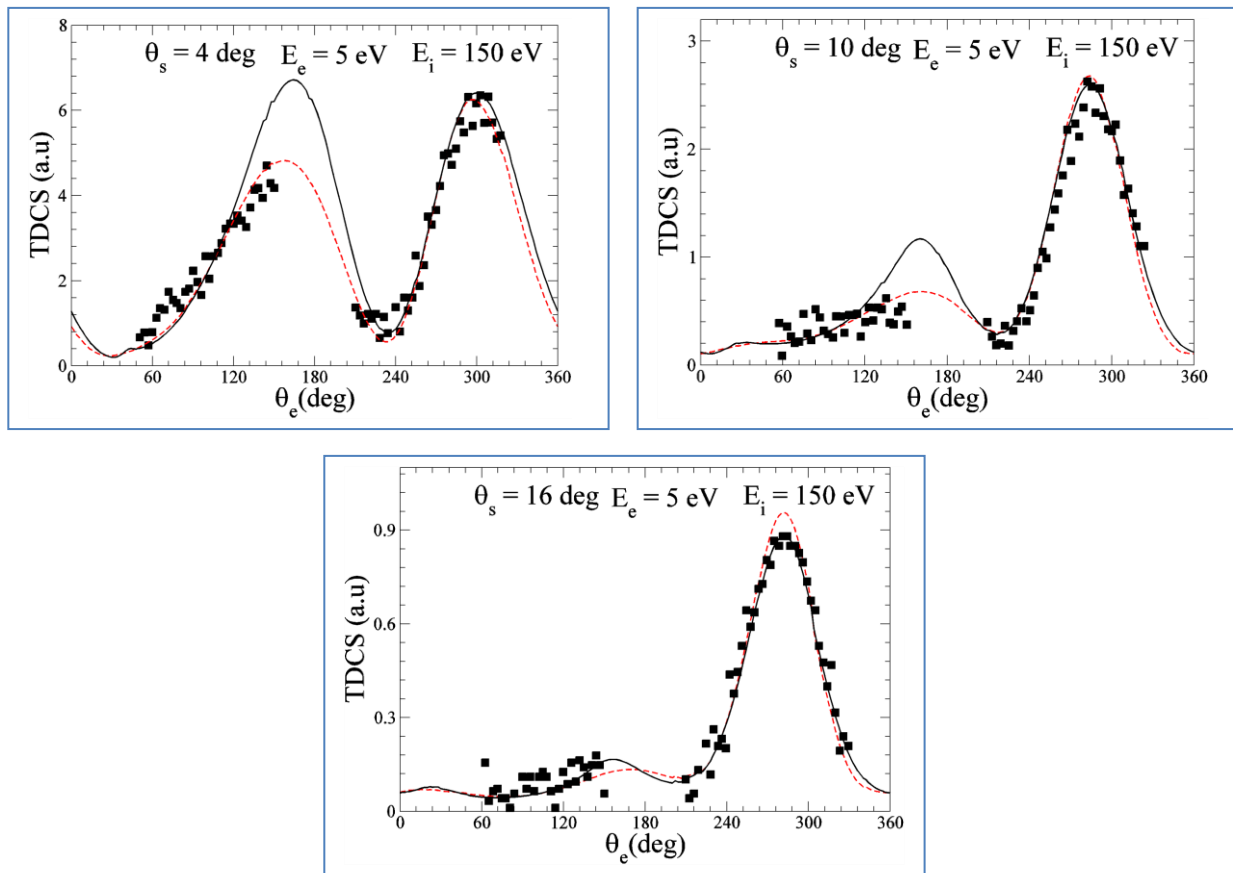


Figure V.2 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome hydrogène par impact d'électron, pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne continue est le résultat du principe variationnel de Schwinger. La courbe en ligne discontinue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [1,2] pour la réaction $(e,2e)$.

La figure V.2 présente aussi les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'hydrogène par impact d'électron. Ces résultats sont aussi obtenus avec le principe variationnel de Schwinger et la deuxième approximation

Chapitre V : Résultats et Discussions

de Born. Ces résultats théoriques sont comparés avec les résultats expérimentaux de Ehrhardt *et col* [1,2] réalisés dans la géométrie coplanaire asymétrique. Dans la figure V.2 comme dans la figure V.1 nous avons aussi trois conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV l'expérience a été effectuée pour les trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ, 10^\circ$ et 16° . Les résultats théoriques ont été obtenus dans les mêmes conditions géométriques et cinématiques pour des angles d'éjection θ_e qui varient de 0° jusqu'à 360° .

La figure V.2 confirme bien ce qui a été dit dans la discussion des résultats présentée par la figure V.1. La différence entre les deux figures vient du fait que l'énergie d'éjection est un peu plus élevée dans la figure V.2 ($E_e = 5$ eV) comparée avec celle de la figure V.1 ($E_e = 3$ eV). Cette petite différence montre une autre fois que le principe variationnel de Schwinger décrit mieux que la deuxième approximation de Born la région de collision binaire ($180^\circ \leq \theta_e \leq 360^\circ$). Mais dans la région de recul ($0^\circ \leq \theta_e \leq 180^\circ$) les deux théories ne sont pas vraiment en bon accord avec l'expérience, nous pouvons remarquer un petit décalage entre les courbes. Nous rappelons que la région de recul représente la région dans laquelle les électrons éjectés sont supposés attirés par l'ion résiduel après la réaction de collision. Ce qui nous mène à dire que dans la figure V.2 ces électrons ont subi une interaction avec l'ion plus importante que ceux de la figure V.1 puisque l'énergie de propagation de ces derniers est plus petite que celle des précédents. Ce qui nous conduit aussi à dire que les transitions dans les états intermédiaires sont très importantes pour une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV, et c'est pour cette raison que nous supposons qu'une description plus précise de ces transitions nous mène à présenter un formalisme théorique plus précis.

La figure V.3 représente aussi les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de la réaction (e,2e) de l'ionisation de l'hydrogène atomique. Ces résultats sont aussi obtenus dans le principe variationnel de Schwinger et la deuxième approximation de Born et sont comparés avec les résultats expérimentaux de Ehrhardt *et col* [1,2] réalisés dans la géométrie coplanaire asymétrique pour. Dans la figure V.3, comme dans les figures précédentes (figures V.1 et V.2), nous avons aussi trois conditions cinématiques : pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 10$ eV les résultats sont obtenus pour les trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ, 10^\circ$ et 16° . Les

Chapitre V : Résultats et Discussions

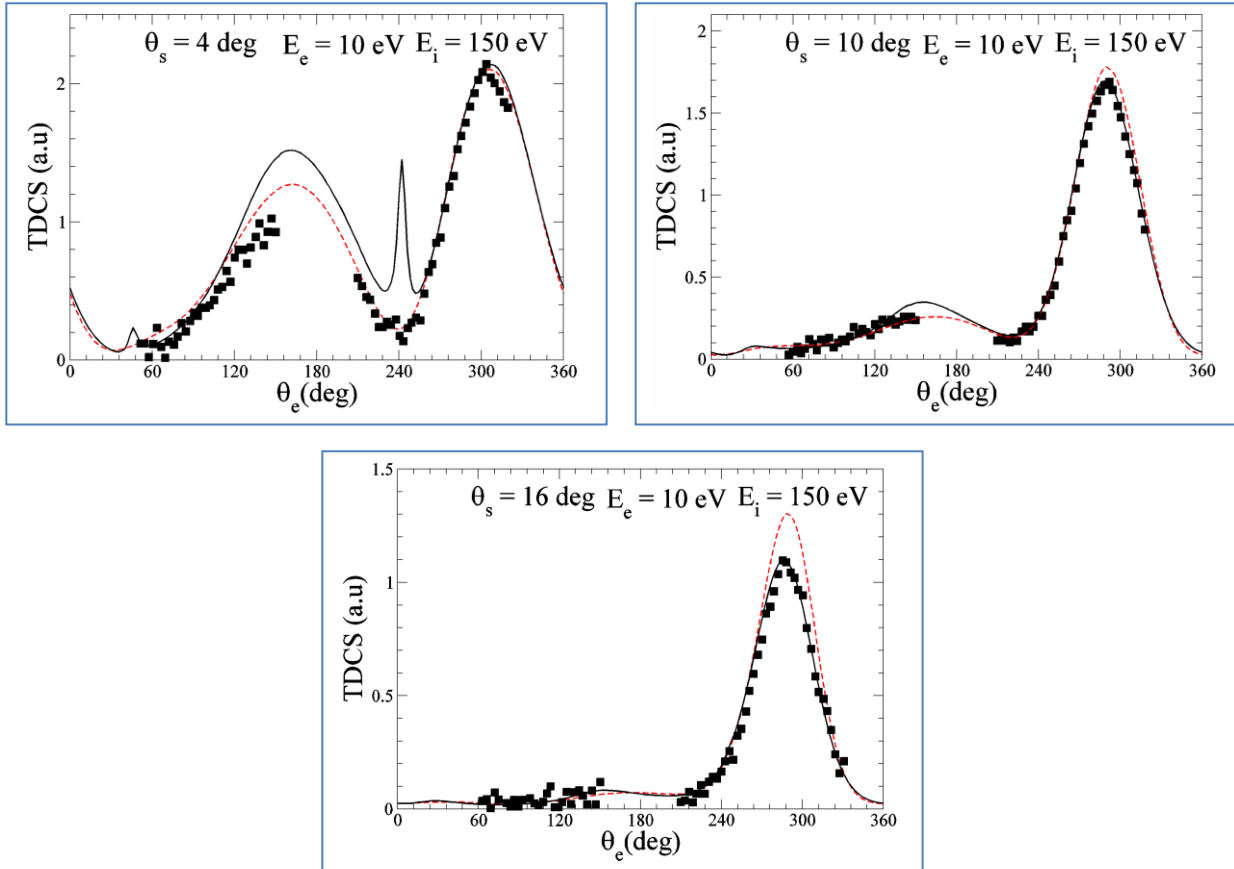


Figure V.3 : Section efficace triplement différentielle d’ionisation de l’atome hydrogène par impact d’électron, pour une énergie d’incidence $E_i = 150 \text{ eV}$ et une énergie d’éjection $E_e = 10 \text{ eV}$. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne continue est le résultat du principe variationnel de Schwinger. La courbe en ligne discontinue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l’expérience de Ehrhardt *et col* [1,2] pour la réaction $(e,2e)$.

En considérant apart les résultats pour $\theta_s = 4^\circ$ dans la figure V.3, les autres résultats confirment bien ce qui a été dit dans la discussion précédentes sur les figures V.1 et V.2. L’énergie d’éjection est plus élever dans la figure V.3 ($E_e = 10 \text{ eV}$). La différence des énergies d’éjection montre encore que le principe variationnel de Schwinger décrit mieux que la deuxième approximation de Born la région de collision binaire. La figure V.3 est très importante par ce qu’elle montre pour certaines conditions cinématiques la forme

Chapitre V : Résultats et Discussions

fractionnelle du principe variationnel de Schwinger peut présenter des divergences lors des calculs numériques. Ces divergences peuvent être remarquées dans la courbe pour $\theta_s = 4^\circ$ autour des angles d'éjection $\theta_e = 240^\circ$ et $\theta_e \sim 45^\circ$.

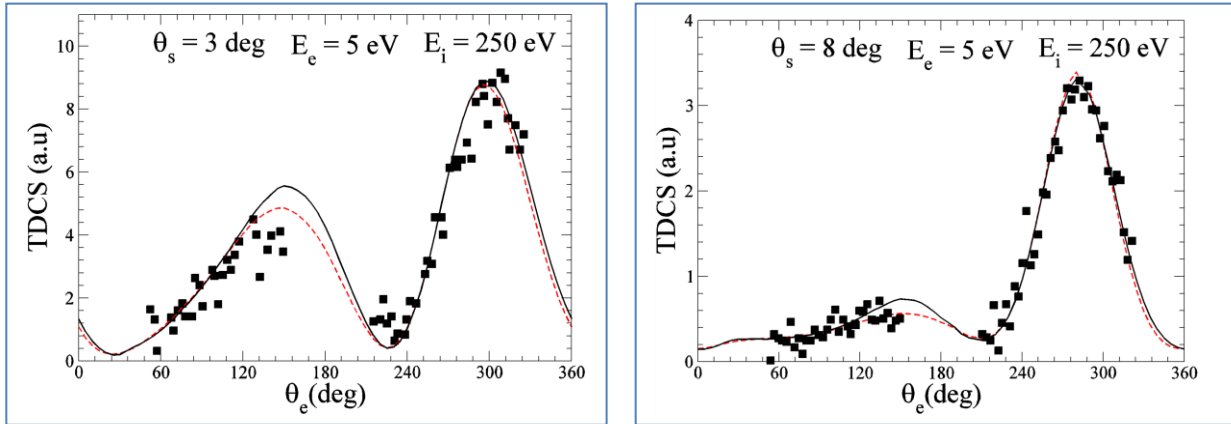


Figure V.4 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron pour une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 3^\circ$ et 8° . La courbe en ligne continue est le résultat du principe variationnel de Schwinger. La courbe en ligne discontinue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carrés noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [1,2] pour la réaction $(e,2e)$.

La figure V.4 présente toujours la distribution de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation simple de l'hydrogène par impact d'électron dans la géométrie coplanaires asymétriques en fonction de l'angle d'éjection θ_e qui varie de 0° jusqu'à 360° . Les résultats théoriques sont obtenus à partir du principe variationnel de Schwinger et la deuxième approximation de Born. Ces résultats sont comparés avec les résultats expérimentaux de Ehrhardt *et col* [1,2]. Les résultats de la figure V.4 sont obtenus pour les conditions cinématiques : énergie d'incidence $E_i = 250$ eV, énergie d'éjection $E_e = 5$ eV et les angles de diffusion $\theta_s = 3^\circ$ et $\theta_s = 8^\circ$.

La figure V.4 confirme toujours ce qui a été dit précédemment sur la théorie. Cette figure est aussi importante puisque elle présente des résultats avec une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV très élevée devant le potentiel d'ionisation et des angles de diffusion très petites $\theta_s = 3^\circ$ et 8° . Nous remarquons à partir de cette figure que le principe variationnel de Schwinger devient très précis pour des énergies d'incidence très élevées.

Chapitre V : Résultats et Discussions

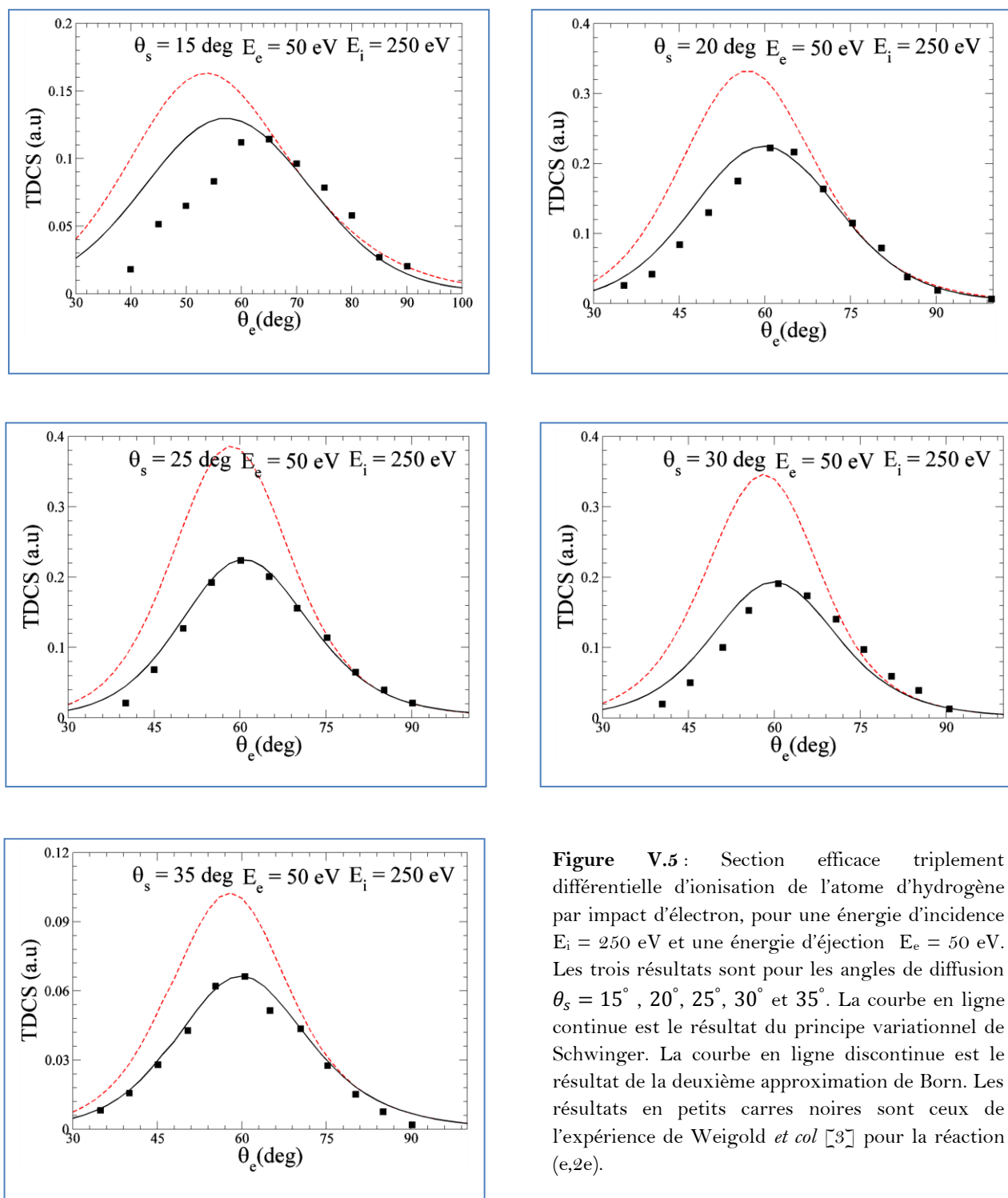


Figure V.5 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron, pour une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 50$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 15^\circ$, 20° , 25° , 30° et 35° . La courbe en ligne continue est le résultat du principe variationnel de Schwinger. La courbe en ligne discontinue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carrés noirs sont ceux de l'expérience de Weigold *et col* [3] pour la réaction $(e,2e)$.

Chapitre V : Résultats et Discussions

Dans la figure V.5 les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron sont obtenus dans la géométrie coplanaire asymétrique pour les conditions cinématiques : énergie d'incidence $E_i = 250$ eV, énergie d'éjection $E_e = 50$ eV et cinq angles de diffusion $\theta_s = 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$ et 35° . Les résultats théoriques sont comparés cette fois avec les résultats des expériences (e,2e) de Weigold *et col* [1]. Les résultats théoriques sont obtenus pour des angles d'éjection θ_e qui varient de 30° jusqu'à 100° dans la région de collision binaire.

La figure V.5 montre bien que plus l'angle de diffusion θ_s est grand l'accord entre la théorie et l'expérience devient bon. Il est nettement remarquable aussi que le principe variationnel de Schwinger est très précis que la deuxième approximation de Born. Il est clair qu'à partir de l'angle de diffusion $\theta_s = 25^\circ$ nous avons un très bon accord entre la théorie et l'expérience. Remarquons que, dans la figure V.5 l'énergie d'incidence est très grande devant l'énergie d'ionisation de l'état fondamentale de la cible. Donc même pour des angles de diffusions un peu élevés l'approximation de Born reste précise. Pour expliquer le désaccord entre la théorie et l'expérience pour des angles de diffusion inférieurs que 25° pour le principe variationnel de Schwinger et la divergence des résultats de l'approximation de Born par rapport à l'expérience, nous rappelons d'abord que dans l'état final de la réaction, c.-à-d. après la collision, deux particules de mêmes charges sortent chacune avec une certaine vitesse. Il y a donc une interaction de répulsion entre les deux particules. Cette interaction devient importante quand la distance entre les particules diffusé et éjecté devienne petite. Cette distance est en fonction de l'angle entre les deux particules mais aussi elle dépend des vitesses ou des énergies des deux particules, c.-à-d., que plus l'angle entre les particules est grand plus la distance entre eux est importante, et plus les énergies des particules sont proches plus la distance entre eux est petite. Donc comme l'énergie d'éjection $E_e = 50$ eV dans la figure V.5 forcément l'interaction poste-collision entre les particules sortantes est importante, et cette interaction devient moins importante si l'angle de diffusion est grand. Rappelons que nous avons utilisé une fonction d'onde plane pour décrire l'électron diffusé et une fonction d'onde de Coulomb pour décrire l'électron éjecté. Malgré que cette dernière fonction et une solution exacte de l'équation de Schrödinger pour un potentiel Coulombien elle n'est pas vraiment une solution exacte pour la réaction (e, 2e). Nous pouvons trouver

Chapitre V : Résultats et Discussions

dans la littérature une solution plus précise pour ce type de problème présenté par Peterkop [4,5]. Dans le modèle Peterkop connue par le modèle deux fonctions de Coulomb (two Coulomb waves 2CW), Peterkop trouve que l'état finale constitué de deux électrons qui diffuse dans le continuum peut être décrits dans la région asymptotique (loin du centre de collision) par le produit de deux fonctions d'ondes de Coulomb. Nous pouvons trouver aussi dans la littérature le modèle trois fonctions d'ondes de Coulomb présenter par Brauner, Briggs et Klar [6] qui est encore plus précis que celui de Peterkop. Le modèle trois fonctions d'ondes de Coulomb est connue par le modèle BBK et représente une solution exacte pour la réactions (e,2e) dans la région asymptotique. La puissance de ce modèle réside dans le fait que l'interaction poste collision entre les électrons diffusé et éjecté est très bien décrite. Plus l'angle entre les deux électrons sortants est petit et les énergies de ces deux électrons sont proches plus cette interaction devienne importante. Dans ce cas ont doit bien décrire l'interaction poste collision dans le formalisme théorique. Dans notre formalisme nous avons pris en compte cette interaction mais d'une façon approximative en introduisant le facteur de Gamow [8]. C'est pour cette raison que nous supposons que quand l'énergie d'éjection E_e devient importante nous remarquons un désaccord entre la deuxième approximation de Born et l'expérience. Mais il claire que la forme fractionnelle du principe variationnel de Schwinger corrige l'effet de l'interaction porte collision.

Chapitre V : Résultats et Discussions

Bibliographie du chapitre V

- [1] Ehrhardt H, Knoth G, Schlemmer P and Jung K. *Phys. Lett.* **110**, 92 (1985).
- [2] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Schlemmer P. *Z. Phys. D.* **1**, 3 (1986).
- [3] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **12**, 291 (1979).
- [4] Peterkop R K. *Opt. Spectr.* **13**, 1220 (1961).
- [5] Peterkop R K. *Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact. Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder*, (1977).
- [6] Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989).
- [7] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 145201. (2008).

Conclusion Générale.

Un formalisme théorique qui décrit avec grande précision la réaction de particule chargées avec une cible atomique ou moléculaire est actuellement très demandé, puisque des données précises sur les différentes sections efficaces sont très utiles pour différents domaines comme l'astrophysique, la physique des plasmas et la radiobiologie. Pour cette raison nous consacrons ce travail à l'étude de la précision du formalisme théorique de la forme fractionnelle du principe variationnel de Schwinger.

Nous avons vu à partir des cinq figures présentées dans le dernier chapitre, que d'une façon générale nous avons trouvé un très bon accord entre la théorie et l'expérience. Nous avons remarqué que quand l'angle entre les électrons diffusés et éjectés est petit et quand leurs énergies sont proches l'interaction post-collision entre ces particules devient importante et doit être correctement décrite dans le formalisme théorique. Mais le plus important c'est que avec les mêmes calculs numériques des premiers et deuxièmes termes de l'approximation de Born nous pouvons avoir des résultats numériques beaucoup plus précis que ceux de la deuxième approximation de Born. En d'autres termes, avec seulement le premier et le deuxième terme de l'approximation de Born nous pouvons avoir des résultats comparables avec ceux qui peuvent être obtenus avec des ordres supérieurs. Nous avons vu aussi que le principe variationnel de Schwinger peut donner des résultats précis dans le cas où l'interaction post-collision est importante même si elle n'est décrite que d'une façon approximative dans le formalisme théorique.

Finalement nous sommes sûrs que si les états initiaux et finaux sont décrits par des fonctions d'ondes plus précises le formalisme variationnel de Schwinger va donner des résultats extrêmement précis.