



FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

THESE DE DOCTORAT

SPECIALITE: PHYSIQUE
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Présentée par:
HADDADOU Atika

Sujet:

***ETUDE DE L'APPROXIMATION DE BORN DU DEUXIEME ORDRE POUR
LES COLLISIONS D'ATOMES ET MOLECULES PAR IMPACT ELECTRONIQUE***

Devant le jury d'examen composé de:

M ^f ZIANE Abdelhamid ;	Professeur ;	U.M.M.T.O ;	Président
M ^f MENAS Ferhat ;	Maître de Conférences classe A;	U.M.M.T.O ;	Directeur de thèse
M ^f DAL CAPPELLO Claude ;	Professeur ;	Université de Metz France ;	Co-directeur de thèse
M ^{me} STAICU CASAGRANDE Elena. Magdalena ;	Maître de Conférences HDR ;	Université d'Orsay France ;	Examineur
M ^f MANSOURI Abdelaziz ;	Professeur ;	Université de Sétif ;	Examineur
M ^f CHAMPION Christophe ;	Maître de Conférences HDR ;	Université de Metz France ;	Examineur

Soutenu le: 24/ 11 /2011

Résumé

Résumé : La seconde approximation de Born nécessite le calcul d'une intégrale numérique triple délicate et souvent les résultats obtenus par différents groupes divergent. Dans ce travail nous étudions en détail la seconde approximation de Born pour le cas le plus simple pour la théorie : l'ionisation de l'atome d'hydrogène par des électrons et des positrons. L'ionisation de l'atome d'hydrogène nous permet de tester très précisément notre modèle car les fonctions d'ondes de cet atome sont connues exactement. De plus, des modèles sophistiqués existent dans ce cas et permettent une comparaison aisée. Nous reportons dans ce travail les résultats de la seconde approximation de Born pour le calcul des sections efficaces triplement différentielles correspondant à l'ionisation de l'atome d'hydrogène en utilisant une première base comportant 100 états discrets et une deuxième base comportant 32 états discrets et pseudo-états. L'ionisation simple de l'hélium est aussi étudiée afin d'élucider une vieille polémique sur des résultats donnés par deux groupes différents de théoriciens. Nous avons aussi appliqué la seconde approximation de Born pour la double ionisation de l'hélium car de nouvelles expériences viennent d'être réalisées très récemment.

Mots clés : *approximation de Born, ionisation simple et double d'atomes, réactions ($e, 2e$), ($e, 3e$).*

Abstract: The second Born approximation needs a difficult triple numerical integral and often many authors find some controversial results. In this study we investigate in a greater detail the second Born approximation for the easier case for the theory: the ionization of atomic hydrogen by electrons and positrons. The ionization of atomic hydrogen allows us to check accurately this approximation because the wavefunctions describing the target are known exactly. Moreover sophisticated models, which can only be applied to simple targets as the atomic hydrogen or the helium atom, lead to easier comparisons. We report in this work accurate second Born results for differential cross sections for the ionization of atomic hydrogen using a basis including 100 discrete states, and another basis including 32 discrete states and pseudo-states. The single ionization of helium is also investigated in order to answer to an old controversy between two different theoretical results. We also apply the second Born approximation for the double ionization of helium because new experiments have been recently performed.

Key-words: *the Born approximation, single and double ionization, collisions ($e, 2e$), ($e, 3e$).*

A la mémoire de mon père

Pour ma mère

Pour mes frères et ma sœur

Remerciements

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (Algérie) en collaboration avec le Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions (LPMC) de l'Université de Metz (France). Je remercie les Professeurs *M'Hand AMAROUCHE* et *Said BOUARAB* directeurs successifs du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (Algérie) de m'avoir accueillie au sein du laboratoire et n'avoir épargné aucun effort pour m'aider à mener à terme ce travail.

Je tiens à remercier *M' Ferhat Menas*, Maître de Conférences Classe A à l'Université de Tizi-Ouzou de m'avoir proposé ce travail en mettant tous les moyens nécessaires au bon déroulement de la présente thèse. Je lui exprime toute ma reconnaissance pour m'avoir encouragée et soutenue jusqu'au terme de ce travail.

Je remercie *M' Claude Dal Cappello*, Professeur à l'Université de Metz, pour avoir beaucoup contribué à la concrétisation de ce travail en le dirigeant conjointement avec Mr Ferhat Menas. Je lui en suis très reconnaissante pour m'avoir témoigné sa confiance et pour sa disponibilité permanente.

Je remercie également *M' Abdelhamid Ziane*, Professeur à l'Université de Tizi-Ouzou de m'avoir fait l'honneur de bien vouloir accepter de présider ce jury. Je lui exprime mes plus vifs remerciements et mon profond respect.

Mes remerciements vont également à *M' Christophe Champion*, Maître de Conférences à l'Université de Metz pour avoir spontanément accepté de faire partie du jury.

Je ne saurai oublier de remercier *M' Abdelaziz Mansouri*, Professeur à l'Université Ferhat Abbas de Sétif pour avoir accepté de faire partie du jury. Je lui en témoigne ma gratitude pour ses encouragements et sa disponibilité pendant mon séjour à Metz.

Mes remerciements vont également à *M^{me} Elena Magdalena Staicu Casagrande*, Maître de Conférences de l'Université de Paris –Sud pour avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie tout le personnel du LPMC (Metz) pour l'accueil qu'ils m'ont offert au cours de mes différents séjours. Je remercie notamment P. Senot (Metz), pour les moyens informatiques mis à ma disposition et sa disponibilité. Ainsi que tous ceux qui ont contribué au bon déroulement de mes séjours en France.

Je remercie tous mes collègues et amis du département de physique.

Je tiens à remercier aussi le staff administratif de la faculté des sciences, et celui du LPCQ.

Table des matières

Introduction	1
CHAPITRE I : Eléments de la théorie des collisions	
I-1.Positionnement du problème.....	4
I-2.Section efficace différentielle	5
I-3.Diffusion d'une particule par un potentiel $V(r)$	7
I-4.Approximation de Born.....	9
I-4-1. Calcul du premier terme de Born	10
I-4-2. Calcul du deuxième terme de Born	11
I-5.Les expériences (e, 2e).....	11
I-5-1 Conditions cinématiques de la réaction (e, 2e).....	11
I-5-2 Collisions (e, 2e) de géométrie symétrique coplanaire	12
I-5-3 Géométrie symétrique non coplanaire.....	14
I-5-4 Collisions (e, 2e) de géométrie asymétrique	16
I-5-4-a).Cas des hautes énergies ($E_0 \geq 600 \text{ eV}$).....	18
I-5-4-b).Cas des énergies intermédiaire ($100 \text{ eV} \leq E_0 \leq 600 \text{ eV}$).....	18
I-5-4-c).Cas des basses énergies ($20 \text{ eV} \leq E_0 \leq 100 \text{ eV}$)	19
I-6. Les expériences (e, 3e)	19
1-6-1. Description de la réaction (e, 3e)	19
1-6-2. Section efficace de double ionisation	21
1-6-3. Section efficace quintuplement différentielle	22
1-6-4. Mécanismes de la réaction (e, 3 e)	22
1-6-4-1. Le mécanisme SO (Shake-Off)	27
1-6-4-2. Le mécanisme TS1 (Two- Step1)	28
1-6-4-3. Le mécanisme TS2 (Two- Step2)	30
1-6-5. Conditions cinématiques de la réaction (e, 3e) 32	
1-6-5-1. Régime asymétrique	32
1-6-5-1-a). Géométrie coplanaire asymétrique	33
1-6-5-1-b). Géométrie non coplanaire asymétrique	33
1-6-5-2. Régime symétrique.....	34
1-6-5-1-a). Géométrie coplanaire symétrique	34
1-6-5-1-b). Géométrie non coplanaire symétrique	34
I-7.Références	36
CHAPITRE II : La deuxième approximation de Born pour la simple ionisation de l'atome d'hydrogène et la double ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électrons et de positrons	
II-1-Introduction	36
II-2-Application de la deuxième approximation de Born	37
II-2-1. L'ionisation de l'atome d'hydrogène	37

II-2-2. La simple ionisation de l'atome d'hydrogène	48
II-2-3. La double ionisation de l'hélium	41
II-3. Références	46

CHAPITRE III : Résultats et discussions

III-1. Sections efficaces triplement différentielles pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène pour les états $n=1$ et $n=2$	52
III-2. Section efficaces triplement différentielles pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène pour les états $n=1$ à $n=10$	53
III-3. Sections efficaces triplement différentielles l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons et de positrons	53
III-3-1. SETD pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons	54
III-3-1-1. Cas pour un faible moment de transfert avec $\theta_s = 3^\circ$	54
III-3-1-2. Cas pour un grand moment de transfert avec $\theta_s = 8^\circ$	57
III-3-1-3. Cas de la relation de fermeture avec $\theta_s = 3^\circ$ et $\theta_s = 8^\circ$	60
III-3-1-4. Cas de la contribution des états de continuum.....	64
III-3-1-5. Comparaison des résultats théorique SETD avec le modèle BBK et l'expérience	66
III-3-2. SETD pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact de positrons	70
III-3-3. SETD pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons pour $\theta_s = 15^\circ$ et $\theta_s = 25^\circ$	73
III-4. SETD et SE4D pour la double ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électrons et de positrons	78
III-3-4-1. SETD pour la simple ionisation de l'hélium par impact d'électrons	79
III-3-4-2. SETD pour la double ionisation de l'hélium par impact d'électrons	80
III-3-4-3. SE4TD pour la double ionisation de l'hélium par impact d'électrons et de positrons	81
III-5. Conclusion	84
III-6. Références	85
V. Conclusion Générale	87
IV. Annexe	89

INTRODUCTION

INTRODUCTION

L'interaction de particules chargées avec des cibles atomiques ou moléculaires est encore aujourd'hui l'un des moyens les plus pertinents pour l'étude de la structure de la matière. Ce type d'étude est également fondamental en physique des plasmas, en astrophysique et en biologie. Si on peut considérer que le problème de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons est quasiment résolu (Rescigno et al. 1999)[1], la méthode utilisée à ce propos est inapplicable pour les autres cibles qu'elles soient atomiques ou moléculaires.

Notre but étant l'étude de l'ionisation simple et double d'atomes et de molécules il nous faut trouver un modèle capable de reproduire les principaux résultats expérimentaux relatifs à l'ionisation de l'atome d'hydrogène et applicable à l'ionisation d'atomes et de molécules.

Le développement de Born (1926) [2] est l'un des traitements les plus utilisés tant que l'énergie incidente est grande devant l'énergie d'ionisation d'un électron de la cible étudiée. Mais, dans la plupart des cas, ce développement est limité au seul premier terme et ne rend pas compte des résultats des expériences. La limitation au premier terme est due à la difficulté numérique du calcul du second terme. Byron et al. (1983) [3] ont été les premiers à le réaliser. Mais seuls l'état fondamental $n=1$ et les états excités $n=2$ ont été pris en compte par la suite dans ce calcul, les auteurs appliquant la relation de fermeture pour évaluer les autres contributions.

Depuis ce travail de pionnier (Piroux et al. (1983)) [4] seules quelques études ont été réalisées. Fang et Bartschat (2001) [5] continuent à utiliser la seconde approximation de Born avec des traitements sophistiqués tel que le modèle de **DWBA (Distored Wave Born Approximation)** mais en ne calculant qu'une partie des termes. Watanabe et al. (2007) [6] ont réalisé une étude plus complète de l'ionisation et de l'ionisation avec excitation de l'hélium dans des conditions dites symétriques (l'électron diffusé a même énergie que l'électron éjecté) en utilisant le modèle très simple des ondes planes pour représenter les électron incident, diffusé et éjecté. Houamer et al. (2003) [7] ont appliqué la seconde approximation pour l'étude de l'ionisation de H_2 dans des conditions dissymétriques (l'électron diffusé est plus rapide que l'électron éjecté) mais avec la relation de fermeture. Mansouri et al. (2004) [8] ont aussi utilisé la seconde approximation de Born avec la relation de fermeture pour l'ionisation double de H_2 .

Choubisa et al. (2003) [9] puis Grin et al. (2000) [10] ont eux étudié la double ionisation de l'hélium toujours avec la relation de fermeture mais avec un modèle analogue à celui de Mansouri et al. (2004) [8] : chaque électron éjecté est décrit par une seule onde coulombienne et l'interaction électron éjecté-électron éjecté est modélisée par le facteur de Gamow. Ancarani et Dal Cappello (2005) [11] ont étudié ce même processus mais avec un meilleur modèle, appelé BBK (Brauner et al. (1989)) [12], tout en utilisant la relation de fermeture. Kheifets (2004) [13] a appliqué la seconde approximation de Born en utilisant le modèle CCC (Convergent Close Coupling) pour la double ionisation de l'hélium mais uniquement pour les moments de transfert très faibles.

A la vue de toutes ces études il nous est apparu comme indispensable de reprendre le problème de l'ionisation de l'atome d'hydrogène en calculant " toutes " les contributions de $n=1$ à $n=10$ des états fondamentaux et excités de l'atome d'hydrogène, puis d'étudier en détail la relation de fermeture.

Nous avons aussi tenté de prendre en compte les contributions des états du continuum de l'atome d'hydrogène en utilisant la relation de fermeture ou en utilisant une base de pseudo-états. Puis, à l'aide du modèle plus sophistiqué BBK (Brauner et al. (1989)) [12], qui prend en compte à tout ordre (mais de manière approchée) l'interaction continue électron diffusé-électron éjecté, nous avons pu comparer nos résultats à ceux des expériences.

Enfin nous avons appliqué notre modèle à la simple ionisation de l'hélium puis à la double ionisation de l'hélium pour laquelle de toutes nouvelles expériences viennent d'être réalisées (Lahmam-Bennani et al. (2010))[14]. Nous avons aussi appliqué notre modèle à l'ionisation (et à la double ionisation) par impact de positrons.

Cette étude pourra facilement se transposer à l'ionisation d'atomes et de molécules plus complexes à condition de bien connaître les fonctions d'ondes décrivant les états excités et les pseudo-états.

Références :

- [1] Rescigno T N, Baertschy M, Isaacs W A and Mc Curdy C W *Science* **286**, 2474 (1999).
- [2] Born M, *Z.Phys.* **38**, 803 (1926).
- [3] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B* **13** L673-676 (1980).
- [4] Piraux B, *Thèse de doctorat*, Université catholique de Louvain (1982).
- [5] Fang Y and Bartschat K, *J. Phys. B* **34**, L19 (2001).
- [6] Watanabe N, Takahashi M, Udagawa Y, Kouzakov K A and Popov Yu V, *Phys Rev A* **78**, 052701 (2007).
- [7] Houamer S, Mansouri A, Dal Cappello C, Lahmam-Bennani A, Elazzouzi S, I. Moulay and I. Charpentier, *J. Phys B* **36**, 3009-3024 (2003).
- [8] Mansouri A, Dal Cappello C, Houamer S, Charpentier I and Lahmam-Bennani A, *J.Phys.B* **37**, 1203 (2004).
- [9] Choubisa R, Purohit G and Sud K K, *J. Phys B* **36**, 1731 (2003).
- [10] Grin M, Dal Cappello C, El Mkhater R and Rasch J, *J. Phys . B* **33**, 131-141 (2000).
- [11] Ancarani L U, Montagnese T and Dal Cappello C, *Inst. Phys. Conf. Ser.* **183**, 21 (2005).
- [12] Brauner M, Briggs J S and Klar H, *J. Phys.B* **22**,2265 (1989).
- [13] Kheifets A, *Phys Rev A* **69**, 032712 (2004).
- [14] Lahmam-Bennani A, Staicu-Casagrande E M, Naja A, Dal Cappello C and Bolognesi P *J. Phys. B:* **43**, 105201 (2010).

CHAPITRE I

Généralités : Eléments de la théorie des collisions

Chapitre 1

Généralités : Eléments de la théorie des collisions

Dans ce chapitre nous présentons quelques brèves généralités sur la théorie des collisions élastiques que l'on pourra ensuite transposer au cas des collisions inélastiques. Le but est d'introduire les notions de section efficace et d'amplitude de diffusion. Puis nous étudierons un peu plus en détail l'approximation de Born qui constitue un des points importants du travail élaboré dans le cadre de cette thèse.

I-1. Positionnement du problème

Nous allons utiliser l'exemple simple de la diffusion d'une particule par une cible. Notre problème consiste à étudier l'interaction d'une particule de masse μ et d'énergie $E = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, \vec{k} désigne le vecteur d'onde de la particule et on a $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$, (λ étant sa longueur d'onde) avec un potentiel $V(\vec{r})$ représentant la cible. Cette particule incidente peut être un électron ou un positron par exemple. La cible est soit un atome, un ion ou une molécule. Dans toute cette étude nous noterons \vec{k}_i et \vec{k}_s les vecteurs d'ondes respectifs de la particule incidente puis de la particule diffusée. Les coordonnées sphériques de la particule incidente et diffusée seront notées (r, θ, φ) . Lors de l'expérience, un faisceau incident d'électrons (ou de positrons) d'énergie connue est dirigé sur une cible (en général un gaz à faible pression d'atomes ou d'ions ou de molécules) et interagit avec celle-ci (Grin (2000)) [1]. Il en résulte que les électrons incidents vont être diffusés dans différentes directions selon la manière dont ils vont interagir avec la cible et donc selon certains mécanismes collisionnels. Ces électrons diffusés sont ensuite analysés par des détecteurs mobiles de l'autre côté de la cible et sont ainsi comptés (voir figure I.1).

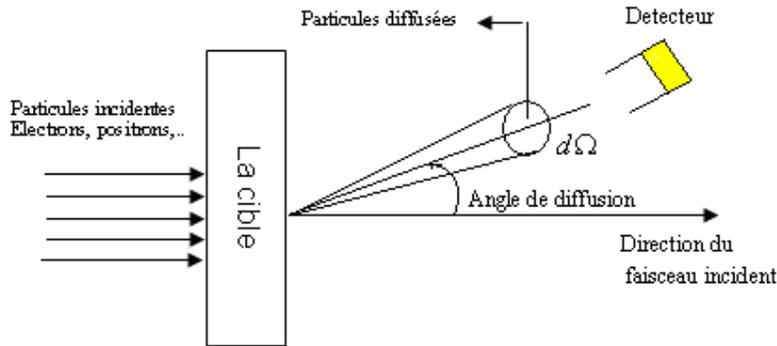


Figure I.1 : *Expérience de collision entre des particules incidentes et les particules d'une cible atomique ou moléculaire*

I-2. Section efficace différentielle

L'une des plus importantes quantités à déterminer dans les expériences de diffusion est la section efficace de diffusion. Considérons le dispositif illustré sur la figure (I.1) où nous avons un faisceau incident de particules dirigées vers la cible et un détecteur placé loin de la zone d'interaction des particules incidentes avec la cible. Parmi les particules incidentes de ce faisceau, certaines vont interagir avec la cible et donc être diffusées. La section efficace totale σ représente le coefficient de proportionnalité qui, une fois appliqué au flux incident F_i , nous donne le nombre n de particules diffusées par unité de temps par la cible (Grin (2000))[1]. On a donc :

$$n = \sigma \cdot F_i. \quad (\text{II.1})$$

La section efficace a la dimension d'une surface. Si on veut connaître le nombre de particules diffusées par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi$ il suffit alors de prendre la section efficace totale et de la différencier par rapport à cet angle solide :

$$\frac{dn}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega} \cdot F_i. \quad (\text{I.2})$$

Le terme $\frac{d\sigma}{d\Omega}$, que l'on appellera section *efficace différentielle*, représente, comme pour le cas de la section efficace totale, le coefficient de proportionnalité qu'il faut appliquer au flux incident pour obtenir le nombre de particules qui seront diffusées par unité de temps mais cette fois dans un angle solide $d\Omega$ précis.

Il existe plusieurs manières de trouver une expression pour la section efficace différentielle. L'une d'entre elles est d'utiliser les courants de probabilité. En effet, on conçoit facilement que le flux incident F_i est proportionnel à la norme du vecteur \vec{J}_i (courant de probabilité lié à la particule incidente). Ainsi :

$$F_i = C |\vec{J}_i| . \quad (\text{I.3})$$

De même, le nombre de particules qui vont être diffusées par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ (situé à une distance r et comportant une surface d'aire $dS = r^2 d\Omega$ perpendiculaire à la direction (θ, φ)) s'écrit :

$$\frac{dn}{r^2 d\Omega} = C |\vec{J}_d| , \quad (\text{I.4})$$

où \vec{J}_d est le vecteur courant de probabilité lié à la particule diffusée. Ceci nous permet alors avec l'équation (I.2) d'écrire :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\vec{J}_d|}{|\vec{J}_i|} r^2 . \quad (\text{I.5})$$

L'expression du courant de probabilité $\vec{J}(\vec{r})$ associé à une particule de masse μ et de fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ est :

$$\vec{J}(\vec{r}) = \frac{1}{\mu} \Re e \left[-i\hbar \psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) \right] . \quad (\text{I.6})$$

Ainsi en décrivant l'électron incident par une onde plane

$$\psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{I.7})$$

et l'électron diffusé par la fonction suivante

$$\psi_d(\vec{r}) = f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r} , \quad (\text{I.8})$$

où $f_k(\theta, \varphi)$ est appelé amplitude de diffusion, on obtient alors, en utilisant le gradient en coordonnées sphériques, et en faisant quelques approximations puisque l'on travaille à des r très grands :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f_k^*(\theta, \varphi) f_k(\theta, \varphi) = |f_k(\theta, \varphi)|^2 . \quad (\text{I.9})$$

La section efficace différentielle est donc simplement donnée par le carré du module de l'amplitude de diffusion.

I-3. Diffusion d'une particule par un potentiel $V(\mathbf{r})$

Le calcul de la section efficace revient à résoudre l'équation de Schrödinger avec une condition asymptotique appropriée. Prenons l'exemple simple de la collision entre deux particules.

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E_r \psi(\vec{r}) , \quad (\text{I.10})$$

où le vecteur impulsion, l'énergie et le potentiel sont donnés respectivement par :

$$\vec{p} = i\hbar \vec{\nabla}, \quad E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \quad V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} u(\vec{r}) \quad \text{et} \quad \mu = \frac{m_A m_B}{M} .$$

En posant

$$u(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\vec{r}), \quad k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_r ,$$

l'équation aux valeurs propre (I.10), se ramène aisément à :

$$\left(\Delta + k^2 \right) \psi(\vec{r}) = u(\vec{r}) \psi(\vec{r}) . \quad (\text{I.11})$$

La solution de l'équation (I.11) sans second membre (donc la description de l'onde en l'absence de potentiel) n'est autre qu'une onde plane $\psi_{\vec{k}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, et l'hypothèse de notre problème nous impose alors $\vec{k} = \vec{k}_i$.

On recherche maintenant une fonction $\psi(\vec{r})$ solution particulière de (I.11) sous la forme :

$$\psi(\vec{r}) = \int_{\vec{k}} f_{\vec{k}} d\vec{k} . \quad (\text{I.12})$$

Cette résolution nous conduit à :

$$\psi(\vec{r}) = \int G(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.13})$$

$\psi(\vec{r})$ de l'équation (I.13) est dite *équation intégrale* de la diffusion avec $G(\vec{r}, \vec{r}')$ qui représente la fonction de Green donnée par la relation suivante :

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{8\pi^3} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 - k'^2} d\vec{k}$$

$\psi(\vec{r})$ s'écrit alors :

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \left(\int \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 - k'^2} d\vec{k} \right) u(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.14})$$

La solution générale de l'équation intégrale de diffusion de l'équation (I.13) n'est en fait rien d'autre que la somme de la solution de l'équation sans second membre et de la solution particulière que l'on vient de trouver. On a alors :

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \int G(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.15})$$

Soit :

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \underbrace{\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\vec{k} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} u(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}'}_{G^+(\vec{r}, \vec{r}')} \quad (\text{I.16})$$

Parmi les deux fonctions de Green possibles nous choisissons pour l'expression (I.16) celle dite sortante G^+ qui s'écrit :

$$G^+(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} .$$

La forme asymptotique de cette solution se déduit en considérant $r \gg r'$ car r' ne concerne que l'espace autour de $u(\vec{r}')$. (Voir figure I.2).

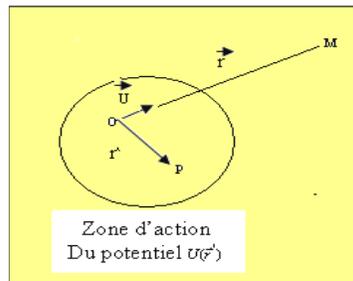


Figure I.2 : Conditions asymptotiques

En posant $\vec{r} = r\vec{u}$ (\vec{u} unitaire), on obtient alors en faisant un développement limité au premier ordre :

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2r\vec{u} \cdot \vec{r}'} = r \sqrt{1 + \frac{r'^2}{r^2} - 2\frac{\vec{u} \cdot \vec{r}'}{r}} = r \left(1 - \frac{\vec{u} \cdot \vec{r}'}{r}\right) = r - \vec{u} \cdot \vec{r}' ,$$

d'où

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \frac{1}{4\pi} \int \frac{u(\vec{r}') e^{ikr} \cdot e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \psi(\vec{r}') d\vec{r}'}{r} \text{ avec}$$

$\vec{k} = k\vec{u}$ qui est la direction de la particule diffusée.

On obtient donc une forme asymptotique pour l'onde diffusée du type :

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{I.17})$$

avec $f_k(\theta, \varphi)$ définie comme l'amplitude de diffusion.

L'amplitude de diffusion dans ce cas est la superposition d'une onde plane incidente et d'une onde sphérique diffusée (Cohen-Tanoudji ed (1973))[2]. Elle est donnée alors par la forme suivante :

$$f_k(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\pi} \left\langle e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} \left| u(\vec{r}') \right| \psi(\vec{r}') \right\rangle \quad (\text{I.18})$$

La section efficace est définie comme étant le carré du module de l'amplitude de diffusion de la particule :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f_k(\theta, \varphi) \cdot f_k^*(\theta, \varphi) \quad (\text{I.19})$$

Il reste à déterminer l'amplitude de diffusion présente dans l'équation (I.18).

I-4. Approximation de Born :

Le but de notre problème est d'obtenir la section efficace différentielle puisque c'est elle que l'on peut mesurer lors des expériences. On a vu précédemment que cette section efficace différentielle n'est en fait rien d'autre que le carré du module de l'amplitude de diffusion de la particule. La résolution mathématique du problème

nous a ensuite permis d'obtenir, en tenant compte des conditions asymptotiques du problème, l'expression de cette amplitude de diffusion qui est :

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}_d \cdot \vec{r}} u(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} . \quad (1.20)$$

On veut maintenant une expression de cette amplitude de diffusion mais qui ne contienne plus $\psi(\vec{r})$. Pour cela, on va utiliser l'approximation de Born qui consiste à obtenir l'expression de $f_k(\theta, \varphi)$ par itérations successives (Atkins ed (1996))[3] sur $\psi(\vec{r})$. En effet :

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \frac{1}{4\pi} \int G^+(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' . \quad (I.21)$$

Cette expression peut également se mettre sous la forme :

$$\psi(\vec{r}') = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} + \frac{1}{4\pi} \int G^+(\vec{r}', \vec{r}'') u(\vec{r}'') \psi(\vec{r}'') d\vec{r}'' . \quad (I.22)$$

Ceci permet d'écrire, en remplaçant (I.21) dans (I.22)

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \frac{1}{4\pi} \int G^+(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') \left[e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} + \int G^+(\vec{r}', \vec{r}'') u(\vec{r}'') \psi(\vec{r}'') d\vec{r}'' \right] d\vec{r}' \\ &= e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \int e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} G^+(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') d\vec{r}' + \dots \end{aligned}$$

On utilise maintenant cette expression de $\psi(\vec{r})$ dans celle de $f_k(\theta, \varphi)$ qui devient donc elle-même un développement de plusieurs termes.

Calculons maintenant les deux premiers qui sont respectivement le terme Born 1 noté f_{B1} et le terme Born2 noté f_{B2} .

I-4-1. Calcul du premier terme de Born f_{B1}

Posons : $\psi(\vec{r}') = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'}$

$$f_{B1} = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u(\vec{r}) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} d\vec{r}$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \langle e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} | u(\vec{r}) | e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \rangle \quad (\text{I.23})$$

Expression dans laquelle apparaît le moment du transfert $\vec{k}_i - \vec{k}'$.

Ce premier terme rend compte d'une interaction entre la particule incidente et la cible.

Dans la suite de notre travail nous noterons $\vec{k}' = \vec{k}_s$ et $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$.

I-4-2. Calcul du deuxième terme de Born f_{B2}

Pour le calcul de ce terme on pose $\psi(\vec{r}') = \int e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} G^+(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') d\vec{r}'$ et on obtient cette fois, et en se servant de l'expression de la fonction de Green :

$$\begin{aligned} f_{B2} &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} u(\vec{r}) \left(\int e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} G^+(\vec{r}, \vec{r}') u(\vec{r}') d\vec{r}' \right) d\vec{r} \\ &= -\frac{1}{32\pi^4} \int \frac{1}{k_i^2 - K^2} \langle e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} | u(\vec{r}') | e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}'} \rangle \langle e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} | u(\vec{r}') | e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \rangle dK \end{aligned} \quad (\text{I.24})$$

Ici nous avons deux interactions de la particule incidente avec la cible.

I-5. Les expériences (e, 2e)

Réalisées à partir de 1969 par (Armaldi et al. (1969), et Ehrhardt et al. (1969)) [4,5] 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.

I-5.1 Conditions cinématiques de la réaction (e, 2e)

Le principe de cette réaction 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 respectivement e_s , e_e . Le processus peut être schématisé comme le montre la figure I.3 suivante :

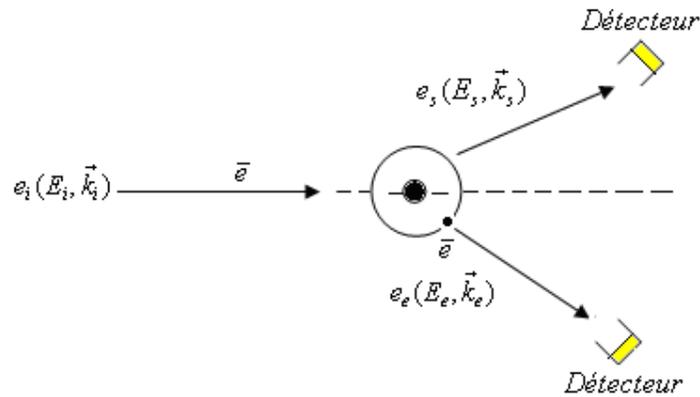


Figure I.3: Schéma d'une collision (e, 2e)

(avec respectivement \vec{k}_i, \vec{k}_s et \vec{k}_e représentant les quantités de mouvement des électrons et E_i, E_s et E_e les énergies cinétiques).

La réaction (e, 2e) dépend en général des énergies mises en jeu ainsi que de la valeur du moment de transfert.

Ce type de collisions (e, 2e) dit **spectroscopique** 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)) [6] pour lesquelles l'électron diffusé a même énergie que l'électron éjecté. Ce type de collisions peut être coplanaire ou non coplanaire. Elles sont dites coplanaire si les quantités de mouvement des électrons incident, éjecté et diffusé se trouvent dans le même plan.
- les collisions (e, 2e) asymétriques coplanaire où l'électron diffusé est bien plus rapide que l'électron éjecté.

I-5.2 Collisions (e, 2e) à géométrie symétrique coplanaire

Dans ce type d'expériences, les deux électrons dans la voie de sortie sont détectés avec des énergies égales $E_s = E_e = \frac{E_i - E_I}{2}$ et des angles polaires égaux, c'est-à-dire que l'angle de diffusion θ_s de l'électron incident varie simultanément avec celui de l'électron éjecté θ_e (figure I.4) tel que : $\theta_s = \theta_e, \varphi_s = 0, \varphi_e = 180^\circ, E_I$ étant l'énergie d'ionisation.

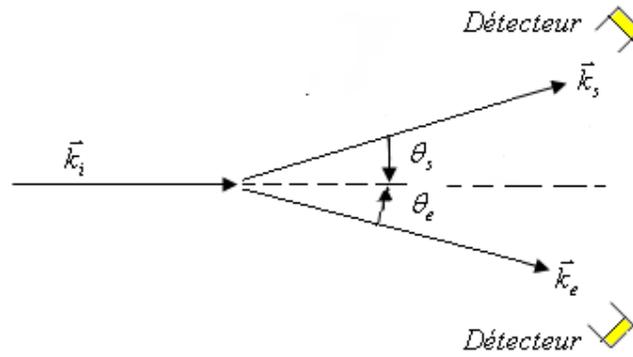


Figure I.4: Collision ($e, 2e$) avec une géométrie coplanaire symétrique

Dans ce cas, la quantité de mouvement de l'ion résiduel \vec{q} sera telle que :

$$\vec{q} = \vec{K} - \vec{k}_e \quad \text{et ici} \quad q = k_i - 2k_s \cos \theta_s \quad \text{car } k_s = k_e.$$

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

La conservation de l'énergie s'écrit

$$\frac{k_i^2}{2} = \frac{k_s^2}{2} + \frac{k_e^2}{2} + E_I$$

et en supposant E_I négligeable devant k_s^2 :

$$\frac{k_i^2}{2} \approx k_s^2 \quad \text{soit} \quad \cos \theta_s \approx \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \text{d'où } \theta_s = \theta_e \approx 45^\circ$$

L'impulsion \vec{q} est faible pour θ_s inférieur à 60° et tend vers zéro pour $\theta_s = 45^\circ$,

et lorsque θ_s est supérieur à 90° , \vec{q} devient plus grande et la collision est caractérisée par de grands moments de transfert \vec{K} .

La répulsion électrostatique entre l'électron diffusé et l'électron éjecté est à prendre en compte si l'angle θ_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 al. (1969)) [4], a été largement suivie durant les années suivantes. Par exemple, (Camilloni et al. (1978)) [7] et (Stefani et al. (1979)) [8] utilisèrent des valeurs de l'angle polaire allant de 25° à 75° et une énergie incidente assez élevée (environ 2 keV) entraînant une valeur assez grande du moment de transfert (4-7u.a.) et assez petite de la quantité de mouvement de recul ($x < 2u.a.$). Le mécanisme de la réaction est dans ce cas bien décrit par les théories du premier ordre. Pochat et al. (1983) [9] et (Tweed (1984)) [10] utilisèrent de plus basses énergies (entre 100 et 200 eV) sur la cible d'hélium avec un angle polaire allant jusqu'à 117° . L'impulsion de recul est plus considérable dans ce cas. Les résultats ne sont interprétés dans ce cas que par les effets d'ordres supérieurs (Byron et col. (1983)) [11]. En effet, en plus du pic binaire pour $\theta = 45^\circ$, un pic de recul se manifeste à 135° et ne s'explique que par une théorie incluant la deuxième approximation de Born. Ce résultat peut se comprendre aisément si on suppose un mécanisme de double diffusion, interprété dans le cadre de la seconde approximation de Born comme suit : dans un premier temps, l'électron incident subit une collision binaire directe avec l'électron de la cible supposé être au repos, la conservation de l'énergie et de l'impulsion indiquent alors que les électrons diffusé et éjecté émergeront chacun avec un angle $\theta = 45^\circ$; ce mécanisme réactionnel est responsable du pic observé à 45° . Le second mécanisme fait intervenir un processus collisionnel double dans lequel l'électron incident est rétro diffusé par le noyau de façon élastique vers l'arrière puis subit une autre collision avec l'électron de la cible. Les deux électrons émergeront cette fois à 45° par rapport à la direction $-\vec{k}_i$, c'est-à-dire à 135° par rapport à celle de \vec{k}_i . Actuellement on préfère réaliser des expériences (e, 2e) symétriques non coplanaires

I-5.3 Géométrie symétrique non coplanaire

Dans ce cas les angles azimutaux ne sont pas nuls (figur I.5). L'angle azimutal φ_e varie ($\varphi_s = 0$) alors que $\theta_s = \theta_e = 45^\circ$.

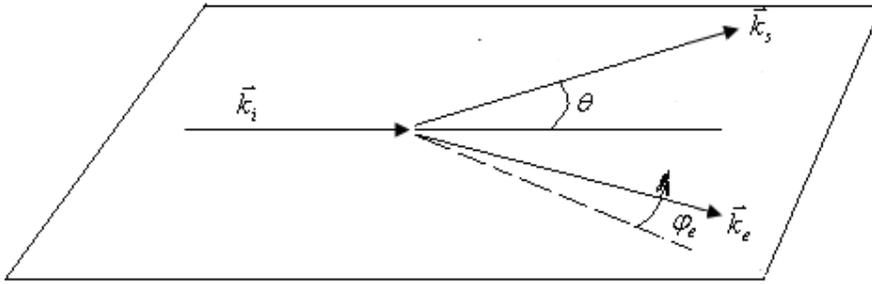


Figure I.5 : Schéma d'une collision(e, 2e) à géométrie symétrique non coplanaire

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

$$\vec{k}_i = \vec{k}_s + \vec{k}_e + \vec{q} .$$

Les composantes du moment de recul s'écrivent :

$$q_x = -k_s \sin \theta_s [\cos(\varphi_s) + \cos(\varphi_e)]$$

$$q_y = -k_s \sin \theta_s [\sin(\varphi_s) + \sin(\varphi_e)]$$

$$q_z = k_s - k_s \cos(\theta_s)$$

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

$$q = \left[(2k_s \cos \theta_s - k_i)^2 + 4k_s^2 \sin^2 \theta_s \left(\frac{\varphi_e}{2}\right) \right]^{1/2}$$

Si on suppose que $\frac{k_i^2}{2} \approx k_s^2$ alors $q^2 \approx k_i \cos\left(\frac{\varphi_e}{2}\right)$

Dans ce type d'expérience φ_e varie peu autour de 180° (généralement $\pm 20^\circ$) et l'interaction électron diffusé-électron éjecté peut être négligée si $E_s \gg E_e$. Cette géométrie est caractérisée par de grands moments de transfert et est généralement utilisée dans les mesures de densité de moment électronique qu'on appelle spectroscopie de moment électronique **Electron Momentum Spectroscopy (EMS)** ou spectroscopie (e,2e) (Brion (1986)) [12]. Ce type d'expériences (e,2e) symétriques spectroscopiques nécessite une énergie incidente trente fois supérieure à l'énergie d'ionisation de la couche étudiée. La **Section Efficace Triplement Différentielle (SETD)** est déterminée en fonction de q ou de Φ tels que $\Phi = \pi - |\varphi_s - \varphi_e|$ avec

$\Phi = \varphi_s - \varphi_e$ étant l'angle azimutal relatif entre l'électron diffusé et l'électron éjecté.

Le moment de transfert est constant (il est maximum lorsque $\theta_s = 45^\circ$).

Cette technique est un moyen très efficace pour les mesures d'énergies de liaison (ou d'ionisation) et les distributions de moments électroniques des orbitales de valence dans les atomes et les molécules (McCarthy et Weigold (1988)) [13].

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 al. (1976)) [14].

Si on suppose **une collision binaire** (électron incident- électron de la cible) et que l'on puisse décrire chaque électron du processus de la collision par une onde plane on obtient la section efficace triplement différentielle (SETD) suivante:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_e} = \frac{4k_s k_e}{(2\pi)^{3/2} k_i K^4} \left| \left\langle e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} \left| e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \right| \varphi_i(\vec{r}) \right\rangle \right|^2$$

avec $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ le moment de transfert.

La section efficace triplement différentielle (SETD) mesurée lors de l'expérience est alors simplement proportionnelle à la densité d'impulsion $\rho(\vec{p}) = \phi(\vec{p}) \phi^*(\vec{p})$ telle que :

$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}} \varphi(\vec{r}) d\vec{r} \quad \text{avec} \quad \vec{p} = \vec{K} - \vec{k}_e \quad \text{et} \quad \vec{k}_i + \vec{p} = \vec{k}_s + \vec{k}_e,$$

et \vec{p} représente la quantité de mouvement de l'électron de la cible avant son éjection.

Tout se passe comme si le noyau et les autres électrons de la cible ne participent pas au processus de collision.

I-5.4 Collisions (e, 2e) à géométrie asymétrique :

Pour ce cas les deux électrons sont détectés avec des énergies très différentes, un électron diffusé d'énergie E_s proche de l'énergie incidente E_i et un électron éjecté d'énergie E_e assez faible (figure I.6). Les collisions (e, 2e) asymétriques dites spectroscopiques nécessitent $|\vec{K}| = |\vec{k}_e|$ de façon que la quantité de mouvement transférée à l'ion (\vec{q}) soit la plus petite possible. L'énergie de l'électron éjecté doit

être au moins égale à $10 \cdot I$ et $E_i \geq 30 \cdot I$ où I est l'énergie d'ionisation. Ces expériences sont généralement réalisées en géométrie **coplanaire**, c'est-à dire que les électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision (\vec{k}_i, \vec{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° .

Cette cinématique, connue aussi sous le nom de géométrie d'Ehrhard (Ehrhardt et al. (1969))[15] décrit essentiellement les réactions du **régime dipolaire caractérisées par un faible moment de transfert**.

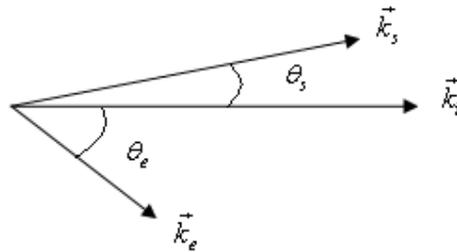


Figure I.6 : Géométrie coplanaire asymétrique

Elle a été réalisée à des énergies assez variées, très basses (Fournier-Lagarde et al. (1984)[16], quelques centaines d'électrons volts (Ehrhardt et al. (1986)) [17] puis jusqu'à 8 keV (Lahmam-Bennani et al.1984b) [18]. 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 al. (1984b, 1986))[18, 19] et (Avaldi et al. (1987))[20], 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 al. (1979))[21], l'hélium (Ehrhardt et al. (1972))[22] et l'hydrogène moléculaire (Jung et al. (1975))[23] et (Chérid et al. (1989))[24] permettant ainsi une étude théorique plus aisée.

I-5-4-a). Cas des hautes énergies ($E_i \geq 600 \text{ eV}$)

A haute énergie et à grand transfert d'impulsion (régime impulsionnel), cette situation est caractérisée par une collision binaire entre l'électron incident et l'un des électrons de la cible (Daoud (1985)) [25]. Le maximum de la SETD est dans la direction du moment de transfert \vec{K} .

Dans ces conditions, le processus de collisions est bien décrit dans le cadre de la première approximation de Born si la cible est correctement décrite (Tavard et Najjari (1996)) [26]. Cette situation fournit un bon test pour l'étude de la structure dans la cible. Dans le cas de faible transfert d'impulsion (régime dipolaire), la collision n'est plus binaire. La SETD montre en effet deux lobes, un lobe binaire dans la direction du transfert \vec{K} et un lobe de recul dans la direction opposée (Duguet et al. (1987)) [27]. Ce lobe de recul est dû au noyau qui perturbe considérablement cette fois le mouvement de l'électron éjecté. En effet, cet électron quitte la cible après la collision avec une petite vitesse et à cause de l'influence du noyau qui a tendance à l'attirer, son mouvement subit alors une déviation et sort enfin dans la direction opposée au transfert.

I-5-4-b). Cas des énergies intermédiaire ($100 \text{ eV} \leq E_i \leq 600 \text{ eV}$)

Dans le cas des énergies intermédiaires, la SETD présente également un lobe binaire et un lobe de recul. Cependant la répartition n'est plus symétrique par rapport aux directions \vec{K} et $-\vec{K}$, les deux pics sont décalés vers les grands angles (schlemmer et al. (1991)) [28]. Ce résultat peut être expliqué par l'effet des interactions post-collisionnelles entre les deux électrons sortants (Ehrhardt (1983)) [29]. Ces deux électrons émergent avec des vitesses proches après la collision et ont alors tendance à se repousser mutuellement, l'électron éjecté est ainsi dévié par rapport à la direction du transfert.

Ces effets peuvent être reproduits par les théories d'ordres supérieurs. Il est alors indispensable d'utiliser les théories qui tiennent compte de ces interactions (Brauner et al. (1989))[30].

I-5-4-c). Cas de basses énergies ($20 \text{ eV} \leq E_i \leq 100 \text{ eV}$)

Dans le cas de basses énergies, il apparaît un lobe binaire et un lobe de recul décalés également vers les grands angles par rapport au transfert (Beaty et al. (1978))

[31]. Ces effets peuvent par exemple être pris en considération à l'aide de la « **D**istorted **W**ave **B**orn **A**pproximation » (**DWBA**) où on tient compte des effets de polarisation de la cible et des effets de distorsion des électrons émergents (Tweed (1980)) [32].

1-6. Les expériences (e, 3e)

Les expériences (e, 3e) consistent à détecter en coïncidence les deux électrons éjectés de la cible et l'électron diffusé.

Ce type d'expériences, très difficile à réaliser, ne s'est développé que ces dernières années. C'est en 1989 que Lahmam- Bennani et al. [33] ont réussi la première expérience (e, 3e), mesurant les sections efficaces quintuplement différentielles de la double ionisation de l'argon. Ainsi la voie était ouverte pour les expériences (e, 3e) sur d'autres cibles atomiques de gaz rares: l'hélium [34-40], le krypton (Lahmam-Bennani et al. (1992))[41], l'argon(El Marji et al. (1997) [42], (Jia et al. (2003)[43]) ; le néon (Schrôter et al. (1998))[44] et sur le magnésium (Ford et al. (1998))[45]. Lahmam Bennani et al. (1991,1992)[46 ; 47] et (El Marji (1995)) [48] ont remarqué que le taux de détection des trois particules émergentes en coïncidence était faible, particulièrement pour le cas de l'atome d'hélium. Ils ont réalisé une nouvelle expérience appelée (e, 3-1e) correspondant à la détection en coïncidence de deux électrons parmi les trois particules sortantes. Actuellement les expériences (e, 3e) et (e, 3-1e) sont étudiées dans plusieurs laboratoires (Dorn et al. (2002)) [39] ; (Lahmam-Bennani et al. (1992))[47] ; (Takahashi et al. (2003))[50] ; (Bolognesi et al. (2003))[49]).

1-6-1.Description de la réaction (e, 3e)

L'expérience de la double ionisation (e, 3e) d'une cible atomique consiste à envoyer à la cible atomique dans son état fondamental ψ_i d'énergie E_i une perturbation externe sous la forme d'un électron appartenant à un faisceau mono énergétique d'énergie E_0 et de moment k_0 , relatif au centre de masse du système. Dans la voie de sortie on a l'éjection de deux électrons, d'énergies E_1 et E_2 et de moments k_1 et k_2 . Le projectile émerge dans l'état final avec une énergie E_s et un moment k_s , en laissant l'ion résiduel dans un état final ψ_f d'énergie E_f . Les différents vecteurs

d'ondes sont représentés dans une géométrie coplanaire sur la figure I.7 présenté ci-dessous :

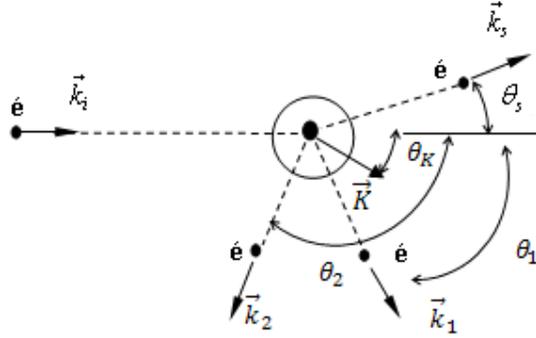


Figure I.7 : Schéma d'une réaction (e,3e) en géométrie coplanaire

Les indices (i, s, 1, 2) indiquent l'électron projectile, diffusé, et les deux éjectés respectivement ; \vec{K} est le moment de transfert défini par $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$

La conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement de la réaction (e, 3e) nous permet d'écrire :

$$E_i = E_f$$

$$E_0 + E_i = E_s + E_1 + E_2 + E_{i0} + E_f \quad (\text{I-25})$$

$$\vec{k}_0 = \vec{k}_s + \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{q} \quad (\text{I-26})$$

$$\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s \quad (\text{I-27})$$

$$\vec{q} = \vec{K} - (\vec{k}_1 + \vec{k}_2) , \quad (\text{I-28})$$

où E_i et E_f sont les énergies initiales et finales du système; \vec{q} est le moment de recul de la cible ionisée ; E_{i0} l'énergie nécessaire pour l'ionisation et \vec{K} étant le moment de transfert.

Dans ce qui va suivre nous déterminons la section efficace de diffusion dans le cas de la collision double ionisante décrite plus haut.

1-6-2. Section efficace de double ionisation

Dans l'expérience réalisant le processus de double ionisation (Berakdar et al. (2003))[51], on mesure le taux de transition d'un état initial préparé vers un état final bien défini, caractérisé par une densité d'états donnée par $d^3k_1 d^3k_2 d^3k_s$. Le rapport de ce taux sur la densité du flux incident détermine la section efficace, qui s'exprime en termes de l'élément de matrice de transition par la relation :

$$d\sigma(k_s, k_1, k_2; k_0, \psi_i) = \frac{(2\pi)^4}{k_0} \delta(E_f - E_i) |T_{if}|^2 d^3k_1 d^3k_2 d^3k_s, \quad (\text{I-29})$$

où :

$$T_{fi} = \frac{1}{2\pi} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) | V | \varphi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \rangle, \quad (\text{I-30})$$

avec

$$V = \frac{-z}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{0i}|}, \quad (\text{I-31})$$

où $\psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ et $\psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ représentent les états de la cible et de l'ion résiduel. La section efficace est calculée en intégrant sur toutes les variables possibles intervenant dans l'expression de la section efficace multi différentielle.

La réaction étudiée consiste en l'éjection de deux électrons de la cible. Dans le cadre de l'approximation du cœur gelé, on assimile la cible considérée (atome à plusieurs électrons ou molécule) à un atome à deux électrons actifs (atome d'hélium), ce qui nous permet de supposer que les électrons dans le cœur ionique doublement chargé ne participent pas au processus d'ionisation (Cooper et al. (2004))[52], (Hda (1994)) [53].

Dans ce cas, la fonction initiale et le potentiel d'interaction s'écrivent sous les formes :

$$|\psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\rangle = |\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \quad (\text{I-32})$$

et

$$V = \frac{-2}{r_0} + \sum_{i=1}^2 \frac{1}{|\vec{r}_{0i}|}. \quad (\text{I-33})$$

Les deux électrons actifs (1 et 2) ayant les vecteurs positions \vec{r}_1 , \vec{r}_2 sont ceux qui seront éjectés.

1-6-3. Section efficace quintuplement différentielle

Dans le cadre des expériences de double ionisation, l'énergie de l'électron incident est connue selon un choix bien précis. Les autres énergies correspondant à l'électron diffusé et les deux éjectés sont déduites de la loi de conservation de l'énergie si on connaît l'énergie de double ionisation E_{i0} . Supposons que les énergies des électrons éjectés sont fixées par les détecteurs à E_1 et E_2 (donc à des moments k_1 et k_2), l'énergie du diffusé obéira à:

$$E_s = E_i - E_1 - E_2 - E_{i0} . \quad (\text{I-34})$$

On obtient par conséquent la section efficace quintuplement différentielle SEQD définie par:

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s dE_1 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2 k_s}{k_0} |T_{fi}|^2 \quad (\text{I-35})$$

Cette expression contient toute l'information sur la réaction (e, 3e).

1-6-4. Mécanismes de la réaction (e, 3e)

Les réactions d'ionisation (e, 3e) sont réalisées selon des mécanismes directs ou indirects. Tweed (1992) [54] a été le premier à décrire de façon formelle ces mécanismes réactionnels. Puis (Popov et al. (1994)) [55] ont étudié les contributions respectives de chaque mécanisme réactionnel à l'aide d'une modélisation très simple (où tous les électrons sont décrits par des ondes planes).

On distingue, pour le moment, trois mécanismes principaux expliquant la double ionisation, qui sont du point de vue formel, inclus dans l'approximation de Born d'ordre 2. Le mécanisme Shake-Off noté SO, le Two Step 1, noté TS1 et le Two Step 2 (TS2). Le premier mécanisme, correspond à une ionisation simple suivie d'un réarrangement de la cible aboutissant à l'éjection d'un deuxième électron. Ce réarrangement de la cible est dû au changement brutal de potentiel survenant après l'éjection d'un électron. Le second électron de la cible voit ainsi son potentiel modifié et peut être éjecté. Le deuxième mécanisme noté TS1 nécessite deux étapes : la première étape est celle conduisant à la simple ionisation (comme pour le SO), puis cet électron éjecté entre en collision avec un autre électron de la cible et l'éjecte. Le

troisième mécanisme noté TS2, s'effectue aussi en deux étapes : la première étape, commune à SO et TS1, consiste en l'éjection d'un électron de la cible, puis l'électron diffusé, au cours de la deuxième étape, éjecte un autre électron de la cible. Notons que l'on pourrait considérer une variante de ces mécanismes en supposant que la première étape s'effectue sans l'ionisation de la cible. C'est donc une collision élastique ou inélastique sans ionisation de la cible.

Ces trois mécanismes peuvent être inclus dans le calcul de la section efficace par l'intermédiaire des deux premiers termes de la série de Born.

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s dE_1 dE_2} = \frac{k_1 k_2 k_s}{k_i} |f_{B1} + f_{B2}|^2, \quad (\text{I-36})$$

où $d\Omega_s$, $d\Omega_1$ et $d\Omega_2$ désignent les éléments d'angles solides des électrons diffusé et des deux éjectés respectivement. dE_1 et dE_2 sont les intervalles d'énergies des électrons éjectés. $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_s$ et \vec{k}_i représentent les moments des électrons éjectés 1 et 2, diffusé et incident. f_{B1} et f_{B2} sont les deux premiers termes du développement de Born donnés par :

$$f_{B1} = \frac{-1}{2\pi} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} | V | e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (\text{I-37})$$

où $\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et $\psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ représentent les états de la cible et de l'ion résiduel. \vec{r}_0 , \vec{r}_1 , \vec{r}_2 étant les vecteurs position du projectile incident et des électrons actifs 1 et 2 par rapport au centre diffuseur du système.

Le potentiel général $V(r_0, r_1, r_2)$ est donné par l'expression (I-29):

$$V(r_0, r_1, r_2) = \frac{-2}{r_0} + \sum_{i=1}^2 \frac{1}{|\vec{r}_{0i}|}. \quad (\text{I-38})$$

L'intégration sur les coordonnées du projectile \vec{r}_0 peut être effectuée analytiquement en utilisant la transformation de Bethe :

$$\int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} d\vec{r} = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}. \quad (\text{I-39})$$

Le premier terme de Born pour l'amplitude de diffusion est donc de la forme :

$$f_{B1} = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) | -2 + e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_2} | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{I-40})$$

ou encore :

$$f_{B1} = T_{e_1} + T_{e_2} + T_N \quad (\text{I-41})$$

avec :

$$T_{e_1} = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{I-42})$$

$$T_{e_2} = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_2} | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{I-43})$$

$$T_N = \frac{2}{2\pi^2 K^2} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{I-44})$$

où \vec{K} est le moment de transfert.

Les amplitudes : T_{e_1} , T_{e_2} , T_N représentent la diffusion directe du projectile par les deux électrons actifs (1, 2) et par le noyau, respectivement.

La première approximation de Born (PAB) est à la base de plusieurs calculs théoriques (Kheifets et al. (1999))[56], (Hda et al. (1994))[53], (Cooper et al. (2004))[52], (Joulakian (1992))[57]. Cette méthode ne tient compte que de l'interaction projectile-cible au premier ordre. Or il faut considérer les transitions des électrons actifs de la cible pour introduire l'interaction d'ordre supérieur. D'ailleurs, l'expérience montre une certaine insuffisance du traitement incluant la PAB à basse énergie comme à haute énergie d'incidence. Pour pouvoir expliquer les résultats des expériences réalisées à basse énergie, l'élaboration de modèles théoriques qui tiennent compte de l'interaction projectile-cible de façon dynamique devenait nécessaire (Dal Cappello et al. (1995, 1998))[58, 59].

La seconde approximation de Born est une extension de l'interaction projectile-cible aux ordres supérieurs. Cette approximation exprime la contribution des mécanismes à deux étapes TS1 et TS2 dans la distribution angulaire de la SEQD.

L'amplitude de diffusion correspondant est donnée par la relation :

$$f_{B2} = \frac{1}{8\pi^4} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_n}{k_i^2 - k_n^2 - 2|I_n| + i\varepsilon} \left\langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_0} \left| V \right| \psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_0} \right\rangle \quad (\text{I-45})$$

$$\times \left\langle e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_0} \psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| V \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle,$$

où I_n est la différence d'énergie entre l'état initial et l'état intermédiaire de moment \vec{k}_n représenté par la fonction d'état $\psi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. L'électron diffusé-intermédiaire est représenté par une onde plane. Cet électron interagit avec la cible ionisée avec ou sans excitation simultanée. Ce processus représente le mécanisme TS2 qui est responsable de la brisure de la symétrie autour du moment de transfert. Le calcul du terme f_{B2} est très délicat et nécessite beaucoup d'attention, car il s'appuie sur la sommation sur tous les états intermédiaires possibles de la cible. Cette sommation peut être effectuée en utilisant l'approximation de la relation de fermeture (Grin et al. (2000))[60] :

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = 1 \quad (\text{I-46})$$

Le terme f_{B2} s'écrit donc:

$$f_{B2} = \frac{1}{8\pi^4} \int \frac{d\vec{k}_n}{k_i^2 - k^2 - 2I} \left\langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \left| V(r_0, r_1, r_2) \right. \right. \quad (\text{I-47})$$

$$\left. \left. \times V(r_0, r_1, r_2) \right| \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle.$$

I_n est considéré ici comme un paramètre I et \vec{k} est l'impulsion de l'électron diffusé intermédiaire. Le potentiel général $V(r_0, r_1, r_2)$ est donné sous l'approximation du cœur gelé par l'expression (I-29):

$$V(r_0, r_1, r_2) = \frac{-2}{r_0} + \sum_{i=1}^2 \frac{1}{|\vec{r}_{0i}|}. \quad (\text{I-48})$$

L'intégration sur les coordonnées du projectile \vec{r}_0 peut être effectuée analytiquement en utilisant la transformation de Bethe :

$$\int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} d\vec{r} = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}. \quad (\text{I-49})$$

L'expression de f_{B2} devient :

$$f_{B2} = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d\vec{k}_n}{K_1^2 K_2^2 (k_i^2 - k^2 - 2I)} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) | (-2 + e^{i\vec{K}_1 \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_2}) \times (-2 + e^{i\vec{K}_1 \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_2}) | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (\text{I-50})$$

où :

$$\vec{K}_1 = \vec{k}_i - \vec{K}; \quad \vec{K}_2 = \vec{K} - \vec{k}_s; \quad \vec{K} = \vec{K}_1 + \vec{K}_2. \quad (\text{I-51})$$

Pour la double ionisation de l'hélium à haute énergie d'impact (1 keV et 5 keV), (Grin et al. (2000))[60] ont utilisé la seconde approximation de Born (SAB) avec la relation de fermeture dans le modèle 2CWG. Les deux électrons éjectés étaient décrits par deux ondes coulombiennes alors que leur interaction répulsive était décrite par le facteur de Gamow. Ce modèle a pu reproduire l'allure des résultats expérimentaux. Les auteurs ont confirmé que l'amplitude obtenue correspondait exactement à la contribution du TS2. D'autres auteurs ont appliqué cette méthode dans le cas atomique (Gôtz et al. (2003))[61], (Jones et al. (2003))[62], (El Mkhantter et al. (1998)) [63], (Dal Cappello et al. (1998)) [58], ainsi que dans le cas de la molécule d'hydrogène (Mansouri et al. (2004))[64].

L'expression (I-43) de la section efficace peut aussi être écrite sous la forme (Tweed (1992)) [54] :

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s dE_1 d\Omega_2} = \frac{k_1 k_2 k_s}{k_i} |M_{SO} + M_{TS1} + M_{TS2}|^2, \quad (\text{I-52})$$

où les amplitudes M_{SO} , M_{TS1} et M_{TS2} correspondent respectivement aux processus SO, TS1 et TS2, et sont exprimées par les formules suivantes (Dal Cappello et col. (1998))[59] :

$$M_{SO} = \frac{-1}{2\pi} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} | \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} | e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{I-53})$$

$$M_{TS1} = \frac{-1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_a}{(2\pi)^3 (k_i^2 - k_a^2 - k_s^2 - 2I_n)} \langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} | \psi_n^{(+)}(k_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \times \langle \psi_n^{(-)}(\vec{k}_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} | \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} | e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{I-54})$$

$$\begin{aligned}
M_{TS2} = & \frac{-1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_b}{(2\pi)^3 (k_i^2 - k_b^2 - k_1^2 - 2I_n)} \left\langle \psi_f^{(\ominus)}(\vec{k}_2, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \psi_n(\vec{r}_2) \right\rangle \\
& \times \left\langle \psi_n^{(\ominus)}(\vec{k}_1; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\
& \frac{-1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_b}{(2\pi)^3 (k_i^2 - k_b^2 - k_1^2 - 2I_n)} \left\langle \psi_f^{(\ominus)}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} \right| e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \psi_n(\vec{r}_1) \right\rangle \\
& \times \left\langle \psi_n^{(\ominus)}(\vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle,
\end{aligned} \tag{I-55}$$

où I_n est l'énergie nécessaire pour éjecter un électron, $\psi_n^{(\pm)}$ (où le + pour une onde entrante et le – pour une onde sortante) représente l'état de l'électron intermédiaire de moment $\vec{k}_{(a,b)}$.

L'étude que nous présentons dans ce qui suit peut être considérée comme une projection du cas de l'atome d'hélium sur les autres cas atomiques ou moléculaires étudiés dans le cadre de l'approximation du cœur gelé.

1-6-4-1. Mécanisme SO (Shake-Off)

Ce mécanisme correspond à une ionisation simple due à l'interaction de l'électron incident avec l'un des deux électrons actifs en l'éjectant (donnée par les termes T_{e_1}, T_{e_2}), suivie d'un réarrangement de la cible qui conduit à l'éjection d'un deuxième électron illustré dans la figure (I.7-a). Ce réarrangement de la cible est dû au changement brusque de potentiel survenant après l'éjection d'un électron:

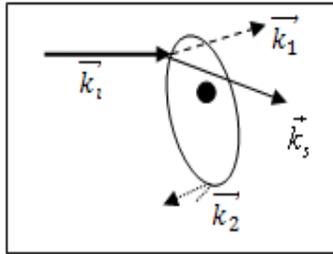


Figure I.7-a

le second électron de la cible voit ainsi son potentiel d'interaction brusquement modifié, ce qui peut provoquer une deuxième ionisation qui est due à l'interaction directe du projectile avec la cible en l'excitant. L'éjection simultanée des deux électrons (voir figure I.7-b) peut se produire suite à la redistribution des potentiels de la cible excitée. Il est important de noter que ce réarrangement ne conduit pas

nécessairement à une deuxième ionisation. La probabilité d'éjecter un deuxième électron est toujours bien plus faible que celle d'exciter cet électron.

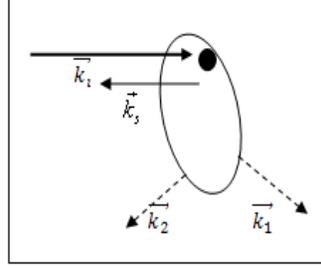


Figure I.7-b

Il est aussi le premier chemin proposé pour la double ionisation (Tweed (1992))[54], décrivant l'interaction projectile- cible au premier ordre, exprimée par la relation (I-53) :

$$M_{SO} = \frac{-1}{2\pi} \left\langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{I-56})$$

Ce processus est décrit par la première approximation de Born. L'amplitude de la SEQD correspondante est donnée par l'expression précédente de f_{B1} (I-41):

$$f_{B1} = T_{e_1} + T_{e_2} + T_N \quad (\text{I-57})$$

1-6-4-2. Le mécanisme TS1 (Two- Step1):

Ce mécanisme se fait en deux étapes. La première étape est analogue à celle du mécanisme SO : la première éjection résulte après une collision entre l'électron incident et un électron de la cible. La deuxième étape consiste en une seconde collision entre le premier électron éjecté et un autre électron de la cible, ce qui provoque l'éjection de ce dernier.

L'amplitude de diffusion de ce mécanisme est représentée par le deuxième terme de Born donnée par (I-53) :

$$M_{TS1} = \frac{-1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_a}{(2\pi)^3 (k_i^2 - k_a^2 - k_s^2 - 2I_n)} \left\langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} \right| \psi_n^{(+)}(k_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\ \times \left\langle \psi_n^{(-)}(\vec{k}_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle$$

Dans l'expression de M_{TS} le terme suivant :

$$\left\langle \psi_n^{(-)}(\vec{k}_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle$$

indique que l'électron incident est diffusé après sa collision avec l'un des deux électrons actifs en laissant la cible simplement ionisée X^+ dans son état $\psi_n^{(-)}(\vec{k}_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ (fondamental $n = 1$, ou et excité $n > 1$).

Quant au deuxième terme de l'expression M_{TS} :

$$\left\langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_{12}|} \right| \psi_n^{(+)}(k_a; \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle$$

il décrit l'interaction du premier électron éjecté de moment intermédiaire \vec{k}_a avec le deuxième électron actif, qui est éjecté à son tour. Ce mécanisme TS1 est schématisé sur la figure I.8-a.

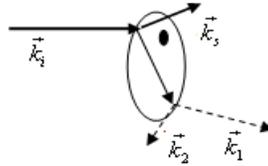


Figure I.8-a

Une autre illustration de ce processus à deux étapes est celle réalisée avec un recul de la cible après la collision du projectile avec l'un des électrons actifs. Dans ce cas le premier électron éjecté (intermédiaire) ressent le recul de la cible excitée, avant ou après son interaction avec le deuxième électron actif. Ce processus dit TS1 avec recul est représenté sur les figures I.8-b et I.8- c.

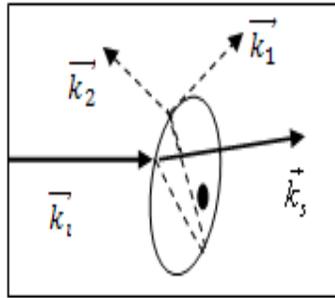


Figure I.8-b

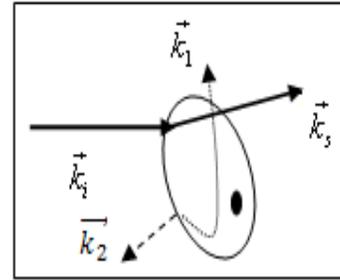


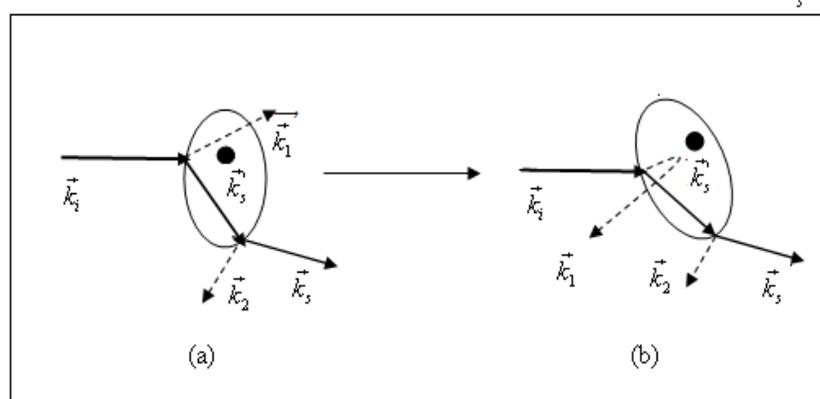
Figure I.8-c

Figure I.8 (a,b,c) : Schémas du mécanisme TS1.

Le processus TS1 peut être interprété comme une interaction du premier ordre du fait que le projectile incident n'interagit qu'une seule fois avec la cible avant d'être diffusé. Il est donc bien décrit par la méthode PAB dans le cas où les corrélations dans les voies initiale et finale sont prises en considération (Grin et al. (2000))[59].

1-6-4-3. Le mécanisme TS2 (Two- Step2)

Ce mécanisme est aussi un mécanisme à deux étapes. La première étape déjà décrite précédemment, est commune à SO et TS1. La deuxième étape de TS2 consiste en une deuxième collision figures I.9-a et I.9-b entre l'électron incident (qui vient d'être diffusé une première fois suite à sa collision avec un électron de la cible) et un autre électron de la cible qui sera enfin éjecté.



Figures I.9: Schéma du mécanisme TS2

Une variante du troisième mécanisme TS2 serait aussi à prendre en considération par la suite. Il diffère des autres par le fait que la première étape consiste en une collision élastique ou inélastique **sans ionisation** entre l'électron incident et la cible. Puis la deuxième étape est la double ionisation de la cible due à la redistribution des énergies et des quantités de mouvement données à la cible lors de la première collision. Comme la double ionisation est un processus s'effectuant en deux étapes il est logique de considérer la seconde approximation de Born pour la décrire.

L'amplitude de diffusion correspondante est alors exprimée par la relation (2-36) (Dal Cappello et al. (1998))[59]:

$$\begin{aligned}
M_{TS2} = & \frac{-1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_b}{(2\pi)^3 (k_i^2 - k_b^2 - k_1^2 - 2I_n)} \left\langle \psi_f^{(-)}(\vec{k}_2, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \psi_n(\vec{r}_2) \right\rangle \\
& \times \left\langle \psi_n^{(-)}(\vec{k}_1; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\
& \frac{-1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_b}{(2\pi)^3 (k_i^2 - k_b^2 - k_1^2 - 2I_n)} \left\langle \psi_f^{(-)}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} \right| e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \psi_n(\vec{r}_1) \right\rangle \\
& \times \left\langle \psi_n^{(-)}(\vec{k}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle
\end{aligned}$$

L'expression de M_{TS2} représente à travers son premier terme les interactions successives entre l'électron incident et la cible donnée comme suit :

$$\left\langle \psi_n^{(-)}(\vec{k}_j; \vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_{01}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{02}|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (I-58)$$

Avec $j=1$ ou 2 .

Ce terme correspond (comme pour le TS1) à une simple ionisation ($n=1$) ou une simple ionisation avec excitation simultanée ($n>1$). Après cette étape, l'électron diffusé intermédiaire, décrit par une onde plane $e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0}$, subit une autre collision avec le deuxième électron et l'éjecte selon le terme :

$$\left\langle \psi_f^{(-)}(\vec{k}_j, \vec{r}_j) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{1}{|\vec{r}_{0j}|} \right| e^{i\vec{k}_b \cdot \vec{r}_0} \psi_n(\vec{r}_j) \right\rangle \quad (I-59)$$

Avec $j=1$ ou 2 .

On note que dans cette équation, la contribution du noyau $\left(\frac{-2}{r_0}\right)$ est nulle parce que la fonction coulombienne décrivant l'état $\psi_n^{(-)}$ est orthogonale à l'état (fondamental ou excité) de l'ion X^+ pour $z=2$ (El Mkhater et col. (1998))[63]

$$\langle \psi_n^{(-)} | \varphi_n \rangle = 0 \quad (\text{I-60})$$

Dans le cas de même énergie d'éjection $E_1 = E_2$ et lorsqu'un de ces électrons est éjecté suivant la direction du moment de transfert, la présence du processus TS2 se remarque par la brisure de symétrie de la distribution angulaire autour de cette direction observée dans les expériences (d'El Marji et al. (1997))[42] et de (Jia et al (2002, 2003)) [43, 65]. L'expérience n'a pas été expliquée par le modèle PWBA qui inclut les deux processus SO et TS1 seulement. Par contre le modèle DWBA (Cooper et al. (2004))[52] décrivant tous les électrons (incident, diffusé et les deux éjectés) par des ondes distordues, et malgré qu'il soit du premier ordre du potentiel d'interaction, donne un bon accord relatif avec ces expériences. D'après ce modèle, la symétrie prédite par la PAB est brisée (expérience de Jia (2002,2003)) [43, 65] du fait que l'onde distordue décrivant l'électron diffusé permet de tenir compte continuellement de son interaction avec l'ion résiduel. Mais la méthode DWBA est loin de reproduire les mesures de l'expérience à faible moment de transfert (Jia et al.(2003))[43], car la contribution du mécanisme TS2, entraînant la double interaction entre l'électron diffusé et la cible, doit être mieux prise en compte.

1-6-5. Conditions cinématiques de la réaction (e, 3e)

Nous rappelons dans ce paragraphe les différentes conditions cinématiques et géométriques des réactions (e, 3e) qui dépendent des énergies mises en jeu et donc du moment de transfert. Ces conditions sont réparties selon leurs caractéristiques géométriques : symétrique ou asymétrique, coplanaire ou non coplanaire.

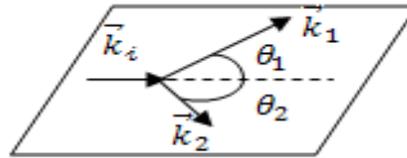
1-6-5-1. Régime asymétrique :

Ce type de géométrie est associé aux expériences où les deux électrons éjectés sont détectés avec des énergies très faibles et différentes $E_{1,2} \ll E_s$. L'électron diffusé, supposé rapide est détecté sous un angle $\theta_d < 1.5^0$, tandis que les deux électrons lents

sont généralement détectés sous des angles variables. Les valeurs des angles azimutaux déterminent la nature coplanaire ou non coplanaire de la géométrie.

1-6-5-1-a). Géométrie coplanaire asymétrique

Dans ce cas les différents vecteurs d'impulsion $\vec{k}_i, \vec{k}_s, \vec{k}_1$ et \vec{k}_2 se trouvent dans le plan de collision. Les angles azimutaux φ_1 et φ_2 prennent la valeur 0 ou π , (figure I.10-a). Les angles d'éjections θ_1 et θ_2 étant variables, on distingue dans l'expérience une variété de modes d'angle d'éjection. Le premier consiste à faire varier l'un des deux angles entre 0 et 2π dans le sens trigonométrique en fixant le deuxième lors de la réaction (Lahmam-Bennani et al. (1999))[35] et Kheifets et al. (1999))[56]. La deuxième variante considère que l'angle relatif $\theta_{12} = |\theta_1 - \theta_2|$ est constant tout en variant les deux angles d'éjections θ_1 et θ_2 . Ce type de géométrie a été utilisé dans plusieurs cas de mesures de la SEQD (Dorn et al. (1999))[37], (El Marji et al. (1997)) [42], (Schroter et al. (1998)) [44], (Choubisa et al. (2003))[66].

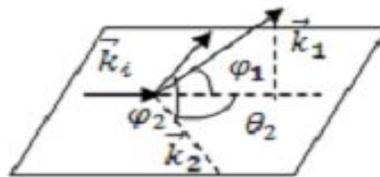


(a)

Figure I.10-a

1-6-5-1-b). Géométrie non coplanaire asymétrique

En plus de la condition sur l'énergie d'éjection $E_{1,2} \ll E_s$, cette cinématique est caractérisée par la variation des angles azimutaux φ_1 et φ_2 et donc la présence des différents électrons de la voie de sortie dans l'espace, (figure I.10-b).



(b)

Figure I.10-b

1-6-5-2. Régime symétrique:

Ce régime correspond au cas d'égalité d'énergie d'éjection $E_1 = E_2 \ll E_s$. Ces électrons lents peuvent être détectés dans le plan de collision (géométrie coplanaire) ou en dehors de ce plan (géométrie non coplanaire) selon les valeurs des angles φ_1 et φ_2 .

1-6-5-2-a. Géométrie coplanaire symétrique

Dans cette géométrie les angles de diffusion et d'éjection se trouvent tous dans un même plan par rapport à la direction d'incidence, et les deux électrons éjectés sont détectés symétriquement ($\theta_1 = \theta_2$) par rapport à cette direction. L'angle azimutal relatif $\phi = |\varphi_1 - \varphi_2|$ prend la valeur 0 ou π figure (I.10-7c). Cette géométrie a été utilisée dans les mesures de la SEQD pour le néon (Shrôter et al. (1998))([44]), ainsi que dans le cas de l'hélium (Lahmam-Bennani et al. (1999))([35]).

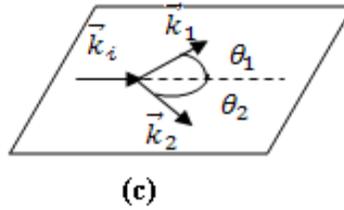
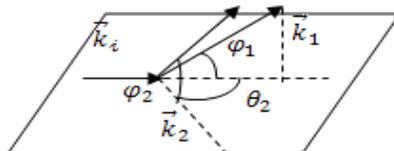


Figure I.10-c

1-6-5-2-b. Géométrie non coplanaire symétrique

Cette cinématique est plus générale que la précédente car les électrons éjectés peuvent être détectés dans toutes les directions de l'espace $\phi = (\varphi_1 - \varphi_2 - \pi)$ et ($\theta_1 = \theta_2$) (voir figure I.10-d). Cet arrangement a été largement utilisé par le groupe de Takahashi réalisant des expériences (e, 2e) et (e, 3-1e) sur des cibles atomique (He) et moléculaire (H_2) (Takahashi et al. (2003, 2004)) [50, 67], (Watanabe et al. (2005, 2008)) [68, 69].



(d)

Figure I.10-d

Les **Figures I.10 (a,b,c,d)**, représentent les schémas des différentes situations cinématiques et géométriques de la réaction (e,3 e).

I-7. Références:

- [1] Grin M, *thèse de doctorat*, Metz (France) (2000).
- [2] Cohen-Tanoudji C, Diu B, Laoé F, *Mécanique Quantique*, Tome II, Ed Hermann, (1973).
- [3] Atkins P W, Friedman R S, *Molecular Quantum Mechanics* (3^{er}d édition), Oxford (1996).
- [4] Araldi U Jr, Egidi A, Marconero R and Pizzella G, *Phys. Rev. Sci. Instru* **40**, 1001 (1969).
- [5] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaats T and Willmann K, *Phys. Rev. Lett* **22**, 89-82 (1969).
- [6] Weigold E and McCarthy I E, *J. Phys. B* **14**, 127 (1978)
- [7] Camilloni R, Giardini-Guidoni A, McCarthy I E and Stefani G. *Phys. Rev. A* **17** (1978).
- [8] Stefani G, Camilloni R and Giardini-Guidoni A, *J. Phys. B* **12** 2583 (1979).
- [9] Pochat A, Tweed R J, Joachain C J, Piraux B and Byron F W Jr *J. Phys. B* **16** L775 (1983).
- [10] Tweed R J, *Lecture Notes in Chemistry* Vol. **35**, Ed, Gianturco F A and Stefani G (Berlin: Springer) p.220 (1984).
- [11] Byron F W Jr and Joachain C J, *J. Phys. Rep.* **34C**, 233 (1983).
- [12] Brion C E *Int. J. Quantum Chem.* **2**, 1397 (1986).
- [13] McCarthy I E and Weigold E, *Rept. Prog. Phys.* **51**, 299 (1988).
- [14] McCarthy I E and Weigold E, *Phys. Rep.* **27C**, 275 (1976).
- [15] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Sshlemmer P, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1807 (1969).
- [16] Fournier-Lagarde P, J. Mazeau and A. Huetz, *J. Phys. B* **17**, L591 (1984).
- [17] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Sshlemmer P, *Z. Phys. D* **1**, 3 (1986).
- [18] Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Dal Cappello C and Rouault M and Duguet A, *J. Phys. B* **16** 2219 (1984b)
- [19] Lahmam-Bennani A, Duguet A and Dal Cappello C, *J. Elect. Spec. and Rel. Phenom* **40**, 141 (1986).
- [20] Avaldi L, Camilloni R, Fainelli E and Stefani G, *J. Phys. B* **20**, 4163 (1987).
- [21] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I, *J. Phys. B* **12**, 291 (1979).
- [22] Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, Schultz M and Willmann K, *J. Phys. B* **5**, 2107 (1972).

- [23] Jung K, Schubert E, Paul D A L and Ehrhardt H, *J.Phys. B* **8**, 1330 (1975).
- [24] Chérid M, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Zuraes R W, Lucchese R R, Dal Cappello M C and Dal Cappello C *J.Phys. B* **22**, 3483 (1989).
- [25] Daoud A, *Thèse de Troisième Cycle*, Paris (1985).
- [26] C. Tavard and B. Najjari, *Int. Quantum Chem.* **60**, 657 (1996)
- [27] Duguet A, Chérid M, lahmam-Bennani A, Franz A and Klar H, *J.Phys. B* **20**, 6145 (1987).
- [28] Schlemmer P, Srivastava M K, Rôsel T and Ehrhardt H, *J. Phy B* **24**, 2719 (1991).
- [29] Ehrhardt H, *Comments At. Mol. Phys* **13**, 115 (1983)
- [30] Brauner M, Briggs J S and Klar H, *J. Phys. B* **22**, 2265 (1989)
- [31] Beaty E C, Hesselbacher K H, Jong S P and Moore J H, *Phys. Rev A* **17**, 1592 (1978).
- [32] Tweed R J, *J. Phys. B* **13**, 4467 (1980).
- [33] A. Lahmam-Bennani, C. Dupré and A. Duguet *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1582 (1989).
- [34] Taouil I, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Lecas M and Avaldi L, *Phys. Rev.Lett.* **81**, 4600 (1998).
- [35] Lahmam-Bennani A, Taouil I, Duguet A, Lecas M, Avaldi L and Berakdar J, *Phys. Rev. A* **59**, 3548 (1999).
- [36] Lahmam-Bennani A, Duguet A, Gaboriaud M N, Taouil I, Lecas M, A Kheifets, Berakdar J and Dal Cappello C, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys* **34**, 3073- 3087 (2001).
- [37] Dorn A, Moshhammer R, Schröter C D, M. Zouros T J, Schmitt W, Kollmus H, Mann R and Ullrich J, *Phys. Rev. Lett* **82**, 2496 (1999).
- [38] Dorn A, Kheifets A, Schröter C D, Najjari B, Höher C, Moshhammer R and Ullrich J, *Phys. Rev. A* **86**, 3755 (2001).
- [39] Dorn A, Kheifets A, Schröter C D, Najjari B, Höher C, Moshhammer R and Ullrich J, *Phys. Rev. A* **65**, 032709 (2002).
- [40] Dürr M, Dorn A, Ullrich J, Cao S P, Czasch A, Kheifets A S, Götz J R, and Briggs J S, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 193201 (2007).
- [41] A Lahmam-Bennani, A. Duguet, A. M. Grisogono et M. Lecas, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 2873 (1992).
- [42] El Marji B, Schröter C, Duguet A, Lahmam-Bennani A and Lecas M, *J.*

- Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.* **30**, 3677 (1997).
- [43] Jia C C, Lahmam-Bennani A, Dal Cappello C, Duguet A and Avaldi L, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, L17-L24 (2003).
- [44] Schröter C, El Marji B, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Lecas M and Spielberger L, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 131 (1998).
- [45] Ford M J, El Marji B, Doering J P, Moore J H, Coplan M A and Cooper J W *Phys. Rev.* **57**, 325(1998.)
- [46] Lahmam-Bennani A, Ehrhardt H, Dupré C and Duguet A, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 3645 (1991).
- [47] Lahmam-Bennani A, Duguet A, and Roussin S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, L59-L63 (1992).
- [48] El Marji B, Duguet A, Lahmam-Bennani A, Lecas M and Wellenstein H F, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L733-L737 (1995).
- [49] Bolognesi P, Jia C C, Avaldi L, Lahmam-Bennani A, Kouzakov K A and Popov Yu V, *Phys. Rev. A* **67**, 034701(2003).
- [50] Takahashi M, Khajuria Y and Udagawa Y, *Phys. Rev. A* **68**,042710 (2003).
- [51] Berakdar J, Lahmam-Bennani A and Dal Cappello C, *Phys. Rep.* **374**, 91 (2003).
- [52] Cooper J W and Van Boeyen R W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **37**, L 77 (2004).
- [53] Hda H, Dal Cappello C and Langlois J, *Z. Phys. D* **29**, 25 (1994).
- [54] Tweed R J, *Z. Phys. D* **23**, 309 (1992).
- [55] Popov Yu V, Dal Cappello C, Joulakian B and Kuzmina N M, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 1599 (1994).
- [56] Kheifets A S, Bray I, Lahmam-Bennani A, Duguet A and Taouil I, *J. Phys. B: At.Mol. Opt. Phys.* **32**, 5047 (1999).
- [57] Joulakian B, Dal Cappello C and Brauner M, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** ,2863 (1992).
- [58] Dal Cappello C, Hda H and Roy A C, *Phys. Rev. A* **51**, 3735 (1995).
- [59] Dal Cappello C, El Mkhater R and Hervieux P A, *Phys. Rev. A* **57**, R693 (1998).
- [60] Grin M, Dal Cappello C, EL Mkhater R and Rasch J, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**, 131 (2000).

-
- [61] Götz J R, Walter M and Briggs J S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, L777 (2003).
- [62] Jones S and Madison D H, *Correlations and Polarisation in Photonic, Electronic and atomic Collisions* Ed Hanne F, Malegat L and Schmidt-Bocking H, pp70-75 (AIP Conference Proceedings 697) (2003).
- [63] El Mkhater R and Dal Cappello C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 301 (1998).
- [64] Mansouri A, Dal Cappello C, Houamer S, Charpentier I and Lahmam Bennani A, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 1203 (2004).
- [65] Jia C C, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Avaldi L, Lecas M and Dal Cappello C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35**, 1113 (2002).
- [66] Choubisa R, Porohit G and Sud K K, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **36**, 1731 (2003).
- [67] Takahashi M, Watanabe N, Khajuria Y, Nakayama K, Udagawa Y, and Eland J H D, *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **141**, 83 (2004).
- [68] Watanabe N, Khajuria Y, Takahashi M, Udagawa Y, Vinitzky P S, Popov Yu V, Chuluunbaatar O and Kouzakov K A, *Phys. Rev. A* **72**, 032705 (2005).
- [69] Watanabe N, Kouzakov K A, Popov Yu V and Takahashi M, *Phys. Rev. A* **77**, 032725 (2008).

CHAPITRE II

« La deuxième approximation de Born pour la simple ionisation de l'atome d'hydrogène et la double ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électrons et de positrons »

CHAPITRE II

La deuxième approximation de Born pour la simple ionisation de l'atome d'hydrogène et la double ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électrons et de positrons

II-1-Introduction

L'ionisation des atomes et des molécules par des électrons ou positrons est d'un grand intérêt en astrophysique, en physique des plasmas et pour les sciences de la vie. Dans ces cas, il est primordial de comprendre les mécanismes conduisant à l'ionisation simple et double. De récentes théories basées sur des méthodes non perturbatives sont désormais en mesure de prédire les sections efficaces totales pour l'ionisation de l'hydrogène ou l'hélium, mais ne sont pas encore en mesure de décrire la section efficace différentielle totale de la double ionisation de l'hélium (Durr et al. (2007)) [1], (Pindzola et al. (2008)) [2]. En outre, ces théories ne peuvent être appliquées, jusqu'à présent, qu'à des atomes très simples et à la molécule H_2 . Mais dans la plupart des autres cas, il est nécessaire d'appliquer les théories de perturbation, comme la série de Born. L'ionisation de l'hydrogène atomique par des projectiles rapides est un bon test pour les théories de perturbation car les résultats expérimentaux existent, en particulier pour les sections efficaces triplement différentielles (Weigold et al. (1979)) [3], (Lohmann et al. (1984)) [4], (Ehrhardt et al. (1985)) [5], (Ehrhardt et al. (1986)) [6]. Dans une telle expérience l'électron éjecté est détecté en coïncidence avec l'électron diffusé et il a été démontré (Ehrhardt et al. (1986)) [23] que ce genre d'expérience, appelée (e, 2e), est très sensible aux détails de la théorie. Weigold et al. (1979) [3] ont réalisé la première expérience (e, 2e) sur l'hydrogène atomique, à des énergies de 100, 113.6, 250 et 413.6 eV, alors que l'énergie de l'électron éjecté variait de 25 eV à 200 eV. Puis (Lohmann et al. (1984)) [4] utilisèrent des conditions asymétriques (250 eV pour les électrons incidents et 5, 10 et 14 eV, respectivement, pour l'électron éjecté). Enfin c'est (Ehrhardt et al. (1985)) [5] qui ont réalisé les premières expériences (e, 2e) absolues pour une géométrie asymétrique (250 eV pour les électrons incidents et 5 eV pour les électrons éjectés).

Byron et al. (1980) [6] furent les premiers à appliquer la seconde approximation de Born pour l'ionisation de l'hydrogène atomique. Pathak et Srivastava (1981) [7] ont utilisé la seconde approximation de Born pour l'ionisation de l'hydrogène atomique et

ont comparé leurs résultats à la première expérience (e, 2e) de (Weigold et al. (1979))[3] (énergie incidente de 250 eV et énergie des électrons éjectés de 50 eV). Ensuite, ils ont également fait des calculs pour l'ionisation de l'hélium en utilisant la relation de fermeture et ont comparé leurs résultats à ceux de Ehrhardt et al. (1982) [8]. Byron et al. (1982)[9] ont également calculé les sections efficaces triplement différentielles (SETD) pour l'ionisation de l'hélium en utilisant la relation de fermeture et ont trouvé des résultats qui n'étaient pas en accord avec ceux de Pathak et Srivastava. Plus tard, (Byron et al. (1985))[10] ont appliqué la seconde approximation de Born en utilisant très peu d'états discrets dans les états intermédiaires et en tenant compte de la relation de fermeture et en ajoutant la contribution de la troisième approximation de Born calculée avec l'approximation de Glauber. Il est maintenant temps de répondre à plusieurs questions au sujet de la seconde approximation de Born. La première est le nombre d'états discrets nécessaires dans le calcul de la seconde approximation de Born. Une deuxième question est le rôle joué par les états du continuum. Nous devons aussi voir ce qui se passe lorsque nous ajoutons des pseudo-états comme états intermédiaires.

Dans le présent travail nous avons effectué un calcul en utilisant la deuxième approximation de Born, qui comprend 100 états discrets *exacts* correspondant à des états allant de $n = 1$ à $n = 10$. Ensuite, nous avons effectué un autre calcul qui utilise en même temps les états propres exacts et des pseudo-états. Finalement nous comparons nos résultats à ceux donnés par le modèle 3C (ou le modèle BBK) Brauner, Briggs et Klar (Brauner et al. (1989))[11] qui traite à l'ordre infini l'interaction entre les deux électrons sortant mais de façon approximative. Nous avons également appliqué la deuxième approximation de Born à la double ionisation de l'hélium et comparé nos résultats à ceux de (Lahmam-Bennani et al. (2010))[12] et (Lahmam-Bennani et al. (2002)) [13].

II-2-Application de la deuxième approximation de Born

II-2-1. L'ionisation de l'atome d'hydrogène

Nous considérons en premier l'ionisation de l'atome d'hydrogène par les électrons donnée par la réaction (e, 2e) suivante:



Pour la deuxième approximation de Born la Section Efficace Triplement Différentielle (SETD) est donnée par :

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e} = \frac{k_s k_e}{k_i} |f_{B1} + f_{B2}|^2, \quad (\text{II-2})$$

où $d\Omega_s$ et $d\Omega_e$ représentent les éléments des angles solides de l'électron diffusé éjecté et l'énergie de l'électron éjecté étant donnée par dE_e .

Les moments des électrons incident, diffusé et éjecté sont notés respectivement \vec{k}_i , \vec{k}_s et \vec{k}_e .

La première approximation de Born f_{B1} est donnée :

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \left\langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_C^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| V \middle| \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \Phi_i(\vec{r}_1) \right\rangle, \quad (\text{II-3})$$

où $\Phi_i(\vec{r}_1)$ est la fonction d'onde *exacte* de l'état initial de l'atome d'hydrogène et $\Psi_C^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1)$ est aussi la fonction d'onde *exacte* de l'état du continuum de l'atome d'hydrogène qui est donnée par :

$$\Psi_C^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1) \Gamma(1 - i\alpha) \exp\left(-\frac{\pi}{2}\alpha\right) {}_1F_1(i\alpha, 1, -i(\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1 + k_e r_1))$$

avec $\alpha = -Z/k_e$, et $Z=1$.

Le potentiel V représente l'interaction coulombienne entre l'électron entrant et la cible et s'écrit comme suit:

$$V = \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0}. \quad (\text{II-4})$$

Nous négligeons les effets d'échange en considérant l'électron diffusé comme étant l'électron rapide et l'électron éjecté comme l'électron lent. Nous pouvons facilement effectuer l'intégration analytique sur \vec{r}_0 et obtenir:

$$f_{B1} = -\frac{2}{K} \left\langle \Psi_C^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) - 1 \middle| \Phi_i(\vec{r}_1) \right\rangle, \quad (\text{II-5})$$

où $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ est le moment de transfert.

Suivant (Joachain (1983))[14] le second terme de Born f_{B2} est donné par:

$$f_{B2} = \frac{1}{8\pi^4} \sum_n \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - k_n^2 - i\varepsilon} \langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_c^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | V | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Phi_n(\vec{r}_1) \rangle \quad (\text{II-6})$$

$$\langle \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Phi_n(\vec{r}_1) | V | \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \Phi_i(\vec{r}_1) \rangle$$

avec $\varepsilon \rightarrow 0^+$ et

$$\frac{k_n^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - (E_n - E_i) \quad (\text{II-7})$$

si on ne considère que les contributions des états discrets n exacts de l'hydrogène atomique (n variant de $n = 1$ à $n \rightarrow \infty$), E_n étant la valeur propre de l'atome d'hydrogène correspondant à la fonction propre Φ_n .

Nous effectuons également l'intégration sur \vec{r}_0 et nous obtenons

$$f_{B2} = \frac{2}{\pi^2} \sum_n \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - k_n^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Psi_c^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1) - 1 | \Phi_n(\vec{r}_1) \rangle \quad (\text{II-8})$$

$$\langle \Phi_n(\vec{r}_1) | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1) - 1 | \Phi_i(\vec{r}_1) \rangle$$

avec $\vec{K}_i = \vec{k}_i - \vec{q}$ et $\vec{K}_f = \vec{q} - \vec{k}_s$, $\vec{K} = \vec{K}_i + \vec{K}_f$. Lorsque l'on considère n différent de n=1 nous avons l'orthogonalité entre l'état initial et les autres états (finaux ou intermédiaires) et le terme en -1 (correspondant à l'interaction de l'électron avec le noyau de la cible) présent dans l'équation (II-5) et (II-8) ne donne aucune contribution.

Quand on considère la contribution de l'état final du continuum nous devons additionner les termes suivants dans le second terme de Born (Byron et al. (1983))

[15]:

$$f_{B2}^c = \frac{1}{8\pi^4} \int d\vec{p} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - \vec{k}^2 - i\varepsilon} \langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_c^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | V | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Psi_c^-(\vec{p}, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{II-9})$$

$$\langle \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Psi_c^-(\vec{p}, \vec{r}_1) | V | \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \Phi_i(\vec{r}_1) \rangle$$

avec $\varepsilon \rightarrow 0^+$ et

$$\frac{\bar{k}^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - \frac{p^2}{2} - \frac{1}{2} \quad (\text{II-10})$$

Comme l'ont souligné (Byron et al. (1983))[15] le calcul de l'élément $\langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_c^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | V | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Psi_c^-(\vec{p}, \vec{r}_1) \rangle$ est une tâche très difficile. Deux voies sont désormais possibles pour éviter le calcul direct de f_{B2}^C : la première est de considérer la relation de fermeture et la seconde est d'utiliser seulement l'équation (II-8) mais avec des pseudo-états.

La relation de fermeture consiste à remplacer la différence de l'énergie de la cible $E_n - E_i$ par une énergie d'excitation moyenne \bar{w} et à sommer sur tous les états intermédiaires $\sum_n \int |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = 1$. Par conséquent, nous obtenons:

$$\bar{f}_{B2} = \frac{2}{\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Psi_c^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1) - 1 | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1) - 1 | \Phi_i(\vec{r}_1) \rangle \quad (\text{II-11})$$

avec $\varepsilon \rightarrow 0^+$ et

$$\frac{p^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - \bar{w} \quad (\text{II-12})$$

Nous pouvons réécrire (II-11) comme :

$$\bar{f}_{B2} = \frac{2}{\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \times \langle \Psi_c^-(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1) - \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1) - \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1) + 1 | \Phi_i(\vec{r}_1) \rangle \quad (\text{II-13})$$

Byron et Joachain (1966)[16] ont également proposé une autre formulation de la relation de fermeture: ils ont exactement inclus quelques contributions d'états discrets (généralement $n = 1$ et $n = 2$) et réécrit le terme de la seconde approximation de Born comme suit

$$\bar{f}_{B2}^{BJ} = \bar{f}_{B2} - f_{B2}^{n=1}(\bar{w}) + f_{B2}^{n=1} - f_{B2}^{n=2}(\bar{w}) + f_{B2}^{n=2} + \dots \quad (\text{II-14})$$

Dans l'équation (II-14) $f_{B2}^{n=1}(\bar{w})$ correspond à (II-8) avec $n=1$ (collision élastique)

avec

$$\frac{k_{n=1}^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - (\bar{w}) \quad (\text{II-15})$$

Le terme $f_{B2}^{n=2}(\bar{w})$ signifie:

$$f_{B2}^{n=2}(\bar{w}) = f_{B2}^{2s}(\bar{w}) + f_{B2}^{2p_0}(\bar{w}) + f_{B2}^{2p_1}(\bar{w}) + f_{B2}^{2p_{-1}}(\bar{w}).$$

II-2-2. La simple ionisation de l'atome d'hélium

Considérons maintenant l'ionisation simple (e, 2e) de l'atome d'hélium par des électrons



pour lequel l'état final de l'ion He^+ est dans son état fondamental (1s).

Le premier terme de l'approximation de Born f_{B1} est donné dans ce cas par:

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \left\langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \middle| V \middle| \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II-17})$$

où $\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est la fonction d'onde de l'état initial de l'atome d'hélium et $\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ la fonction d'onde du système cible final constitué d'un ion He^+ (1s) et de deux électrons dans le continuum. Le potentiel V représente l'interaction Coulombienne entre les électrons entrant et la cible et il s'écrit :

$$V = \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} - \frac{2}{r_0}. \quad (\text{II-18})$$

Pour l'état initial nous utilisons un fit analytique de la fonction d'onde Hartree-Fock (Byron et Joachain 1966) [16]:

$$\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_0(\vec{r}_1)\phi_0(\vec{r}_2) \text{ ou } \phi_0(\vec{r}) = (4\pi)^{-1/2} (A \exp(-\alpha r) + B \exp(-\beta r))$$

avec $A = 2.60505$, $B = 2.08144$, $\alpha = 1.41$ et $\beta = 2.61$.

La fonction d'onde de l'état final est un produit symétrisé de la fonction d'onde initiale de He^+ multipliée par une fonction d'onde coulombienne orthogonalisée à l'état initial de l'atome d'hélium telle que donnée par (Byron et al. (1986))[17]:

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_C^{-1}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2) + \Psi_C^{-1}(\vec{k}_e, \vec{r}_2) \phi_n(\vec{r}_1) \right]$$

$$\text{avec } |\Psi_C^{-1}\rangle = |\Psi_C^-\rangle - \langle\phi_0|\Psi_C^-\rangle|\phi_0\rangle.$$

En effectuant l'intégration sur \vec{r}_0 dans l'équation (II-17) on peut écrire le premier terme de Born:

$$f_{B1} = -\frac{2^{3/2}}{K^2} \left[\langle\Psi_C^-(\vec{k}_e)|\exp(i\vec{K}\cdot\vec{r})|\phi_0\rangle - \langle\Psi_C^-(\vec{k}_e)|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\exp(i\vec{K}\cdot\vec{r})|\phi_0\rangle \right] \langle\phi_n|\phi_0\rangle \quad (\text{II-19})$$

Suivant (Joachain (1983))[14] le second terme de Born f_{B2} est donné par

$$f_{B2} = \frac{1}{8\pi^4} \sum_n \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - k_n^2 - i\varepsilon} \langle\exp(i\vec{k}_s\cdot\vec{r}_0)\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|V|\exp(i\vec{q}\cdot\vec{r}_0)\Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \langle\exp(i\vec{q}\cdot\vec{r}_0)\Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|V|\exp(i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0)\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \quad (\text{II-20})$$

avec $\varepsilon \rightarrow 0^+$ et

$$\frac{k_n^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - (E_n - E_i), \quad (\text{II-21})$$

où E_n est une valeur propre de l'atome d'hélium correspondant à l'état propre Φ_n .

En effectuant l'intégration sur \vec{r}_0 dans l'équation (II-20) on peut écrire le premier

terme de Born comme suit :

$$f_{B2} = \frac{2}{\pi^2} \sum_n \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - k_n^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|\exp(i\vec{K}_f\cdot\vec{r}_1) + \exp(i\vec{K}_f\cdot\vec{r}_2) - 2|\Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \langle\Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|\exp(i\vec{K}_i\cdot\vec{r}_1) + \exp(i\vec{K}_i\cdot\vec{r}_2) - 2|\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \quad (\text{II-22})$$

En appliquant la relation de fermeture, on obtient:

$$\bar{f}_{B2} = \frac{2}{\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|\exp(i\vec{K}_f\cdot\vec{r}_1) + \exp(i\vec{K}_f\cdot\vec{r}_2) - 2| \langle\exp(i\vec{K}_i\cdot\vec{r}_1) + \exp(i\vec{K}_i\cdot\vec{r}_2) - 2|\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \quad (\text{II-23})$$

avec $\varepsilon \rightarrow 0^+$ et

$$\frac{p^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - \bar{w} \quad (\text{II-24})$$

\bar{w} étant l'énergie d'excitation moyenne.

Après un petit calcul d'algèbre simple l'expression (II-23) peut se réduire à :

$$\begin{aligned} \bar{f}_{B2} = & \frac{2^{3/2}}{\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \\ & [\langle \Psi_{\bar{c}} | \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \phi_0 \rangle \\ & + \langle \Psi_{\bar{c}} | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \\ & + \langle \Psi_{\bar{c}} | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \\ & - 2 \langle \Psi_{\bar{c}} | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \phi_0 \rangle \\ & - 2 \langle \Psi_{\bar{c}} | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \phi_0 \rangle \\ & - \langle \Psi_{\bar{c}} | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \phi_0 \rangle \\ & + 2 \langle \Psi_{\bar{c}} | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \phi_0 \rangle \\ & + 2 \langle \Psi_{\bar{c}} | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \phi_0 \rangle \\ & - \langle \Psi_{\bar{c}} | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \\ & - \langle \Psi_{\bar{c}} | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle \langle \phi_n | \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}) | \phi_0 \rangle] \end{aligned} \quad (\text{II-25})$$

Cette dernière expression est plus simple que celle trouvée par (Byron et al. (1986) [17].

II-2-3. La double ionisation de l'hélium

Enfin considérons la double ionisation de l'hélium par des électrons, décrite par la réaction (e, 3e) suivante :



Dans la seconde approximation de Born la section efficace quintuplement différentielle (FDSC) est donnée par

$$\sigma^{(5)} = \frac{d^5\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b d\Omega_s dE_a dE_b} = \frac{k_s k_a k_b}{k_i} |f_{B1} + f_{B2}|^2, \quad (\text{II-27})$$

Où $d\Omega_s$, $d\Omega_a$ et $d\Omega_b$ sont, respectivement, les éléments de l'angle solide pour les électrons diffusé et éjectés et les énergies des électrons éjectés sont représentées par

E_a et E_b . Les moments des électrons incident, diffusé et éjectés sont désignés respectivement par \vec{k}_i , \vec{k}_s et \vec{k}_b . Le premier terme de Born f_{B1} est donné ici par

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \left\langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_f^\perp(\vec{k}_a, \vec{r}_1, \vec{k}_b, \vec{r}_2) \middle| V \middle| \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle, \quad (\text{II-28})$$

où $\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est la fonction d'onde de l'état initial de l'atome d'hélium et $\Psi_f^\perp(\vec{k}_a, \vec{r}_1, \vec{k}_b, \vec{r}_2)$ est la fonction d'onde représentant le double continuum de l'atome d'hélium qui est orthogonalisé à l'état initial. Le potentiel V représente l'interaction coulombienne entre l'électron incident et la cible et est donné par l'équation (II-18).

Pour l'état initial, nous utilisons une fonction d'onde précise de type Hylleraas proposée par (Bonham et Kohl (1966))[18] :

$$\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N_0 \left[\exp(-ar_1 - br_2) + \exp(-ar_2 - br_1) \right] + \beta \exp(-\gamma r_{12}) \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) = \Phi_i^{BK14}$$

N_0 étant un facteur de normalisation r_{12} et de la distance électron-électron,

$$a = 1.3991, \quad b = 2.097, \quad \alpha = 1.63, \quad \beta = -0.4431 \quad \text{et} \quad \gamma = 0.4134.$$

L'énergie de l'état initial donnée par cette fonction d'onde est $E = -2.903115$ u.a. Nous avons aussi utilisé une fonction d'onde qui inclut seulement de la corrélation radiale:

$$\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N'_0 \left[\exp(-a'r_1 - b'r_2) + \exp(-a'r_2 - b'r_1) \right] = \Phi_i^{BK7}$$

où $a' = 1.1885$, $b' = 2.1832$. Cette dernière fonction d'onde est souvent utilisée actuellement car elle ne comporte pas de termes en r_{12} (Ciappina et col. (2008))[19].

L'énergie de l'état initial donnée par cette fonction d'onde est $E = -2.875661$ u.a.

La fonction d'onde de l'état final est la fonction d'onde BBK approximée (Dal Cappello et col. (1993))[20] telle que :

$$|\Psi_f^\perp\rangle = |\Psi_f\rangle - \langle \Phi_i | \Psi_f \rangle |\Phi_i\rangle \quad \text{et avec :}$$

$$\Psi_f(\vec{k}_a, \vec{r}_1, \vec{k}_b, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_C^-(\vec{k}_a, \vec{r}_1) \Psi_C^-(\vec{k}_b, \vec{r}_2) + \Psi_C^-(\vec{k}_a, \vec{r}_2) \Psi_C^-(\vec{k}_b, \vec{r}_1) \right] \varphi(|\vec{k}_a - \vec{k}_b|),$$

où $\varphi(|\vec{k}_a - \vec{k}_b|)$ est le facteur de répulsion de Gamow donné par :

$$\varphi(|\vec{k}_a - \vec{k}_b|) = \exp\left(-\frac{\pi\chi_{ab}}{2}\right) \Gamma(1 - i\chi_{ab}) \quad \text{et} \quad \chi_{ab} = \frac{1}{|\vec{k}_a - \vec{k}_b|}.$$

Si l'on néglige les effets d'échange en considérant que l'électron diffusé est l'électron rapide et les électrons éjectés sont des électrons lents, nous pouvons facilement effectuer l'intégration analytique par rapport à \vec{r}_0 et obtenir:

$$f_{B1} = -\frac{2}{K^2} \langle \Psi_f^\perp(\vec{k}_a, \vec{r}_1, \vec{k}_b, \vec{r}_2) | \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) - 2 | \Phi_i \rangle. \quad (\text{II-29})$$

Le second terme de Born f_{B2} est donné par:

$$f_{B2} = \frac{1}{8\pi^4} \sum_n \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - k_n^2 - i\varepsilon} \langle \exp(i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0) \Psi_f^\perp(\vec{k}_a, \vec{r}_1, \vec{k}_b, \vec{r}_2) | V | \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (\text{II-30})$$

$$\langle \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}_0) \Phi_n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$$

où la sommation sur n signifie que nous prenons en compte l'ensemble des contributions des n états discret et du continuum de l'atome d'hélium. Cela signifie aussi que l'électron incident heurte à deux reprises la cible et ceci correspond au mécanisme bien connu Two-Step 2 (TS2) (Carlson et Krause, (1965))[21]. En effectuant l'intégration dans l'équation (30) et en appliquant la relation de fermeture nous obtenons (Grin et al. (2000))[22]:

$$\bar{f}_{B2} = \frac{2}{\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Psi_f^\perp(\vec{k}_a, \vec{r}_1, \vec{k}_b, \vec{r}_2) | \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1) + \exp(i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) - 2 | \quad (\text{II-31})$$

$$| \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1) + \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2) - 2 | \Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$$

et

$$\frac{p^2}{2} = \frac{k_i^2}{2} - \bar{w} \quad (\text{II-32})$$

\bar{w} étant l'énergie d'excitation moyenne.

Il est important de noter que toutes les intégrales en $d\vec{q}$ doivent être effectuées méticuleusement (voir annexe).

II-4. References

- [1] Dürr M, Dorn A, Ullrich J, Cao S P, Czasch A, Kheifets A, Götz J R and Briggs J S *Phys. Rev. Lett.* **98**, 193201 (2007).
- [2] Pindzola M S, Robicheaux F and Colgan J, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **41**, 235202 (2008).
- [3] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **12**, 291 (1979).
- [4] Lohmann B, Mc Carthy I E, Stelbovics A T and Weigold E *Phys. Rev. A* **30**, 758 (1984).
- [5] Ehrhardt H, Knoth G, Schlemmer P and Jung K, *Phys. Lett.A* **110**, 92 (1985).
- [6] Byron F W Jr Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **13**, L673 (1980).
- [7] Pathak A and Srivastava M K, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **14**, L773 (1981).
- [8] Ehrhardt H, Fischer M and Jung K, *Z. Phys A* **304**, 119 (1982).
- [9] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **15**, L293 (1982).
- [10] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **18**, 3203 (1985).
- [11] Brauner M, Briggs J S and Klar H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **22**, 2265 (1989).
- [12] Lahmam-Bennani A, Staicu-Casagrande E M, Naja A, Dal Cappello C and Bolognesi P, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **43**, 105201(2010).
- [13] Lahmam-Bennani A, Duguet A and Roussin S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **35**, L59 (2002).
- [14] Joachain C J, *Quantum Collision Theory*, 3rd edn (Amsterdam : North-Holland) (1983).
- [15] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **16**, L769 (1983).
- [16] Byron F W Jr and Joachain C J, *Phys. Rev.* **146**, 1 (1966).
- [17] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **19**, 1201 (1986).
- [18] Bonham R A and Kohl D A, *J. Chem. Phys. A* **45**, 2471 (1966)
- [19] Ciappina M F, Schulz M, Kirchner T, Fischer D, Moshhammer R and J.

Ullrich, Phys. Rev. A **77**, 062706 (2008).

[20] Dal Cappello C, Joulakian B and Langlois J, *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.* **3**, 125 (1993).

[21] Carlson T A and Krause M O, *Phys. Rev. A* **51**, 3735 (1965).

[22] Grin M, Dal Cappello C, El Mkhater R and J. Rasch, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33**,13 (2000).

CHAPITRE III

« RESULTATS ET DISCUSSION »

CHAPITRE III

RESULTATS ET DISCUSSION

III-1. Sections efficaces triplement différentielles de l'ionisation de l'atome

d'hydrogène pour les états n=1 et n=2

Ci-dessous nous présentons les résultats de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'atome d'hydrogène, sous forme de tableau pour le premier terme de Born B_1 et pour le second terme de Born B_2 en mettant en évidence la contribution des états discrets 2s et 2p pour l'état discret n=2 où nous avons pu observer une augmentation d'amplitude du pic binaire et une diminution d'amplitude du pic de recul.

θ_e (deg)	B1	B2(1s)	B2(2s)	B2(2p)	SB2(0.5)	SB2(1.0)	B2(0.5)	B2(1.0)
10	1.363	1.409	1.323	1.362	0.597	0.974	0.599	1.019
30	0.247	0.261	0.235	0.250	0.296	0.443	0.289	0.433
50	0.666	0.660	0.670	0.620	0.808	0.885	0.790	0.897
70	1.581	1.576	1.573	1.495	1.577	1.695	1.552	1.758
90	2.400	2.427	2.340	2.334	2.489	2.578	2.446	2.619
110	2.906	2.996	2.834	3.037	3.467	3.354	3.401	3.129
130	3.050	3.210	2.985	3.418	4.248	3.895	4.281	3.701
150	2.830	3.026	2.712	3.229	4.456	4.010	4.618	4.225
170	2.253	2.438	2.106	2.556	3.830	2.438	4.030	2.106
190	1.387	1.521	1.270	1.589	2.455	2.355	2.605	2.758
210	0.510	0.567	0.458	0.630	0.932	1.010	1.000	1.207
230	0.313	0.286	0.314	0.370	0.446	0.442	0.489	0.538
250	1.885	1.800	1.932	2.100	2.265	1.876	2.369	1.978
270	5.823	5.747	5.995	6.272	6.139	5.502	6.113	5.077
290	10.54	10.53	10.64	10.44	9.302	9.185	9.183	8.982
310	12.41	12.46	12.39	11.74	9.058	9.811	9.034	10.19
330	9.675	9.756	9.600	9.129	5.934	6.948	5.948	7.376
350	4.847	4.922	4.779	4.665	2.504	3.234	2.511	3.445

Tableau 1: sections efficaces triplement différentielles (en u.a.) pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène obtenues à partir du second terme de Born donné par les expressions (II-8), (II-13) et (II-14), en utilisant diverses approximations pour \bar{f}_{B2} : SB2(0.5), \bar{f}_{B2} : calculé par la relation de fermeture en utilisant une énergie d'excitation moyenne $\bar{w} = 0.5u.a$; SB2 (1.0), \bar{f}_{B2} : calculé par la relation de fermeture en utilisant une énergie moyenne d'excitation $\bar{w} = 1.0u.a$; B2 (1s), \bar{f}_{B2} : calculé en incluant seulement la contribution de l'état fondamental de la cible (1s) comme un état intermédiaire; B2 (2s) (B2 (2p)): même calcul, pour lequel la contribution de l'état 2s (2p) est incluse dans \bar{f}_{B2} ; B2 (0.5): seconde approximation de Born où \bar{f}_{B2}^{BJ} est calculé en incluant exactement les états 1s, 2s et 2p (états intermédiaires) de la cible, et la relation de fermeture calculée avec $\bar{w} = 0.5u.a$; B1: résultats de la première approximation de Born (II.5). L'énergie de l'électron incident est de 250 eV, l'énergie de l'électron éjecté est de 5 eV et l'angle de diffusion est $\theta_s = 3^\circ$.

III-2. Sections efficaces triplement différentielles de l'ionisation de l'atome d'hydrogène pour les états $n=1$ à $n=10$

Nous présentons dans le tableau suivant les résultats de la section efficace triplement différentielle des états discrets de $n=1$ à $n=10$ pour la première approximation de Born B_1 et la deuxième approximation de Born B_2 , où nous avons pu observer une augmentation d'amplitude du pic binaire et une diminution d'amplitude du pic de recul.

θ_e (deg)	B1	B2(2)	B2(3)	B2(4)	B2(5)	B2(6)	B2(8)	B2(10)
10	1.363	1.366	1.349	1.352	1.347	1.349	1.346	1.346
30	0.247	0.252	0.250	0.249	0.248	0.248	0.247	0.247
50	0.666	0.618	0.598	0.598	0.583	0.579	0.576	0.574
70	1.581	1.482	1.433	1.410	1.394	1.386	1.377	1.374
90	2.400	2.302	2.283	2.296	2.307	2.297	2.282	2.291
110	2.906	3.056	3.099	3.131	3.152	3.153	3.148	3.150
130	3.050	3.515	3.609	3.640	3.662	3.676	3.692	3.697
150	2.830	3.312	3.474	3.561	3.609	3.640	3.672	3.686
170	2.253	2.598	2.736	2.810	2.852	2.878	2.907	2.921
190	1.387	1.608	1.703	1.755	1.784	1.801	1.820	1.829
210	0.510	0.638	0.692	0.723	0.742	0.756	0.768	0.774
230	0.313	0.346	0.396	0.423	0.438	0.447	0.456	0.460
250	1.885	2.068	2.172	2.194	2.196	2.204	2.214	2.220
270	5.823	6.370	6.408	6.411	6.424	6.416	6.376	6.388
290	10.54	10.52	10.54	10.55	10.56	10.56	10.56	10.55
310	12.41	11.77	11.46	11.29	11.20	11.15	11.09	11.06
330	9.675	9.135	8.879	8.755	8.685	8.651	8.611	8.590
350	4.847	4.670	4.573	4.530	4.507	4.493	4.477	4.464

Tableau 2: sections efficaces triplement différentielles (en u.a.) pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène obtenues à partir du second terme de Born donné par l'expression (II-8), en utilisant diverses approximations pour \bar{f}_{B2} : B2(2) calculé en incluant seulement les contributions de $n=1$ et $n=2$, B2 (3): calculé en incluant seulement les contributions de $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$; B2 (4): calculé en incluant uniquement les contributions de $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ et $n = 4$; B2 (5) calculé en incluant uniquement les contributions des états $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$ et $n = 5$; B2 (6): calculé en incluant uniquement les contributions de $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$ et $n = 6$; B2 (8): calculé en incluant uniquement les contributions de $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$, $n = 6$, $n = 7$ et $n = 8$; B2 (10): calculé en incluant uniquement les contributions de $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$, $n = 6$, $n = 7$, $n = 8$, $n = 9$ et $n = 10$. B1: résultats de la première approximation de Born (II-5). L'énergie de l'électron incident est de 250 eV, l'énergie de l'électron éjecté est de 5 eV et l'angle de diffusion est $\theta_s = 3^\circ$.

III-3. Sections Efficaces triplement différentielles pour l'ionisation de

L'atome d'hydrogène par impact d'électrons et de positrons

Dans ce qui va suivre nous présentons les différents résultats obtenus de la section efficace triplement différentielle pour l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène par

impact d'électrons de 250 eV et pour des angles de diffusion ($\theta_s = 3^\circ$) et ($\theta_s = 8^\circ$).

Pour les différents états discrets allant de $n=1$ et $n=2$, et de $n=1$ à $n=10$.

III-3-1.SETD pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons

Nous étudions maintenant l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons en comparant les résultats de notre seconde approximation de Born avec les données (d'Ehrhardt et al. (1985, 1986))[1, 2]. L'énergie incidente est de 250 eV et de l'électron éjecté est de 5 eV. Nous considérons le cas où l'électron incident est diffusé par un angle de ($\theta_s = 3^\circ$) qui correspond a un faible moment de transfert ($K=0.27$ u.a).

III-3-1-1. Cas pour un faible moment de transfert avec $\theta_s = 3^\circ$

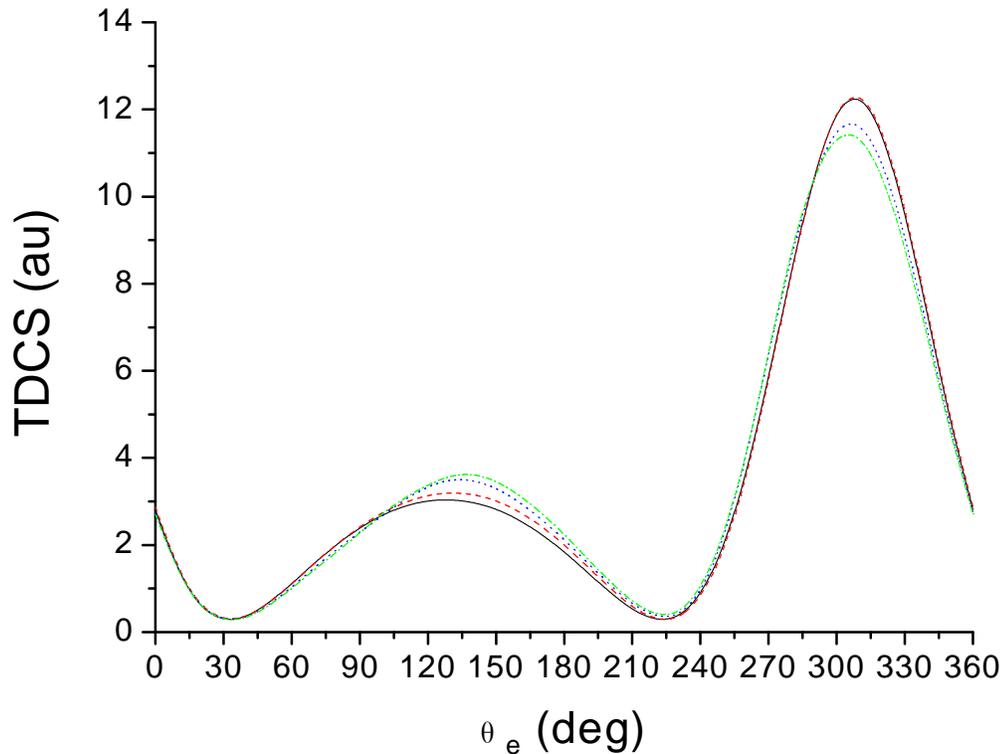


Figure 1: Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e , par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de l'état fondamental cible ($n = 1$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n=1$ et $n=2$ par une ligne pointillée et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n=1$, $n=2$ et $n=3$ par une ligne en tirets et points.

Dans la figure 1 on compare les résultats du premier ordre de Born avec ceux de la seconde approximation de Born, en prenant en compte successivement les états intermédiaires (de $n=1$ à $n=3$). Il apparaît clairement que la contribution pour $n=1$ (contribution élastique) ne joue pas un rôle important pour les conditions cinématiques étudiées ici. Nous remarquons juste une légère augmentation de l'amplitude du pic de recul. Si l'on rajoute la contribution des états excités correspondant à $n=2$ ($2s$ et $2p$), on observe une baisse de l'amplitude du lobe binaire et une augmentation de l'amplitude du lobe de recul. En fait, la contribution la plus importante est due à l'état excité $2p$ (voir tableau 1). Ce résultat s'explique par la transition dipolaire $1s \rightarrow 2p$ qui est importante pour un moment de transfert faible, résultat obtenu déjà par (Byron et al. (1985))[3]. Si on ajoute la contribution de l'état excité correspondant à $n=3$ on remarque que l'augmentation de l'amplitude du lobe de recul se poursuit comme la diminution de l'amplitude du pic binaire.

Cela nous amène à conclure que si la contribution de $n=2$ est la plus importante, elle ne suffit pas et l'on doit prendre en compte la contribution de $n=3$.

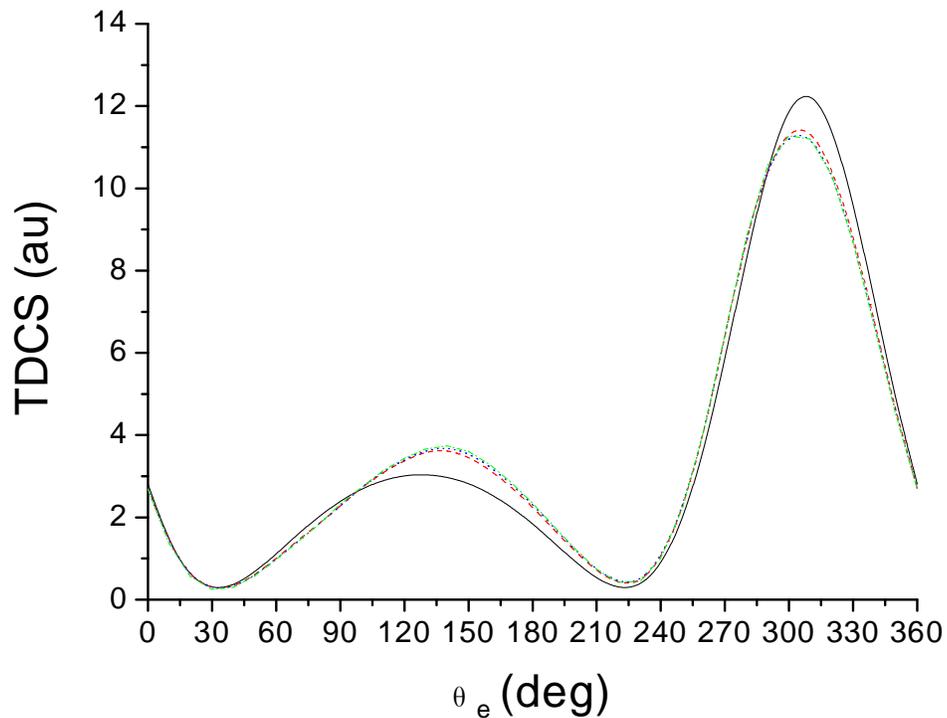


Figure 2: Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e , par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de $n = 1, n = 2$ et $n = 3$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les contributions $n = 1, n = 2, n = 3$ et $n = 4$ par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1, n = 2, n = 3, n = 4$ et $n = 5$ par une ligne en tirets et points.

La figure 2 montre les résultats de la seconde approximation de Born quand on ajoute les contributions des états excités correspondant à $n=4$ et $n=5$. Ces contributions sont faibles. Ainsi l'état excité $n=5$ ne donne aucune contribution pour le pic binaire et juste une très faible diminution de l'amplitude du pic de recul. Il semble que nous ayons atteint la limite de convergence de la contribution des états discrets. Afin de vérifier ce point nous allons ajouter la contribution des états excités de $n=6$ à $n=10$ (figure 3).

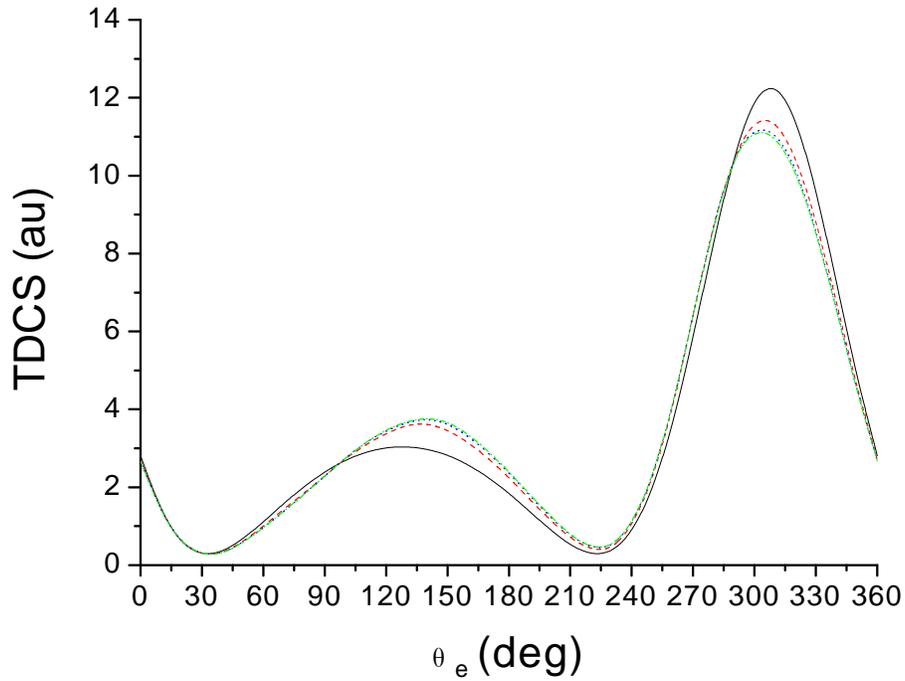


Figure 3 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de $n = 1 + n = 2 + n = 3$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les contributions $n = 1, n = 2, n = 3, n = 4, n = 5$ et $n = 6$ par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant toutes les contributions de $n=1$ à $n = n = 10$ par une ligne en tirets et points.

La figure 3 montre les contributions des états discrets $n=6, n=7, n=8, n=9$ et $n=10$ (qui correspond à 100 états discrets). Il est à remarquer que les contributions à partir de $n=7$ à $n=10$ ne jouent aucun rôle significatif et peuvent être négligées (voir tableau 2).

III-3-1-2. Cas pour un grand moment de transfert avec $\theta_s = 8^\circ$

Nous étudions maintenant un autre cas où le moment de transfert est plus grand. Nous considérons $\theta_s = 8^\circ$ qui correspond à un moment de transfert $K=0.61$ u.a

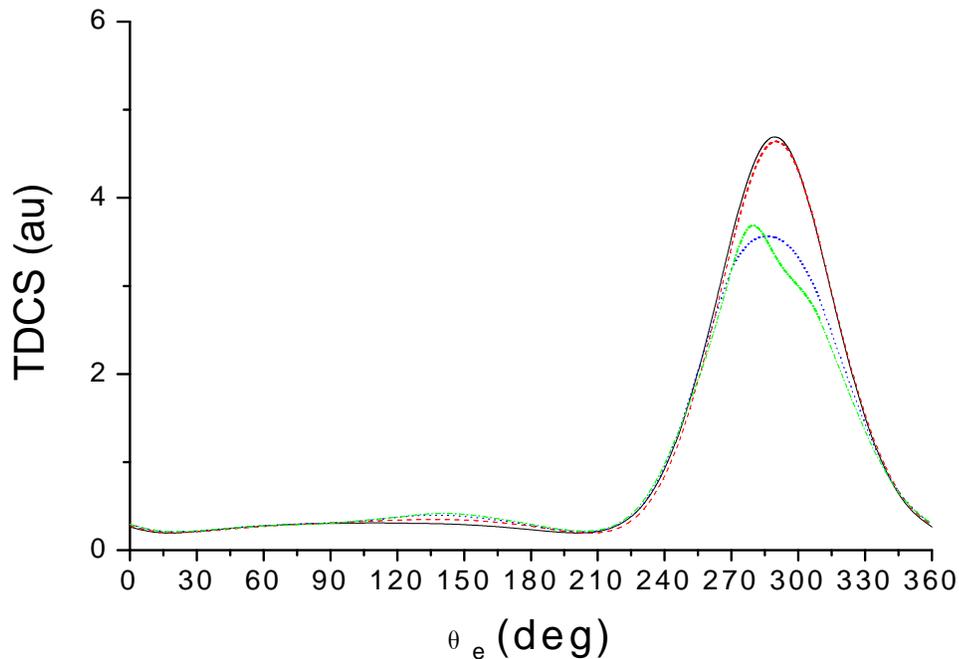


Figure 4: Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de l'état fondamental cible ($n = 1$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1$ et $n = 2$ par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$ par une ligne en tirets et points.

Pour la figure 4 nous comparons les résultats donnés par le premier terme de l'approximation de Born avec ceux du second terme, en incluant successivement les états discrets $n=1$, $n=2$ et $n=3$ comme états intermédiaires. La contribution de $n=1$ (cas d'une collision dite élastique) est ici aussi faible que précédemment. Nous remarquons toujours une faible augmentation de l'amplitude du pic de recul. Quand nous ajoutons la contribution des états excités correspondant à $n=2$ (2s et 2p), nous observons une forte diminution de l'amplitude du lobe binaire et une augmentation de l'amplitude du lobe de recul. Si l'on ajoute la contribution de l'état excité correspondant à $n=3$ on constate un déplacement du pic binaire et une petite augmentation de l'amplitude du lobe de recul. Pour ce plus grand moment de transfert la contribution de $n=2$ est la plus importante, celle correspondant à $n=3$ reste faible. Nous pouvons donc nous attendre à ce que les contributions correspondant à $n=4$ et $n=5$ ne jouent aucun rôle.

La figure 5 montre que c'est le cas pour le lobe de recul, mais pas pour le lobe binaire : la convergence ici n'est pas encore atteinte.

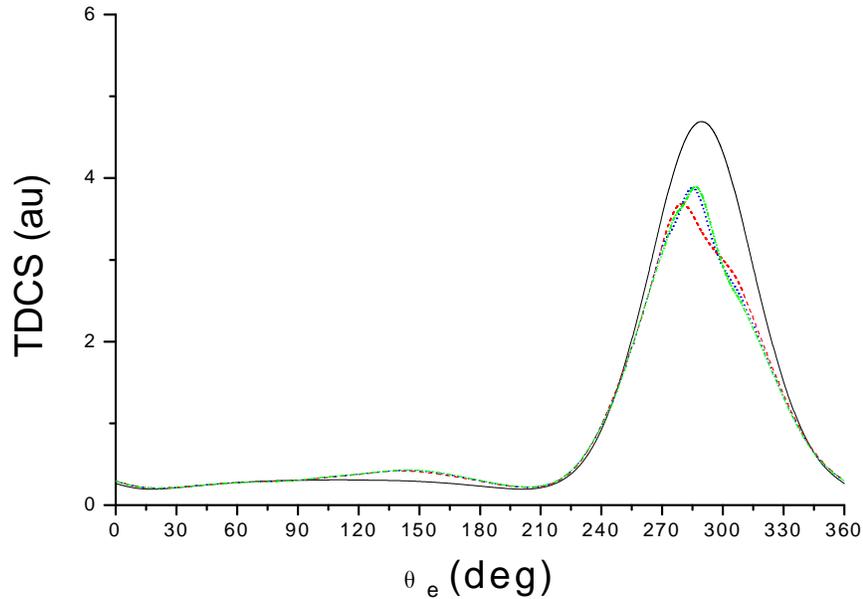


Figure 5 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les contributions $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ et $n = 4$ par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$ et $n = 5$ par une ligne en tirets et points.

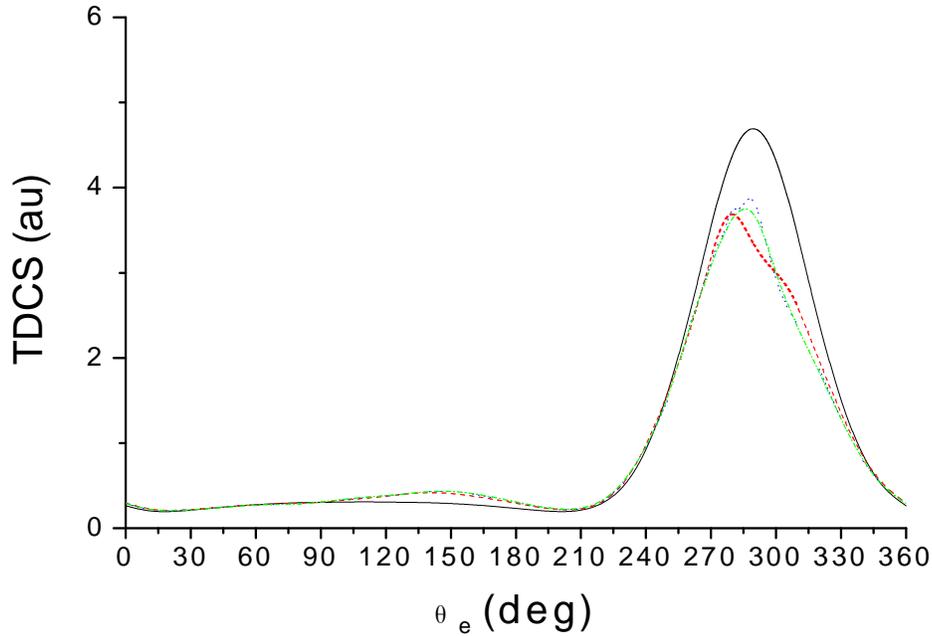


Figure 6 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de $n = 1, n = 2$ et $n = 3$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1, n = 2, n = 3, n = 4, n = 5$ et $n = 6$ par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant toutes les contributions de $n = 1$ à $n = 10$ par une ligne en tirets et points.

La figure 6 présente les résultats des contributions de $n=6, n=7, n=8, n=9$ et $n=10$ (qui correspond à 100 états discrets). Il est clair que les contributions des états intermédiaires de $n=7$ à $n=10$ ne jouent aucun rôle ici et peuvent être négligées.

Nous avons donc eu raison d'estimer que la convergence était atteinte en ajoutant les contributions de $n=1$ à $n=6$.

En conclusion nous pouvons dire que la contribution la plus importante pour les deux cas ($K=0.27$ u.a et $K=0.61$ u.a) est due à $n=2$ (en particulier pour l'état 2p) et qu'il est préférable d'ajouter les contributions des états intermédiaires $n=3, n=4, n=5$ et $n=6$ pour atteindre la convergence.

III-3-1-3. Cas de la relation de fermeture pour ($\theta_s = 3^\circ$) et ($\theta_s = 8^\circ$).

Nous étudions maintenant la relation de fermeture dans les mêmes conditions cinématiques pour les cas où $\bar{w} = 0.5u.a$ et $\bar{w} = 1.0u.a$. Les figures qui vont suivre (figure 7 et figure 8) montrent les résultats obtenus en appliquant la relation de fermeture. Nous observons que la relation de fermeture utilisant l'équation (II-13) ou

l'équation (II-14) donne des résultats proches. Dans notre cas, l'équation (II-14) est calculée avec $n=1$ à $n=6$ (Byron et al. (1985))[3] ont pris en compte seulement $n=1$ et $n=2$.

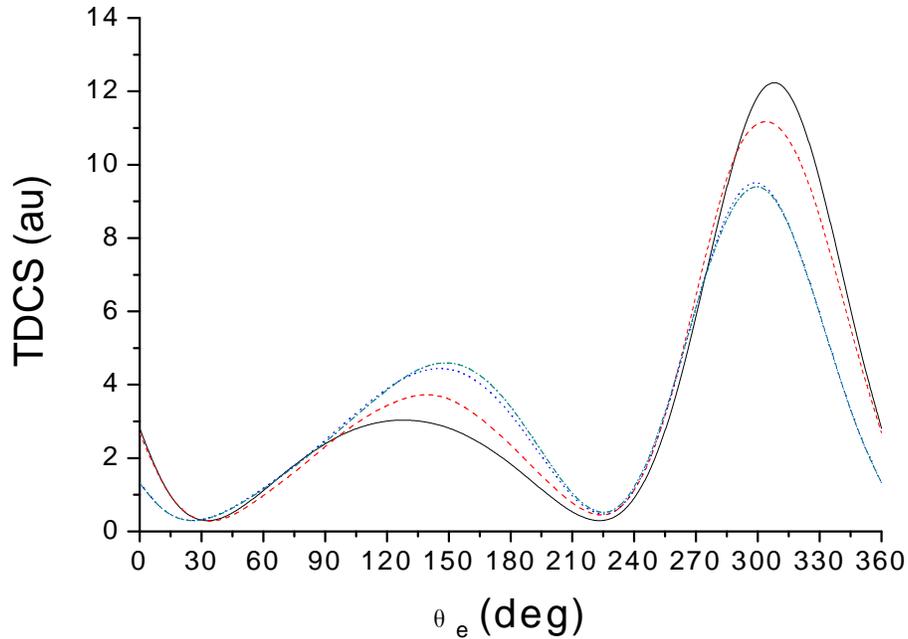


Figure 7: Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les contributions $n=1$, $n=2$, $n=3$, $n=4$, $n=5$ et $n=6$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13)) par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-14)) par une ligne en tirets et points.

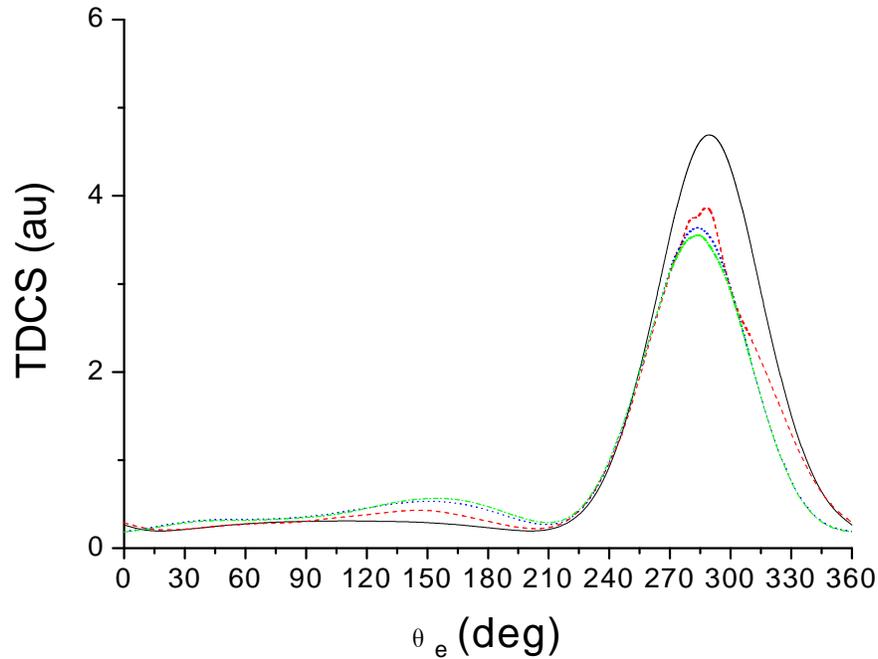


Figure 8 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les contributions de $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$ et $n = 6$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13), ($\bar{w} = 0.5u.a$) par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-14), $\bar{w} = 0.5u.a$) par une ligne en tirets et points.

Les figures 7 et 8 montrent une nette différence entre nos résultats calculés en prenant en compte les seules contributions des états discrets (pour $n=1$ à $n=6$) et ceux calculés en appliquant la relation de fermeture. Cela signifie que nous ne pouvons pas négliger les contributions des états du continuum, comme souligné par Byron et al. (1985)[3] qui ont par ailleurs montré que les résultats du calcul de la seconde approximation de Born étaient insensibles à la variation du paramètre \bar{w} .

De notre côté, nous observons que le changement de valeur du paramètre \bar{w} change les résultats de notre calcul effectué dans le cadre de l'approximation de Born d'ordre deux.

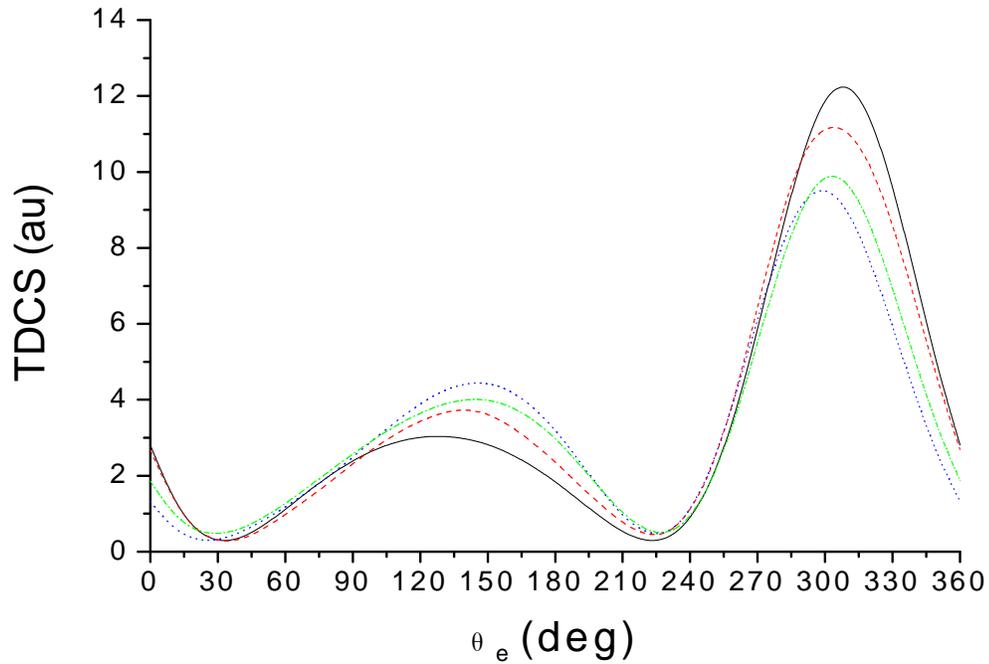


Figure 9: Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les contributions $n=1$, $n=2$, $n=3$, $n=4$, $n=5$ et $n=6$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13), $\bar{w} = 0.5u.a$) par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13), $\bar{w} = 1.0u.a$) par une ligne en tirets et points.

Nous effectuons également comme (Byron et al. (1985))[3], des calculs faits avec $\bar{w} = 0.5u.a$ et $\bar{w} = 1.0u.a$ mais en incluant plus d'états discrets. Nous pouvons conclure des résultats de la relation de fermeture que les contributions dues aux états du continuum sont nécessaires et que malheureusement la relation de fermeture dépend du choix du paramètre \bar{w} . Ce résultat a également été constaté par (Lahmam-Bennani et al. (2003))[4] pour la double ionisation de l'hélium par des électrons.

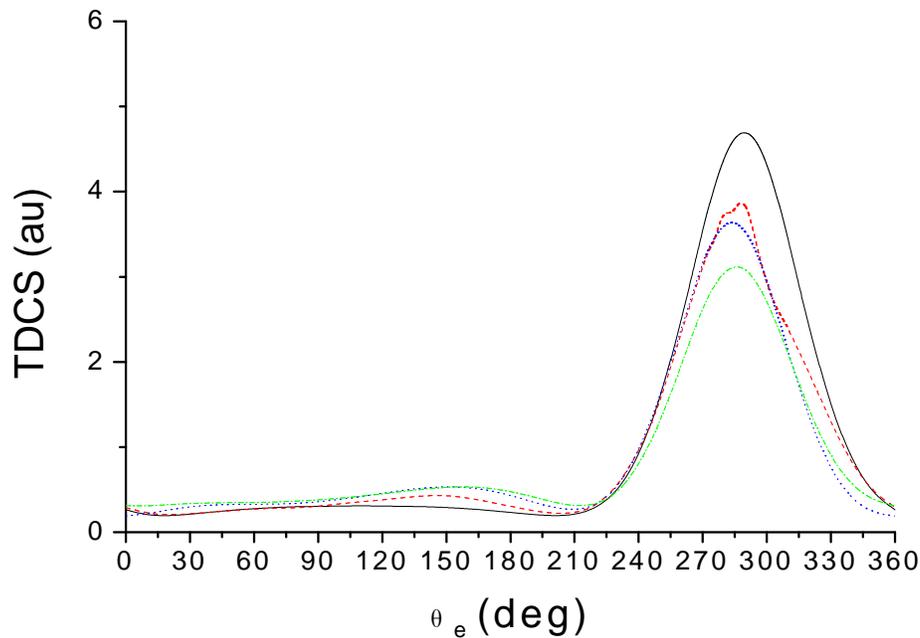


Figure 10: Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle θ_e , d'électron éjecté par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie des électrons éjectés est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les $n = 1$ contribution, $n = 2$, $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$ et $n = 6$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13), $\bar{w} = 0.5u.a$) par des pointillés et ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13), $\bar{w} = 1.0u.a$) par une ligne en tirets et points.

III-3-1-4. Cas de la contribution des états de continuum

De ce fait des résultats de la relation de fermeture, les contributions dues aux états du continuum sont nécessaires. Une autre façon d'inclure ces contributions des états du continuum est de considérer une base avec des pseudo-états. C'est pourquoi nous considérons deux bases de pseudo-états qui incluent respectivement 31 (Callaway (1978)) [5] et 32 (Callaway (1993)) [6] états. Les valeurs propres varient de $-0.5au$ à $1.02au$ (Callaway (1978)) [5] et de $-0.5au$ à $4.8au$ (Callaway (1993)) [6]. Pour de plus amples détails de ces deux bases on peut se référer à (Rouet (1996)) [7]. Les figures 11 et 12 montrent les résultats de la seconde approximation de Born calculée avec une base de pseudo-états.

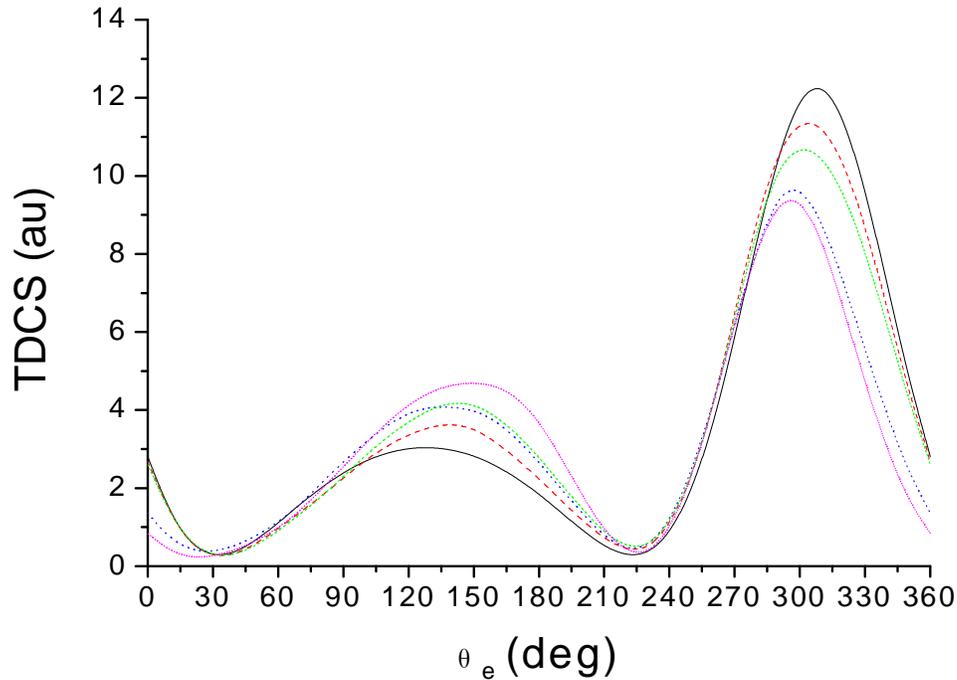


Figure 11 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie des électrons éjectés est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les états propres discrets et les pseudo-états (Callaway 1978) [5] par des tirets et par une ligne en petits tirets (Callaway 1993) [5], ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états (Callaway 1978) [5] par des pointillés et par une ligne pointillée courte (Callaway 1993) [6].

Dans la figure 11 ($\theta_s = 3^\circ$), nous voyons que les contributions des états du continuum sont importantes aussi bien pour le pic binaire que pour le pic de recul. Toutefois, des différences apparaissent dans la figure 12 ($\theta_s = 8^\circ$). Nous voyons ici que la contribution la plus importante des états du continuum provient de la base des pseudo-états (Callaway (1993))[6] comportant 32 termes. En particulier le pic de recul subit un important décalage. De ces résultats nous pouvons conclure que les contributions des états du continuum jouent un rôle important dans l'ionisation de l'hydrogène atomique pour ces conditions cinématiques particulières (énergie incidente grande par rapport à l'énergie de l'électron éjecté).

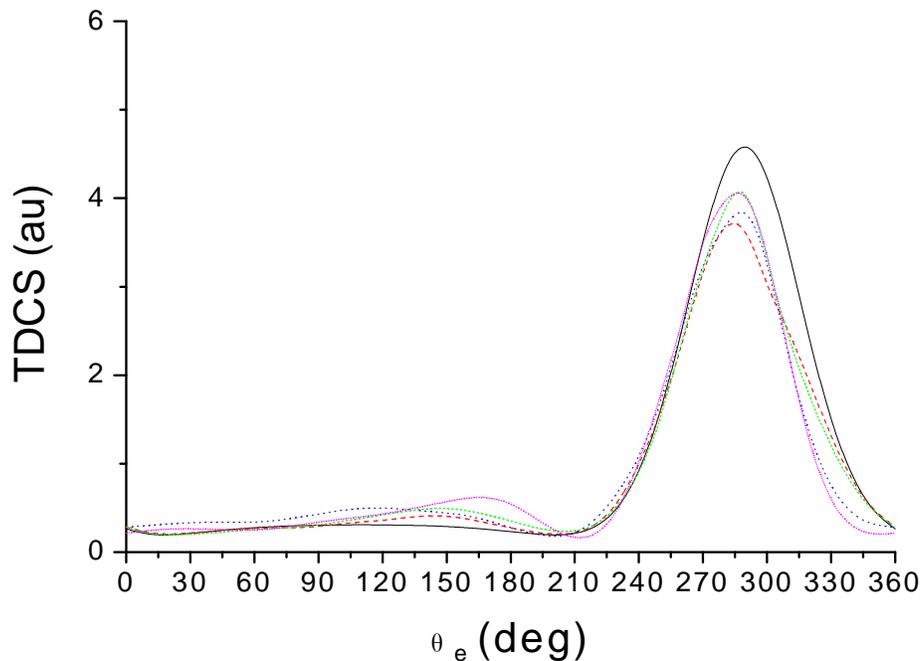


Figure 12 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les états propres discrets et les pseudo-états (Callaway (1978))[5] par des tirets et par une ligne en petits tirets (Callaway 1993) [6], ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états (Callaway (1978))[5] par des pointillée et par une ligne pointillée courte (Callaway (1978)) [5] .

III-3-1-5. Comparaison des résultats théoriques de la SETD avec le modèle BBK et l'expérience

Il est maintenant temps de comparer nos résultats théoriques avec le modèle BBK (Brauner et al. (1989))[8] et avec les données absolues de (Ehrhardt et al. (1985, 1986))[1,2]. Pour cela nous avons suivi la recommandation de Jones et de Madison (2002) [9] et multiplié toutes les données par un facteur d'échelle de 0.88. (Jones et Madison (2000))[10] trouvent un très bon accord entre leur modèle (CDW-EIS) de Continuum Distorted Wave Eikonal State modèle (Crothers et McCan (1983))[11] , (Jones et Madison 1998)[12], qui contient la même fonction d'onde BBK pour l'état final avec un état initial décrit par une onde Eikonale au lieu de l'onde plane pour l'électron incident, avec le modèle non perturbatif (CCC) Convergent Close

Coupling (Bray et al. (1994)[13], Jones et Madisson 2000) [10]. A partir de ce bon accord entre les deux théories (CDW-EIS et CCC), ils concluent que les résultats des expériences de (Ehrhardt et al. (1985, 1986)) [1,2] doivent être multipliés par un facteur d'échelle de 0.88. Pour une énergie incidente considérée ici (250 eV) les modèles BBK et CDW-EIS donnent des résultats qui sont en très bon accord avec ceux du modèle le plus sophistiqué (CCC) (Jones et Madisson (2000)) [10].

La figure 13 montre un très bon accord entre les résultats du modèle BBK et ceux de la seconde approximation de Born avec la relation de fermeture et les expériences pour $\theta_s = 3^\circ$.

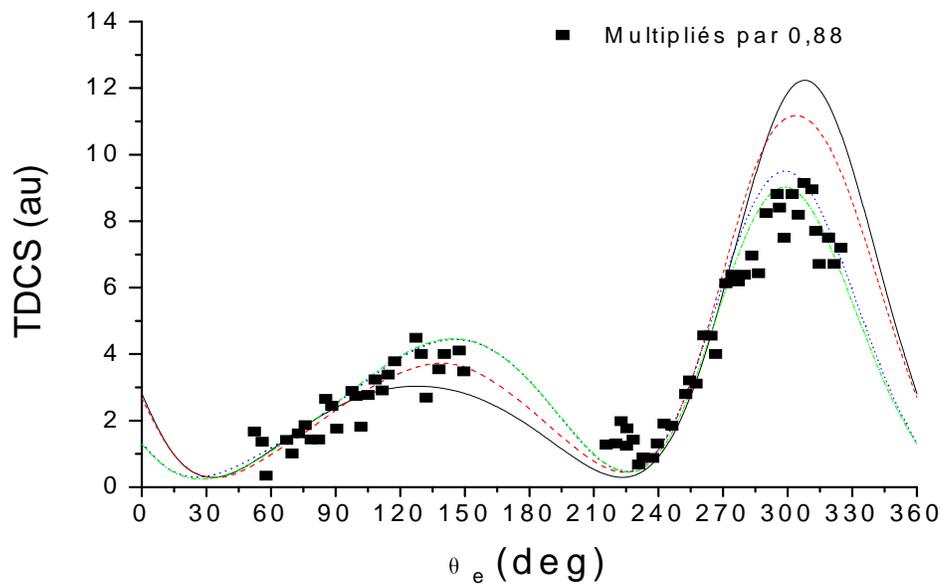


Figure 13 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie des électrons éjectés est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée par la relation de fermeture ($\bar{w} = 0.5u.a$) par des pointillés, ceux du modèle BBK par une ligne en tirets et points et les résultats des expériences (multiplié par 0.88) par des carrés.

Comme on l'a déjà vu plus haut le calcul de la seconde approximation de Born effectué avec les états discrets ($n=1-6$, ou $n=1-10$) est insuffisant : la contribution des

états du continuum est nécessaire. Cette contribution est déjà prise en compte partiellement dans le modèle BBK parce que l'interaction entre l'électron diffusé et l'électron éjecté est traitée à un ordre infini, mais de façon approximative.

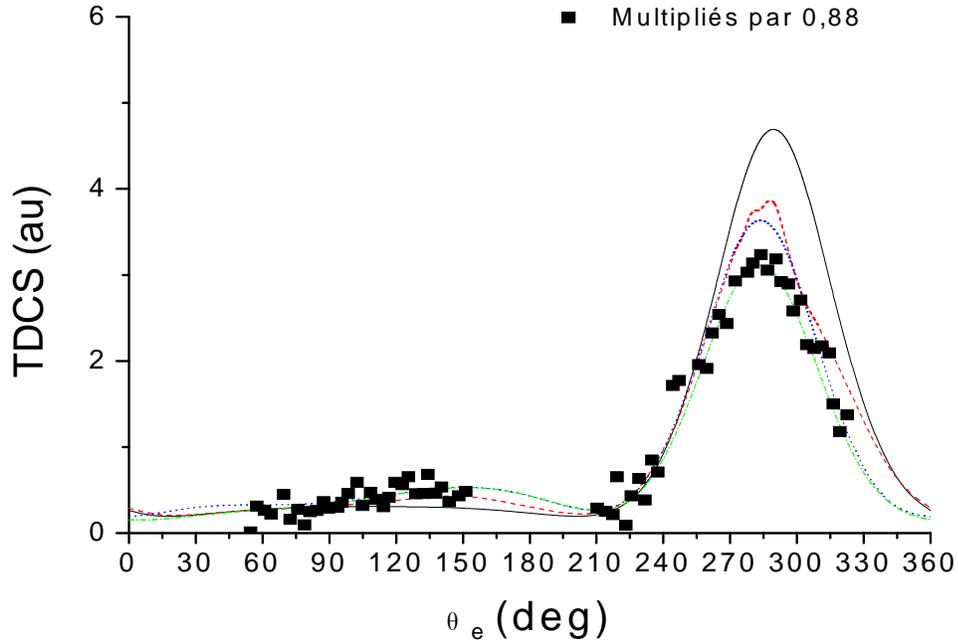


Figure 14 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée par la relation de fermeture ($\bar{w} = 0.5u.a$) par des pointillés, ceux du modèle BBK par une ligne en tirets et points et les résultats des expériences (multipliés par 0.88) par des carrés.

La figure 14 montre la même comparaison mais pour $\theta_s = 8^\circ$. La seconde approximation de Born calculée avec la relation de fermeture donne un meilleur accord avec le modèle BBK (et avec l'expérience), tandis que la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement des états discrets est insuffisante. Mais l'accord donné par la relation de fermeture est un peu moins bon pour $\theta_s = 8^\circ$ que pour $\theta_s = 3^\circ$. Nous n'étudions ici que le pic binaire parce que il n'y a pas de différences qui apparaissent dans les différents traitements pour le pic de recul qui est petit par rapport au cas de $\theta_s = 3^\circ$.

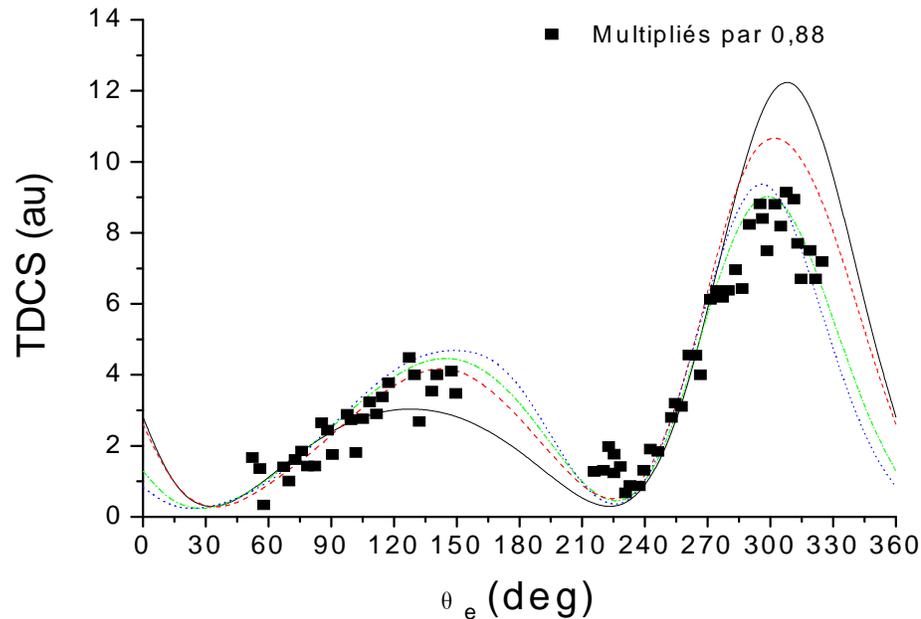


Figure 15 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les états propres discrets et pseudo-états (Callaway (1993)) [6] par une ligne pointillée, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états (Callaway (1993)) [6] par une ligne en tirets et points et les résultats des expériences (multipliés par 0.88) par des carrés.

Les figures 15 et 16 montrent une comparaison entre le traitement de notre second Born avec les pseudo-états, le modèle BBK et des expériences. Pour ($\theta_s = 3^\circ$). Nous constatons une très bonne concordance entre le modèle BBK, notre seconde approximation de Born avec les pseudo-états et les expériences. Ici les contributions des états de continuum est importante, particulièrement pour le pic binaire. Pour ($\theta_s = 8^\circ$) nous constatons que les contributions des états du continuum sont faibles (voir également figure 12). Cela explique pourquoi l'accord entre notre modèle de second Born avec les pseudo-états est moins satisfaisant pour le pic binaire. Il serait nécessaire d'inclure plus d'états du continuum dans la base de pseudo-états.

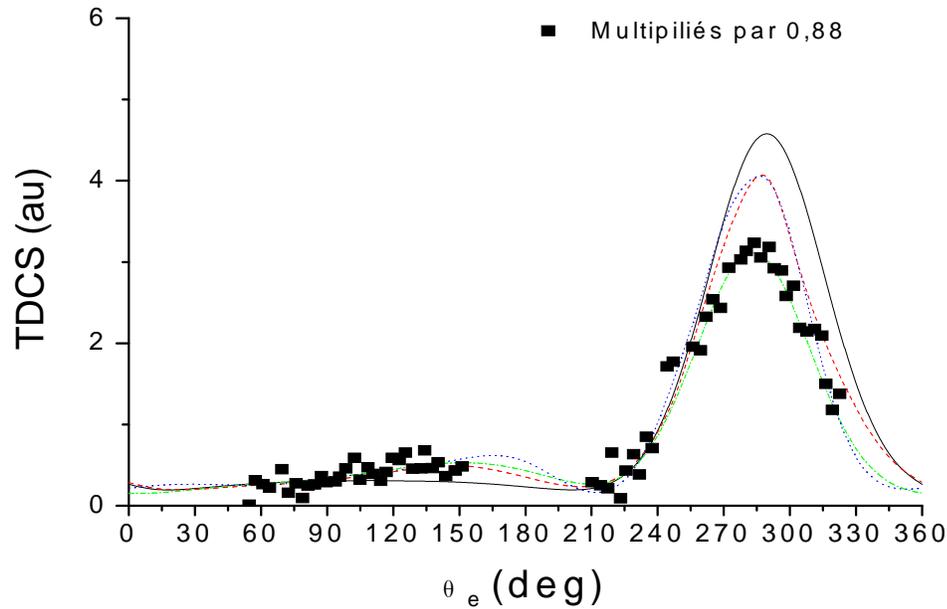


Figure 16 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction d'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant uniquement les états propres discrets et pseudo-états (Callaway (1993))[6] par une ligne pointillée, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états(Callaway (1993))[6] par une ligne en pointillés, ceux du modèle BBK par une ligne en tirets et points et les résultats des expériences (multipliés par 0.88) par des carrés.

III-3-2. SETD pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact de positrons

Dans ce qui va suivre nous nous sommes intéressés à ce qui se passe quand on remplace les électrons incidents par des positrons. L'ionisation de l'hydrogène atomique par positrons est un problème plus difficile parce que les collisions de réarrangement sont possibles grâce à la formation du positronium. L'ionisation de l'hydrogène atomique par positrons est donc une collision à deux-centres tandis que celui de l'ionisation de l'hydrogène atomique par un électron est un mono-centre. Bien que des progrès ont été réalisés (voir Par exemple (Kadyrov et al. (2007)) [14] nous observons que le problème de l'ionisation de l'hydrogène atomique par positrons n'est pas encore résolu. Brauner et al. (1989) [8] ont appliqué leur modèle à BBK pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par positrons et ont obtenu la SETD. Mais,

jusqu'à présent, la seconde approximation de Born pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par les positrons n'a pas été publiée. Bandyopadhyay et al. (1994) [15] et (Fiol et Olson (2002))[16] ont également utilisé le modèle BBK pour les calculs de la SETD et la section efficace doublement différentielle. Mais, jusqu'à maintenant, aucun n'a appliqué le second terme de l'approximation de Born pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par positrons (Sharma et Srivastava (1988)) [17] ont appliqué la seconde approximation de Born pour l'ionisation de l'hélium par des électrons et de positrons). Ce n'est que récemment le travail de (Dal Cappello et al. (2011))[18] basé sur le second terme de Born pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact de positrons et aussi bien pour l'hélium a donné quelques indications théoriques. Dans notre approximation de Born les ondes planes sont utilisées pour les particules incidentes et difusées. Il convient de noter que l'amplitude du premier terme de Born a des signes opposés suivant que l'impact est du aux électrons ou aux positrons. Si on ne considère que le premier terme de l'approximation de Born nous trouvons la même section efficace par impact d'électron ou de positron parce que les SETD sont directement relié aux carré du premier terme de Born (voir équation (II-2)). Le signe du second terme de Born ne dépend pas de la charge de la particule, mais maintenant le signe du premier terme de Born joue un rôle parce que le premier terme de Born est ajouté au deuxième terme de Born, expliquant ainsi le changement de comportement lorsque la seconde approximation de Born est appliquée par impact d'électrons et de positrons.

Ci dessous nous présentons les premiers résultats obtenu pour la SETD pour la simple ionisation de l'atome d'hydrogène par impact de positrons

Les figures 17 et 18 montrent les résultats de notre modèle BBK (qui donne les mêmes valeurs que celles trouvées par (Brauner et al. (1989)) [8] ainsi que notre traitement appliquant la seconde approximation de Born. Pour ($\theta_s = 3^\circ$) nous observons les mêmes tendances: la seconde approximation de Born avec la relation de fermeture ou les pseudo-états donne un bon accord avec le modèle BBK et notre traitement de second Born qui ne comprend que les contributions des états propres $n = 1$ à $n = 6$ sous estime l'amplitude du pic binaire.

Mais pour $\theta_s = 8^\circ$ nous avons curieusement un bon accord entre tous les modèles. Il semble que pour l'impact de positrons les contributions des états du continuum sont moins importantes.

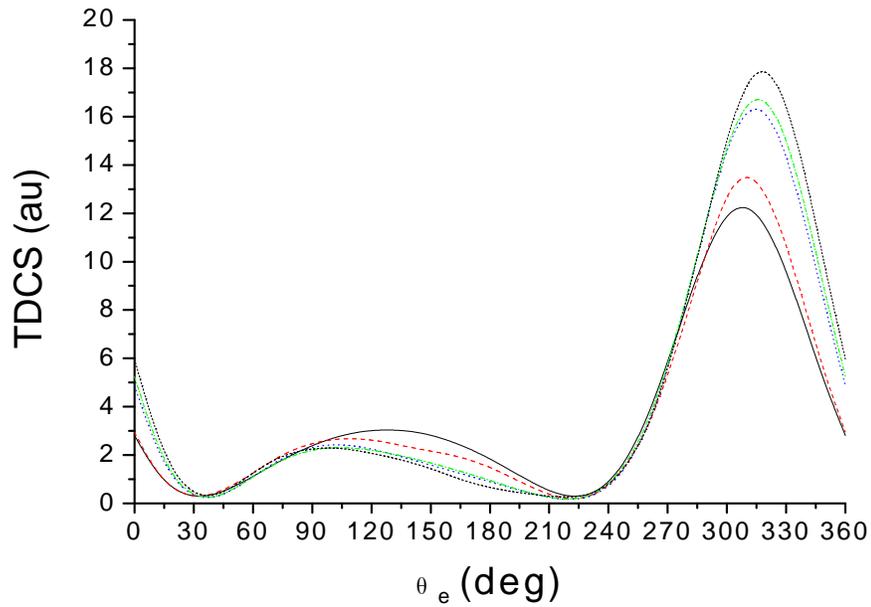


Figure 17 : Sections Efficaces Triplement Différentielles pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact de positron de 250 eV pour $\theta_s = 3^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de positron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculé en utilisant la relation de fermeture par des pointillés, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états (Callaway (1993))[6] par des petits tirets, et ceux du modèle BBK par une ligne en tirets et points.

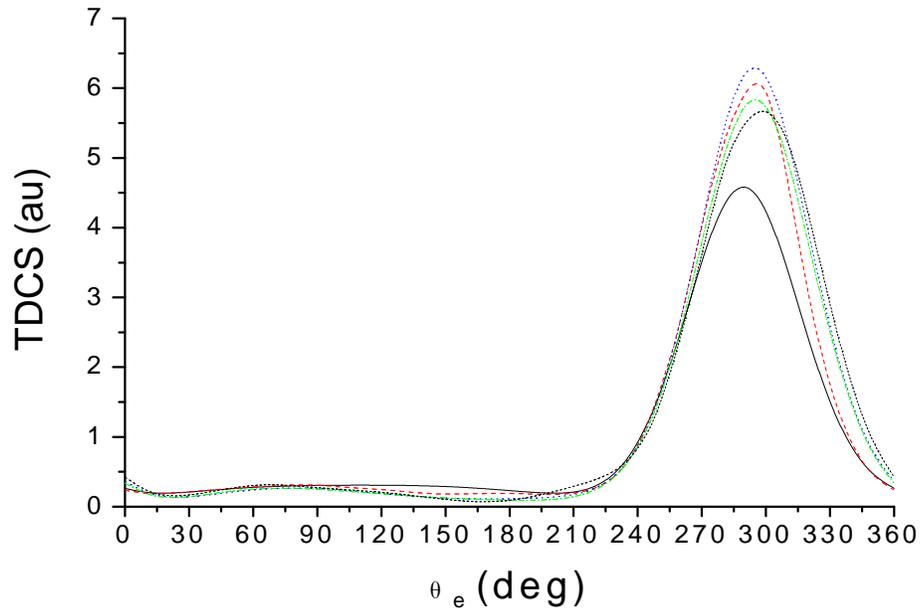


Figure 18 : Sections Efficaces Différentielles Triples (SETD) pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact de positron de 250 eV pour $\theta_s = 8^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de positron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture par des pointillés, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états (Callaway (1993)) [6] par des petits tirets, et ceux du modèle BBK par une ligne en tirets et points.

Généralement, l'application de la seconde approximation de Born par impact de positrons donne un pic binaire plus large et un pic de recul réduit à la différence des résultats de la première approximation de Born. C'est exactement le résultat inverse par impact d'électrons.

III-3-3. Sections efficaces triplement différentielles pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron à 250 eV pour $\theta_s = 15^\circ$ et $\theta_s = 25^\circ$

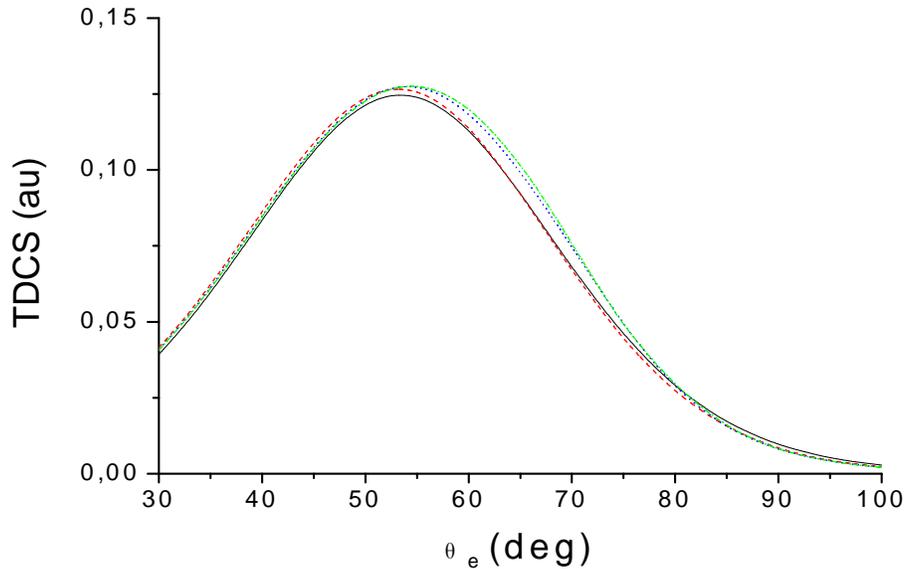


Figure 19 Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 15^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 5$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution de l'état fondamental ($n = 1$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1$ et $n = 2$ par une ligne pointillée et ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant les contributions $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$ par une ligne en tirets et points.

La figure 19 montre nos résultats de la seconde approximation de Born avec les contributions des états intermédiaires $n = 1$, $n = 2$ et $n = 3$ pour $\theta_s = 15^\circ$ pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène pour une énergie incidente de 250 eV et une énergie des électrons éjectés de 50 eV. Une fois de plus nous constatons que la contribution de $n = 1$ est très faible mais, dans ce cas, les contributions des autres états ($n = 2$ et $n = 3$) sont aussi faibles contrairement aux résultats précédents.

Les graphes 20 à 23 montrent les résultats de la seconde approximation de Born et le modèle BBK pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène pour une énergie incidente de 250 eV et une énergie des électrons éjectés de 50 eV et pour plusieurs valeurs de l'angle de diffusion. Les expériences relatives de (Weigold et al.(1979))[19] ont été normalisées avec le modèle BBK pour $\theta_s = 25^\circ$ et $\theta_s = 60^\circ$. Ces expériences sont intéressantes car (Pathak et Srivastava (1981))[20] ont conclu que la seconde approximation de Born n'était pas en mesure d'apporter une amélioration générale des résultats de SETD par rapport à ceux générés par les résultats de la première

approximation de Born. Ces auteurs utilisent la relation de fermeture avec une énergie d'excitation moyenne élevée $\bar{w} = 1.0u.a$. Ce fut le début d'une polémique avec (Byron et al.(1982))[21] qui a affirmé que l'application de la relation de fermeture n'est justifiée que si l'énergie de l'électron éjecté est faible (et que l'angle de diffusion est aussi petit).

La figure 20 montre que la seconde approximation de Born calculée en n'incluant que les contributions des états discrets ($n=1-6$) est insuffisante pour décrire les expériences. Réalisées pour un angle de diffusion de 15 degrés. La seconde approximation de Born calculée avec la relation de fermeture ($\bar{w} = 0.5u.a$) donne elle aussi un mauvais accord avec l'expérience comme l'avait prédit (Byron et al. (1982) [21]. Le déplacement du pic binaire se fait dans la mauvaise direction alors que le modèle BBK reproduit très bien ce déplacement.

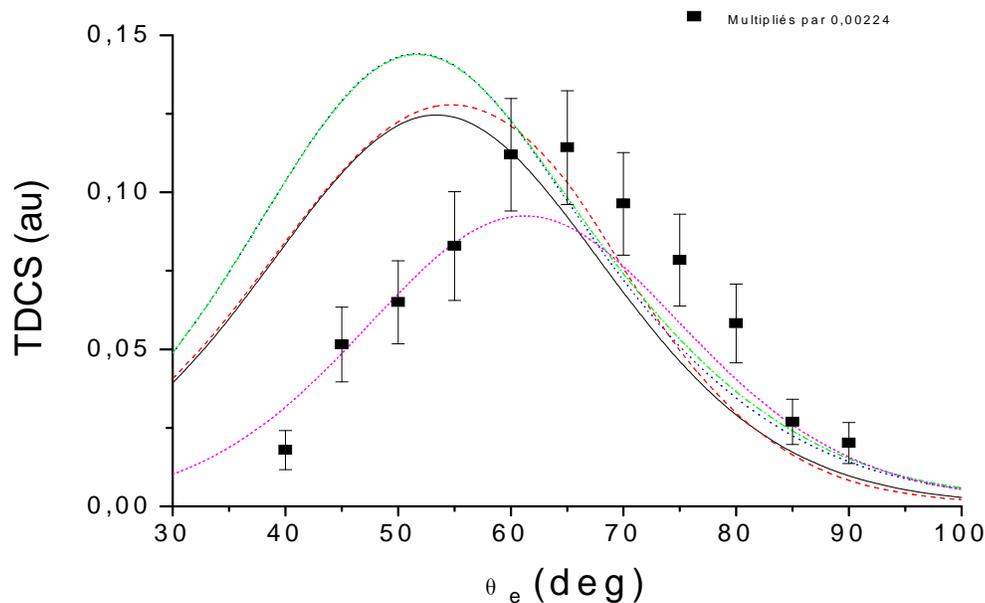


Figure 20 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 15^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de électrons incidents. L'énergie des électrons éjectés est de $E_e = 50$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets(rouge), ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13)) par des pointillés(bleu), ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-14)) par tirets et points(vert), ceux du modèle BBK par de petits pointillés(rose) et les résultats des expériences (multipliés par 0.00224) par des carrés.

Dans la figure 21 (toujours pour un angle de diffusion de 15 degrés) nous voyons que la seconde approximation de Born calculée en incluant les états discrets et pseudo-

états n'apporte aucune amélioration. Nous remarquons aussi que les effets d'échange sont faibles (modèle BBK avec échange) et peuvent être négligés.

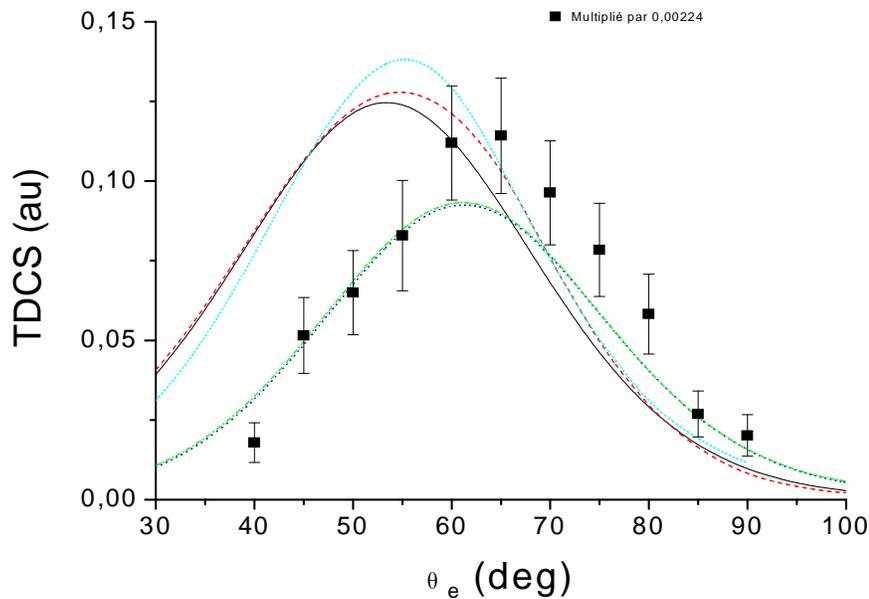


Figure 21 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 15^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 50$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets(rouge), ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états(Callaway (1993))[6] par des petits tirets(bleu foncé), ceux du modèle BBK par des pointillée(bleu clair)et ceux du modèle BBK avec échange en tirets et points(vert). Les résultats des expériences (multipliés par 0.00224) sont représentés par des carrés.

La figure 22 (pour un angle de diffusion de 25 degrés) confirme que la relation de fermeture ne peut pas donner une bonne interprétation des résultats expérimentaux. La seconde approximation de Born calculée en n'incluant que les contributions des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) donne une grandeur qui est inférieure à celle donnée par la première approximation de Born (contrairement à la relation de fermeture).

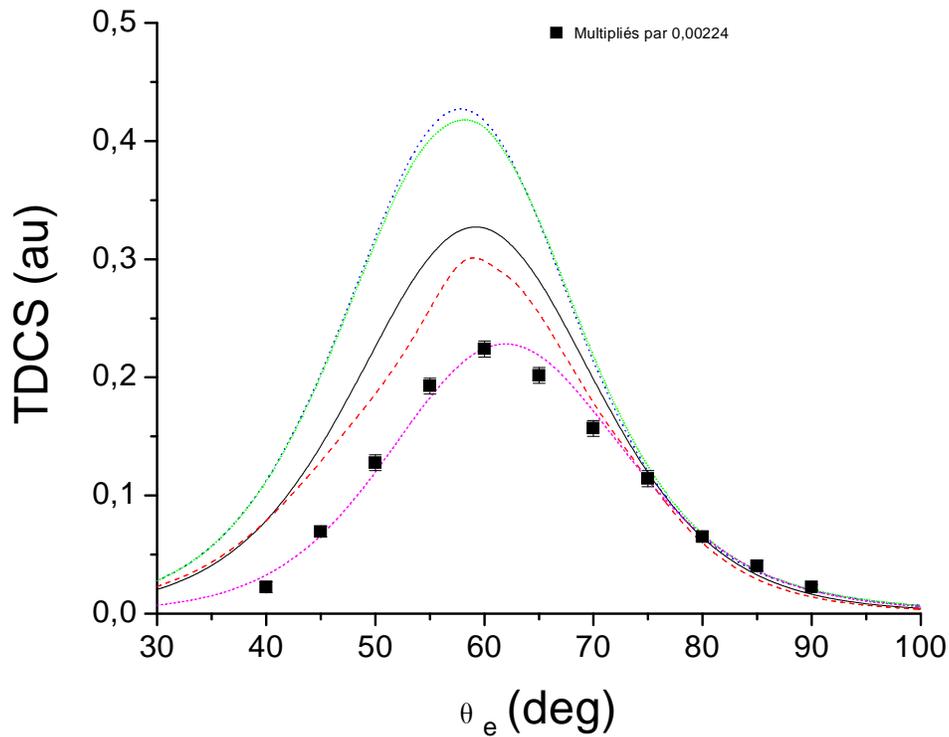


Figure 22 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 25^\circ$ en fonction de l'angle d'électrons éjectés θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 50$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13)) par des pointillée, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-14)) en tirets et points, ceux du modèle BBK par des petits pointillée et les résultats des expériences (multipliés par 0.00224) par des carrés.

Dans la figure 23 (toujours pour un angle de diffusion de 25 degrés) nous constatons que la seconde approximation de Born calculée en incluant les états discrets et pseudo-états surestime les expériences.

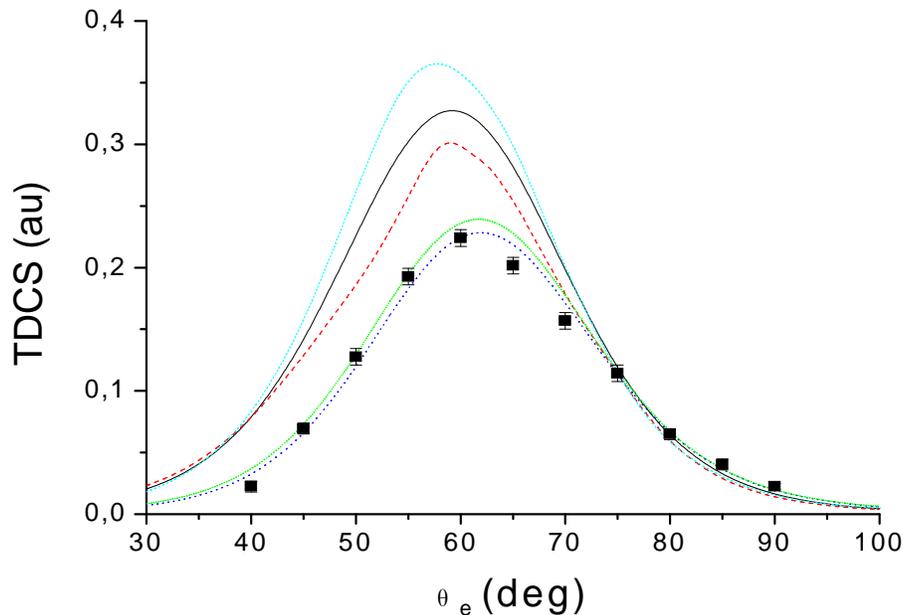


Figure 23 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hydrogène atomique par impact d'électron de 250 eV pour $\theta_s = 25^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 50$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant seulement la contribution des états discrets ($n = 1$ à $n = 6$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en incluant tous les états propres et pseudo-états (Callaway (1993))[6] par de petits tirets, celles du modèle BBK par des pointillée et ceux du modèle BBK avec échange en tirets et points. Les résultats des expériences (multipliés par 0.00224) sont représentés par des carrés.

Enfin, le modèle BBK ou le modèle BBK avec échange donne le meilleur accord avec les expériences (l'effet d'échanges est petit). Pathak et Srivastava (1981) [20] ainsi que (Byron et al. (1982))[21] ont eu raison : la seconde approximation de Born ne fonctionne pas lorsque *l'énergie des électrons éjectés n'est pas faible*. Si le modèle BBK donne un bon accord, cela signifie que nous devons prendre en compte les ordres supérieurs de l'interaction entre l'électron diffusé et l'électron éjecté.

III-4. SETD et SE4D pour l'ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électrons ou de positrons

Nous présentons dans ce qui va suivre les résultats de l'étude de la deuxième approximation de Born pour l'ionisation simple de l'atome de l'hélium par impact d'électrons et de positrons où nous avons pu élucider une veille polémique sur des résultats donnés par deux groupes différents de théoriciens. Aussi les résultats de

l'application de la seconde approximation de Born pour la double ionisation de l'hélium car de nouvelles expériences récentes (Lahmam-Bennani et al. (2010))[22] viennent conforter nos résultats théoriques (Dal Capello et al. (2011))[18].

III-4.1 SETD pour la simple ionisation de l'hélium par impact d'électrons

Nous allons maintenant étudier l'ionisation de l'hélium par des électrons en comparant les résultats de notre deuxième approximation de Born avec les données relatives de (Ehrhardt et al. (1982))[23] et entre le premier calcul théorique de (Pathak et Srivastava (1981)) [20] en utilisant la relation de fermeture ($\bar{w} = 1.3u. a$) et en deuxième le calcul théorique de (Byron et al. (1982))[21] en utilisant la relation de fermeture mais avec ($\bar{w} = 0.9u. a$). Ces deux groupes utilisent la même expression théorique (II-25).

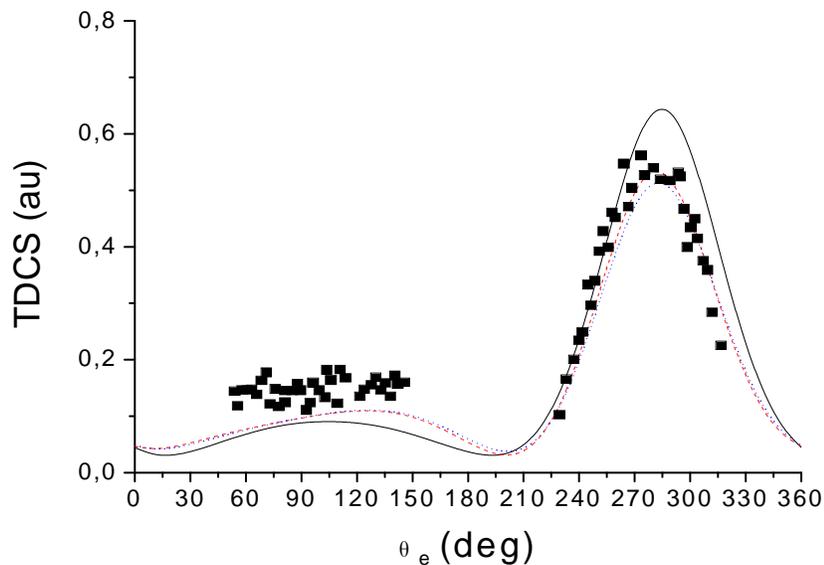


Figure 24 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hélium par impact d'électron de 500 eV pour $\theta_s = 10.5^\circ$ en fonction de l'angle d'électron éjecté θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 50$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13) avec $\bar{w} = 0.9u. a$) par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13) avec $\bar{w} = 1.3u. a$) par des pointillés et ceux du modèle BBK en tirets et points. Les résultats des expériences (Ehrhardt et al. (1982))[21] sont représentés par des carrés et sont normalisés aux résultats donnés par la seconde approximation de Born ($\bar{w} = 0.9u. a$) à $\theta_e = 280^\circ$.

La figure 24 montre les résultats de la deuxième approximation de Born avec les deux valeurs du paramètre \bar{w} . Nous avons à chaque fois remarquée de petites différences

entre les deux calculs et avons trouvé des résultats proches de ceux de (Byron et al. (1982)) [21]: la Section Efficace Triplement Différentielle calculée avec la première et la deuxième approximation de Born ne diffèrent que de 17% au pic binaire, le résultat donné par la seconde approximation de Born étant plus petit que le résultat donné par la première approximation de Born (comme dans le cas de l'hydrogène atomique). Nous constatons également que le rapport du pic binaire sur le pic de recul est réduit pour le premier terme de Born de la valeur de 8.43 pour le second terme de Born a la valeur de 5.63. Ce dernier résultat est en meilleur accord avec l'expérience. Ainsi, comme cela a été écrit par (Byron et al. (1982))[21], les résultats de Pathak et Srivastava (1981) [20], dans ce cas sont incorrectes. Nous remarquons que la valeur du paramètre \bar{w} choisi par ces auteurs $\bar{w} = 1.3u.a$ nécessite l'utilisation de l'expression (A-12) (Dal Cappello et al. (2011))[18] qui est souvent plus difficile à calculer numériquement que celle donnée par (A-13) (Dal cappello et al. (2011))[18]. Les résultats du modèle de BBK sont aussi tracer dans la figure 24. Le raport de pic binaire au pic de recul est de 4.21 donnée par le modèle BBK qui s'approche des résultats experimentaux. Une fois de plus nous pouvons concluer les contributions des états de continuum sont nécessaires parceque ces contributions sont pris dans le dans le modèle BBK.

III-4-2. SETD pour la double ionisation de l'hélium par impact d'électrons

La figure 25 montre que tous les termes de l'expression (A-3) dans l'annexe parrut dans la publication de (Dal Cappello et al. (2011))[18] contribuent à la seconde approximation de Born: si nous négligeons , par exemple (comme Fang et Bartschat (2001)[24]), le terme le plus difficile (à savoir l'intégrale numérique triple, voire l'expression (A-4) (Dal cappello et al.(2011))[18], nous remarquons qu'il n'ya pratiquement pas de changement pour le lobe de recul. Nous constatons que le maximum du lobe recul est situé autour de l'angle de $\theta_e = 105^\circ$ (première approximation de Born), et autour de l'angle $\theta_e = 110^\circ$ (deuxième approximation de Born avec l'integrale numérique triple), tandis que la seconde approximation de Born et le modèle BBK donnent le maximum près de $\theta_e = 130^\circ$. En fait, le plus grand déplacement du pic de recul est généralement dû à l'intégrale triple numérique donnée dans l'expression (A-4) de l'annexe (Dal Cappello et al. (2011))[18] et ne peut jamais être supprimé.

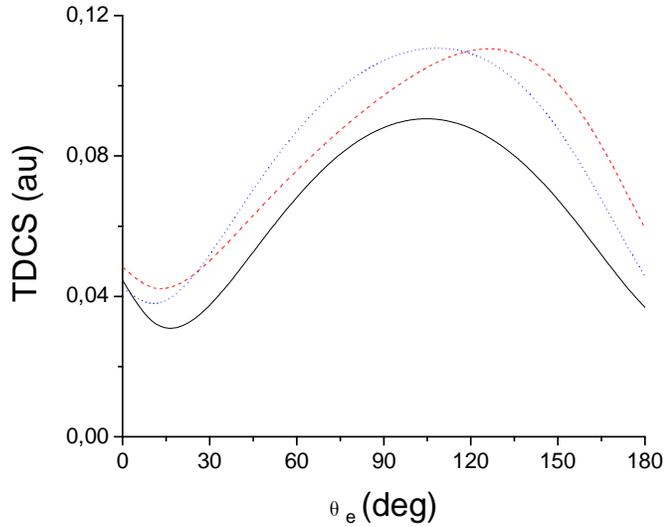


Figure 25 : Sections Efficaces Différentielles Triples pour l'ionisation de l'hélium par impact d'électrons de 500 eV pour $\theta_s = 10.5^\circ$ en fonction de l'angle d'électrons éjectés θ_e par rapport à la direction de l'électron incident. L'énergie de l'électron éjecté est de $E_e = 50$ eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-13)) avec $\bar{w} = 1.3u.a$ par des tirets, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture sans la contribution de l'intégrale triple numérique comme (Fang et Bartschat (2001)) [24] par des pointillés (équation (II-13) avec $\bar{w} = 1.3u.a$).

III-4-3. SE4D pour la double ionisation de l'hélium par impact d'électrons et de positrons

Nous avons finalement étudié la double ionisation de l'hélium par des électrons (ou des positrons) en comparant les résultats de notre deuxième approximation de Born avec les données relatives de (Lahmam-Bennani et al. (2002))[25] et (Lahmam-Bennani et al. (2010)) [22]. Les importants déplacements des pics binaires et de recul observés expérimentalement ont été mis en doute par (Götz et al. (2003)) [26].

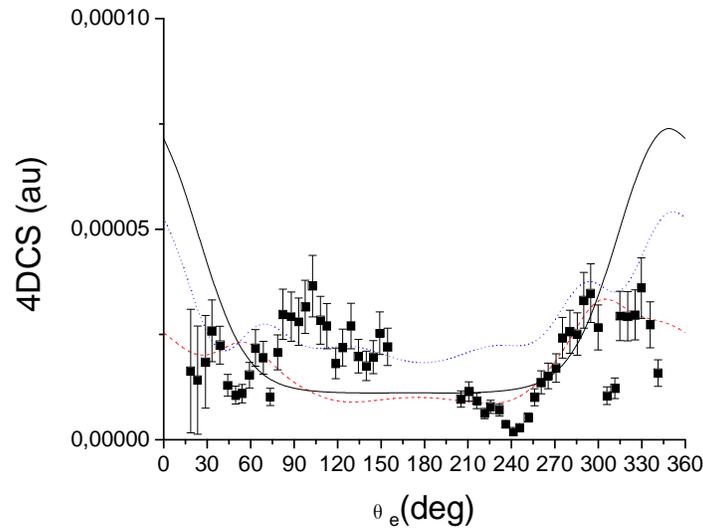


Figure 26 : Section efficace quadruplement différentielle (SE4D) pour la double ionisation de l'hélium ($e, 3-1e$) par impact d'électrons de 640 eV pour $\theta_s = 10.5^\circ$ et $\varphi_s = 180^\circ$ en fonction de l'angle θ_e (rapide) éjecté. θ_e angle par rapport à la direction de l'électron incident. L'électron éjecté rapide à une énergie de 51 eV, alors que l'électron éjecté lent a une énergie de 10 eV. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-31)) avec $\bar{w} = 79$ eV et la fonction d'onde initiale BK14 par une ligne pointillée et ceux de la seconde approximation de Born calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-31)) avec $\bar{w} = 79$ eV et le BK7 fonction d'onde initiale en tirets. Les carrés pleins sont les résultats expérimentaux de (Lahmam-Bennani et al. (2002))[25].

La figure 26 montre que la seconde approximation de Born est maintenant en mesure de reproduire le déplacement du pic binaire et partiellement le déplacement du pic de recul. Nous voyons aussi que les résultats de la seconde approximation de Born dépendent du choix de la fonction d'onde utilisée: la fonction d'onde BK14 reproduit un minimum autour de 310 degrés comme les résultats expérimentaux, contrairement à la fonction d'onde BK7 qui donne un maximum. Mais aucun modèle n'a été capable de reproduire encore toutes les données. Ainsi le modèle le plus sophistiqué DS6C de (Götz et al. (2006))[27] ne parvient pas à décrire les expériences. Le relatif bon accord trouvé entre notre modèle et l'expérience signifie que le mécanisme TS2 (qui est implicitement inclus dans la seconde approximation de Born) joue un rôle considérable ici.

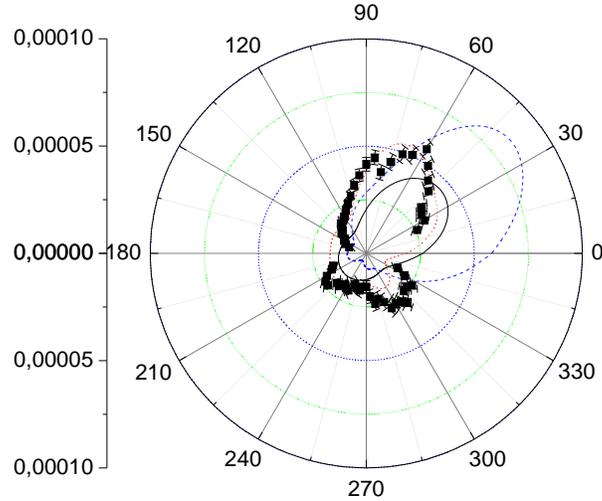


Figure 27: Section efficace quadruplement différentielle (SE4D) pour la double ionisation (e , $3-1e$) de l'hélium par impact d'électrons et de positrons de 621 eV. Les énergies des électrons éjectés sont de 37 eV et de 5 eV. L'angle de diffusion $\theta_s = 6^\circ$ ($\varphi_s = 180^\circ$). La SE4D est tracée en coordonnées polaires en fonction de la direction \vec{k}_a pour l'électron rapide éjecté. L'électron incident est en mouvement le long de l'axe des x . L'axe des x et l'axe des y représente respectivement $(SE4D) \cos\theta_a$ et $(SE4D) \sin\theta_a$. Les résultats de la première approximation de Born sont représentés par une courbe en trait continu, ceux de la seconde approximation de Born pour l'impact d'électron et calculée à l'aide de la relation de fermeture (équation (II-31)) avec $\bar{w} = 79$ eV et la fonction d'onde initiale BK14 par une des pointillée et ceux de la seconde approximation de Born par impact de positrons et calculée en utilisant la relation de fermeture (équation (II-31)) avec $\bar{w} = 79$ eV et la fonction d'onde initiale BK 14 par des tirets. Les carrés pleins sont les résultats expérimentaux de (Lahmam-Bennani et al. (2010))[22].

La figure 27 montre les résultats de notre modèle incluant la deuxième approximation de Born (et en utilisant la relation de fermeture) avec les derniers résultats de (Lahmam-Bennani et al. (2010))[22]. On constate un très bon accord, car notre modèle est capable de prédire le déplacement du pic binaire. Nous étudions également la double ionisation de l'hélium par des positrons. Dans ce cas, l'amplitude du pic binaire augmente tandis que l'amplitude du pic de recul diminue. C'est exactement ce que nous observons lorsque nous étudions la simple ionisation de l'hydrogène par des électrons et des positrons.

III-5. Conclusion

La seconde approximation de Born a d'abord été étudiée pour l'ionisation de l'hydrogène atomique en utilisant un grand nombre d'états discrets (100) comme états intermédiaires. Les résultats montrent que les contributions des états discrets sont toujours insuffisantes et que les contributions des états du continuum doivent être ajoutées. Nous confirmons les premiers résultats de Byron et de Joachain et Piraux [3]: la contribution de $n = 2$, comme état intermédiaire est la plus importante. Néanmoins, il est nécessaire d'ajouter les contributions correspondant à $n = 3$, $n = 4$, $n = 5$ et $n = 6$ et à prendre en compte celles des états du continuum. La relation de fermeture, qui est souvent utilisée (Marchalant et al. (1999,2000))[28,29], (Kheifets (2004)) [30], (Grin et al. (2000))[31], (Choubisa et al. (2003))[32], fonctionne très bien pour de faibles énergies des électrons éjectés. Pour des énergies d'électrons éjectés plus élevées cet accord n'existe plus. La seconde approximation de Born en utilisant des états discrets en conjonction avec des pseudo-états donne un meilleur accord, mais n'est pas toujours suffisante pour décrire toutes les expériences. Ce résultat prouve une nouvelle fois que les contributions des états du continuum doivent être ajoutées et qu'il est certainement nécessaire de prendre en compte beaucoup plus de pseudo-états. La seconde approximation de Born donne d'aussi bons résultats que le modèle BBK pour l'ionisation des cibles par les positrons. Bien que le modèle BBK donne ici un bon accord avec les expériences, il a été remarqué par (Dey et al. (2008))[33] que les expériences récentes de l'ionisation de l'hélium par des électrons Catoire et al. (2006)[34] et Stevenson et al. (2007)[35] ne sont pas bien décrites par ce modèle qui surestime les sections efficaces différentielles dans la région de recul. En outre (Dal Cappello et al. (2008))[36] montrent que l'ionisation-excitation de l'hélium ne peut pas être décrite par le modèle BBK, contrairement à un modèle utilisant la seconde approximation de Born (Watanabe et al. (2007))[37]. La seconde approximation de Born fonctionne très bien pour la double ionisation de l'hélium en utilisant la relation de fermeture. Le grand déplacement du pic binaire constaté expérimentalement par (Lahmam-Bennani et al. (2010))[22] est bien reproduit démontrant ainsi que le mécanisme TS2 est très important dans ce cas.

III-6. Références

- [1] Ehrhardt H, Knoth G, Schlemmer P and Jung K, *Phys. Lett. 110 A* **92**, (1985).
- [2] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G, Schlemmer P, *Z. Phys. D* **1**, 3 (1986).
- [3] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **18**, 3203 (1985).
- [4] Lahmam-Bennani A, Duguet A, Dal Cappello C, Nebdi H, Piraux B, *Phys. Rev. A* **67**, 010701 (2003).
- [5] Callaway J, *Phys. Rep.* **45**, 89 (1978).
- [6] Callaway J, *Phys. Rev. A* **48**, 4292 (1993).
- [7] Rouet F, *Thèse de doctorat*, Université de Brest (1996).
- [8] Brauner M, Briggs J S and Klar H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **22**, 2265 (1989).
- [9] Jones S, Madison D H, *Phys. Rev. A* **65**, 052727 (2002).
- [10] Jones S, Madison D H, *Phys. Rev. A* **62**, 042701 (2000).
- [11] Crothers D S and McCann J F J. *Phys. B: At. Mol. Phys* **16**, 32229 (1983).
- [12] Jones S and Madison D H *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2886 (1998).
- [13] Bray I, Knovalov D A, McCarthy I E and Stelbovics A T *Phys. Rev. A* **50**, R2818 (1994).
- [14] Kadyrov A S, Bray I and Stelbovics A T *Phys. Rev. Lett.* **98**, 263202 (2007).
- [15] Bandyopadhyay A, Roy K, Mandal P and Sil N C *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **27**, 4337(1994).
- [16] Fiol J and Olson R E *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **35**, 1173 (2002).
- [17] Sharma S and Srivastava M K *Phys. Rev. A* **38**, 1083 (1988).
- [18] Dal Cappello C, Haddadou A, Menas F and Roy A C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 015204 (2011).
- [19] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **12**, 291 (1979).
- [20] Pathak A and Srivastava M K, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **14**, L773 (1981).
- [21] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **15**, L293 (1982).
- [22] Lahmam-Bennani A, Staicu-Casagrande E M, Naja A, Dal Cappello C and Bolognesi P, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 105201 (2010).
- [23] Ehrhardt H, Fischer M and Jung K, *Z. Phys. A* **304**, 119 (1982).

- [24] Fang Y, Bartschat K, *J. Phys. B* **34**, L19 (2001).
- [25] Lahmam-Bennani A, Duguet A and Roussin S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **35**, L59 (2002).
- [26] Götz J R, Walter M and J. S. Briggs, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36**, L77 (2003).
- [27] Götz J R, Walter M and Briggs J S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **39**, 4365 (2006).
- [28] Marchalant P J, Rasch J, Whelan C T, Madison D H, Walters H R J, *J. Phys B* **32**, L705 (1999).
- [29] Marchalant P J, Rouvellou B, Rasch J, Rioual S, Whelan C T, Pochat A, Madison M H and Walters H R J, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **33**, L749 (2000).
- [30] Kheifets A, *Phys. Rev. A* **69**, 032712 (2004).
- [31] Grin M, Dal Cappello C, El Mkhater R and Rasch J, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **33**, 131 (2000).
- [32] Choubisa R, Purohit G and Sud K K, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **36**, 1731(2003).
- [33] Dey R, Roy A C and Dal Cappello C, *NIMB* **266**, 242 (2008).
- [34] Catoire F, Staicu-Casagrande E M, Nekkab M, Dal Cappello C, Bartschat K and Lahmam-Bennani A, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **39**, 2827 (2006).
- [35] Stevenson M A, Lohmann B, Bray I, Fursa D V and Stelbovics A T, *Phys. Rev. A* **75**, 034701 (2007).
- [36] Dal Cappello C, Roy A C, Ren X G and Dey R, *NIMB* **266**, 570 (2008).
- [37] Watanabe N, Takahashi M, Udagawa Y, Kouzakov K A and Popov Yu V, *Phys. Rev. A* **75**, 052727 (2007).

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Ce travail a eu pour but d'étudier en détail la seconde approximation de Born pour l'étude de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons. Nous avons ainsi pu tenir compte de 100 états intermédiaires (de $n=1$ à $n=10$) pour le calcul de l'amplitude de diffusion. Pour les situations expérimentales étudiées nous avons pu démontrer que la convergence était atteinte généralement à partir de $n=6$ (et non pas à partir de $n=2$ comme on pouvait le penser). Nous avons voulu ensuite calculer *directement* la contribution des états du continuum mais nous avons rencontré de grandes difficultés numériques pour le faire (intégrale numérique d'ordre 6) et finalement avons exploré deux voies possibles pour contourner ce problème. La première, déjà étudiée préalablement par (Joachain et al. (1983)), est l'utilisation de la relation de fermeture. Nous avons alors inclus bien plus d'états intermédiaires et avons trouvé une certaine dépendance des résultats vis-à-vis du paramètre d'énergie d'excitation moyenne. Puis nous avons considéré la deuxième voie qui consiste à décrire les états du continuum par des pseudo-états. Nous avons testé deux bases comportant une trentaine de pseudo-états. Finalement ces deux voies donnent des résultats assez proches. En particulier il a été démontré que pour le processus d'ionisation étudié ici il était indispensable de prendre en compte la contribution des états du continuum. D'autre part, il n'est pas possible d'appliquer la méthodologie de la seconde approximation de Born lorsque l'électron éjecté possède une énergie non négligeable devant celle de l'électron diffusé.

Même si l'accord avec l'expérience est excellent il resterait donc à calculer *directement* cette contribution des états du continuum et à bien étudier l'influence du choix d'une base de pseudo-états pour décrire ces états du continuum.

Nous avons ensuite appliqué la seconde approximation de Born pour l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact de positrons et comparé nos résultats donnés par le modèle BBK qui prend bien en compte à tout ordre, mais d'une manière approchée, l'interaction électron diffusé-électron éjecté.

Il a également été possible d'étendre notre traitement à l'ionisation de l'atome d'hélium par impact d'électrons et nous avons démontré dans ce cas la validité des résultats de Joachain et al. et infirmé ceux de Pathak et Srivastava confirmant une fois de plus que le calcul de la seconde approximation de Born est délicat et demande beaucoup d'attention.

Enfin il nous a été possible de transposer notre modèle à l'étude de la double ionisation de l'hélium par impact d'électrons (ou de positrons). Nous avons ainsi pu confirmer les derniers résultats de l'équipe du Professeur Lahmam-Bennani en démontrant que le mécanisme en deux étapes (TS2) devait être pris en compte. Il resterait, dans ce dernier cas, à évaluer la seconde approximation de Born avec les contributions de pseudo-états et ainsi vérifier si l'on obtient aussi un bon accord que celui obtenu en utilisant la relation de fermeture et dépendant d'un paramètre.

Ce travail réalisé pour l'étude de la simple et de la double ionisation de l'atome d'hydrogène et de l'atome d'hélium pourra être appliqué à des atomes et molécules plus complexes. Ainsi des bases de l'ADN pourront être étudiées car les programmes GAUSSIAN donnent des informations sur l'état initial de la cible et également sur les états excités et ceux du continuum (pseudo-états). Il sera évidemment nécessaire de ramener le problème de N électrons à un problème à un ou deux électrons dit actifs.

ANNEXE

ANNEXE A

Methode générale

d'évaluation d'une amplitude de diffusion du second ordre

I-Deuxième approximation de Born :

I-1.Méthode de l'intégrale de Piraux

Nous avons vu au chapitre II que les calculs du second terme de l'approximation de Born nécessitent le calcul de l'intégrale en $d\vec{q}$. Ce dernier est délicat au point de vue informatique car retrancher un grand nombre à un autre grand nombre nécessite beaucoup de précautions. Nous donnons les différentes étapes de calcul menant au résultat final. Dans un premier temps, nous avons adopté le calcul analytique de l'intégrale développée dans l'annexe de la thèse de (Piraux (1983))[1] donnée par la relation suivante :

$$I = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{k} \frac{1}{k^2 - p^2 - i\varepsilon} W(k, \theta_k, \varphi_k) \quad (\text{A-1})$$

lorsque $\varepsilon \rightarrow 0^+$, nous pouvons développer nos calculs en utilisant la relation suivante ,

$$\frac{1}{k^2 - p^2 - i\varepsilon} = P \left\{ \frac{1}{k^2 - p^2} \right\} + i\pi \delta(k^2 - p^2) \quad (\text{A-2})$$

où P représente la valeur principale. Par la suite nous pouvons réécrire le terme I comme suit :

$$I = P \underbrace{\int \frac{d\vec{k}}{k^2 - p^2} W(k, \theta_k, \varphi_k)}_J + \frac{i\pi}{2} P \int d\hat{k} W(P, \theta_k, \varphi_k) \quad (\text{A-3})$$

Le deuxième terme ne présente aucune difficulté contrairement au premier terme J.

Ce terme J représente la partie principale d'une intégrale et s'écrit avec nos notations habituelles (ici $q=k$)

$$G(q, \cos \theta_q) = \int_0^{2\pi} d\varphi_q W(q, \theta_q, \varphi_q)$$

J s'écrit alors Piraux thèse (Piraux 1983)

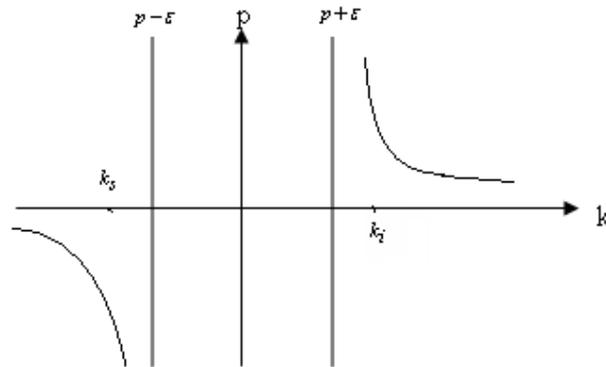
$$J = P \int \frac{d\bar{q}}{q^2 - p^2} W(q, \theta_q, \varphi_q) = P \int \frac{q^2 dq}{q^2 - p^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) G(q, \cos \theta_q) \quad (\text{A-4})$$

I-1-1. Méthode de découpage pour le modèle numérique

La difficulté numérique réside ici dans le bon découpage de l'intervalle d'intégration afin d'obtenir une bonne convergence. On doit éviter le pôle en p tout en s'approchant de sa valeur.

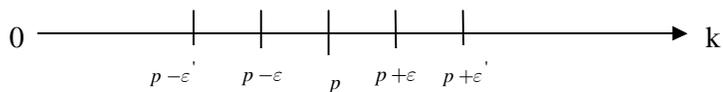
$$I = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\bar{k} \frac{1}{k^2 - p^2 - i\varepsilon} W(k, \theta_k, \varphi_k)$$

Le graphe suivant représente la fonction ; $\frac{1}{k^2 - p^2 - i\varepsilon}$



On peut se baser sur la méthode des intervalles finis de (Thompson (1997)) [2]

Nous avons alors effectué le découpage du domaine d'intégration de la manière suivante :



$$J = \left\{ \int_0^{p-\varepsilon} + \int_{p+\varepsilon}^{\infty} \right\} \frac{dq q^2}{q^2 - p^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) G(q, \cos \theta_q) + \Delta J$$

Avec :

$$\Delta J = p \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{dq q^2}{q^2 - p^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) G(q, \cos \theta_q)$$

En se basant sur le découpage dans la région de l'intervalle entre $|p-\varepsilon, p+\varepsilon|$, et après un calcul long et rigoureux le développement de ce calcul nous amène alors à écrire ΔJ tel que

$$\Delta J = \frac{\varepsilon}{2p} J_0 + 2\varepsilon J_1$$

Revenons maintenant à l'intégrale J qui est :

$$J = \left\{ \int_0^{p-\varepsilon} + \int_{p+\varepsilon}^{\infty} \right\} \frac{dq q^2}{q^2 - p^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) G(q, \cos \theta_q) + \Delta J$$

D'où :

$$J = \left\{ \int_0^{p-\varepsilon} + \int_{p+\varepsilon}^{\infty} \right\} \frac{dq q^2}{q^2 - p^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) G(q, \cos \theta_q) + \left(\frac{\varepsilon}{2p} J_0 + 2\varepsilon J_1 \right)$$

Finalement

$$I = \left\{ \int_0^{p-\varepsilon} + \int_{p+\varepsilon}^{\infty} \right\} \frac{dq q^2}{q^2 - p^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) G(q, \cos \theta_q) + \left\{ \frac{i\pi}{2} + \frac{\varepsilon}{2p} \right\} J_0 + \varepsilon J_1 \quad (\text{A-5})$$

$$\text{Avec } J_0 = \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) H(p, \cos \theta_q)$$

$$J_1 = \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta_q) \frac{\partial H}{\partial q}(q, \cos \theta_q)_{q=p}$$

Et

$$H(q, \cos \theta_q) = q G(q, \cos \theta_q)$$

$$G(q, \cos\theta_q) = \int_0^{2\pi} d\varphi_q W(q, \cos\theta_q)$$

On peut citer une autre procédure de calcul de I celle de (Marchalant et al. (1998)) [3] qui ont adopté une procédure de soustraction pour évaluer (A-3) et d'introduire un facteur exponentiel pour faire converger plus rapidement les intégrales lorsque $q \rightarrow \infty$:

(A-6)

$$J = \left\{ P \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\alpha(q-p)^2) q^2 dq}{q^2 - p^2} + \frac{i\pi p}{2} \right\} \times \int W(p, \theta_q, \varphi_q) d\bar{q} \\ + \int \frac{(W(p, \theta_q, \varphi_q) - \exp(-\alpha(q-p)^2) W(p, \theta_q, \varphi_q))}{q^2 - p^2} d\bar{q}$$

Le paramètre α dans l'expression (A-6) est un choix libre et les résultats doivent être indépendants de ce paramètre (Marchalant et al. (1998))[3].

II-Procédure de calculs théoriques appliqués pour le second terme de Born

II-1. Methode de l'intégrale de Lewis

Pour vérifier l'exactitude de nos procédures numériques, nous avons calculé l'intégrale la plus singulière contenue dans l'expression ci-dessus (Byron et al. (1985)) [4]:

Avec $\varepsilon \rightarrow 0^+$.

$$I_0 = \pi^{-2} \int \frac{d\bar{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \quad (A-7)$$

Avec :

$$K_i = q - k_i, \quad K_f = q - k_s$$

$$p^2 = k_i^2 - 2\bar{w} = k_s^2 - 2(\bar{w} - w) \quad \text{où} \quad k_i^2 - k_s^2 = 2w$$

\bar{w} représente la différence d'énergie entre l'état initial et l'état intermédiaire, quand

$(\bar{w} - w)$ étant la différence entre l'état finale et l'état intermédiaire.

Cette intégrale peut être évaluée exactement en utilisant les résultats de (Lewis (1956)) [5]

Nous donnons les différents étapes de calculs en utilisant la méthode de Lewis, celui-ci obtient une intégrale selon la forme suivante :

$$I = \int_{(q^2 + \lambda^2) [(\bar{q} - \bar{q}_1)^2 + \mu_1^2] [(\bar{q} - \bar{q}_2)^2 + \mu_2^2]} d\bar{q} = \frac{\pi^2}{\sqrt{\beta^2 - \alpha Y}} \ln \left[\frac{\beta + \sqrt{\beta^2 - \alpha Y}}{\beta - \sqrt{\beta^2 - \alpha Y}} \right]$$

Si $\beta^2 - \alpha Y \neq 0$

Dans le cas où $\beta^2 = \alpha Y$, $I = \frac{2\pi^2}{\beta}$

La résolution de l'intégrale de piroux dans ce cas nous donne après des calculs à

trois cas (Dal cappello et al (2011)) [6] :

1-Cas où $k_s \langle p \langle k_i$

Si $\mu_1 = \mu_2 = 0$, $\beta = \lambda K^2$, $\alpha Y = K^2 [k_i^2 + \lambda^2] [k_s^2 + \lambda^2]$

$$I_0 = \frac{i\pi^2}{K\sqrt{\Delta}} \ln \left[\frac{(pK + \sqrt{\Delta})^2}{\left| \begin{matrix} k_i^2 - p^2 \\ p^2 - k_s^2 \end{matrix} \right|} \right] \quad (\text{A-8})$$

Avec $\Delta = K^2 p^2 + (p^2 - k_i^2)(p^2 - k_s^2)$.

2-Cas où $p \langle k_s$,

$$I_0 = \frac{i\pi^2}{K\sqrt{\Delta}} \ln \left[\frac{(pK + \sqrt{\Delta})^2}{\left| \begin{matrix} k_i^2 - p^2 \\ p^2 - k_s^2 \end{matrix} \right|} \right] + \frac{\pi^3}{K\sqrt{\Delta}} \quad (\text{A-9})$$

3-Cas où $p = k_s$

Pour ce cas, la partie imaginaire de I_0 tend vers l'infini et la partie réelle est donnée

par

$$R_e(I_0) = \frac{\pi^3}{2pK^2} \quad (\text{A-10})$$

4-Cas où $p = k_i$,

La partie imaginaire de I_0 tend vers l'infini et la partie réelle est donnée par

$$R_e(I_0) = \frac{\pi^3}{2pK^2} \quad (\text{A-11})$$

En générale nous avons utilisé dans notre travail l'expression (A-8). Où nous atteignant toujours pour nos calculs numériques une précision de 10^{-5} en utilisant 500000 points de quadrature pour l'intégration numérique triple.

III- References

- [1] Piraux B, *Thèse de Doctorat* , Université de Louvain (1983).
- [2] William J.Thompson, *Computers in Physics*. Vol. 12, N° 1, JAN/FEB (1998).
- [3] Marchalant P J, Whelan C T et walters H R J, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **31** 1141(1998).
- [4] Byron F W Jr, Joachain C J et Piraux B, *J. Phys. B: At. Mol. Phys* **18** 3203 (1985).
- [5] Lewis R R Jr *Phys. Rev.* 102 537 (1956).
- [6] Dal Cappello C, Haddadou A, Menas F and Roy A C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 015204 (2011).

