

**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 Computationnelle**

Par

Melle. **ALLAM Oumria**

Sur le thème

**Spectre d'ionisation simple de l'hélium par impact d'électron chargé**

**Application du principe variationnel de schwinger**

Soutenu le **10 /07/2019** devant le jury composé de :

<b>M. LASRI Boumediene</b>	<b>Professe</b>	<b>U. Saïda</b>	<b>Président</b>
<b>M. SAHLAOUI Mohammed</b>	<b>M.C.A</b>	<b>ESSA- Tlemcen</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>M. MESKINE Mohammed</b>	<b>M.C.A</b>	<b>U. Saïda</b>	<b>Co-rapporteur</b>
<b>M. BOUDRAA Kamel-Eddine</b>	<b>M.C.A</b>	<b>U. Saïda</b>	<b>Examineur</b>
<b>M. SAHABI Toufik</b>	<b>M.C.B</b>	<b>U. Saïda</b>	<b>Examineur</b>

# *Dédicace*

*A mes chers parents, pour tous leurs sacrifices,  
leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs  
prières tout au long de mes études,*

*A mes chers, pour leur appui et leur  
encouragement.*

*A la famille **Allam** pour leur soutien tout au long  
de mon parcours universitaire,*

*A mes chers amies siham boucif , bouazza  
boumediene ,khodja sid ahmed ,*

*A tous la promotion master physique rayonnement*

*Merci d'être toujours présent*

## **Remerciements**

*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 parents, qui mon Encouragé et aidé à arriver à ce stade de ma formation.*

*Je tiens à remercier tous ceux et celle qui ont contribué à finaliser ce modeste travail.*

*Mes remerciements vont à Docteur SAHLOUI MOHAMMED mon Encadreur pour m'avoir guidé pour la réalisation de ce projet.*

*Je remercie Professeur LASRI BOUMEDIENE, Maitre de Conférences «A », et Dr. SAHABI Toufik maitre de conférence « B »et Dr. BOUDRAA kamel-eddine maitre de conférence« A », à l'université Dr Tahar Moulay –Saida d'avoir*

*Accepté de participer au jury de ce mémoire.*

*Mes plus grands remerciements vont à MMESKINE Mohammed, mon Co-Encadreur pour m'avoir guidé pour la réalisation de ce projet.*

*Je remercie vivement les étudiants Master physique*

*Pour leur aide morale durant toute la période de préparation.*

*Je ne saurais oublier mes remerciements à tous mes professeurs et enseignants sans eux je n'en aurais pas pu réussir mes études.*

*.Enfin, 'exprime mes sincères remerciements à tous ceux qui ont participé de près ou de Loin à la réalisation de ce travail.*

# Sommaire

Introduction générale .....	3
<b>Chapitre 1</b>	
I-1 Introduction.....	4
I-1 Terminologie et Notations.....	5
I-3 Section efficace triplement différentielle.....	7
I-4 Sections efficaces doublement différentielles.....	8
I-5 Sections efficaces simplement différentielle.....	9
I-2 matrice de transition.....	10
I-3 L'approximation de Born.....	12
<b>Chapitre 2</b>	
II-1 Introduction.....	18
II-2- Terminologie et notations.....	19
II-3 Les expériences (e,2e).....	21
II-4-1 Conditions cinématiques.....	22
II-4-1-1 Géométrie symétrique :.....	22
II-4-1-1-1 Géométrie symétrique coplanaire :.....	23
II-4-1-1-2 Géométrie symétrique non coplanaire .....	24
II-4-1-1 Géométrie asymétrique .....	26
II-4-1-1-1 Géométrie asymétrique coplanaire :.....	26
II-4-1-1-2 Géométrie asymétrique non coplanaire :.....	27
<b>Chapitre 3</b>	
III-1 Introduction.....	30
III-2 Section efficace triplement différentielle.....	31
III-3 Amplitude de transition .....	32
III-4 Principe variationnelle de Schwinger.....	37
<b>Chapitre 4</b>	
IV-1 Introduction.....	43
IV-2 Résultats et discussions.....	44
Conclusion générale .....	50



## Introduction générale

Dans ce travail nous allons étudier la précision du principe variationnel de Schwinger dans le cas de la simple ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électron. Autant que chercheurs dans le domaine des collisions atomiques et moléculaire nous avons besoin d'un formalisme théorique qui décrit avec précision les processus de collision de particule chargées avec des cibles atomiques ou moléculaires. Ce type de formalisme est utilisé pour calculer les sections efficaces différentielles et totales qui sont très demandées pour plusieurs domaines comme, la physique des plasmas, l'astrophysique et la radiobiologie.

Nous pouvons trouver dans la littérature plusieurs formalismes utilisés pour étudier les amplitudes de transitions lors des collisions atomiques. Parmi ces formalismes on trouve les méthodes variationnelles. Parmi ces derniers on trouve que le principe variationnel de Schwinger [1,2] est le plus intéressant. Ce principe est basé sur l'utilisation des équations intégrales de Schwinger de la diffusion qui possèdent des propriétés remarquables [3] ce qui laisse le principe variationnel de Schwinger bien adaptée aux calculs des amplitudes de transitions. Malgré les avantages de ce principe et les résultats encourageants qu'il fournit dans le domaine de l'excitation de cibles atomiques par impact de particules chargées, il n'a pas été beaucoup utilisé, que dans un nombre modeste de travaux [4-12]. Ceci provient du fait que le principe variationnel de Schwinger contient des termes de second ordre dans le développement des amplitudes de transitions qui sont généralement difficiles à évaluer analytiquement et numériquement, comme ceux qui apparaît dans la deuxième approximation de Born.

La méthode variationnelle de Schwinger, représente un outil très puissant pour calculer les sections efficaces de l'excitation de cibles atomiques par impact d'ion [7-12]. Mais dans le cas de l'ionisation la méthode n'a pas été sérieusement considérée. Dans ce travail nous comptent vérifier la puissance de cette approche dans l'étude des collisions ionisante par

# INTRODUCTION GÉNÉRALE



l'effet de l'impact de particules chargées. Pour cette raison nous avons partagé ce manuscrit en quatre chapitres et une conclusion générale. Dans le premier chapitre nous allons d'abord donnée une définition détaillée sur le notion de section efficace de la simple ionisation par impact d'électron connue aussi par le réaction  $(e,2e)$ . Dans ce chapitre nous allons présenter aussi le calcul de l'amplitude de transition dans l'approximation de Born. Dans le deuxième chapitre nous allons parler de la réaction  $(e,2e)$ . Nous donnons une explication détaillée sur l'aspect théorique et expérimental de cette réaction. Nous présentons aussi les différentes géométries dans lesquelles une expérience de collision peut être réalisée. Dans le troisième chapitre nous présentons notre formalisme théorique pour le calcul de l'amplitude de transition de l'ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électron dans le cadre de la deuxième approximation de Born et le formalisme variationnel de Schwinger. Bien sûr dans le dernier chapitre-nous présentons les différent résultats de la section efficace triplement différentielle et nous discutons aussi les résultats d'une façon détaillée. Comme il est coutume, ce travail commence par une introduction générale et termine par une conclusion générale.



## 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 1 : Section Efficace de la Simple Ionisation

### I-1 Introduction

Parmi les recherches de grande importance en physique on trouve ceux qui s'intéressent au processus de collisions de particules chargées avec des cibles atomiques. Les études dans ces domaines s'intéressent à des réactions de base et sont importés pour plusieurs domaines comme la physique des plasmas, l'astrophysique, et radiobiologie.

Les grandeurs physiques qui permettent l'investigation d'un processus de collision sont connues par les sections efficaces. Les chercheurs de ce domaine ont besoins d'un ou plusieurs types de sections efficaces pour bien comprendre un ou plusieurs processus. On trouve donc la section efficace totale, une fois différentielle, deux fois différentielle et trois fois différentielle j'jusqu'à huit fois différentielle, et on peut déduire l'une de l'autre par intégration analytique ou numérique. Dans le cas de la simple ionisation par impact de particule chargée, c'est la section efficace triplement différentielle qui permet de remonter à des informations détaillée sur ce processus et même sur la structure de la cible. Depuis les premières mesures de cette grandeur [1,2], plusieurs études théoriques et expérimentales ont été menées sur le processus d'ionisation simple d'une cible atomique. Ainsi, plusieurs méthodes théoriques ont été élaborées pour comprendre les mécanismes de ce type d'ionisation. L'intérêt de l'étude des interactions entre des particules chargées et les électrons d'une cible atomique a été conforté par l'évolution des techniques expérimentales et des formalismes mathématiques. Cet intérêt était à l'origine des travaux théoriques de Bethe [3] et de Massey et Mohr [4], qui sont les premiers avoir établi les





fondements du calcul théorique de la section efficace de diffusion dans la première approximation de Born.

Dans ce premier chapitre nous allons voir comment étudier la simple ionisation d'une cible atomique par impact d'électron, et nous allons présenter la notion de section efficace.

## I-1 Terminologie et Notations

Supposons qu'un électron vient avec une grande énergie d'incidence  $E_i$  et rentre en interaction avec une cible atomique. La perturbation des électrons de la cible induite par la particule incidente peut conduire à l'ionisation d'un ou plusieurs électrons. Si cette perturbation n'influence que sur un électron de la cible permettant à celui-ci d'être éjecté, on a donc affaire à la simple ionisation. Ce processus est connue chez les chercheurs dans le domaine des collisions atomiques et moléculaire par la réaction (e,2e).

Supposons maintenant qu'un nombre  $N_i$  d'électrons (par unité de temps et de surface) est émis par une source avec la même énergie  $E_i$  dans la même direction, donc de même moment cinétique  $\mathbf{k}_i$ . Chosions la direction de l'axe Oz suivant la direction du vecteur  $\mathbf{k}_i$  et que le flux de ces électrons fait des collisions avec un nombre  $N_t$  de cibles atomiques localisées à l'origine O du système de référence (Oxyz). Apres la collision, nous supposons que seulement un nombre  $N_s$  d'électrons (par unité de temps et de surface) est diffusés dans la direction de leurs vecteur moment cinétique moment  $\mathbf{k}_s$  avec des énergies qui varient entre  $E_s$  et  $E_s + dE_s$ . Nous pouvons donc écrire l'équation suivante :

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

Où  $d\hat{\mathbf{k}}_s$  représente un élément d'angle solide choisi dans la direction du vecteur  $\mathbf{k}_s$  et définie par les angles sphériques  $\theta_s$  et  $\varphi_s$  et  $d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$  est une grandeur physique qui dépend des

# CHAPITRE 1 : SECTION EFFICACE



vecteurs  $\mathbf{k}_i$  et  $\mathbf{k}_s$  et des énergies  $E_i$  et  $E_s$  connue par la section efficace. La section efficace doublement différentielle de la diffusion peut donc être définie par l'équation

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

Qui représente la probabilité qu'un électron diffuse dans la direction  $d\hat{\mathbf{k}}_s$  avec un moment cinétique  $\mathbf{k}_s$  et une énergie  $E_s$ . Lors d'une expérience de collision atomique, un détecteur est localisé en face de la direction  $d\hat{\mathbf{k}}_s = \sin\theta_s d\theta_s d\varphi_s$  pour détecter les électrons qui diffusent avec des énergies dans l'intervalle  $[E_s, E_s + dE_s]$ . Dans ce cas, le nombre  $N_s$  des électrons qui diffusent par unité de temps dans l'angle solide  $d\hat{\mathbf{k}}_s$  est proportionnel la densité de courant  $J_{\mathbf{k}_s}$  de ces particules. Pour une fonction d'onde quelconque  $\psi(\mathbf{r})$ , le flux de probabilité qui n'est autre que la densité de courant est défini par la formule

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

Loin du centre du référentielle Oxyz qui représente aussi le centre de collisions, la forme asymptotique de l'onde diffusée est donnée dans l'équation suivante

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

La grandeur  $f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$  représente l'amplitude de la fonction d'onde, connue par l'amplitude de transition. Le flux de probabilité sortant radial peut donc être déduit en utilisant l'équation (I-3). Pour une position  $\mathbf{r}$  très loin de l'origine O du trièdre Oxyz ( $r \rightarrow \infty$ ), nous pouvons négliger le terme d'ordre  $r^{-3}$ , et nous trouvons donc que

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

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

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

La fonction d'onde de l'électron incident peut être définie par l'équation



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

Qui est normalisée dans le sens que la probabilité de le trouver un électron dans un volume fini de l'espace est l'unité. En utilisant la formule (I-3), nous pouvons facilement trouver que le flux de probabilité  $J_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$  de la fonction d'onde  $\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$  est :

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

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

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

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

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

La section efficace doublement différentielle de la diffusion par une cible atomique, c.-à-d. dans le cas où  $N_t = 1$ , peut être déduite en injectant les résultats (I-6) et (I-9) dans l'équation (I-2), nous trouvons que

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

## I-3 Section efficace triplement différentielle

Lors d'une expérience de réaction (e,2e), les électrons sortants du centre de collisions ne sont pas seulement les électron incident qui ont subis une diffusion mais il y a aussi des électrons de la cible qui ont été éjectés par celle-ci suite à une perturbation importante supérieur que le potentiel d'ionisation. La section efficace est dans ce cas non seulement elle est fonction des deux vecteurs  $\mathbf{k}_i$  et  $\mathbf{k}_s$  mais aussi du vecteur  $\mathbf{k}_e$  qui représente le moment cinétique de l'électron éjecté. Donc elle n'est pas seulement doublement différentielle mais triplement différentielle. Cette section efficace mesure alors la probabilité qu'un électron incident avec une énergie  $E_i$



suivant la direction du vecteur  $\mathbf{k}_i$  excite un électron de la cible vers un état de continuum d'énergie  $E_e$  et qui se propage dans la direction du vecteur  $\mathbf{k}_e$ . L'électron incident diffuse après la collision avec une énergie  $E_s$ . Ce type de section efficace est défini par la relation :

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

Dans le cas où c'est l'énergie d'éjection qui est détecté dans l'expérience. Ou

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

Dans le cas où c'est l'énergie de diffusion qui est détecté dans l'expérience. Rappelons que la fonction delta est définie par

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \neq 0 \\ 1 & \text{si } x = 0 \end{cases} \quad (I-13)$$

L'équation  $E_i - E_s - E_e + IP = 0$  représente l'équation de conservation de l'énergie où  $IP$  représente l'énergie potentielle d'ionisation.

La section efficace triplement différentielle (SETD) est une quantité qui fournit une description complète sur la cinématique de la réaction (e,2e), puisqu'elle fait intervenir tous les paramètres cinématiques et géométriques de la collision, à savoir les énergies  $E_i$ ,  $E_s$  et  $E_e$  ainsi que les angles de diffusion ( $\theta_s, \varphi_s$ ) et d'éjection ( $\theta_e, \varphi_e$ ). La SETD fournit le teste le plus fiable de la théorie (e,2e). Dans une expérience de la réaction en question, afin de s'assurer que les électrons diffusé et éjecté proviennent du même événement ionisant, ces particules doivent être détectées en coïncidence temporelle [5,6].

## I-4 Sections efficaces doublement différentielles

Dans une expérience d'ionisation simple par impact d'électrons, si seulement une particule sortante est détecté en fonction de son énergie et sa direction de propagation, alors la section efficace doublement différentielle (SEDD) qui est mesure et pas la SETD. Cette section efficace



est définie par une intégration de la SETD. Si lors de l'expérience on s'intéresse à la mesure de l'angle et l'énergie de l'électron diffusé, alors la section efficace triplement différentielle doit être intégrée sur les angles de la direction d'éjection ( $\theta_e, \varphi_e$ )

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

Ceci signifie que durant l'expérience nous avons un seul détecteur qui mesure l'énergie  $E_s$ . Dans ce cas pour un électron diffusé correspond un électron éjecté dans une direction non définie, ce qui implique que toutes les directions sont possibles. Si lors de l'expérience on s'intéresse à la mesure de l'angle et l'énergie de l'électron éjecté, alors la section efficace triplement différentielle doit être intégrée sur les angles de la direction de diffusion ( $\theta_s, \varphi_s$ )

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

La section efficace doublement différentielle donne des informations moins détaillées sur la réaction de collision comparée avec la section efficace triplement différentielles.

Notons que même si les deux électrons sortants sont des particules indiscernables, dans certaines conditions cinématique, on peut dire si la particule détectée est celle qui a été éjectée ou diffusée.

## I-5 Sections efficaces simplement différentielle

La section efficace simplement différentielle (SESD) en angle est la mesure de la probabilité de qu'un faisceau d'électrons diffusés ou éjectée est détectée dans une certaine direction, avec une énergie comprise entre  $E_{min}$  et  $E_{max}$ . Dans le cas où c'est le faisceau d'électrons diffusés qui est considéré

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

Dans le cas où c'est le faisceau d'électrons éjectés qui est considéré

# CHAPITRE 1 : SECTION EFFICACE



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

Ce type de sections efficaces ne peut pas donner les informations que peu donnée les sections efficaces triplement et doublement différentielles. Cependant, les sections efficaces simplement différentielles présentent un grand intérêt pour certaine recherches, par exemple, dans celles qui s'intéressent à l'étude des structures moléculaire.

Si dans une étude on s'intéresse au spectre d'énergie, c'est la section efficace simplement différentielle en énergie qui doit être calculée ou mesurée. Si le spectre énergétique du faisceau des électrons diffusés qui nous intéresse alors

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

Et si le spectre énergétique du faisceau des électrons éjectés qui nous intéresse alors

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

Ce type de sections efficaces est très important pour différents champs de la physique, comme ceux qui s'intéressent à l'étude de perte d'énergie des électrons dans l'ionosphère terrestre et les atmosphères des autres planètes.

## I-2 matrice de transition

Considérons le cas simple de collision d'un électron incident d'énergie  $E_i$  avec une cible atomique de  $N$  électrons. Selon la théorie de la mécanique quantique le hamiltonien de ce système est de la forme

$$H = H_0 + V \quad (I-20)$$

où  $H_0$  représente l'opérateur hamiltonien qui décrit indépendamment (avant l'interaction) l'électron incident et la cible atomique. Il est bien connu que ce hamiltonien est de la forme

# CHAPITRE 1 : SECTION EFFICACE



$$H_0 = H_T + K_0 \quad (\text{I-21})$$

où

$$K_0 = -\frac{1}{2}\nabla_0^2 \quad (\text{I-22})$$

qui n'est autre que l'opérateur de l'énergie cinétique de l'électron incident libre (qui ne subit aucune interaction avec aucun potentiel), et

$$H_T = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{N}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (\text{I-23})$$

qui est l'opérateur hamiltonien qui décrit la cible atomique constituée d'un noyau de charge positif  $Ne^+$  et un nombre  $N$  d'électrons. La perturbation  $V$  provoquée par l'électron incident est dans ce cas de la forme

$$V = \left( -\frac{N}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|r_0 - r_i|} \right) \quad (\text{I-24})$$

Le vecteur  $\mathbf{r}_0$  représente la position de l'électron incident dans le référentiel Oxyz d'origine située sur le centre du noyau de la cible. Les vecteurs  $\mathbf{r}_i$  représentent les positions des électrons de la cible atomique, supposée ici électriquement neutre.

La matrice de transition est définie dans le cas présent par la formule

$$T_{fi} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{I-25})$$

Où  $|\Psi_i\rangle$  et  $|\Psi_f\rangle$  les fonctions d'ondes qui décrivent, respectivement, les états initial et final du système de  $(N+1)$  électrons. Ces fonctions d'ondes sont des solutions des deux équations de Schrödinger avant et après la collision

$$H|\Psi_i\rangle = E|\Psi_i\rangle \quad (\text{avant la collision}) \quad (\text{I-26})$$

et

$$H|\Psi_f\rangle = E|\Psi_f\rangle \quad (\text{après la collision}) \quad (\text{I-27})$$

# CHAPITRE 1 : SECTION EFFICACE



La matrice de transition fourni la probabilité pour que le système composée d'un électron incident et une cible atomique passe après la collision de l'état quantique initiale  $|\Psi_i\rangle$  à l'état quantique finale  $|\Psi_f\rangle$ . La relation entre la matrice de transition est l'amplitude de transition est la suivante :

$$f_{fi} = -(2\pi)^2 T_{fi} \quad (\text{I-28})$$

Ainsi la section efficace triplement différentielle, définie précédemment dans le chapitre I, peut être réécrite sous la forme

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{k}_s d\hat{k}_e dE_e} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{I-29})$$

L'étude d'une façon exacte de la dynamique d'un système quantique de plusieurs particules a toujours été très compliquée. Le processus d'ionisation rentre dans cette catégorie de problèmes, c'est pour cette raison que souvent des approximations sont utilisées afin de pouvoir évaluer les éléments de la matrice de transition  $T_{fi}$ .

Dans la littérature nous pouvons trouver plusieurs formalismes théoriques qui décrivent la même réaction de collision. Pour étudié la réaction (e,2e), nous pouvons des modèles approximatifs tel que le modèle d'une fonction de Coulomb, le modèle de deux fonctions de Coulomb [7,8,9], le model de trois fonctions de Coulomb [3], et le modèle *Convergent Close Coupling* (CCC) qui a été proposé par Massey et Mohr [10].

## I-3 L'approximation de Born

Nous avons vue dans la section précédente la section efficace triplement différentielle dépend de la norme au carre de l'amplitude de transistons  $T_{fi}$  (voir équation I-28). Cette dernière et une quantité dépendent de fonctions d'ondes qui définissent les états initiale et finale qui sont des solutions des équations de Schrödinger indépendantes du temps données dans les équations (I-26) et (I-27).

Considérons la réaction (e,2e) dans laquelle un électron incident viens avec une énergie cinétique  $E_i$  suivant la direction de son vecteur moment cinétique  $\mathbf{k}_i$ . Nous supposons que cet électron





rentre en collision avec une cible atomique constituée d'un noyau de charge  $Z = Ne^+$  et un nombre  $N$  d'électrons. L'ensemble du système quantique est donc constitué d'un noyau et d'un nombre  $N+1$  d'électrons ( $N$  électrons liés et un électron libre). La fonction d'onde de ce système doit satisfaire l'équation différentielle de Schrödinger suivante

$$H|\Psi_i^{(+)}\rangle = (H_0 + V)|\Psi_i^{(+)}\rangle = \left(\frac{k_i^2}{2} + \epsilon_i\right)|\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{I-30})$$

Où  $H$  est l'opérateur hamiltonien de l'ensemble du système donnée dans l'équation (I-20) et  $\epsilon_i$  l'énergie de la cible atomique et  $k_i^2/2$  l'énergie cinétique de l'électron incident.

Supposons maintenant que la cible avant la collision est dans un état propre  $|\phi_n\rangle$  quelconque. Cet état est donc solution de l'équation de Schrödinger suivante

$$H_T|\phi_n\rangle = \epsilon_n|\phi_n\rangle \quad (\text{I-31})$$

Où  $H_T$  est l'opérateur hamiltonien de la cible atomique définie dans l'équation (I-23) et  $\epsilon_n$  la valeur propre de cet hamiltonien qui n'est autre que l'énergie propre de l'état  $|\phi_n\rangle$  ( $n = 1, 2, 3, \dots, etc$ ). Si la cible atomique est dans l'état  $|\phi_i\rangle$  avant la collision elle forcément solution de l'équation

$$H_T|\phi_i\rangle = \epsilon_i|\phi_i\rangle \quad (\text{I-32})$$

et la fonction d'onde  $|\Psi_i^{(+)}\rangle$  de l'ensemble du système électron incident-cible atomique va automatiquement satisfaire la condition an limite

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle \xrightarrow{r_0 \rightarrow \infty} |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle + \text{onde sortante} \quad (\text{I-33})$$

Avec

$$|\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle|\phi_i\rangle = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r})|\phi_i\rangle \quad (\text{I-34})$$

Nous avons supposé ici que l'électron incident est très rapide ce qui justifie le choix d'une fonction d'onde plane pour décrire cet électron

$$|\mathbf{k}_i\rangle = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{I-35})$$

# CHAPITRE 1 : SECTION EFFICACE



L'équation (I-30) avec la condition à la limite donnée dans l'équation (I-33) peut être transformée à une équation intégrale, connue par l'équation de Lippmann Schwinger :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle + G_0^{(+)}V|\psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{I-36})$$

ou  $G_0^{(+)}$  représente l'opérateur de Green. La solution formelle de l'équation (I-30) est donc une série en puissance de  $V$  obtenue par itération :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = \left(1 + G_0^{(+)}V + (G_0^{(+)}V)^2 + \dots + (G_0^{(+)}V)^p + \dots\right) |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle \quad (\text{I-37})$$

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

Il est important de noter que dans cette approximation l'effet de l'électron incident est considéré comme une perturbation. Ceci implique que cet électron après la collision diffuse avec une énergie suffisamment grande pour que la forme asymptotique de l'état finale  $\langle\Psi_f|$  de l'ensemble du système de  $N+1$  électrons, loin de la cible, prenne la forme de produit de deux fonctions d'ondes :

$$\langle\Psi_f| = \langle\mathbf{k}_s, \phi_f| = \langle\mathbf{k}_s|\langle\phi_f| \quad (\text{I-38})$$

Où  $\mathbf{k}_s$  est le vecteur moment cinétique de l'électron diffusé et  $\langle\phi_f|$  l'état final de la cible après la collision.

En introduisant les relations précédentes données dans les équations (I-38) et (I-37) dans la relation de l'amplitude de transition donnée dans l'équation (I-25) on trouve le développement de Born de l'amplitude de transition

$$T_{fi}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle\mathbf{k}_s, \phi_f|V + VG_0^{(+)}V + V(G_0^{(+)}V)^2 + \dots + V(G_0^{(+)}V)^p + \dots|\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle \quad (\text{I-39})$$

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

$$T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle\mathbf{k}_s, \phi_f|V|\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle \quad (\text{I-40})$$



Si on ne retient que les deux premiers termes du développement dans la série de Born, on obtient la deuxième approximation de Born :

$$T_{fi}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) + T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \quad (\text{I-41})$$

avec le premier terme  $T_{fi}^{B1}$  est définie dans l'équation (I-40), et le deuxième terme est définie par

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V G_0^{(+)} V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{I-42})$$

Ce second terme joue un rôle très important dans la réaction (e,2e), précisément dans la description des transitions entre les états intermédiaires.

Pour calculer le terme  $T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i)$ , une résolution spectrale de l'opérateur de Green  $G_0^{(+)}$  est nécessaire

$$G_0^{(+)} = - \sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{4\pi^3} \int d\mathbf{k} \frac{|k, \phi_n\rangle \langle k, \phi_n|}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \quad (\text{I-43})$$

Dans cette équation la sommation est sur tous les états discrets et continus  $|\phi_n\rangle$  de la cible atomique et les  $k_n$  sont définies par l'équation

$$k_n^2 = k_i^2 + 2(E_i - E_n) \quad (\text{I-44})$$

La substitution de l'équation (I-43) dans l'équation (I-42) donne

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \frac{-1}{4\pi^3} \sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int d\mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k}, \phi_n \rangle \langle \mathbf{k}, \phi_n | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \quad (\text{I-45})$$

Le calcul de l'intégrale triple qui figure dans cette équation est difficile à résoudre puisqu'il contient généralement des singularités mathématiques. C'est pour cette raison que la résolution numérique de cette intégrale prend un temps important. Ceci même à une autre difficulté dans le calcul du deuxième terme de Born qui est la somme sur tous les états intermédiaires  $|\phi_n\rangle$ . Pour cette raison une bonne approximation est souvent basée sur le remplacement de  $k_n$  dans l'équation (I-45) par une moyenne  $\bar{k}$

$$\bar{k}^2 = k_i^2 + 2(E_i - \bar{E}) \quad (\text{I-46})$$

# CHAPITRE 1 : SECTION EFFICACE



Où  $\bar{E}$  représente une moyenne sur les énergies des états intermédiaires  $|\phi_n\rangle$ . L'équation (I-45) dans ce cas prend la forme suivante

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \frac{-1}{4\pi^3} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int d\mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k}, \phi_n \rangle \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \langle \mathbf{k}, \phi_n | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - \bar{k}^2 - i\eta} \quad (\text{I-47})$$

Nous pouvons maintenant utiliser la relation de fermeture :

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (\text{I-48})$$

Pour trouver pour le deuxième terme de Born l'approximation suivante :

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = -\frac{1}{4\pi^3} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int d\mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - \bar{k}^2 - i\eta} \quad (\text{I-49})$$

Souvent appelée l'approximation de Born simplifier.



## Bibliographie du chapitre I

- [1] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaat T and Willmann K. *Phys. Rev. Lett.* **22**, 89 (1969).
- [2] Amaldi V, Egidi A, Marconero R and Pizzella G. *Rev. Sci. Inst.* **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. *Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact*. Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder, (1977).
- [8] Peterkop R K. *Opt. Spectr.* **13**, 1220 (1961)
- [9] Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989)
- [10] Massey H S W and Mohr C. *Proc. Roy. Soc. A.* **141**, 434 (1933).



## Chapitre 2 : La réaction ( $e, 2e$ ).

### II-1 Introduction

Dans plusieurs domaines de la physique, l'étude de la collision entre un atome cible et un projectile constitue une source d'information très importante et originale de la structure atomique et moléculaire. Cela présente de plus un grand intérêt aussi bien fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes naturels notamment pour la physique des plasmas et la fusion thermonucléaire.

En astrophysique par exemple, les mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) interviennent lors de la formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs.

L'ionisation des atomes ou des ions par impact d'électrons, est un processus fondamental en physique atomique. On le retrouve dans différents champs disciplinaires comme l'astrophysique, la physique des plasmas ou bien la physique des matériaux irradiés, ces derniers pouvant être amorphes, cristallins et même organiques

La connaissance de ces mécanismes permet ainsi d'analyser les phénomènes galactiques. Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, l'étude des phénomènes d'ionisation et d'excitation est fondamentale pour le développement de la physique des Généralités sur la théorie des collisions atomiques et moléculaires 7 plasmas de fusion, dans lesquels les collisions conduisent à la production d'ions excités la désexcitation se traduit par l'émission de rayons X. Grâce à des méthodes performantes de spectroscopie, il est possible d'obtenir une estimation précise de la densité, de la température ainsi que la mise en évidence des processus de transfert d'énergie au

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)

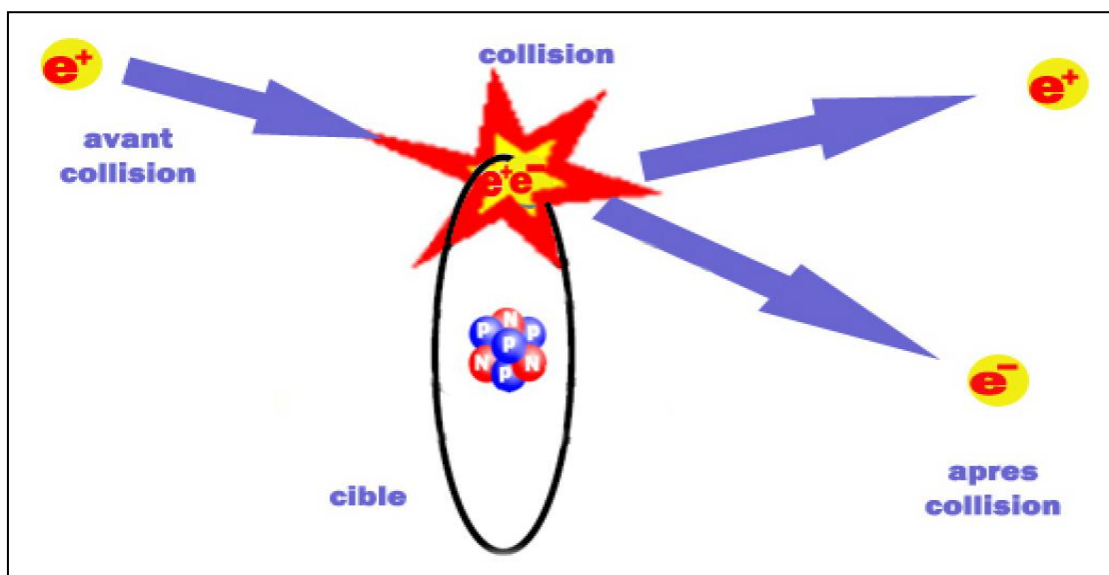


sein de ces plasmas chauds [5], et par conséquent la notion de section efficace totale est fondamentale.

Les sections efficaces de collisions atomiques ont été largement étudiées en fonction des énergies d'impact. Récemment, les expériences de physique nucléaire et biologiques avec des ions fortement chargés dans des accélérateurs de particules ont montré une nouvelle direction des études pour la physique des collisions atomiques.

## II-2- Terminologie et notations

L'ionisation simple par impact électronique est l'arrachement d'un électron de la cible suite à la collision entre un électron de celle-ci. Ce processus consiste à étudier la collision entre un électron projectile et une cible atomique ou moléculaire conformément aux conditions usuelles d'expérimentation la cible au repos et orientée de façon quelconque bombardée par un faisceau monocinétique d'électrons d'énergie supérieure au premier potentiel d'ionisation (figure II.1)

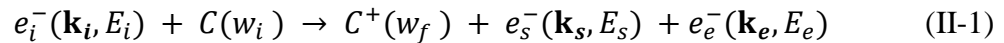


**Figure II.1:** Le processus de simple ionisation avec l'éjection d'un électron.

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



D'une façon générale, la réaction de collision de la simple ionisation par impact électronique, connue chez les chercheurs dans le domaine des collisions atomiques par la réaction (e,2e), peut être représenté comme suite :



Cette équation représente un électron  $e_i^-$  incident avec une énergie  $E_i$  suivant la direction de son vecteur quantité de mouvement  $\mathbf{k}_i$  qui rentre en collision avec une cible atomique  $C$ . Après la collision si l'énergie transférée à cette dernière est suffisamment grande, cette cible éjecte un électron  $e_e^-$  avec une énergie  $E_e$  dans la direction définie par le vecteur quantité de mouvement  $\mathbf{k}_e$  de l'électron éjecté. La cible devient donc un ion résiduel  $C^+$  et l'électron incident qui est la cause de l'excitation de la cible va donc être diffusé avec une énergie  $E_s$  inférieure que  $E_i$  dans la direction de son vecteur quantité de mouvement  $\mathbf{k}_s$ . Après la collision on se retrouve donc avec deux électrons diffusés  $e_s^-$  et éjecté  $e_e^-$ .

La conservation de l'énergie de la réaction question peut donc être écrite sous la forme

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

Où  $E_I$  représente l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale donnée de la cible qui est considérée dans son état fondamental.  $E_r$  représente l'énergie de recul de l'ion  $C^+$ , qui est considérée ici très petite devant les énergies des autres particules. Dans le cadre de cette supposition, cette énergie peut être négligée dans le bilan énergétique.

$$E_i \approx E_s + E_e + E_I \quad (\text{II-3})$$

La conservation de la quantité de mouvement qui représente la deuxième contrainte cinématique de la réaction (e,2e) peut être écrite sous la forme

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_e + \mathbf{Q} \quad (\text{II-4})$$

Où  $\mathbf{Q}$  représente le vecteur moment de recul de l'ion. Un autre vecteur très important dans la théorie des collisions atomiques et le vecteur  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$  qui définit le transfert de moment du projectile à la cible. Dans cette théorie le vecteur  $\mathbf{k}_i$  est souvent choisi selon la direction Oz d'un



# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



référentielle Oxyz, et les directions des vecteurs  $\mathbf{k}_s$  et  $\mathbf{k}_e$  sont définies par les angles sphériques  $(\theta_s, \varphi_s)$  et  $(\theta_e, \varphi_e)$ , respectivement (voir figure II.2).

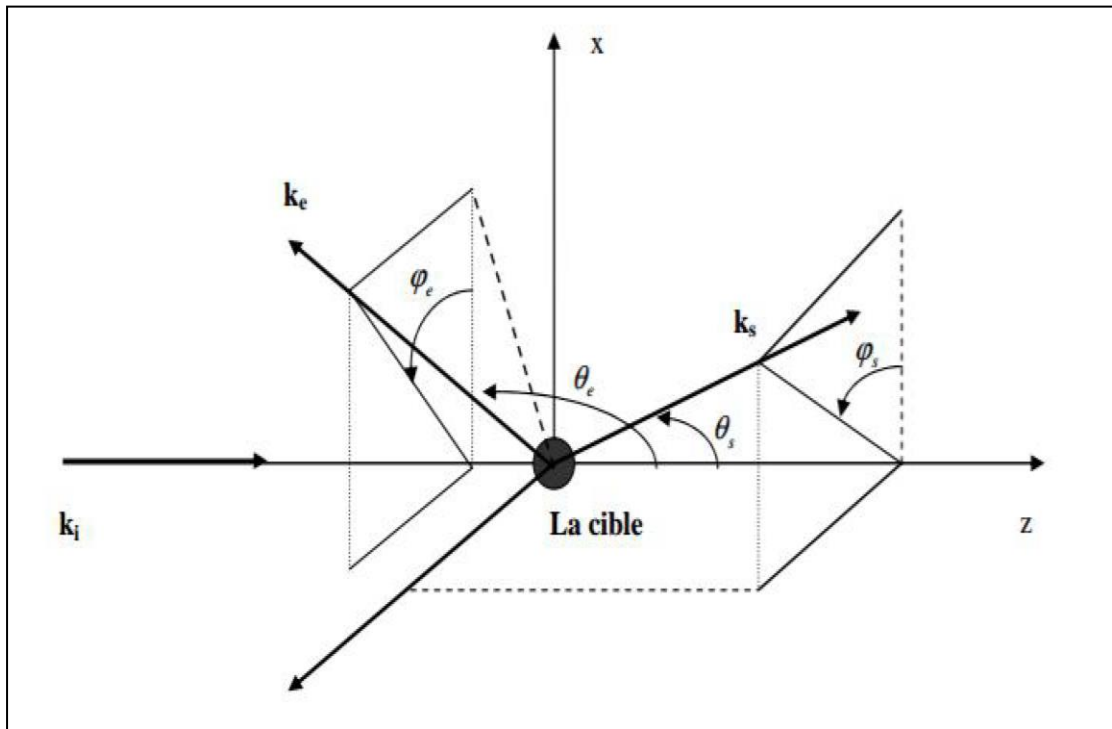


Figure I.2 – Schéma de la réaction (e,2e)

## II-3 Les expériences (e, 2e)

Réalisées à partir de 1969 par Armaldi *et col* [1]. (1969), et Ehrhardt *et col* [2] ces expériences consistent à détecter en coïncidence les deux électrons issus d'une simple ionisation. Elles permettent, pour des **conditions cinématiques particulières**, d'obtenir des informations sur la densité d'impulsion de la cible avant la collision. La plupart des expériences sont étant réalisées dans des conditions géométriques coplanaires, c'est-à-dire avec trois électrons sortants détectés dans un plan contenant les angles  $\theta_s$  et  $\theta_e$  par rapport à la direction d'incidence.

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2e)



## II-4-1 Conditions cinématiques

Le principe de la réaction (e, 2e) consiste à ioniser la cible généralement dans son état fondamental par impact d'électrons. Il en résulte un ion résiduel et deux électrons dans la voie de sortie notés  $e_s$  et  $e_e$ . La réaction en question dépend en général des énergies mises en jeu ainsi que de la valeur du moment de transfert. Ce type de collisions nous fournit directement des informations sur la cible et peut 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 type de collisions peut être coplanaire ou non coplanaire. Elles sont dites coplanaires si les quantités de mouvement des électrons incident, éjecté et diffusé se trouvent dans le même plan.
- Les collisions (e, 2e) asymétriques coplanaires où l'électron diffusé est bien plus rapide que l'électron éjecté.

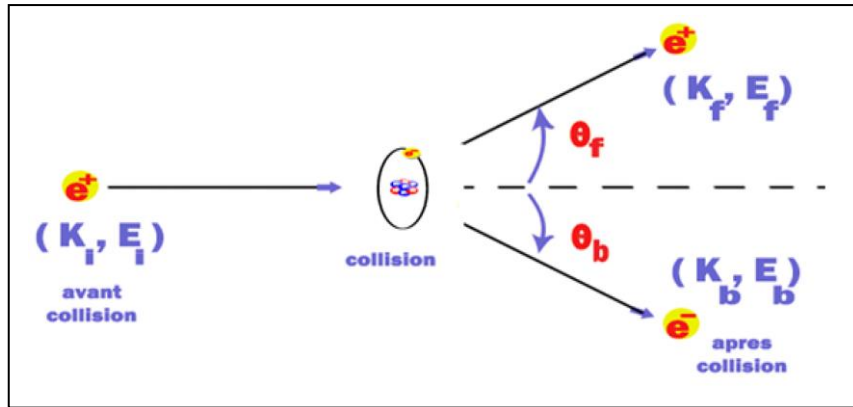
### II-4-1-1 Géométrie symétrique :

Dans la géométrie symétrique, les deux électrons diffusé et éjecté sont détectés avec des énergies égales  $E_s = E_e = \frac{E_i - E_f}{2}$ . Dans cette géométrie on distingue deux types : coplanaire et non coplanaire.

#### II-4-1-1-1 Géométrie symétrique coplanaire :

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 ( Figure II.3).

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



**Figure II.3:** Collision (e, 2e) avec une géométrie coplanaire symétrique. Les vecteurs quantités de mouvement se trouvent dans le même plan et les énergies et les angles sont égales  $E_s = E_e$  et

$$\theta_e = \theta_s .$$

Dans ce cas, l'angle de diffusion  $\theta_s$  varie simultanément avec celui de l'électron éjecté  $\theta_e$  tel que :  $\theta_s = \theta_e$  ,  $\varphi_s = 0^\circ$  ,  $\varphi_e = 180^\circ$  , et avec des énergies égales  $E_s = E_e$  et petites devant celle de l'électron incident. Dans ce type de géométrie, la quantité de mouvement de l'ion résiduel  $\mathbf{Q} = \mathbf{q} - \mathbf{k}_e$  sera telle que :

$$q = k_i - 2k_s \cos \theta_s \text{ (car } k_s = k_e \text{ )} \quad (\text{II-5})$$

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

La conservation de l'énergie s'écrit

$$\frac{k_i^2}{2} = \frac{k_s^2}{2} + \frac{k_e^2}{2} + E_I = k_s^2 + E_I \quad (\text{II-6})$$

et en supposant  $E_I$  négligeable devant  $k_s^2$  :

$$\frac{k_i^2}{2} \approx k_s^2 \text{ soit } \cos \theta_s \approx \frac{\sqrt{2}}{2} \text{ d'où } \theta_s \approx 45^\circ \quad (\text{II-7})$$

L'impulsion  $Q$  est faible pour  $\theta_s$  inférieur à  $60^\circ$  et tend vers zéro pour  $\theta_s \approx 45^\circ$  . et lorsque  $\theta_s$  est supérieur à  $90^\circ$  ,  $Q$  devient plus grande et la collision est caractérisée par de grands moments de

## Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



transfert  $q$ . La répulsion électrostatique entre l'électron diffusé et l'électron éjecté (interaction poste-collision) est à prendre en compte si l'angle  $\theta_s$  est faible.

La répartition angulaire finale du processus de la collision fournit l'information sur la structure de la cible. Le facteur d'échange entre les deux électrons n'est pas dans ces conditions négligeable, il joue un rôle important dans la description théorique du mécanisme collisionnel.

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  $25^\circ$  à  $75^\circ$  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 (inférieure que 2 u.a.). Le mécanisme de 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  $117^\circ$ . 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  $45^\circ$ , un pic de recul se manifeste à  $135^\circ$  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  $45^\circ$ . 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  $45^\circ$  par rapport à la direction  $(-\mathbf{k}_i)$ , c'est-à-dire à  $135^\circ$  par rapport à celle de  $(+\mathbf{k}_i)$ . Actuellement on préfère réaliser des expériences (e,2e) symétriques non coplanaires.

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



## II-4-1-1-2 Géométrie symétrique non coplanaire :

Dans ce type de symétrie nous avons aussi  $E_s = E_e$  donc  $k_s = k_e$  et mais les angles azimutaux ne sont pas nuls (cf Figure II.3). L'angle azimutal  $\varphi_e$  varie (mais  $\varphi_s = 0$ ) alors que  $\theta_e = \theta_s = 45^\circ$ .

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

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_e + \mathbf{Q} \quad (\text{II-8})$$

Les composantes du moment de recul s'écrivent :

$$Q_x = -k_s \sin \theta_s [\cos \varphi_s + \cos \varphi_e] \quad (\text{II-9})$$

$$Q_y = -k_s \sin \theta_s [\sin \varphi_s + \sin \varphi_e] \quad (\text{II-10})$$

$$Q_z = k_i - 2k_s \cos \theta_s \quad (\text{II-11})$$

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

$$Q^2 = (k_i - 2k_s \cos \theta_s)^2 + 4k_s^2 \sin^2 \theta_s \cos^2 \left( \frac{\varphi_e}{2} \right) \quad (\text{I-12})$$

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

$$Q^2 = 2k_s^2 \cos^2 \left( \frac{\varphi_e}{2} \right) = k_i^2 \cos^2 \left( \frac{\varphi_e}{2} \right) \quad (\text{I-12})$$

Dans ce type d'expérience  $\varphi_e$  varie peu autour de  $180^\circ$  (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  $\Phi$  tels que  $\Phi = \pi - |\varphi_s - \varphi_e|$  avec  $\Phi = |\varphi_s - \varphi_e|$  étant

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



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 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].

## II-4-1-1 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  $\mathbf{q}$  soit proche de celle du vecteur quantité de mouvement de l'électron éjecté  $\mathbf{k}_e$  ( $q \approx k_e$ ) 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  $10 \times \text{PI}$  et  $E_i \geq 30 \times \text{PI}$  où PI est l'énergie potentielle d'ionisation.

### II-4-1-1-1 Géométrie asymétrique coplanaire :

Dans ce type d'expériences les électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision ( $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s$ ), l'angle de diffusion restant faible ( $\theta_s \leq 15^\circ$ ) alors que l'angle d'éjection est variable entre 0 et  $360^\circ$ .

# Chapitre 2 : Réaction ( $e, 2e$ )



Cette cinématique, connue aussi sous le nom de géométrie d'Ehrhard (Ehrhardt et col. (1969))[12] décrit essentiellement les réactions du régime dipolaire caractérisées par un 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.1984b)[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.

## II-4-1-1-2 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.

# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



## Bibliographie du chapitre II :

- [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).



# Chapitre 2 : Réaction (e, 2 e)



- [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)
- [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, Zurales R W, Lucchese R R, Dal Cappello M C and Dal Cappello C. *J. Phys. B* **22**, 3483 (1989).



## Chapitre 3 : La section efficace de l'atome d'hélium.

### III-1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter la section efficace de l'ionisation simple de l'atome d'hélium. La structure de cette cible atomique est constituée d'un noyau de charge positive ( $Z=2e^-$ ) et deux électrons. Ce problème de collision rentre dans le cadre de problèmes de plusieurs particules. Ces derniers sont connus par être très compliqués à étudier. Pour cette raison les approximations sont implicitement nécessaires afin de trouver un formalisme qui décrit ce problème avec une bonne précision. Afin de réduire le problème de plusieurs électrons dans la réaction  $(e,2e)$ , l'approximation dite du cœur gelé (frozen-core approximation) est souvent utilisée. Pour calculer l'amplitude de transition l'approximation de Born est employée dans ce travail.

### 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 de la cible est

## Chapitre 3 : Section efficace de He



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. Dans le cas où la cible est un atome d'hélium, l'état initial qui correspond à une particule incidente et deux électrons liés peut être décrit par le produit :

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

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

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

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

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

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

Dans le cas où l'interaction poste-collision entre les électrons diffusé et éjecté est importante, il est nécessaire de prendre en compte cette interaction dans la section efficace. Pour ne pas compliquer les calculs nous allons utiliser l'approximation donnée par Kheifets et col [1] où l'interaction poste-collision est décrite par un facteur de normalisation de la fonction de Coulomb, connu par le facteur de Gamow :

# Chapitre 3 : Section efficace de He



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

Où  $\xi_{se} = 1/q_{se}$  et  $\mathbf{q}_{se} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e$ . En multipliant la SETD donnée dans l'équation (III-1) par le facteur de Gamow on obtient l'équation

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

## III-3 Amplitude de transition

Il est difficile de traiter d'une façon détaillée le problème de quatre particules, pour cette raison nous allons utiliser des approximations afin de simplifier le problème. Dans notre étude, l'électron incident est considéré très rapide. Donc le temps de l'interaction de cet électron avec la cible est très court. Nous pouvons alors supposer que le réarrangement des particules de la cible ne s'effectue que après que l'électron diffusé sera très loin du centre de collision. Nous supposons aussi que l'électron éjecté est plus lent que l'électron diffusé 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.

Dans le cas où la cible est un atome d'hélium, donc son orbitale est occupée par deux électrons actifs, les fonctions d'ondes données dans les équations (II.4) et (II.5) qui décrivent les états initial et final du système de collision prennent donc les formes

$$\Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \phi_{AO}(\mathbf{r}_2) \quad (\text{III-10})$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{III-11})$$

Où  $\phi_{AO}(\mathbf{r}_1)$  est une orbitale de l'état fondamental de l'atome d'hélium. Après la collision l'un des deux électrons s'éjecte avec un moment  $\mathbf{k}_e$ . Ce dernier va être décrit par la fonction d'onde du continuum  $\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r})$  et l'autre électron passe à un autre état  $\chi_{OI}(\mathbf{r})$ . Comme ces deux électrons sont indiscernables, l'échange entre eux doit être pris en compte et l'état final  $\Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  prend la forme suivante

## Chapitre 3 : Section efficace de He



$$\Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \chi(\mathbf{r}_2) + \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_2) \chi(\mathbf{r}_1) \right\} \quad (\text{III-12})$$

Le potentiel d'interaction  $V$  prend la forme suivante

$$V = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_2|} \quad (\text{III-13})$$

L'élément  $T_{fi}$  de la matrice de transition peut donc être écrit sous la forme de la somme des deux premiers termes de l'approximation de Born suivant :

$$T_{fi}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) + T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) \quad (\text{III-14})$$

ou

$$T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V | \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{III-15})$$

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V G_0^+ V | \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{III.16})$$

En effectuant une résolution spectrale à l'opérateur de Green  $G_0^+$  (voir le chapitre I, équation (I-43)) nous pouvons écrire le deuxième terme de l'approximation de Born comme suite :

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \frac{1}{4\pi^3} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V | \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \\ \times \langle \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V | \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{III-17})$$

Où  $\rightarrow 0^+$ . La somme est sur tous les états discrets et continus  $\Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  de l'atome d'hydrogène et  $k_n$  est définie par  $k_n^2 = k_i^2 - 2(E_n - E_i)$ ,  $E_n$  étant la valeur propre de l'hamiltonien atomique qui correspond à la fonction propre  $\Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ . En utilisant l'intégrale dite de Bethe [2] :

$$\int \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}_0 = \frac{4\pi}{q^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{III-18})$$

nous pouvons écrire les équations (III-15) et (III-17) sous les forme

## Chapitre 3 : Section efficace de He



$$T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \frac{4\pi}{q^2} \langle \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{III-19})$$

Et

$$\begin{aligned} T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) &= -\frac{4}{\pi} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - k_n^2 - i\eta) q_s^2 q_i^2} \\ &\times \langle \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \\ &\times \langle \Phi_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-20})$$

où  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$  est le moment de transfert,  $\mathbf{q}_i = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}$  et  $\mathbf{q}_s = \mathbf{k} - \mathbf{k}_s$ . En utilisant l'approximation de fermeture (voir chapitre I) nous arrivons à déduire

$$\begin{aligned} T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) &= -\frac{4}{\pi} \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_s^2 q_i^2} \\ &\times \langle \Phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}_2} - 2 | | e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-21})$$

Remplaçons maintenant les fonctions d'ondes par leurs formes données dans les équations (III-10) et (III-12) il vient

$$\begin{aligned} T^{B1} &= \frac{8\pi}{q^2 \sqrt{2}} \left\{ \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \left[ \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle - 2 \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right] \right. \\ &\quad \left. + \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{III-22})$$

$$\begin{aligned} T^{B2} &= \frac{-8}{\pi \sqrt{2}} \left\{ \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \left[ \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle + 4 \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right] \right. \\ &\quad \left. + \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right\} I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s, -i\bar{k}) \\ &- \frac{8}{\pi \sqrt{2}} \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_s^2 q_i^2} \left\{ \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right. \\ &\quad \left. + \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right. \\ &\quad \left. - 2 \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \left[ \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle + \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right] \right. \\ &\quad \left. - 2 \langle \chi_{OI}(\mathbf{r}) | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \left[ \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_s\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle + \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_i\cdot\mathbf{r}} | \phi_{OA}(\mathbf{r}) \rangle \right] \right\} \end{aligned}$$

# Chapitre 3 : Section efficace de He



(III-23)

Nous supposons maintenant que les fonctions d'ondes des états liés  $\phi_{OA}(\mathbf{r})$  et  $\chi_{OI}(\mathbf{r})$  sont développées sur des orbitales de types Slater.

$$\phi_{OA}(\mathbf{r}) = \sum_{\nu=1}^{N_{OA}} \omega_{\nu} S_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{\alpha_{\nu}}(\mathbf{r}) \quad (III-24)$$

$$\chi_{OI}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=1}^{N_{OI}} W_{\mu} R_{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}^{\alpha_{\mu}}(\mathbf{r}) \quad (III-25)$$

Injectons le développement de chaque fonction d'onde dans les équations (III-22) et (III-23

Où  $N_{OI}$  est le nombre des orbitales de type Slater nécessaires pour décrire l'orbitale ionisée.

$$T^{B1} = \frac{8\pi}{q^2\sqrt{2}} \sum_{\nu=1}^{N_{OA}} \sum_{\nu'=1}^{N_{OA}} \sum_{\mu=1}^{N_{OI}} w_{\nu} w_{\nu'} W_{\mu} \left\{ Q_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}} \left[ F_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}}(\mathbf{q}) - 2P_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}} \right] \right. \\ \left. + G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}) P_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}} \right\} \quad (III-26)$$

et

$$T^{B2} = -\frac{8}{\pi\sqrt{2}} \sum_{\nu=1}^{N_{OA}} \sum_{\nu'=1}^{N_{OA}} \sum_{\mu=1}^{N_{OI}} w_{\nu} w_{\nu'} W_{\mu} \left\{ \left( G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}) P_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}} \right. \right. \\ \left. \left. + Q_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}} \left[ F_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}}(\mathbf{q}) + 4P_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}} \right] \right) I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s; -i\bar{k}) \right. \\ \left. + \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta)} q_s^2 q_i^2 \left( G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}_i) F_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}}(\mathbf{q}_s) + G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}_s) F_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}}(\mathbf{q}_i) \right. \right. \\ \left. \left. - 2 \left[ G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}_s) + G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}_i) \right] P_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}} - 2Q_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}} H_{n_{\nu'}l_{\nu'}m_{\nu'}}(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_s) \right) \right\} \quad (III-27)$$

$$\text{avec } Q_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}} = \langle \chi_{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}^{\alpha_{\mu}}(\mathbf{r}) | \phi_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{\alpha_{\nu}}(\mathbf{r}) \rangle \text{ et } G_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}(\mathbf{q}) = \langle \chi_{n_{\mu}l_{\mu}m_{\mu}}^{\alpha_{\mu}}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \phi_{n_{\nu}l_{\nu}m_{\nu}}^{\alpha_{\nu}}(\mathbf{r}) \rangle.$$

Les grandeurs qui figurent dans les équations (III-26) et (III-27) sont bien définies dans la thèse de Sahlaoui [3].

## Chapitre 3 : Section efficace de He



L'état du continuum  $\psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r})$  de l'électron éjecté est décrit ici par la fonction d'onde de Coulomb [4,5] qui satisfait la condition aux limites sortantes :

$$\psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{D_{\xi_e}^{(-)}}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}) {}_1F_1[i\xi_e; 1; -i(\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r} + k_e r)] \quad (\text{III-28})$$

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 un orbitale atomique peut être développée sur une base de type-Slater

$$\phi_{AO}(\mathbf{r}) = \sum_{v=1}^{N_{OA}} w_v R_{n_v}^{\alpha_v}(r) Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{III-29})$$

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

$$R_{n_v}^{\alpha_v}(r) = \frac{(2\alpha_v)^{n_v+1/2}}{\sqrt{(2n_v)!}} r^{n_v-1} e^{-\alpha_v r} \quad (\text{III-30})$$

avec  $\alpha_v$  un paramètre variationnel. Nous avons donc

$$F_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}) = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \left| e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \right| R_{n_v}^{\alpha_v}(r) Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}}) \right\rangle \quad (\text{III-31})$$

$$P_{n_v l_v m_v} = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) \left| R_{n_v}^{\alpha_v}(r) Y_{l_v}^{m_v}(\hat{\mathbf{r}}) \right\rangle \quad (\text{III-32})$$

et

$$H_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i) = F_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}_s) + F_{n_v l_v m_v}(\mathbf{q}_i) \quad (\text{III-33})$$

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-33), (III-32) et (III-31) [6-9].



## Chapitre 3 : Section efficace de He



Le deuxième terme de l'approximation de Born  $T^{B2}$  contient une intégrale tridimensionnelle singulière souvent difficile à résoudre. Ce terme peut être résolu numériquement en utilisant l'approche donnée par Sahlaoui et Bouamoud [8], ou celle donnée par Marchalant et col [10]. L'intégrale tridimensionnelle singulière suivante :

$$I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s; -i\bar{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta)q_i^2 q_s^2} \quad (\text{III-34})$$

Qui figure dans l'équation (III-27) peut être déduit à partir du travail effectué par Byron et col [11], qui peut être exactement évaluée en utilisant la méthode des résidus de Lewis [12].

### III-4 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

$$H = H_0 + V \quad (\text{III-35})$$

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

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \quad (\text{III-36})$$

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 :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\Phi_i\rangle + G_0^{(+)} V |\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{III-37})$$

$$\langle \Psi_f^{(-)}| = \langle \Phi_f| + \langle \Psi_f^{(-)}| V G_0^{(+)} \quad (\text{III-38})$$

Avec

## Chapitre 3 : Section efficace de He



$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \quad (\text{III-39})$$

les deux opérateurs de Green associés à l'hamiltonien  $H_0$ . Les expressions intégrales données dans l'équation (III-36) 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 :

$$\begin{aligned} T_{fi} = & \langle\Psi_f^{(-)A}|V|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_f|V|\Psi_i^{(+A)}\rangle - \langle\Psi_f^{(-)A}|(V - VG_0^{(+)}V)|\Psi_i^{(+A)}\rangle \\ & + \langle\Psi_f^{(-)A} - \Psi_f^{(-)}|(V - VG_0^{(+)}V)|\Psi_i^{(+A)} - \Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{III-40}) \end{aligned}$$

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 (III-40) 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 (III-40) est de second ordre pour l'écart par rapport à la valeur exacte. Gardons seulement les termes de premier ordre de l'écart dans l'équation (III-40) et supprimons l'indice A des fonctions d'ondes approximatives. Nous obtenons la forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger :

$$[T_{fi}] = \langle\Psi_f^{(-)}|V|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_f|V|\Psi_i^{(+)}\rangle - \langle\Psi_f^{(-)}|(V - VG_0^{(+)}V)|\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{III-41})$$

Ce sont les fonctions d'ondes d'essai approximatives qui sont employées dans ce principe variationnel. Il y a trois termes dans l'équation (III-41), si des fonctions 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 (III-41) devient une identité.

Vérifions maintenant que la forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger donnée dans l'équation (III-41) est stationnaire, c-à-d la différentiation  $\delta[T_{fi}] = 0$ , pour des variations

## Chapitre 3 : Section efficace de He



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 :

$$\delta[T_{fi}] = \langle \delta \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle - \langle \delta \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (\text{III-42})$$

Cependant, la fonction d'onde  $|\Psi_i^{(+)}\rangle$  satisfait l'équation de Lippmann-Schwinger (III-37), 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 (III-38). Nous pouvons immédiatement tirer profit du principe variationnel (III-41) en choisissant les fonctions d'essais

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle \rightarrow A |\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{III-43})$$

$$\langle \Psi_f^{(-)} | \rightarrow \langle \Psi_f^{(-)} | B \quad (\text{III-44})$$

où A et B sont des paramètres variationnels. Insérons les expressions (III-43) et (III-44) dans la forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger donnée dans l'équation (III-41) nous trouvons la formule :

$$[T_{fi}] = B \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle + A \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle - AB \langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle \quad (\text{III-45})$$

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

$$\frac{\partial}{\partial A} [T_{fi}] = 0 \quad (\text{III-46})$$

$$\frac{\partial}{\partial B} [T_{fi}] = 0 \quad (\text{III-47})$$

nous obtenons les résultats

$$B = \frac{\langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(-)} \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle} \quad (\text{III-48})$$

## Chapitre 3 : Section efficace de He



$$A = \frac{\langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle} \quad (\text{III-49})$$

En remplaçant ces quantités dans l'expression stationnaire (III-41), nous obtenons la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger

$$[T_{fi}] = \frac{\langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(-)} \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \Psi_i^{(+)} \rangle} \quad (\text{III-50})$$

Notons que ce principe variationnel, de même que la forme bilinéaire (III-41), n'exige pas aux fonctions d'ondes de satisfaire les conditions aux limites, ainsi la forme fractionnelle (III-50) 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 (III-50) 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 (III-50) prend la forme

$$[T_{fi}] = T^{B1} \left( 1 - \frac{T^{B1}}{T^{B1}} \right)^{-1} \quad (\text{III-51})$$

Avec

$$T^{B1} = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle \quad (\text{III-52})$$

$$T^{B1} = \langle \Phi_f | (V G_0^{(+)} V) | \Phi_i \rangle \quad (\text{III-53})$$

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

Si la quantité  $\frac{T^{B1}}{T^{B1}}$  est petite, nous pouvons développer l'expression (III-51) et obtenir le résultat

$$[T_{fi}] = T^{B1} + T^{B2} + \dots \quad (\text{III-54})$$

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 (III-51), qui est basée sur le principe

## Chapitre 3 : Section efficace de He



variationnel, avec seulement deux termes de l'approximation de Born donne un résultat plus précis que la deuxième approximation de Born.



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



## Chapitre 4 : Résultats et discussions

### IV-1 Introduction

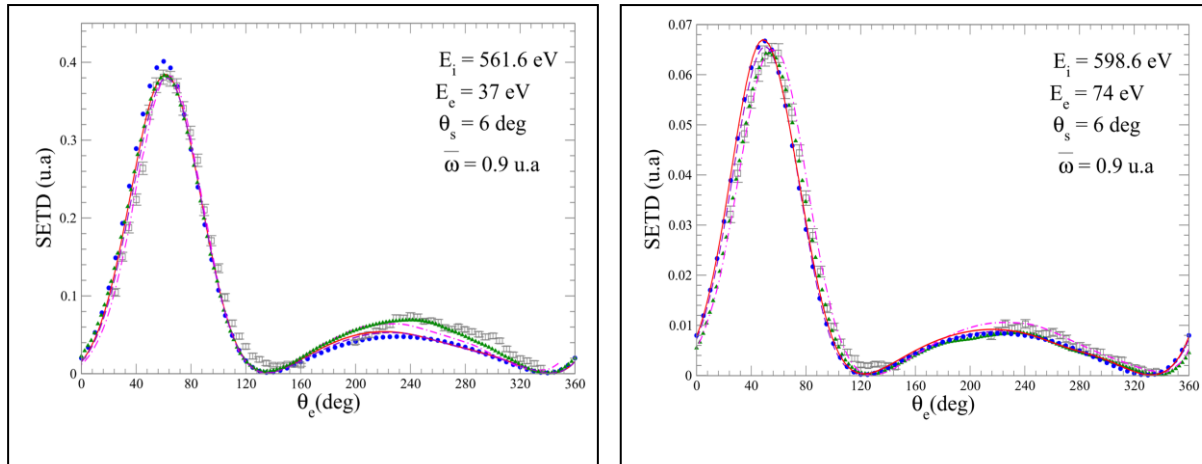
Dans ce chapitre nous allons présenter différents résultats de la section efficace triplement différentielle de la simple ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électron. Les résultats théoriques sont calculés dans le cadre du principe variationnel de Schwinger. Ces résultats sont comparés avec 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  $16^\circ$ . 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  $16^\circ$ . 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  $8^\circ$ . 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  $\theta_e$  qui varient de  $0^\circ$  jusqu'à  $360^\circ$ . 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 4 Résultats et discussions



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

## IV-2 Résultats et discussions



**Figure IV.1** – Section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique tracée en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$  pour la moyenne sur les énergies d'excitation  $\bar{\omega} = 0.9$  u.a. L'énergie d'incidence est  $E_i$ , l'énergie d'éjection est  $E_e$  et l'angle de diffusion est  $\theta_s$ . Cercles pleines et ligne continue nos résultats dans la première et la deuxième approximation de Born, respectivement. Ligne discontinue nos résultats du PVS. Ligne discontinue-pointillée les résultats donnés par le modèle DWBA [1]. Triangles les résultats donnés par le modèle CCC [2]. Carrés ouverts les données de l'expérience [1].

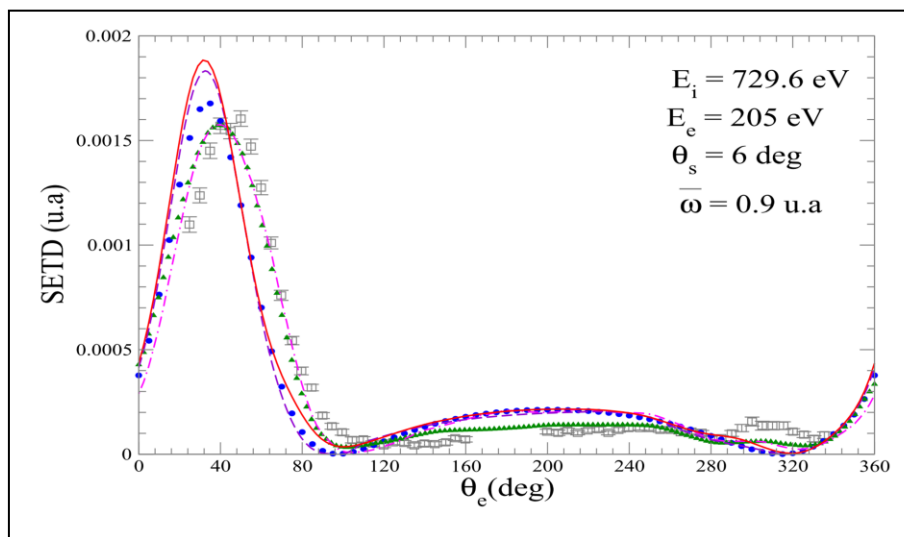
Dans la figure IV.1 nous avons présente les résultats de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique pour les énergies d'incidence  $E_i = 561.6$  eV et  $598.6$  eV très élevées par rapport au potentiel d'ionisation, l'énergie d'éjection  $E_e = 37$  eV est considérée relativement petite,  $E_e = 74$  eV et  $E_e = 205$  eV sont grandes, et l'angle de diffusion est fixé à  $\theta_s = 6^\circ$ . Nos résultats théoriques sont comparés aux données expérimentales et théoriques de Kheifet et col [1], ou le modèle de l'approximation de Born pour une onde distordue (Distorted Wave Born Approximation) a été employer. Nous avons présenté aussi les résultats théoriques obtenus par Naja et col [2] dans le cadre du modèle CCC (Convergent Close-coupling). Nous pouvons voir que les courbes tracées dans le principe



# CHAPITRE 4 Résultats et discussions



variationnel de Schwinger et la deuxième approximation de Born sont presque confondues, et décrivent bien l'expérience surtout dans la région de collision binaire. Nous remarquons aussi que si l'énergie d'éjection est grande le principe variationnel de Schwinger et la deuxième approximation s'éloignent de l'expérience. Nous remarquons que les résultats donnés par les modèles DWBA et CCC sont plus précis que nos résultats dans le cas où l'énergie d'incidence est grande. De cette remarque nous pouvons dire que l'effet du recul de l'ion résiduel sur l'électron éjecté est important et doit être pris en compte.



**Figure IV.2** – Section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique tracée en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$  pour la moyenne sur les énergies d'excitation  $\bar{\omega} = 0.9$  u.a. L'énergie d'incidence est  $E_i$ , l'énergie d'éjection est  $E_e$  et l'angle de diffusion est  $\theta_s$ . Cercles pleines et ligne continue nos résultats dans la première et la deuxième approximation de Born, respectivement. Ligne discontinue nos résultats du PVS. Ligne discontinue-pointillée les résultats donnés par le modèle DWBA [1]. Triangles les résultats donnés par le modèle CCC [2]. Carrés ouverts les données de l'expérience [1].

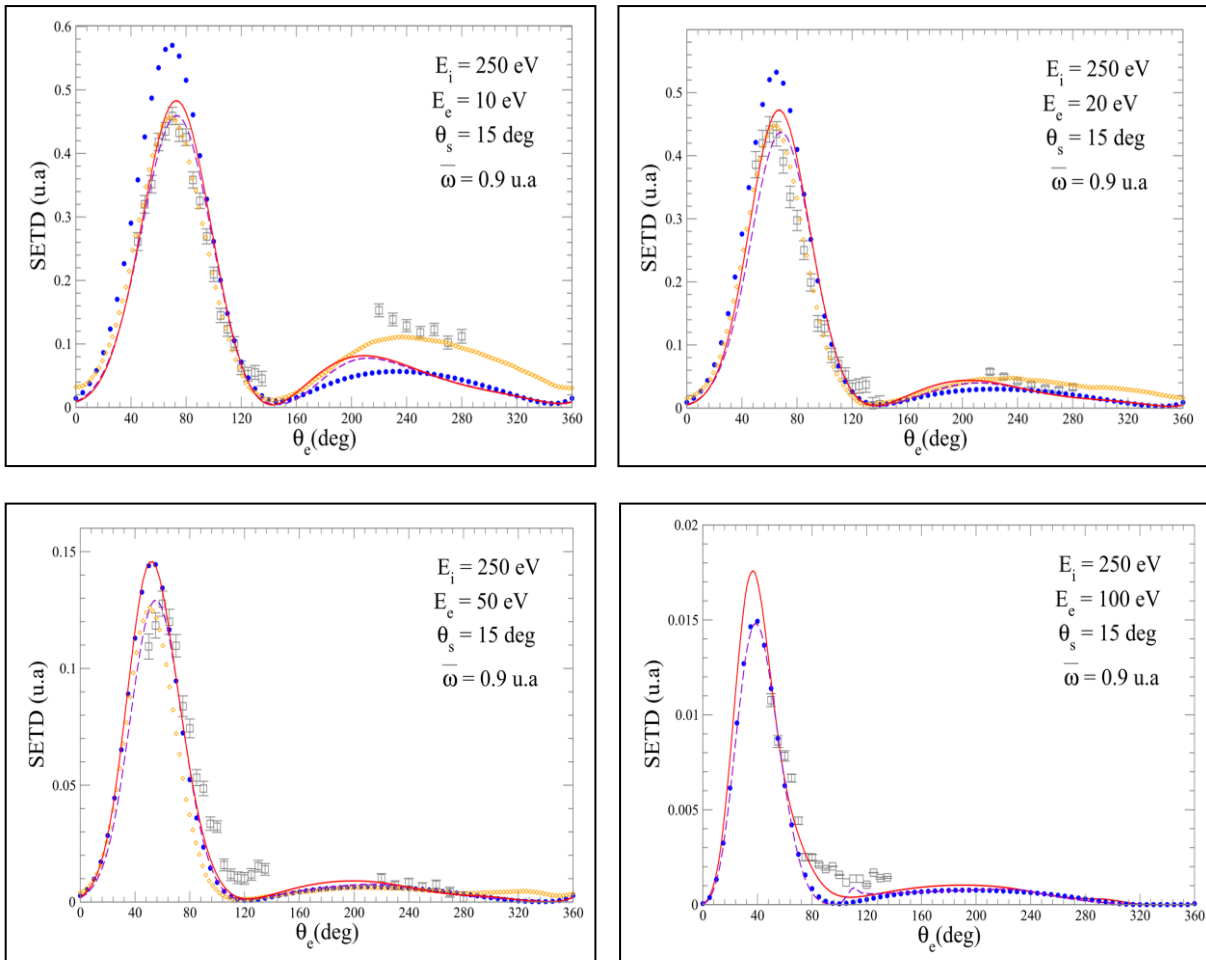
Dans la figure IV.2 nous avons présentée les résultats de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'atome d'hélium pour l'énergie d'incidence  $E_i = 729.6$  eV très élevées par rapport au potentiel d'ionisation et pour une énergie d'éjection  $E_e = 205$  eV très grandes, et l'angle de diffusion est fixé à  $\theta_s = 6^\circ$ . Nous remarquons que dans ces conditions cinématiques la deuxième approximation de Born et le principe variationnel de Schwinger ne sont pas en bon accord avec l'expérience. Il est évident que pour énergies d'incidence  $E_i = 729.6$

## CHAPITRE 4 Résultats et discussions



eV très élevée l'approximation de Born est un très bon choix. L'énergie d'éjection  $E_e = 205$  eV est aussi élevée dans ce cas l'approximation de la fonction d'onde de Coulomb pour décrire la particule éjectée est aussi une bonne approximation. Donc pourquoi il y a un désaccord entre la théorie et l'expérience. Pour expliquer ce désaccord, nous rappelons d'abord que dans l'état final de la réaction  $(e, 2e)$ , c.-à-d. après la collision, deux électrons de même charge 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 devient 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  $E_e = 205$  eV l'interaction post-collision entre les particules sortantes est importante. 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 est 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 dans la littérature une solution plus précise pour ce type de problème présenté par Peterkop [3,4]. Dans le modèle Peterkop connue par le modèle deux fonctions de Coulomb, Peterkop trouve que l'état final constitué de deux électrons qui diffuse dans le continuum peut être décrits dans la région asymptotique par le produit de deux fonctions d'ondes de Coulomb. Nous pouvons trouver aussi le modèle trois fonctions d'ondes de Coulomb présenté par Brauner, Briggs et Klar [5] qui est encore plus précis que celui de Peterkop. Ce dernier représente une solution exacte pour la réaction  $(e, 2e)$  dans la région asymptotique. La puissance de ce modèle réside dans le fait que l'interaction post-collision entre les électrons diffusé et éjecté est très bien décrite. Dans notre formalisme nous avons pris en compte cette interaction mais d'une façon approximative en introduisant le facteur de Gamow [1]. C'est pour cette raison que nous supposons que quand l'énergie d'éjection  $E_e$  devient importante nous remarquons un désaccord entre nos formalismes théoriques et l'expérience.

# CHAPITRE 4 Résultats et discussions



**Figure IV.3** – Section efficace triplement différentielle de l’ionisation de l’atome d’hélium par impact électronique tracée en fonction de l’angle d’éjection  $\theta_e$  pour la moyenne sur les énergies d’excitation  $\bar{\omega} = 0.9$  u.a. L’énergie d’incidence est  $E_i$ , l’énergie d’éjection est  $E_e$  et l’angle de diffusion est  $\theta_s$ . Cercles pleines et ligne continue nos résultats dans la première et la deuxième approximation de Born, respectivement. Ligne discontinue nos résultats du PVS. Diamants les résultats donné par le modèle DWBA [6]. Carrés ouverts les mesures expérimentales de [6].

Dans la figure IV.3 la section efficace triplement différentielle est tracée pour une énergie d’incidence  $E_i = 250$  eV moins élevée comparée à l’énergie de la figure précédente IV.2. L’énergie d’éjection  $E_e$  varie d’une figure à l’autre, 10, 20, 50 et 100 eV pour le même angle de diffusion  $\theta_s = 15^\circ$ . Nos résultats théoriques sont comparés dans cette figure aux données expérimentales de Milne-Brownlie [6] et aux résultats théoriques de Milne-Brownlie [6] obtenus par le modèle DWBA. Nous pouvons voir dans la figure IV.3 que plus l’énergie d’éjection est

## CHAPITRE 4 Résultats et discussions



grande plus la deuxième approximation de Born calculés avec l'approximation de fermeture deviennent moins précise. Nous pouvons voir aussi que plus l'énergie d'incidence et petite plus la région du recul n'est pas bien décrite. Nous pouvons constater aussi que le principe variationnel de Schwinger donne une correction importante dans le cadre de l'approximation de Born. Il est clair que le principe variationnel de Schwinger est aussi plus précis que l'approximation de l'onde distordue dans la région de collision binaire. Cependant, en analysant la région de recule on trouve que c'est l'approximation de l'onde distordue qui est plus précise que le principe variationnel de Schwinger. Il est donc évident que pour des petites énergies d'incidence l'effet de l'ion résiduel sur l'électron éjecté et même sur l'électron diffusé devient important. Ce qui implique de prendre en compte l'effet de la distorsion des fonctions d'ondes par le potentiel crée par l'ion  $H^+$ .

# CHAPITRE 4 Résultats et discussions



## 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] Naja A, Staicu-Casagrande E M, Kheifets A S, Lahmam-Bennani A, Stevenson M, Lohmann B, Dal Cappello C, Bartschat K, Kheifets A, Bray I and Fursa D V. *J. Phys. B :At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 085205 (2008).
- [3] Peterkop R K. *Opt. Spectr.* **13**, 1220 (1961).
- [4] Peterkop R K. *Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact. Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder*, (1977).
- [5] Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989).
- [6] Milne-Brownlie D S. Doctorat Thesis. *Electron Coincidence Studies of Molécules*. Griffith University. School of Science. (2007).



## Conclusion générale

Nous avons vu dans ce travail une application du principe variationnel de Schwinger pour étudier l'ionisation simple de l'atome d'hélium par impact d'électron. Le formalisme variationnel de Schwinger a été employé pour calculer les sections efficaces triplement différentielles. Nous avons présenté dans le dernier chapitre les résultats théoriques de nos calculs dans le cadre du principe variationnel de Schwinger et la deuxième approximation de Born compare avec d'autres résultats théoriques obtenus par l'approximation de Born de l'onde distordue (Distorted Wave Born approximation (DWBA)) et l'approximation du couplage fort convergent (Convergent Close coupling Approximation (CCC)). Tous ces résultats ont été comparés avec les données expérimentaux de Kheifets *et col* [*J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 145201. (2008)] et Milne-Brownlie [Doctorat Thesis. *Electron Coincidence Studies of Molécules*. Griffith University. School of Science. (2007)]. Lors de la discussion des résultats nous avons trouvé que bien que nous avons utilisé la forme fractionnelle la plus simple de l'amplitude de transition dans le cadre du formalisme variationnel de Schwinger, nous avons obtenues des résultats très encourageant. Rappelons que nous avons utilisé l'approximation de Born pour calculer les éléments de la matrice de l'amplitude de transition. Nous avons décrit l'interaction poste collision entre les électrons éjecté et diffué que d'une façon approximative en utilisant le facteur de Gamow. Nous avons décrit l'électron éjecté par une fonction d'onde de Coulomb, c.-à-d. une fonction qui ne contient que l'effet d'un potentielle coulombien avec une charge effective égale à 1. Nous avons décrit aussi l'état fondamental de l'atome d'hélium que par une fonction d'onde approximative qui n'est autre que la résolution de l'équation de Schrödinger avec une méthode variationnelle. Malgré toutes ces approximations, les résultats obtenus sont très satisfaisants.

# CONCLUSION GÉNÉRALE



Pour améliorer la précision de notre formalisme théorique nous visons les choses suivantes :

- Utiliser une fonction d'ondes plus précise pour décrire l'électron éjecté. Nous suggérons d'utiliser une fonction d'onde distordue basée sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger de la diffusion d'une charge dans un potentiel de symétrie sphérique créé par l'ion d'hélium  $H^+$ . Dans ce cas le formalisme variationnel de Schwinger va donner une description plus précise surtout pour la région de recul. Mais dans ce cas l'interaction post-collision ne sera pas correctement décrite ce qui mène à des résultats qui ne sont pas précis dans le cas où l'angle entre les deux particules sortantes est petit ou l'énergie d'éjection est importante. Mais
- Pour décrire l'interaction post-collision correctement nous pouvons utiliser le modèle BBK [Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989)], dans lequel les deux électrons diffusés et éjectés sont décrits par des fonctions d'ondes de Coulomb. Mais dans ce cas l'effet du potentiel de distorsion créé par l'ion ne sera pas pris en compte dans les fonctions d'ondes du continuum. Pour prendre en compte cet effet les fonctions d'onde de Coulomb peuvent être remplacées par des fonctions d'ondes distordues.
- Il ne faut pas oublier aussi l'état initial de l'amplitude de transition qui doit être aussi décrit par une fonction d'onde plus précise.

Finalement nous pouvons dire que le principe variationnel de Schwinger est un outil très puissant pour le calcul des sections efficaces et doit être bien considéré dans la théorie des collisions atomiques.

## *Résumé*

**Notre étude consiste à appliquer le principe variationnel de Schwinger (PVS) qui est un outil très puissant pour le calculer des sections efficaces d'ionisation simple d'un atome à deux électrons. Cette étude va nous permettre aussi de vérifier si nous pouvons utiliser le formalisme PVS pour déterminer le spectre d'ionisation de l'anti-Hydrogène positif (+) par impact de positron et de positronium.**

## *Summary*

**OUR STUDY CONSISTS OF APPLYING THE VARIATIONAL PRINCIPLE OF SCHWINGER (PVS) WHICH IS A VERY POWERFUL TOOL TO CALCULATE SIMPLE IONIZATION CROSS SECTIONS OF ATOMS HAS TWO ELECTRONS. THIS STUDY WILL ALSO ALLOW US TO CHECK IF WE CAN USE THE PVS FORMALISM TO DETERMINE THE IONIZATION SPECTRUM OF THE ANTI-POSITIVE (+) HYDROGEN BY POSITRON AND POSITRONIUM IMPACT**