



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

THESE

présentée

A L'UNIVERSITE DE METZ

pour obtenir

le titre de Docteur ès Sciences Physiques

par

Hamid HAFID

Sujet : Etude de l'ionisation par impact électronique des systèmes à un électron actif (2s) : Utilisation de fonctions d'onde corrélées pour la description du double continuum.

Soutenue le 8 avril 1994 devant la commission d'examen

Professeur J. D'INCAN	Université Lyon I (rapporteur)
Professeur H. KOBEISSI	Université de Beyrouth
Professeur A. LAHMAM-BENNANI	Université de Paris XI (rapporteur)
Professeur J. L. BRETONNET	Université de Metz
Professeur C. DAL CAPPELLO	Université de Metz
Professeur C. TAVARD	Université de Metz
Docteur B. JOULAKIAN	Université de Metz (Directeur de thèse)



THESE

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE TECHNOPOLE - METZ -	
N° Inv	19940665
Cote	S/M2 94/22
Loc.	Majarin
Cat	OCLC

présentée

A L'UNIVERSITE DE METZ

pour obtenir

le titre de Docteur ès Sciences Physiques

par

Hamid HAFID

**Sujet : Etude de l'ionisation par impact électronique des systèmes à un
électron actif (2s) : Utilisation de fonctions d'onde corrélées pour
la description du double continuum.**

Soutenu le 8 avril 1994 devant la commission d'examen

Professeur J. D'INCAN	Université Lyon I (rapporteur)
Professeur H. KOBEISSI	Université de Beyrouth
Professeur A. LAHMAM-BENNANI	Université de Paris XI (rapporteur)
Professeur J. L. BRETONNET	Université de Metz
Professeur C. DAL CAPPELLO	Université de Metz
Professeur C. TAVARD	Université de Metz
Docteur B. JOULAKIAN	Université de Metz (Directeur de thèse)

Ce travail a été effectué au Laboratoire de physique moléculaire et des collisions de l'Université de Metz. Je tiens à remercier son Directeur, le Professeur C. Taward, pour l'accueil qu'il m'a réservé tout au long de mon séjour et pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de participer au jury de cette Thèse.

Je remercie J. D'Incan, Professeur à l'université de Lyon 1, d'avoir accepté d'être rapporteur et président du jury.

Mes remerciements vont également à A. Lahmam-Bennani, Professeur à l'université de Paris XI, qui s'est intéressé à mon travail et a bien voulu accepter d'être rapporteur.

Je remercie le Docteur B. Joulakian qui a dirigé ce travail, qu'il me soit permis de lui témoigner ma profonde reconnaissance pour les encouragements, la confiance, les orientations ainsi que les nombreuses remarques constructives sur la rédaction de ce mémoire.

Je remercie également J. L. Brettonet, Professeur à l'université de Metz et H. Kobeissi Professeur à l'université de Beyrouth, qui ont accepté de faire partie du jury de cette thèse. Je suis reconnaissant à C. Dal Cappello, Professeur à l'Université de Metz, pour ces conseils, ces suggestions et son aide à toute circonstance. Je le remercie aussi d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je suis reconnaissant à J. Hanssen, Professeur à l'Université de Metz qui m'a fait bénéficier de ces remarques et commentaires. Je le remercie vivement de l'intérêt qu'il a bien voulu porter à ce travail.

A mes amis du Laboratoire H. Kda, B. Najjari, M. Roeth et P. Lamy, j'exprime ma sincère et amicale gratitude pour le soutien cordial qu'ils m'ont apporté.

Je formule également mes remerciements à P. Demot pour l'assistance technique qu'il a apporté durant mon travail.

TABLE DES MATIERES

Introduction	3
Chapitre I: Section efficace d'ionisation par impact électronique	7
1- Notion de section efficace.....	7
2- Méthode d'approximation dans la description de l'ionisation.....	8
a- Préparation de l'état initial.....	9
b- Description de l'interaction.....	10
c- Description de l'état final.....	12
3- Calcul de la section efficace.....	14
4- Section efficace différentielle d'ionisation.....	14
5- Classification des réactions (e,2e) selon des considérations cinématiques.....	17
6- Etude de l'effet d'échange dans le cas de l'hydrogène et du lithium.....	18
7- Conclusion.....	21
Chapitre II: Séparation approchée des mouvements d'un système à trois corps et détermination de la fonction d'onde du double continuum	22
1- Mouvement des particules dans le système du centre de masses.....	23
2- La méthode de Pluvinage pour des systèmes à deux électrons actifs.....	25
3- Application de la méthode de Pluvinage au double continuum.....	26
4- Normalisation dans une boîte de la fonction d'onde du double continuum.....	31
5- Conclusion.....	32
Chapitre III: Application de la fonction d'onde corrélée du double continuum au problème de l'ionisation par impact électronique de l'hydrogène (1s et 2s)	33
1- Etude de l'ionisation de H(1s).....	33
a- Modèle théorique.....	34
b- Résultats et discussions.....	38
2- Etude de l'ionisation de H(2s).....	50
a- Modèle théorique.....	50
b- résultats et discussions.....	53

Chapitre IV: Ionisation du lithium par impact électronique.....	64
1- Etat initial de la cible.....	64
2- Calcul de la section efficace différentielle d'ionisation de Li.....	66
a- Résultats et discussions.....	70
Conclusion.....	79
Appendice A: Probabilité de transition.....	81
Appendice B: Relation entre les matrices S et T	84
Appendice C: Séparation du mouvement du centre de masses de l'ion et les	
électrons émergents.....	86
Appendice D: Norme de la fonction d'onde BBK	90
Appendice E: Détermination de L'intégrale $W(\vec{K}_1, \vec{K}_2, \vec{K}_3, \vec{P}_1, \vec{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$.....	95
Appendice F: Calcul des dérivées de D_0.....	103
Bibliographie.....	107

INTRODUCTION

L'ionisation des atomes et des molécules par impact électronique est l'un des processus de base de la physique. Il trouve son application dans différents domaines comme l'astrophysique et la physique des plasmas. Le développement d'un tel processus a débuté dans les années 20 par les expériences de Langmuir et Jones (1928)⁽⁶³⁾ et Rudberg (1930)⁽⁸⁰⁾ suivies par les travaux de Bethe⁽⁹⁾ puis Massey et Mohr⁽⁶⁷⁾ qui ont réussi à établir la base de la description de l'ionisation en utilisant l'approximation de Born. Les sections efficaces totale, différentielle simple et double ont été ensuite mesurées par Hughes et McMillen (1932)⁽⁵⁰⁾.

Une deuxième phase de ce développement se poursuit par les travaux de Peterkop^(73,74) et Rudge et Seaton^(81,82) qui ont donné dans les années 60 une formulation théorique du problème de l'ionisation en tenant compte de la présence de trois corps dans l'état final. La diffusion des électrons rapides par des cibles représente des effets similaires à la diffusion Compton par des rayons X, elle permet de déterminer la structure électronique de la cible à partir de la distribution angulaire des électrons diffusés. Une première théorie quantique de cette diffusion est due aux travaux de Tavard⁽⁸⁸⁾ qui a établi une relation entre la section efficace d'ionisation (élastique et inélastique) et l'énergie électronique de la cible ainsi qu'une première théorie quantique de la diffusion Compton électronique⁽⁸⁹⁾. Cette relation rend alors possible la détermination de l'énergie de liaison des molécules par comparaison de l'expérience avec le modèle des atomes indépendants^(29,38). L'amélioration des conditions de détection par la technique de comptage réalisée par Wellenstein et Bonham⁽⁹³⁾ permet d'atteindre une meilleure précision que dans les cas des photons.

Le développement des techniques expérimentales ainsi que les progrès informatiques ont contribué largement au développement rapide observé dans ce domaine. Ainsi dès 1969 Ehrhardt et al⁽³⁴⁾ et Amaldi et al⁽²⁾ ont réussi à utiliser les techniques d'observation par coïncidence des deux électrons sortants pour déterminer la section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome de l'hélium et d'un film mince de carbone.

Cette technique s'est développée rapidement par la suite et est utilisée par de nombreux groupes d'expérimentateurs. La section efficace triplement différentielle donne des informations complètes sur le mécanisme de l'ionisation⁽³³⁾ et permet sous certaines

conditions expérimentales d'aboutir à la détermination de la densité d'impulsion électronique de la cible (Smirnov et Neudatchin(1966))^(86,87).

Du point de vue théorique différents modèles ont été proposés. A haute énergie de collision l'approximation de Born est justifiée et l'électron éjecté peut être décrit par une onde plane ou par une onde coulombienne⁽⁶⁰⁾. Lorsque l'énergie de l'électron incident diminue (500 eV dans le cas de l'hélium) l'interaction entre l'électron diffusé et l'électron éjecté doit être prise en compte. Ceci peut être réalisé en décrivant ces deux électrons par le produit de deux ondes coulombiennes à charges variables liées par l'équation de Peterkop⁽⁷³⁾. Schultz⁽⁸³⁾ puis récemment Whelan⁽⁹⁴⁾ appliquèrent cette méthodologie, qui donne des accords très approximatifs avec les résultats des expériences.

Un autre moyen consiste à utiliser le deuxième ordre de la série de Born (Byron et Joachain (1973,1977))^(18,19). La prise en compte des autres termes de la série de Born se fait dans le cadre de l'approximation de Glauber modifiée ou (EBS') (Joachain 1985)⁽⁵³⁾. Dans le domaine du seuil où l'électron est éjecté avec une énergie de l'ordre de 1eV les méthodes perturbatives ne sont plus valables. La théorie de Wannier⁽⁹¹⁾ prévoit l'existence de très fortes corrélations entre les deux électrons émergents. Elle définit deux zones d'espace: la zone de réaction où l'excédent d'énergie E (différence entre l'énergie incidente et l'énergie d'ionisation) est très faible devant les autres énergies et la zone de Coulomb caractérisée par une équivalence entre l'ordre de grandeur de E et les autres potentiels. La section efficace est déterminée par le mouvement des deux électrons dans cette dernière zone. Elle est indépendante du partage de l'énergie entre les deux électrons sortants et est proportionnelle à E^m où $m=1.127$ lorsque la charge de la cible $Z=1$ et $m \rightarrow 1$ quand $Z \rightarrow \infty$.

Les expériences se font généralement suivant deux géométries. La première, dite asymétrique pour laquelle les deux électrons sortent avec des énergies différentes. Elle peut être coplanaire ou non, elle a été étudiée par Ehrhardt et al^(32,36) qui ont considéré des valeurs d'énergie incidente inférieure à 500 eV et par Lahmam-Bennani⁽⁶⁰⁾ qui considère une énergie incidente de l'ordre de 8 keV. Ce régime cinématique permet d'étudier en détail la corrélation angulaire et de tester les différents modèles théoriques.

Au contraire, en géométrie dite symétrique, les électrons diffusé et éjecté ont la même énergie. Le moment de transfert est grand. Les angles de diffusion et d'éjection sont égaux. Cette géométrie a été initialement proposée par Amaldi et al⁽²⁾. On peut citer également dans ce domaine les travaux récents de Frost et al (1992)⁽⁴⁰⁾ et Baum et al (1992)⁽⁶⁾ qui

déterminent dans cette géométrie le paramètre d'antisymétrie lors de l'ionisation d'un atome polarisé par des électrons également polarisés.

La description des états non liés des particules chargées, et particulièrement des électrons dans le champ coulombien d'un ion, soulève un problème qui ne trouve pas à l'heure actuelle une solution satisfaisante. En fait les fonctions du continu ne sont pas de carré sommable, les méthodes variationnelles et du champ autocohérent qui sont si efficaces dans les états liés ne sont pas applicables.

Dans le cas (e,2e), l'idée d'introduire la corrélation électronique dans des fonctions décrivant le double continuum par une fonction comprenant explicitement le terme r_{12} (analogie aux fonctions corrélées de type Hylleraas⁽⁵¹⁾ ou Pluvinaige^(75,76) pour décrire des états liés) fut pour la première fois appliquée par Brauner, Briggs et Klar^(13,16) en 1989 pour déterminer la section efficace triplement différentielle dans le cas d'une cible d'hydrogène atomique.

Mon travail a consisté à étudier la contribution d'une orbitale 2s aux sections efficaces d'ionisation, pour des collisions aux hautes énergies, appliqué aux cas de l'hydrogène et du lithium en utilisant pour la description du double continuum la fonction d'onde développée par Brauner et al^(13,16). Pour cela nous rappelons dans le premier chapitre les outils de base de la théorie des collisions. Nous obtenons ainsi les expressions des sections efficaces totale et différentielles en fonction de la matrice de transition T suivant la méthode de Goldberger et Watson⁽⁴⁶⁾. Dans le deuxième chapitre nous présentons une étude du problème à trois corps (deux électrons et un ion) et les approximations nécessaires qui nous permettent de construire la fonction d'onde du double continuum. Cette fonction a été initialement utilisée par Gariboti et al (1980)⁽⁴¹⁾ puis par Godunov et al (1983)⁽⁴⁵⁾. Le problème de normalisation dans une boîte de la fonction d'onde est également traité dans cette partie. Un calcul détaillé est donné dans l'appendice D. L'appendice C traite le problème de la réduction des 9 coordonnées d'espace du système formé par les deux électrons et l'ion résiduel en 6 coordonnées relatives et 3 coordonnées du centre de masses.

Le chapitre 3 comporte deux parties. La première traite l'étude de l'ionisation de l'hydrogène dans l'état fondamental. Nos résultats sont comparés aux nombreux résultats expérimentaux. La deuxième partie comporte le calcul de la section efficace triplement différentielle de l'hydrogène dans l'état initial excité 2s. Nos résultats seront comparés à ceux effectués avec la Born 2. Nous présentons également une étude cinématique de ce problème, pour différentes valeurs d'énergies, d'angles de diffusion et d'éjection.

Le dernier chapitre traite du calcul de la section efficace triple d'ionisation de l'atome de lithium. L'électron de valence est sous l'influence d'un potentiel créé par le noyau et les autres électrons. Nos résultats sont comparés à ceux de l'expérience de Frost et al⁽⁴⁰⁾ et aux résultats du calcul par l'approximation DWBA de Zhang et al⁽⁹⁷⁾.

Les résultats satisfaisants que nous avons obtenus par l'application de l'approximation BBK à l'étude de l'ionisation de l'hydrogène (2s) et du lithium nous permettent d'envisager son extension à l'étude de l'ionisation d'autres atomes alcalins comme le sodium ou le potassium, et éventuellement aux systèmes atomiques possédant des couches p. Le développement du calcul formel et de la puissance des ordinateurs nous laisse penser que les fonctions corrélées du double continuum pourront être appliquées dans un avenir proche à tous les systèmes atomiques.

CHAPITRE I : SECTION EFFICACE D'IONISATION PAR IMPACT ELECTRONIQUE

L'ionisation des atomes par impact électronique est un processus important de la physique atomique dont l'étude consiste dans la détection des électrons diffusés et éjectés en coïncidence. La comparaison de ces mesures aux résultats des calculs basés sur différentes hypothèses permet une meilleure compréhension des mécanismes de l'ionisation et de la structure électronique des atomes.

Dans ce chapitre nous présentons les principes de base de la théorie des collisions. Dans la première partie nous exprimons la section efficace en fonction de la probabilité de transition^(46,54). Une étude de l'évolution du système au cours du temps permet de définir cette probabilité en fonction de la matrice de transition T ou de Heisenberg S. Nous développerons ensuite l'expression de la section efficace différentielle (D.C.S) qui est liée directement aux observations expérimentales des électrons sortants en coïncidence de ce processus et qui permet une comparaison directe de l'expérience et la théorie. Nous déterminons dans la dernière partie l'expression de la section efficace triplement différentielle (TDCS).

1- NOTION DE SECTION EFFICACE

Considérons un flux F de particules incidentes, monoénergétique et homogène qui rentrent en collision avec une cible gazeuse composée de N_t particules identiques. On considère que la pression du gaz est suffisamment faible pour avoir un seul choc par particule.

Soit N le nombre de particules diffusées par unité de temps. On définit la section efficace totale par:

$$\sigma = \frac{N}{F N_t} \quad , \quad (I-1-1)$$

elle est mesurée en m^2 et reliée à la probabilité de transition par unité de temps, par la relation^(46,54):

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{if}}{F} \quad (I-1-2)$$

Nous allons dans la suite présenter un traitement quantique de l'ionisation et les approximations nécessaires qui vont nous permettre de déterminer les valeurs approchées de σ_{if} pour le cas de l'ionisation simple par impact électronique.

2- METHODE D'APPROXIMATION DANS LA DESCRIPTION DE

L'IONISATION:

L'étude des collisions en général et celle de l'ionisation par impact électronique en particulier présente des difficultés insurmontables, si nous n'employons pas des approximations qui nous permettent d'obtenir des simplifications dans les expressions représentant la section efficace différentielle. Pour préparer les outils de base de notre travail nous adoptons le point de vue quantique. Nous considérons H le Hamiltonien du système formé d'un électron incident et un atome. L'évolution au cours du temps de ce système est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (I-2-1)$$

où Ψ , représente la fonction d'onde du système, \vec{r} les positions des particules qui le composent. Le système évolue entre deux états :

- Un état initial où les deux corps électron et atome sont séparés et leur interaction est pratiquement nulle.

- Un état final comprenant l'électron diffusé, l'atome ionisé et l'électron éjecté.

Le Hamiltonien est donné par :

$$H(\vec{r}, t) = H_0(\vec{r}) + V(\vec{r}, t) \quad (I-2-2)$$

H_0 décrit le mouvement individuel du projectile et de la cible et V représente leur interaction.

Dans notre cas lorsque le temps t tend vers $-\infty$ les deux corps sont indépendants et le système est dans un état propre $\Psi(-\infty)$ de H_0 vers lequel tend $H(\vec{r}, t)$. Au fur et à mesure que le temps augmente, la distance entre les deux corps diminue, l'interaction devient appréciable et le système est régi par l'équation (I-2-1).

Après l'interaction, le potentiel redevient négligeable. Les corps se séparent et l'état du système peut être désigné par $\Psi(+\infty)$. On peut résumer la situation par le schéma suivant:

$$H = \begin{cases} H_0 & -\infty < t < -t_0 \\ H_0 + V & -t_0 < t < t_0 \\ H_0' & t_0 < t < +\infty \end{cases} \quad (I-2-3)$$

où on a considéré que le choc se produit entre $-t_0$ et t_0 .

a- PREPARATION DE L'ETAT INITIAL

Comme il a été décrit précédemment, les deux corps, projectile et cible sont très éloignés et supposés indépendants. Le Hamiltonien du système est donné par:

$$H_0 = H_{0a} + H_{0b} \quad (I-2-4)$$

où H_{0a} et H_{0b} sont respectivement le Hamiltonien du projectile et de la cible. L'équation aux valeurs propres associée à H_0 est :

$$H_0 \chi_i = E_i \chi_i \quad (I-2-5)$$

où χ_i est la fonction d'onde du système. Elle peut être représentée approximativement par le produit des fonctions d'onde de chaque particule:

$$\chi_i = \chi_a \chi_b \quad (I-2-6)$$

χ_a et χ_b obéissent aux équations suivantes:

$$\begin{aligned} H_{0a} \chi_a &= E_a \chi_a \\ H_{0b} \chi_b &= E_b \chi_b \end{aligned} \quad (I-2-7)$$

La superposition de tous les états possibles qui sont des solutions de l'équation (I-2-5) reste aussi un état propre du système; on peut donc écrire la solution sous la forme de paquet d'onde⁽⁴⁶⁾ qu'on note X_i , défini par :

$$X_i = \int d^3 q_1 d^3 q_2 A(\bar{q}_1, \bar{q}_2) \chi_i \quad (I-2-8)$$

où A est le poids des états propres χ_i .

Soit $\psi_0(\bar{r}, t)$ la fonction d'onde qui décrit l'évolution dans le temps du système étudié. L'équation de Schrödinger dépendante du temps:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(\bar{r}, t) = H_0 \psi_0(\bar{r}, t) \quad (I-2-9)$$

permet de représenter le comportement du système avant le choc, c'est à dire entre $t = -\infty$ jusqu'au $t = -t_0$, à l'aide de la fonction:

$$\psi_0(\bar{r}, t) = e^{\frac{-iH_0 t}{\hbar}} X_i \quad (I-2-10)$$

b- DESCRIPTION DE L'INTERACTION

On considère ici que les particules sont suffisamment proches. Il y a interférence entre les paquets d'ondes des deux particules et l'interaction commence⁽⁴⁶⁾. Le Hamiltonien s'écrit :

$$H = H_0 + V \quad (I-2-11)$$

La fonction d'onde Ψ du système obéit l'équation (I-2-1) dont la solution peut être représentée par:

$$\Psi(\bar{r}, t) = c e^{\frac{-itH}{\hbar}} \quad (I-2-12)$$

où c est une constante d'intégration. A la limite $t = -t_0$, $\Psi(\bar{r}, t) = \psi_0(\bar{r}, t)$. On a donc à partir de l'équation (I-2-10):

$$\Psi(\bar{r}, -t_0) = e^{\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} X_i = c e^{\frac{i t_0 H}{\hbar}}$$

qui nous permet d'écrire :

$$\Psi(\bar{r}, t) = e^{\frac{-iH(t+t_0)}{\hbar}} e^{\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} X_i \quad (I-2-13)$$

Considérons l'opérateur évolution $U(t, -t_0)$ qui est défini par :

$$U(t, -t_0) = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}} \quad (\text{I-2-14})$$

et qui décrit l'évolution du système tout au long de la collision ⁽⁴⁶⁾. Le terme $e^{-\frac{iH_0 t_0}{\hbar}}$ décrit son évolution entre les instants 0 et t_0 avec un Hamiltonien H_0 et entre t_0 et t avec H , et finalement entre t et ∞ où le système continue son évolution avec H_0 .

Remplaçant (I-2-14) dans (I-2-13) on a :

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} U(0, -t_0) X_i \quad (\text{I-2-15})$$

On pose ⁽⁴⁶⁾

$$\Gamma = U(0, t_0) X_i \quad (\text{I-2-16})$$

Ψ devient

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \Gamma \quad (\text{I-2-17})$$

La dérivée partielle de $U(t, -t_0)$ par rapport à $-t_0$ à partir de l'équation (I-2-14) donne une équation différentielle. En tenant compte de la condition $U(t, t) = 1$, l'intégration de cette dernière donne :

$$U(t, -t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-t_0}^t dt' U(t, t') V(t') \quad (\text{I-2-18})$$

Avec

$$V(t') = e^{\frac{iH_0 t'}{\hbar}} V e^{-\frac{iH_0 t'}{\hbar}} \quad (\text{I-2-19})$$

On peut réécrire Γ sous la forme :

$$\begin{aligned} \Gamma &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-t_0}^0 dt' U(0, t') V(t') \right] X_i \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{-t_0}^0 dt' e^{\frac{iH t'}{\hbar}} V e^{-\frac{iH_0 t'}{\hbar}} \right] X_i \end{aligned} \quad (\text{I-2-20})$$

Considérons une base $\{\psi_\lambda\}$ représentant l'ensemble de vecteurs propres de H telque $H\psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda$. Le développement de Γ et de X_i sur cette base donne :

$$\Gamma = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda} \Gamma_{\lambda} \quad (\text{I-2-21})$$

$$\text{et} \quad X_i = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda} X_i(\lambda) \quad (\text{I-2-22})$$

Cette décomposition nous permet de raisonner en terme d'énergie, puisqu'on suppose que ψ_λ et χ_i sont vecteurs propres de H avec respectivement comme valeurs propres E_λ et E_i . Le produit scalaire de chaque terme de l'équation (I-2-20) donne :

$$\Gamma_{\lambda-X_i}(\lambda) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-t_0}^0 dt' e^{-\frac{i(E_i-E_\lambda)t'}{\hbar}} (\psi_\lambda, V X_i) \quad (I-2-23)$$

$$= -i \left[\frac{1}{E_i - E_\lambda} \left(1 - e^{\frac{i[E_i-E_\lambda]t_0}{\hbar}} \right) \right] (\psi_\lambda, V X_i) \quad (I-2-24)$$

La fonction $e^{\frac{i[E_i-E_\lambda]t_0}{\hbar}}$ n'est pas définie à $t_0 \rightarrow -\infty$ à cause du caractère oscillatoire de cette fonction. On introduit un terme d'amortissement $e^{-\eta t}$ suivant la méthode de Gell-Mann et Goldberger⁽⁴²⁾ ce qui permet donc de donner une valeur finie des termes de l'équation (I-2-24). Si on tend η vers 0 on retrouvera alors l'expression de Γ_λ . On définit une fonction $\Gamma_\lambda(i \eta)$ qui généralise la solution Γ_λ telle que :

$$\Gamma_\lambda = \lim_{\eta \rightarrow 0} \Gamma_\lambda(i \eta) \quad (I-2-25)$$

La contribution du terme en exponentiel de l'équation (I-2-24) est nulle⁽⁴⁶⁾ du fait qu'on a supposé que la contribution du potentiel d'interaction est négligeable avant l'instant $-t_0$ où commence le choc.

$$\Gamma_\lambda(i \eta) = X_i(\lambda) + \frac{1}{E_i + i \eta - E_\lambda} (\psi_\lambda, V X_i) \quad (I-2-26)$$

La somme sur tous les états possibles de Γ_λ et ψ_λ donne :

$$\Gamma(i \eta) = \sum_\lambda \psi_\lambda \Gamma_\lambda(i \eta) = X_i + \frac{1}{E_i + i \eta - H} V X_i \quad (I-2-27)$$

où $\frac{1}{E_i + i \eta - H}$ est la fonction de Green associée à H.

c - DESCRIPTION DE L'ETAT FINAL :

A l'état final on récupère un système composé ici de deux électrons et l'atome ionisé. L'évolution au cours du temps de ce système est décrite comme dans l'équation (I-2-10) par la fonction d'onde $\psi'(\vec{r}, t)$ soit H_0' son Hamiltonien. On a :

$$\psi'_0(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H'_0} \chi_f \quad (\text{I-2-28})$$

avec χ_f solution de l'équation :

$$H'_0 \chi_f = E_f \chi_f \quad (\text{I-2-29})$$

H'_0 a pour expression :

$$H'_0 = H - V' \quad (\text{I-2-30})$$

où V' est le potentiel d'interaction dans la phase finale, c'est à dire après le choc. On pose:

$$B = E_i + i\eta - H'_0 \text{ et } A = E_i + i\eta - H \quad (\text{I-2-31})$$

La relation reliant les opérateurs A et B par : $\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{A}(B-A)\frac{1}{B}$ permet d'écrire la fonction de Green sous la forme :

$$\frac{1}{E_i + i\eta - H} = \frac{1}{E_i + i\eta - H'_0} \left[1 - V' \frac{1}{E_i + i\eta - H} \right] \quad (\text{I-2-32})$$

L'expression de Γ devient :

$$\Gamma(i\eta) = X_i + \frac{1}{E_i + i\eta - H'_0} \left[V + V' \frac{1}{E_i + i\eta - H} V \right] X_i \quad (\text{I-2-33})$$

On définit la matrice de transition T par :

$$T = V - V' \frac{1}{E_i + i\eta - H} V \quad (\text{I-2-34})$$

Et Γ devient :

$$\Gamma(i\eta) = X_i + \frac{1}{E_i + i\eta - H'_0} T X_i \quad (\text{I-2-35})$$

A partir de l'équation (I-2-17) et en prenant la limite de $\Gamma(i\eta)$ au voisinage de $\eta=0$ on aboutit à une expression de $\Psi(\vec{r}, t)$ indépendante de t_0 et fonction de la matrice de transition T qui sera par la suite reliée à la probabilité de transition et donc à la section efficace.

3- CALCUL DE LA SECTION EFFICACE.

d'après l'équation (I-1-5) :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{if}}{F} \quad (I-3-1)$$

Dans la suite toutes les expressions seront données en unités atomiques de Hartree, ($e=1$, $m_e = 1$, le rayon de Bohr $a = 1$ et $\hbar = 1$).

La probabilité de transition dépend de l'état initial et final, elle est donnée par l'expression $P_{if} = \left| \langle \psi_0(\vec{r}, t) | \Psi(\vec{r}, t) \rangle \right|^2$. Elle peut être reliée à la matrice T (voir appendice A) par la relation:

$$P_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) |T_{if}|^2 \frac{F}{|\vec{v}_1 - \vec{v}_2|} \quad (I-3-2)$$

où \vec{v}_1 et \vec{v}_2 représentent respectivement les vitesses des particules incidente et cible dans le repère lié au laboratoire. L'impulsion dans le système du centre de masses est donnée par⁽⁴⁶⁾:

$$\vec{K}_i = (\vec{v}_1 - \vec{v}_2) \quad (I-3-3)$$

La section efficace de transition devient, en utilisant les équations (I-3-1) et (I-3-2) :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 K_i^{-1} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) |T_{if}|^2 \quad (I-3-4)$$

En tenant compte de la dégénérescence sur l'orientation⁽⁴⁶⁾ de la particule diffusée la section efficace devient :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 K_i^{-1} \int d\vec{K}_b \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) |T_{if}|^2 \quad (I-3-5)$$

\vec{K}_b étant l'impulsion de l'électron éjecté.

4- SECTION EFFICACE DIFFERENTIELLE D'IONISATION :

A présent on est en mesure de définir les sections efficaces différentielles à partir de l'équation (I-3-5) du paragraphe précédent :

• Section efficace simplement différentielle :

Elle décrit pour une énergie donnée la distribution angulaire de l'électron après diffusion. Elle est fonction de E_i et de Ω_b et est donnée par :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_b} = (2\pi)^4 K_i^{-1} \int dK_b K_b^2 \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) |T_{if}|^2 \quad (I-4-1)$$

• Section efficace doublement différentielle :

Elle représente la distribution en énergie et en angle de l'électron éjecté et diffusé elle est donnée par ⁽⁶⁸⁾ :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_b dE_b} = (2\pi)^4 K_i^{-1} K_b \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2 \quad (I-4-2)$$

On peut également définir $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_a dE_a}$, où la variation de l'énergie de l'électron diffusé

est prise en compte, la section efficace doublement différentielle est une fonction de l'énergie incidente, de l'énergie et de l'angle de sortie de l'un des deux électrons. Expérimentalement on fixe deux paramètres et on mesure la section efficace doublement différentielle en fonction du troisième. Les deux détecteurs A et B opèrent indépendamment en mode non-coïncidence de façon à obtenir $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_b dE_b}$ et

$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_a dE_a}$ séparément par A et B respectivement ⁽⁶⁸⁾.

• Section efficace triplement différentielle :

La section efficace triplement différentielle est une fonction de tous les paramètres cinétiques de la collision, c'est à dire E_i , E_a ou E_b et les angles θ_a , θ_b , ainsi que le cas d'une collision non coplanaire des angles φ_a et φ_b (voir figure 2). Les indices a et b se réfèrent respectivement à l'électron projectile et à l'électron atomique éjecté au cours du choc ionisant.

La détection en coïncidence des deux électrons émergents conduit à la mesure de la section efficace triplement différentielle, ce qui permet une comparaison directe de la théorie et l'expérience.

Le transfert d'impulsion défini par $\vec{K} = \vec{K}_i - \vec{K}_a$, avec \vec{K}_i et \vec{K}_a les impulsions de l'électron incident et diffusé, joue un rôle très important, il dépend de l'énergie incidente, diffusée et de la direction de diffusion.

Si $|\vec{K}|$ est grand ($\frac{K^2}{2} \gg I^+$, on a dans ce cas $\vec{K} = \vec{K}_2$) on parle d'un choc binaire⁽³¹⁾,

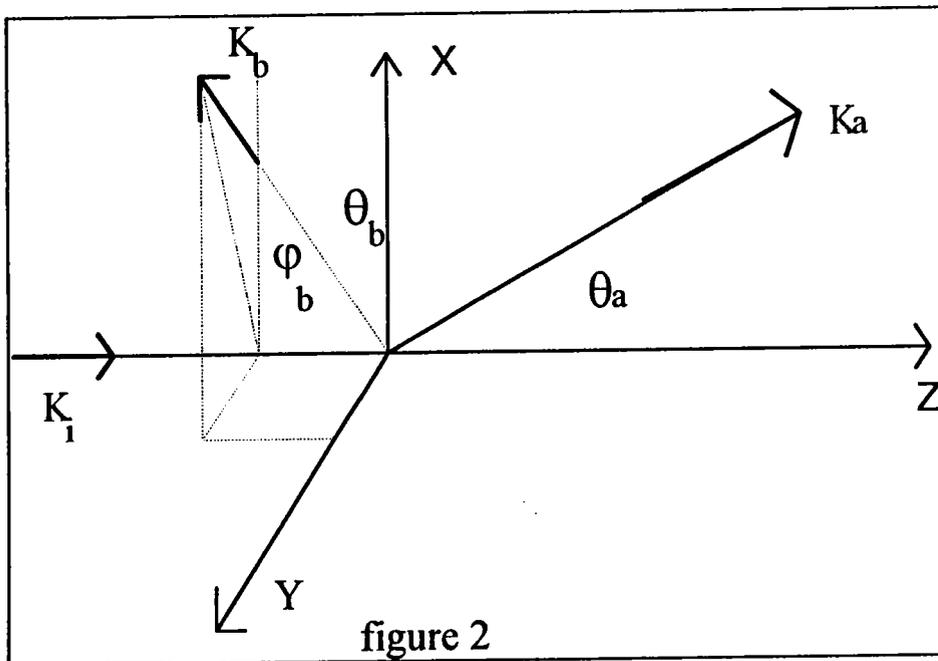
l'électron incident est dévié suivant un grand angle de diffusion et avec une grande perte d'énergie. Dans ce cas l'interaction entre l'ion et les électrons émergents est faible.

Si $|\vec{K}|$ est faible on approche la situation limite de la photo-ionisation. Dans ce cas la déviation de l'électron incident est faible ainsi que la perte d'énergie. L'interaction se fait essentiellement avec les couches externes.

Si $|\vec{K}|$ n'est ni très grand ni très petit, l'électron éjecté sort avec une faible énergie et interagit fortement avec l'ion.

La section efficace triplement différentielle est donnée par :

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_a} = (2\pi)^4 K_i^{-1} K_b K_a |T_{if}|^2 \quad (I-4-3)$$



•Approximation de Born :

La matrice T définie par l'équation (I-2-34) peut être développée de la manière suivante :

$$T = V + V' \frac{1}{E_i + i\eta - H_0'} V + V' \frac{1}{E_i + i\eta - H_0'} V' \frac{1}{E_i + i\eta - H} V + \dots \quad (I-4-4)$$

L'approximation de Born⁽¹¹⁾ consiste à retenir le premier terme du développement, ce traitement est surtout valable pour des électrons incidents suffisamment rapides relativement aux électrons atomiques. L'amplitude de diffusion, ne tenant compte que du premier terme de la série de Born, est donnée par:

$$T_{if} = \langle \psi_i | V | \psi_f \rangle \quad (I-4-5)$$

où ψ_i et ψ_f représentent respectivement l'état initial et final du système. La contribution du second terme de la série de Born à la section efficace est donnée par:

$$f_{B2} = 4\pi^2 \sum_n \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - K_i^2 + 2(\omega_n - \omega) + i\eta} \langle \psi_f | v | e^{i\vec{q}\vec{r}} \psi_n \rangle \langle e^{i\vec{q}\vec{r}} \psi_n | v | \psi_i \rangle \quad \eta \rightarrow 0 \quad (I-4-6)$$

où \vec{K}_i est la quantité de mouvement du projectile, ω_n est l'énergie de l'état $|n\rangle$ et ω l'énergie d'ionisation de l'électron cible.

5- CLASSIFICATION DES REACTIONS (e,2e) SELON DES CONSIDERATIONS CINEMATIQUES :

On peut classer les études des collisions ionisantes en deux catégories⁽⁵⁹⁾: l'étude de la structure et de la dynamique des cibles.

Dans la première catégorie on trouve les collisions symétriques coplanaires ou non pour lesquelles les 2 électrons sortent avec la même énergie. Les expériences se font avec une énergie incidente intermédiaire, dans ces conditions le moment de transfert est grand et on peut utiliser l'approximation impulsionnelle qui consiste à décrire l'électron éjecté par une onde plane et négliger la contribution du potentiel nucléaire dans la section efficace^(59,17). Ceci permet de relier directement la densité d'impulsion⁽²⁵⁾ de la couche de la cible où se produit l'ionisation à $\frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_a}$. Cette région, où le moment de recul $\vec{Q} = \vec{K} - \vec{K}_b$ est également faible, est appelée la région de spectroscopie angulaire.

Dans la seconde catégorie de travaux on place les collisions dites asymétriques où les énergies des électrons sortants sont très différentes, le moment de transfert est petit,

l'énergie incidente peut varier de l'énergie du seuil (Fournier-Lagarde et al 1984⁽³⁹⁾) à quelques centaines d'eV (Ehrahdt et al 1986⁽³¹⁾) pour atteindre des énergies supérieures à 8 keV (Lahmam Bennani et al 1984⁽⁶¹⁾).

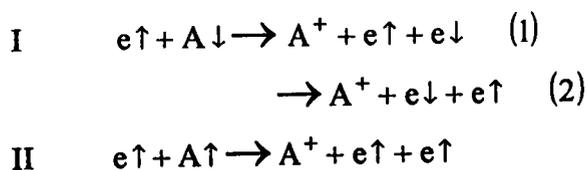
La région des énergies du seuil est régie par la théorie de Wannier⁽⁸⁸⁾ qui prédit que la section efficace totale est proportionnelle à E^n avec $n=1.127$ où E est l'énergie résiduelle. Dans la seconde région on détecte en coïncidence les électrons sortants dans une géométrie asymétrique coplanaire pour laquelle l'électron diffusé est rapide et sort sous un petit angle alors que l'éjecté est lent et possède une faible énergie.

Et finalement la région où l'énergie incidente est très grande, de l'ordre de keV. Dans ces conditions le moment de transfert devient très faible, le processus $(e,2e)$ devient équivalent à un processus (ν,e) l'énergie du photon ν étant donnée par $E_i - E_a$, différence entre son énergie initiale et après le choc. Nous citons dans ce domaine l'expérience réalisée par Lahmam-Bennani et collaborateurs⁽⁶¹⁾ concernant l'ionisation de l'hélium par impact d'électrons de haute énergie ($E_0 \approx 8$ keV).

6- ETUDE DE L'EFFET D'ECHANGE DANS LE CAS DE L'HYDROGENE ET DU LITHIUM :

L'ionisation simple d'un atome par impact électronique donne lieu à un état final du système constitué par l'atome ionisé et deux électrons, l'un diffusé et l'autre éjecté. Dans le cas asymétrique le premier électron est rapide et le deuxième est lent et l'effet d'échange lié à l'indiscernabilité des électrons peut être négligés. Dans le cas symétrique les électrons émergent avec la même énergie et l'effet d'échange est important.

Dans le cas où l'électron incident et l'atome sont non polarisés, deux cas se présentent. L'électron incident et l'électron atomique peuvent avoir des spins parallèles ou antiparallèles. La situation peut être schématisée par :



Où le symbole \uparrow ou \downarrow est associé aux deux fonctions de spin α et β , dont les valeurs propres sont égales à $\frac{1}{2}$ ou $-\frac{1}{2}$.

Le principe de Pauli impose que la fonction d'onde d'un système de fermions soit antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons.

Si les deux électrons ont des spins antiparallèles, le spin total $S=0$. La seule fonction d'onde de spin antisymétrique des deux électrons est :

$$\chi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(a)\beta(b) - \alpha(b)\beta(a)] \quad (I-6-1)$$

La fonction d'onde orbitale est alors symétrique par échange et les fonctions d'ondes globales initiale et finale sont :

$$\psi_i^A = [\psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_a, \vec{r}_b) + \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_b, \vec{r}_a)] \chi_A \quad (I-6-2)$$

$$\psi_f^A = [\psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_a; \vec{K}_b, \vec{r}_b) + \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_b; \vec{K}_b, \vec{r}_a)] \chi_A \quad (I-6-3)$$

On note l'amplitude de diffusion $T(\uparrow\downarrow)$, à partir de l'équation (I-4-5) on peut écrire:

$$T(\uparrow\downarrow) = \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\langle \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_a, \vec{r}_b) | V(\vec{r}_a, \vec{r}_b) | \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_a; \vec{K}_b, \vec{r}_b) \rangle + \\ &\langle \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_b, \vec{r}_a) | V(\vec{r}_b, \vec{r}_a) | \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_b; \vec{K}_b, \vec{r}_a) \rangle + \\ &\langle \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_a, \vec{r}_b) | V(\vec{r}_a, \vec{r}_b) | \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_b; \vec{K}_b, \vec{r}_a) \rangle + \\ &\langle \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_b, \vec{r}_a) | V(\vec{r}_b, \vec{r}_a) | \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_a; \vec{K}_b, \vec{r}_b) \rangle \end{aligned} \right] \quad (I-6-4)$$

Un changement de variable simple permet de voir que les deux premiers termes sont égaux ainsi que les deux derniers.

On appelle amplitude d'ionisation directe p le terme :

$$p = \langle \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_a, \vec{r}_b) | V(\vec{r}_a, \vec{r}_b) | \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_a; \vec{K}_b, \vec{r}_b) \rangle \quad (I-6-5)$$

L'amplitude d'échange est définie par :

$$q = \langle \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_a, \vec{r}_b) | V(\vec{r}_b, \vec{r}_a) | \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_b; \vec{K}_b, \vec{r}_a) \rangle \quad (I-6-6)$$

Les deux amplitudes sont reliées par la relation de Peterkop⁽⁷²⁾ : $p(\vec{K}_b, \vec{K}_a) = q(\vec{K}_a, \vec{K}_b)$

Donc $|T(\uparrow\downarrow)|^2 = |p + q|^2$ (I-6-7)

Si les spins des électrons sont parallèles, le spin total $S=1$, la fonction d'onde de spin est symétrique.

Pour cet état triplet, trois cas distincts sont alors possibles:

$$\chi_S = \alpha(a) \alpha(b) \quad (I-6-8(a))$$

$$\chi_S = \beta(a) \beta(b) \quad (I-6-8(b))$$

$$\chi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(a) \beta(b) + \alpha(b) \beta(a)] \quad (I-6-8(c))$$

La fonction d'onde orbitale dans ce cas est antisymétrique par échange:

$$\psi_i^A = [\psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_a; \vec{r}_b) - \psi_i(\vec{K}_i, \vec{r}_b; \vec{r}_a)] \chi_S \quad (I-6-9)$$

$$\psi_f^A = [\psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_a; \vec{K}_b, \vec{r}_b) - \psi_f(\vec{K}_a, \vec{r}_b; \vec{K}_b, \vec{r}_a)] \chi_S \quad (I-6-10)$$

L'élément de matrice T s'écrit alors:

$$T = p - q \quad (I-6-11)$$

Dans une expérience où les électrons ne sont pas polarisés, chacune des quatre combinaisons de spin possède la même probabilité. On peut donc écrire:

$$|T|^2 = \frac{|p+q|^2 + 3|p-q|^2}{4} \quad (I-6-12)$$

et,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE} = (2\pi)^4 \frac{K_a K_b}{K_i} \left[\frac{1}{4}|p+q|^2 + \frac{3}{4}|p-q|^2 \right] \quad (I-6-13)$$

L'amplitude de diffusion du singulet $|p+q|^2$ correspond à l'état de spin total $S=0$ et $|p-q|^2$ correspond au spin $S=1$.

Expérimentalement on mesure la section efficace différentielle pour un électron et une cible initialement polarisés sans tenir compte de la polarisation des électrons à la sortie⁽⁹⁸⁾.

On peut dans ce cas définir un paramètre d'antisymétrie définie par :

$$A = \frac{\sigma^3(0) - \sigma^3(1)}{\sigma^3(0) + 3\sigma^3(1)} \quad (\text{I-6-14})$$

qui permet d'estimer l'importance de chaque type de polarisation. La notation $\sigma^3(0)$ ou $\sigma^3(1)$ signifie qu'il s'agit de la section efficace dans le cas où le spin total est nul ou est égal à 1.

Pour un processus où seul le cas singulet est observé $A=1$, alors que pour un processus purement triplet $A=-\frac{1}{3}$.

Dans le cas d'une collision symétrique où le moment de transfert est grand le processus triplet est négligeable⁽⁴⁰⁾ puisque les deux électrons sortants sont indiscernables, le principe de Pauli oblige alors que leurs spins soient antiparallèles ce qui implique une collision purement singulet. Dans ces conditions $p=q$ et l'amplitude de diffusion directe est faible.

7- CONCLUSION :

Dans ce chapitre nous avons traité l'ionisation simple par impact électronique. Le problème de détermination des éléments de la matrice de transition T est simplifié en considérant l'approximation de premier ordre de T. Nous avons obtenu son expression pour le cas où l'état final serait constitué de deux électrons non polarisés.

CHAPITRE II SEPARATION APPROCHEE DES MOUVEMENTS D'UN SYSTÈME À TROIS CORPS ET DETERMINATION DE LA FONCTION D'ONDE DU DOUBLE CONTINUUM

Dans le chapitre précédent nous avons vu que la description de l'état initial et l'état final d'un système cible-projectile par des fonctions d'ondes solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, était nécessaire pour la détermination de la section efficace. Dans l'état initial le projectile et l'atome peuvent être considérés comme un système à deux corps pour lequel une description appropriée est possible à trouver. Dans l'état final par contre où l'ionisation de l'atome par impact électronique conduit à un système à trois corps en interaction coulombienne, l'équation de Schrödinger n'a pas de solution exacte.

Pour surmonter les difficultés de ce problème plusieurs modèles ont été proposés dans le cadre de l'approximation de Born, utilisant des combinaisons simples soit d'ondes planes, soit d'ondes partielles ou des combinaisons de fonctions décrivant les états liés. D'autres méthodes comme celle de la matrice R qui partage l'espace en deux régions, interne et externe et représente les fonctions d'ondes par des développements de bases d'orbitales appropriées, donnent des résultats satisfaisants.

Nous allons de notre côté suivre un autre chemin qui consiste à trouver une description approchée du double continuum par des fonctions corrélées. Ce chemin a été tracé par plusieurs chercheurs. Ainsi, dès 1980 Garibotti et Miraglia⁽⁴¹⁾ ont proposé des fonctions corrélées dans le calcul de la section efficace différentielle double (DDCS) de collision avec des projectiles lourds. En 1983 Godunov⁽⁴⁵⁾ et al ont utilisé la même fonction d'onde pour des collisions à impact protonique. En 1989 Brauner, Briggs et Klar^(13,16) ont proposé une approche différente pour trouver l'expression de cette fonction d'onde, utilisée ensuite dans le calcul de la section efficace triplement différentielle lors d'impacts ionisants.

Dans ce chapitre nous présentons une solution approchée basée sur la méthode de Pluvinage^(75,76) du problème des deux électrons sortant et l'ion. Dans un premier temps nous exprimons le Hamiltonien H du système en terme des coordonnées du centre de masses dont le mouvement est indépendant du mouvement relatif, et les 6 coordonnées relatives (coordonnées de Jacobi)⁽¹⁰⁾. Dans un deuxième temps nous donnons la fonction d'onde d'essai obtenue pour le double continuum par une méthode analogue à celle utilisée

par Brauner, Briggs et Klar ^(13,16) et qui satisfait les conditions aux limites exigées par l'interaction coulombienne. Enfin nous présentons les problèmes liés à la normalisation de cette fonction d'onde.

1- MOUVEMENT DES PARTICULES DANS LE SYSTEME DU CENTRE DE MASSES :

Considérons la réaction suivante :



où A représente l'atome neutre.

Soient m_1 , m_2 et m_3 , les masses respectives du projectile (qui est ici un électron), de l'électron atomique et de l'ion, $\vec{\rho}_1$, $\vec{\rho}_2$ et $\vec{\rho}_3$, leurs coordonnées dans un repère galiléen. Le Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \mathcal{K} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{II-1-1})$$

Z est la charge du noyau de la cible, r_1 et r_2 sont respectivement la distance entre le noyau et le projectile et le noyau et l'électron (voir fig. 2). \mathcal{K} décrit le mouvement des particules en l'absence de toutes interactions:

$$\mathcal{K} = -\frac{\vec{\nabla}_{\rho_1}^2}{2m_1} - \frac{\vec{\nabla}_{\rho_2}^2}{2m_2} - \frac{\vec{\nabla}_{\rho_3}^2}{2m_3} \quad (\text{II-1-2})$$

$\vec{\nabla}_{\rho_i}^2$ représente l'opérateur de Laplace opérant en terme de $\vec{\rho}_i$. Si on traite les particules, projectile, noyau et électron de la même façon on peut faire les arrangements suivants 1+(2+3) , 2+(1+3) ou 3+(1+2), où 1, 2, 3 représentent respectivement le projectile, l'électron et le noyau. La notation i+(j+k) signifie que les particules (j , k) sont liées alors que i est libre. On ne traite dans ce qui suit que le premier arrangement. Introduisons les variables \vec{r}_2 , \vec{R} par :

$$\vec{r}_2 = \vec{\rho}_2 - \vec{\rho}_3 \quad (\text{II-1-3})$$

$$\vec{R} = \frac{m_2 \vec{\rho}_2 + m_3 \vec{\rho}_3}{m_2 + m_3} \quad (\text{II-1-4})$$

\mathcal{K} devient⁽⁶¹⁾ :

$$\mathcal{H} = -\frac{\bar{V}_R^2}{2(m_2 + m_3)} - \frac{\bar{V}_{r_2}^2}{2m_{23}} - \frac{\bar{V}_{r_1}^2}{2m_1} \quad (\text{II-1-5})$$

Où m_{23} est donnée par :

$$m_{23} = \frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3} \quad (\text{II-1-6})$$

Faisant un nouveau changement de variable :

$$\bar{R}_1 = \bar{R} - \bar{\rho}_1 \quad (\text{III-1-7})$$

$$\bar{R}' = \frac{(m_2 + m_3)\bar{R} + m_1 \bar{\rho}_1}{m_1 + m_2 + m_3} \quad (\text{II-1-8})$$

\mathcal{H} devient alors :

$$\mathcal{H} = -\frac{\bar{V}_{R'}^2}{2(m_1 + m_2 + m_3)} - \frac{\bar{V}_{r_2}^2}{2m_{23}} - \frac{\bar{V}_{R_1}^2}{2M_1} \quad (\text{II-1-9})$$

Où
$$M_1 = \frac{m_1(m_2 + m_3)}{m_1 + m_2 + m_3} \quad (\text{II-1-10})$$

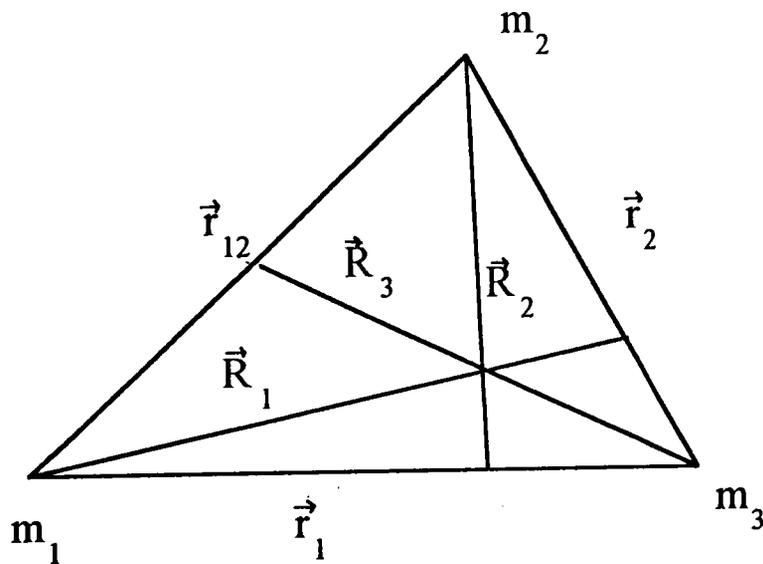


figure 2

Le premier terme de (II-1-9) décrit le mouvement d'une particule de masse $(m_1 + m_2 + m_3)$, qui correspond donc au mouvement du centre de masses en l'absence d'un champ extérieur. \mathcal{H} devient, dans le système de centre de masses :

$$\mathcal{H} = -\frac{\bar{V}_{r_2}^2}{2m_{23}} - \frac{\bar{V}_{R_1}^2}{2M_1} \quad (\text{II-1-11})$$

où (\bar{r}_2, \bar{R}_1) définit un groupe de coordonnées de Jacobi.

De la même façon si on traite les arrangements 2+(1+3) et 3+(1+2) on peut définir deux autres groupes de coordonnées $(\bar{r}_{12}, \bar{R}_3)$ et (\bar{r}_1, \bar{R}_2) (voir fig.2). \mathcal{H} s'exprime dans chacun des deux systèmes par:

$$\mathcal{H} = -\frac{\bar{V}_{r_{12}}^2}{2m_{12}} - \frac{\bar{V}_{R_3}^2}{2M_3} \quad (\text{II-1-12})$$

$$= -\frac{\bar{V}_{r_1}^2}{2m_{13}} - \frac{\bar{V}_{R_2}^2}{2M_2} \quad (\text{II-1-13})$$

m_{12}, M_2, m_{13} et M_3 sont définies dans l'appendice (C).

Les moments conjugués relatifs à chaque groupe de coordonnées de Jacobi (\bar{r}_2, \bar{R}_1) , $(\bar{r}_{12}, \bar{R}_3)$ et (\bar{r}_1, \bar{R}_2) sont respectivement $(\bar{k}_2, \bar{K}_1), (\bar{k}_{12}, \bar{K}_3)$ et (\bar{k}_1, \bar{K}_2) . On peut passer d'un groupe de coordonnées à l'autre par des relations de transformation (voir appendice C). L'énergie cinétique totale du système dans le centre de masse est :

$$E = \frac{K_1^2}{2M_1} + \frac{k_2^2}{2m_{23}} = \frac{k_{12}^2}{2m_{12}} + \frac{K_3^2}{2M_3} = \frac{k_1^2}{2m_{13}} + \frac{K_2^2}{2M_2} \quad (\text{II-1-14})$$

2- LA METHODE DE PLUVINAGE POUR DES SYSTEMES A DEUX ELECTRONS ACTIFS:

L'équation de Schrödinger du système après le choc est semblable à celle des atomes à deux électrons qui n'est pas séparable et pour laquelle on a pu former que des solutions approchées basées sur des méthodes variationnelles ou perturbatrices. La méthode de Pluvinage^(75,76) que nous adoptons a l'avantage de prendre en considération la corrélation électronique et ne pas être une méthode variationnelle.

La détermination de la fonction d'onde d'un système à deux électrons nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger suivante:

$$\left[-\frac{1}{2}(\Delta_r + \Delta_r) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \Phi = E\Phi \quad (\text{II-2-1})$$

L'idée de base de Pluvinage est d'écrire la solution de cette équation comme le produit de deux fonctions d'ondes Φ_1 et Φ_2 qui sont solutions des équations suivantes:

$$\left[-\frac{1}{2}(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \right] \Phi_1 = E_1 \Phi_1 \quad (\text{II-2-2})$$

$$\left[-\frac{1}{2}(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) + \frac{1}{r_{12}} \right] \Phi_2 = E_2 \Phi_2 \quad (\text{II-2-3})$$

Remplace Φ par le produit $\Phi_1 \Phi_2$ dans (II-2-1) et en utilisant (II-2-2) et (II-2-3) on obtient :

$$\left[-\frac{1}{2}(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \Phi = (E_1 + E_2) \Phi - [(\bar{\nabla}_{r_1} + \bar{\nabla}_{r_2}) \Phi_1][(\bar{\nabla}_{r_1} + \bar{\nabla}_{r_2}) \Phi_2] \quad (\text{II-2-4})$$

Pluvinage a proposé de prendre:

$$[(\bar{\nabla}_{r_1} + \bar{\nabla}_{r_2}) \Phi_1][(\bar{\nabla}_{r_1} + \bar{\nabla}_{r_2}) \Phi_2] = \lambda \Phi_1 \Phi_2 \quad (\text{II-2-5})$$

qui permet d'écrire $E = E_1 + E_2 - \lambda$

Cette procédure est très bien adaptée à notre problème à laquelle nous ajoutons une correction supplémentaire que nous présentons plus bas.

3- APPLICATION DE LA METHODE DE PLUVINAGE AU DOUBLE CONTINUUM:

Soit Ψ_f la fonction d'onde de l'état final. Elle satisfait l'équation de Schrödinger associée au Hamiltonien \mathcal{H} défini par l'équation (II-1-1). Dans le groupe de coordonnées (\bar{r}_1, \bar{R}_2) on a:

$$\left[\mathcal{H} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right] \Psi_f = E_f \Psi_f \quad (\text{II-3-1})$$

La solution de cette équation peut s'écrire suivant la méthode de Pluvinage comme le produit de trois termes:

$$\Psi_f(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \xi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \psi(\bar{r}_{12}, \bar{R}_3) \chi(\bar{r}_2, \bar{R}_1) \quad (\text{II-3-2})$$

ξ et ψ satisfont comme il a été présenté dans (II-2-2) et (II-2-3) les équations :

$$\left(\mathcal{H} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \right) \xi = E_f \xi \quad (\text{II-3-3})$$

où l'interaction entre les deux électrons n'est pas prise en compte et

$$\left(\mathcal{H} - \frac{1}{|\bar{r}_2 - \bar{r}_1|} \right) \psi = E_f \psi \quad (\text{II-3-4})$$

qui ne tient compte que de l'interaction entre les deux électrons. La fonction χ est déterminée en remplaçant Ψ_f par son expression (II-3-2) dans l'équation (II-3-1).

• Résolution de l'équation (II-3-3)

En partant de l'expression de \mathcal{H} donnée par (II-1-11) et en utilisant les relations de passage de (\bar{r}_2, \bar{R}_1) à (\bar{r}_1, \bar{R}_2) (voir appendice C) on obtient:

$$\bar{R}_1 = -c \bar{R}_2 + (1 - c b) \bar{r}_1 \quad (\text{II-3-5})$$

où c est donnée par :

$$c = \frac{m_2}{m_3 + m_2} \text{ et } b = \frac{m_1}{m_1 + m_3}$$

En remarquant que $m_1 = m_2 \ll m_3$

(II-3-6)

nous écrivons :

$$\bar{R}_1 = \bar{r}_1 + 0 \left(\frac{m_2}{m_3} \right) \quad (\text{II-3-7})$$

L'équation (II-3-3) devient alors en unités atomiques:

$$\left[-\frac{\bar{\nabla}_{\bar{r}_1}^2}{2} - \frac{\bar{\nabla}_{\bar{r}_2}^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \right] \xi = E_f \xi \quad (\text{II-3-8})$$

On aboutit à une équation qui décrit un mouvement semblable à celui de deux particules indépendantes. ξ peut donc s'écrire comme le produit de deux fonctions qui dépendent respectivement des variables \bar{r}_1 et \bar{r}_2 . Chacune de ces fonctions est solution de l'équation de Schrödinger à une particule dans un potentiel coulombien. Pour le cas des énergies positives elles prennent la forme des ondes coulombiennes.

$$\xi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{k}_1 \bar{r}_1} \Gamma(1-i\alpha_1) e^{-\pi\alpha_1/2} {}_1F_1(i\alpha_1, 1, -i(k_1 r_1 + \bar{k}_1 \bar{r}_1)) \\ \times (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{k}_2 \bar{r}_2} \Gamma(1-i\alpha_2) e^{-\pi\alpha_2/2} {}_1F_1(i\alpha_2, 1, -i(k_2 r_2 + \bar{k}_2 \bar{r}_2)) \quad (\text{II-3-9})$$

où Γ représente les fonctions Gamma habituelles et ${}_1F_1$ la fonction hypergéométrique confluente, avec:

$$\alpha_1 = -\frac{Z}{K_1} \quad (\text{II-3-10})$$

$$\alpha_2 = -\frac{Z}{K_2} \quad (\text{II-3-11})$$

• Résolution de l'équation (II-3-4)

Reprenons maintenant l'équation (II-2-4) et prenons pour \mathcal{H} l'expression (II-1-12) :

$$\left[-\frac{\bar{\nabla}_{r_{12}}^2}{2m_{12}} - \frac{\bar{\nabla}_{R_3}^2}{2M_3} + \frac{1}{|\bar{r}_2 - \bar{r}_1|} \right] \psi = E_r \psi \quad (\text{II-3-12})$$

Cette équation décrit le mouvement d'une particule libre de coordonnées \bar{R}_3 et de masse M_3 et d'une particule de coordonnées \bar{r}_{12} dans un champ coulombien $\frac{1}{r_{12}}$ avec une énergie positive. ψ est donc le produit d'une fonction d'onde plane et d'une fonction d'onde coulombienne :

$$\psi(\bar{r}_{12}, \bar{R}_3) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{K}_3 \bar{R}_3} \times \\ (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{k}_{12} \bar{r}_{12}} \Gamma(1-i\alpha_3) e^{-\pi\alpha_3/2} F(i\alpha_3, 1, -i(k_{12} r_{12} + \bar{k}_{12} \bar{r}_{12})) \quad (\text{II-3-13})$$

avec
$$\alpha_3 = -\frac{1}{k_{12}} \quad (\text{II-3-14})$$

\bar{k}_{12} peut être exprimé en fonction de \bar{k}_1 et de \bar{k}_2 en utilisant les relations (C8) et (C10) et en supposant toujours que $m_1 = m_2 \ll m_3$ (voir appendice C)

$$\bar{k}_{12} = \frac{\bar{k}_2 - \bar{k}_1}{2} \quad (\text{II-3-15})$$

Il nous reste à déterminer la valeur de la fonction χ , pour cela reprenons l'équation (II-3-1) où on a remplacé \mathcal{H} par l'équation (II-1-11). On remplace Ψ_r par sa valeur (équation (II-3-2)) on obtient:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2m_{23}} \frac{\bar{\nabla}_r^2 \chi}{\chi} - \frac{1}{2M_1} \frac{\bar{\nabla}_{R_1}^2 \chi}{\chi} - E_f \right) - \frac{1}{m_{23}} \left[\frac{\bar{\nabla}_r \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_r \psi}{\psi} + \frac{\bar{\nabla}_r \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_r \chi}{\chi} + \frac{\bar{\nabla}_r \psi}{\psi} \frac{\bar{\nabla}_r \chi}{\chi} \right] \\ & - \frac{1}{M_1} \left[\frac{\bar{\nabla}_{R_1} \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \psi}{\psi} + \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \chi}{\chi} + \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \psi}{\psi} \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \chi}{\chi} \right] + \frac{1}{\xi} \left(\mathcal{H} - \frac{Z}{\eta_1} - \frac{Z}{\eta_2} \right) \xi \\ & + \frac{1}{\psi} \left(\mathcal{H} - \frac{1}{|\bar{\eta}_2 - \bar{\eta}_1|} \right) = 0 \end{aligned} \quad (\text{II-3-16})$$

En utilisant les relations (II-3-3) et (II-3-4) on obtient:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2m_{23}} \frac{\bar{\nabla}_r^2 \chi}{\chi} - \frac{1}{2M_1} \frac{\bar{\nabla}_{R_1}^2 \chi}{\chi} - E_f \right) - \frac{1}{m_{23}} \left[\frac{\bar{\nabla}_r \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_r \psi}{\psi} + \frac{\bar{\nabla}_r \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_r \chi}{\chi} + \frac{\bar{\nabla}_r \psi}{\psi} \frac{\bar{\nabla}_r \chi}{\chi} \right] \\ & - \frac{1}{M_1} \left[\frac{\bar{\nabla}_{R_1} \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \psi}{\psi} + \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \xi}{\xi} \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \chi}{\chi} + \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \psi}{\psi} \frac{\bar{\nabla}_{R_1} \chi}{\chi} \right] + E_r + E_f = 0 \end{aligned} \quad (\text{II-3-17})$$

D'après les équations (II-3-9) et (II-3-13) on peut écrire:

$$\frac{\bar{\nabla}_r \psi}{\psi} = i\bar{k}_2 + \alpha_3 \frac{{}_1F_1(i\alpha_3 + 1, 2, -i(k_{12} \eta_2 + \bar{k}_{12} \bar{\eta}_2))}{{}_1F_1(i\alpha_3, 1, -i(k_{12} \eta_2 + \bar{k}_{12} \bar{\eta}_2))} \bar{\nabla}_r (k_{12} \eta_2 + \bar{k}_{12} \bar{\eta}_2) \quad (\text{II-3-18})$$

$$\frac{\bar{\nabla}_{R_1} \psi}{\psi} \approx \frac{\bar{\nabla}_r \psi}{\psi} = i\bar{k}_1 + \alpha_3 \frac{{}_1F_1(i\alpha_3 + 1, 2, -i(k_{12} \eta_2 + \bar{k}_{12} \bar{\eta}_2))}{{}_1F_1(i\alpha_3, 1, -i(k_{12} \eta_2 + \bar{k}_{12} \bar{\eta}_2))} \bar{\nabla}_r (k_{12} \eta_2 + \bar{k}_{12} \bar{\eta}_2) \quad (\text{II-3-19})$$

$$\frac{\bar{\nabla}_r \xi}{\xi} = i\bar{k}_2 + \alpha_2 \frac{{}_1F_1(i\alpha_2 + 1, 2, -i(k_2 \eta_2 + \bar{k}_2 \bar{\eta}_2))}{{}_1F_1(i\alpha_2, 1, -i(k_2 \eta_2 + \bar{k}_2 \bar{\eta}_2))} \bar{\nabla}_r (k_2 \eta_2 + \bar{k}_2 \bar{\eta}_2) \quad (\text{II-3-20})$$

$$\frac{\bar{\nabla}_{R_1} \psi}{\psi} = i\bar{k}_1 + \alpha_1 \frac{{}_1F_1(i\alpha_1 + 1, 2, -i(k_1 \eta_1 + \bar{k}_1 \bar{\eta}_1))}{{}_1F_1(i\alpha_1, 1, -i(k_1 \eta_1 + \bar{k}_1 \bar{\eta}_1))} \bar{\nabla}_r (k_1 \eta_1 + \bar{k}_1 \bar{\eta}_1) \quad (\text{II-3-21})$$

L'approximation :

$$\frac{{}_1F_1(i\alpha_i + 1, 2, -i(k_i r_i + \bar{k}_i \bar{r}_i))}{{}_1F_1(i\alpha_i, 1, -i(k_i r_i + \bar{k}_i \bar{r}_i))} \xrightarrow{r_i \rightarrow \infty} 0 \quad (\text{II-3-22})$$

nous permet de réécrire l'équation (II-3-17) sous la forme :

$$\left(-\frac{1}{2m_{23}} \frac{\bar{V}_{\bar{r}_2}^2 \chi}{\chi} - \frac{1}{2M_1} \frac{\bar{V}_{\bar{k}_1}^2 \chi}{\chi} - E_f \right) - \frac{1}{m_{23}} \left[-\bar{k}_2^2 + 2i\bar{k}_2 \frac{\bar{V}_{\bar{r}_2} \chi}{\chi} \right] - \frac{1}{M_1} \left[-\bar{k}_1^2 + 2i\bar{k}_1 \frac{\bar{V}_{\bar{r}_1} \chi}{\chi} \right] + E_f + E_f = 0 \quad (\text{II-3-23})$$

En faisant l'approximation $E = \frac{\bar{k}_1^2}{2M_1} + \frac{k_2^2}{2m_{23}}$ on peut dire que la solution de cette équation

est:

$$\chi = e^{-i\bar{k}_2 \bar{r}_2 - i\bar{k}_1 \bar{R}_1} \quad (\text{II-3-24})$$

La relation $\bar{k}_{12} \bar{r}_{12} + \bar{K}_3 \bar{R}_3 = \bar{K}_2 \bar{R}_2 + \bar{k}_1 \bar{r}_1 = \bar{k}_2 \bar{r}_2 + \bar{K}_1 \bar{R}_1$ (appendice C) et les relations (II-3-9), (II-3-13) et (II-3-24) permettent finalement d'aboutir à l'expression de la fonction d'onde normalisée :

$$\begin{aligned} \Psi_f &= (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{k}_1 \bar{r}_1} \Gamma(1-i\alpha_1) e^{-\pi\alpha_1/2} {}_1F_1(i\alpha_1, 1, -i(k_1 r_1 + \bar{k}_1 \bar{r}_1)) \\ &\times (2\pi)^{-3/2} e^{i\bar{k}_2 \bar{r}_2} \Gamma(1-i\alpha_2) e^{-\pi\alpha_2/2} {}_1F_1(i\alpha_2, 1, -i(k_2 r_2 + \bar{k}_2 \bar{r}_2)) \\ &\times \Gamma(1-i\alpha_3) e^{-\pi\alpha_3/2} {}_1F_1(i\alpha_3, 1, -i(k_{12} r_{12} + \bar{k}_{12} \bar{r}_{12})) \end{aligned} \quad (\text{II-3-25})$$

On peut écrire Ψ_f sous une forme plus condensée :

$$\Psi_f(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \prod_{i=1}^3 \Psi_c^i(\bar{r}_i, \bar{k}_i, \alpha_i, \varepsilon_i) \quad (\text{II-3-26})$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \alpha_1 = \frac{-Z}{k_1}, \alpha_2 = \frac{-Z}{k_2}, \alpha_3 = \frac{1}{k_3} = \frac{1}{k_{12}} \\ \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1, \varepsilon_3 = 0 \quad \bar{r}_3 = \bar{r}_2 - \bar{r}_1 \quad \bar{k}_3 = \frac{\bar{k}_2 - \bar{k}_1}{2} \end{cases} \quad (\text{II-3-27})$$

$$\text{et } \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \varepsilon_j) = (2\pi)^{-3/2} e^{-\frac{\pi\alpha_j}{2}} \Gamma(1-i\alpha_j) {}_1F_1(i\alpha_j, 1, -i[\bar{r}_j \bar{k}_j + r_j k_j]) \quad (\text{II-3-28})$$

4- NORMALISATION DANS UNE BOITE DE LA FONCTION DU DOUBLE CONTINUUM:

La fonction d'onde Ψ_f n'est pas de carré sommable. Donc rigoureusement on ne peut pas calculer sa norme. Pour palier à ce problème on suppose, comme pour la normalisation de l'onde plane, qu'on intègre sur un volume V_0 fini. Le traitement du problème normalisation fera l'objet de ce paragraphe.

La norme de la fonction Ψ_f est donnée par :

$$\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = \int d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \prod_{j=1}^3 \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \epsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \epsilon_j) \quad (\text{II-4-1})$$

On introduit deux nouvelles intégrales en partant de la fonction δ .

$$\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = (2\pi)^{-3} \int d\bar{p} \prod_{j=1}^3 \int d\bar{r}_j e^{\pm i\bar{p}\bar{r}_j} \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \epsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \epsilon_j) \quad (\text{II-4-2})$$

Le produit porte sur trois intégrales indépendantes qu'on peut calculer en multipliant les termes de chaque intégrale par $\frac{e^{-x r_j}}{r_j}$ avec $x \rightarrow 0$ et en dérivant par rapport à x . Ceci veut

dire qu'on peut réécrire le terme du produit sous la forme :

$$G_j = - \lim_{x \rightarrow 0} \frac{d}{dx} C_j I_j \quad (\text{II-4-3})$$

L'expression de C_j est donnée dans l'appendice D et I_j est donnée par :

$$I_j = \int d\bar{r}_j e^{i[\epsilon, \bar{k}, -\epsilon, \bar{k}, \pm \bar{p}]\bar{r}_j} {}_1F_1(i\alpha_j, 1, -i[\bar{r}_j \bar{k}_j + r_j k_j]) {}_1F_1(-i\alpha'_j, 1, +i[\bar{r}'_j \bar{k}'_j + r_j k'_j]) \quad (\text{II-4-4})$$

Le développement de la fonction hypergéométrique sous sa forme intégrale (M. Abramowitz and I. A. Stegun)⁽¹⁾ nous permet de réécrire I_j sous la forme :

$$I_j = \frac{1}{B(i\alpha_j, 1 - i\alpha_j) B(-i\alpha'_j, 1 + i\alpha'_j)} \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 t_1^{i\alpha_j - 1} (1 - t_1)^{-i\alpha_j} t_2^{i\alpha'_j - 1} (1 - t_2)^{-i\alpha'_j} g(t_1, t_2) \quad (\text{II-4-5})$$

où $g(t_1, t_2)$ est une intégrale sur \bar{r}_j et qui donne une expression qui dépend de t_1 et t_2 . I_j se réduit à une fonction hypergéométrique ${}_2F_1$ telle que:

$$I_j = 2\pi e^{-\pi\alpha} \alpha^{i\alpha_j - i\alpha'_j - 1} \gamma^{-i\alpha} (\alpha + \beta)^{-i\alpha} {}_2F_1\left(i\alpha_j, -i\alpha'_j, 1, 1 - \frac{\beta\gamma - \alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)}\right) \quad (\text{II-4-6})$$

La dérivée de I_j par rapport à x permet d'écrire G_j sous la forme d'une somme de deux termes :

$$G_j = G_{j1} + G_{j2}. \quad (\text{II-4-7})$$

L'intégrale sur \bar{p} montre que le premier terme a pour valeur $(2\pi)^3$, alors que le deuxième est négligeable (voir appendice D). Ce qui nous permet d'écrire: $\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = 1$.

5) CONCLUSION

Nous avons obtenu dans ce chapitre une fonction d'onde corrélée suivant la méthode B.B.K décrivant le double continuum d'un champ coulombien. Cette fonction représente à ce jour la solution approchée la mieux adaptée à l'étude du problème d'ionisation simple et double^(8,55,56) car elle contient intrinsèquement la corrélation électronique entre toutes les particules émergentes.

CHAPITRE III : APPLICATION DE LA FONCTION D'ONDE CORRELE DU DOUBLE CONTINUUM AU PROBLEME DE L'IONISATION PAR IMPACT ELECTRONIQUE DE L'HYDROGENE (1S ET 2S)

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté une méthode de détermination de la fonction d'onde approchée du double continuum des deux électrons résultant de l'ionisation d'un atome par un électron. Depuis son utilisation pour la première fois par Brauner et collaborateurs ^(13,16)(1989) pour le calcul de la section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène par un électron, d'autres travaux ont suivi. Ainsi Berakdar et collaborateurs (1990) ⁽⁸⁾ ont confirmé l'importance de la corrélation entre différentes particules émergentes. La corrélation est encore plus importante lorsqu'on considère les domaines d'énergies moyennes ou faibles ⁽¹²⁾, qui sont convenablement décrit par ce type de fonction d'onde. En 1991 Brauner et collaborateurs ⁽¹⁴⁾ ont appliqué cette fonction d'onde au problème de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par un positron. Ils ont montré que l'existence de la corrélation implique une divergence de la section efficace dans le cas où le projectile et l'électron sortent avec la même énergie et dans la même direction, alors que cette section efficace s'annule dans les mêmes conditions si le projectile est un électron. Ce type de fonction a été également utilisé lors de l'étude de l'ionisation simple de l'Hélium par un électron ⁽¹⁵⁾, par un proton et un antiproton ⁽⁷⁾. Joulakian et collaborateurs l'ont appliqué à la double ionisation de l'hélium ^(55,56) prenant pour l'état fondamental des fonctions d'onde de type Hylleraas ⁽⁵¹⁾. L'ionisation des gaz rares a été également étudiée utilisant la fonction d'onde BBK pour décrire la corrélation entre les électrons éjectés ^(28,49).

Le but principal de notre étude dans ce chapitre est d'étendre l'application de cette fonction à l'ionisation de l'hydrogène dans son état métastable (2s), ceci étant un premier pas pour le passage à l'étude de l'ionisation d'atomes alcalins.

1- ETUDE DE L'IONISATION DE H(1s) :

La comparaison entre les résultats théoriques et les mesures de sections efficaces différentielles d'ionisation en coïncidence représente un test pour les différents modèles. Le problème est simplifié quand on considère l'ionisation de l'hydrogène puisque la fonction d'onde de l'état fondamental est exactement connue, ce qui n'est pas le cas pour l'état final (système à trois corps). Plusieurs modèles ont été proposés pour tenir compte

de l'interaction coulombienne entre les particules chargées. La seconde approximation de Born, qui introduit le deuxième terme de la série de Born (équation (I-4-4)), considère que dans un premier temps l'atome est excité à un état intermédiaire E_n . L'électron incident transfère un moment $\vec{K}_0 - \vec{K}$, et dans un deuxième temps lorsque l'atome est ionisé, l'électron atomique est éjecté avec un moment \vec{K}_2 . Puisqu'on ne peut détecter que l'électron éjecté après ionisation il faut sommer sur tous les états intermédiaires et intégrer sur tous les moments \vec{K} . Pour une simplification Byron et al⁽²⁰⁾ (1980) ont proposé une approximation (simplified second Born (SB2)) qui consiste à remplacer l'énergie E_n par une énergie moyenne \bar{W} ce qui permet de faire la somme sur les états intermédiaires grâce à la relation de fermeture. Le troisième terme de la série de Born est difficile à calculer. Une approximation appelée (EBS) proposée par Byron et al⁽²²⁾ (1983) consiste à remplacer ce troisième terme par l'amplitude de Glauber. Ils ont montré^(21,23) que ce terme est faible dans le cas de l'ionisation de l'hydrogène avec un faible moment de transfert. La prise en compte des autres termes de la série de Born devient de plus en plus difficile, l'approximation de Glauber modifiée ou EBS^(3,4,53) permet de le faire. Curran et al (1987)⁽²⁷⁾ ont modifié l'état initial dans le cadre de l'approximation CPC (coupled pseudostate calculation). Ces différentes approximations donnent plus ou moins bons accords avec les expériences qui ont été faites dans ce domaine, parmi lesquelles nous citons celle de Weigold et al (1977)⁽⁹²⁾, Lohman et al(1984)⁽⁶⁵⁾, Ehrhardt et al (1985)⁽³⁵⁾.

-a- Modèle théorique

La section efficace différentielle par rapport aux angles solides des deux électrons sortant et par rapport à l'énergie de l'un d'entre eux est donnée par la relation (I-4-14).

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE} = (2\pi)^4 \frac{K_1 K_2}{K_i} |T_{if}|^2 \quad (\text{III-1-1})$$

T_{if} est l'élément de matrice T, il est donné par :

$$|T_{if}|^2 = \frac{1}{4}|p+q|^2 + \frac{3}{4}|p-q|^2 \quad (\text{III-1-2})$$

où p est l'amplitude de diffusion directe et q l'amplitude de diffusion d'échange. Elles sont reliées par la relation : $p(\vec{K}_1, \vec{K}_2) = q(\vec{K}_2, \vec{K}_1)$.

$$\text{avec : } p = \langle \psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{III-1-3})$$

Dans la situation où le projectile possède une vitesse supérieure à celle des particules de la cible tout phénomène d'échange entre lui et l'électron atomique peut être exclu. La fonction d'onde du système peut donc être donnée par:

$$\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{K}_1 \cdot \vec{r}_1} \Phi_{1s}(\vec{r}_2) \quad (\text{III-1-4})$$

$\Phi_{1s}(\vec{r}_2)$ est la fonction d'onde de l'électron dans l'état fondamental 1s, elle est donnée par:

$$\Phi_{1s}(\vec{r}_2) = \frac{e^{-r_2}}{\sqrt{\pi}} \quad (\text{I-1-5})$$

La fonction d'onde de l'état final est donnée par:

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = M e^{i\vec{K}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_2} \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{III-1-6})$$

avec :

$$M = (2\pi)^{-3} \Gamma(1-i\alpha_1) \Gamma(1-i\alpha_2) \Gamma(1-i\alpha_3) e^{-\pi \frac{\alpha_1}{2}} e^{-\pi \frac{\alpha_2}{2}} e^{-\pi \frac{\alpha_3}{2}} \quad (\text{III-1-7})$$

et :

$$\begin{aligned} \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & {}_1F_1\left[i\alpha_1, 1, -i(\vec{K}_1 \cdot \vec{r}_1 + K_1 r_1)\right] \times \\ & {}_1F_1\left[i\alpha_2, 1, -i(\vec{K}_2 \cdot \vec{r}_2 + K_2 r_2)\right] \times \\ & {}_1F_1\left[i\alpha_3, 1, -i(\vec{K}_3 \cdot \vec{r}_2 + K_3 r_{21})\right] \end{aligned} \quad (\text{III-1-8})$$

V est le potentiel coulombien d'interaction entre l'électron incident et le noyau d'une part et l'électron atomique d'autre part. Pour l'hydrogène :

$$V = -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \quad (\text{III-1-9})$$

Ainsi on peut décomposer p en deux termes :

$$p = p_1 + p_2$$

avec :

$$p_1 = \left\langle \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{1}{r_1} \right| \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{III-1-10})$$

et

$$p_2 = \left\langle \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{III-1-11})$$

Le développement de p_1 donne :

$$p_1 = -\frac{1}{(2\pi)^2 \sqrt{2}} M^* \int \frac{d^3 r_1}{r_1} d^3 r_2 e^{-i\vec{K}_1 \vec{r}_1} e^{i\vec{K}_2 \vec{r}_2} \chi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{K}_1 \vec{r}_1} e^{-\vec{r}_2} \quad (\text{III-1-12})$$

qui peut être exprimé en termes d'une intégrale que nous présentons sous la forme suivante:

$$W(\vec{K}_1, \vec{K}_2, \vec{K}_3, \vec{P}_1, \vec{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \int \frac{d^3 r}{r} r' {}_1F_1[-i\alpha_1, 1, i(\vec{K}_1 \vec{r} + K_1 r)] e^{-i\vec{K}_1 \vec{r} - i\vec{P}_1 \vec{r} - \lambda_1 r} \times \\ {}_1F_1[-i\alpha_2, 1, i(\vec{K}_2 \vec{r}' + K_2 r')] e^{-i\vec{K}_2 \vec{r}' - i\vec{P}_2 \vec{r}' - \lambda_2 r'} \times \\ {}_1F_1[-i\alpha_3, 1, i(\vec{K}_3 (\vec{r} + \vec{r}') + K_{ba} |\vec{r} + \vec{r}'|)] e^{-\lambda_3 |\vec{r} + \vec{r}'|} \quad (\text{III-1-13})$$

Pour exprimer p_1 en fonction de W on effectue le changement de variables :

$$\vec{r}_1 = \vec{r} \\ \vec{r}_2 = -\vec{r}'$$

$$\text{on aura alors } d^3 r_1 d^3 r_2 = \left| \frac{D(r_1, r_2)}{D(r, r')} \right| d^3 r d^3 r'$$

où $\frac{D(r_1, r_2)}{D(r, r')}$ est le jacobien de la transformation.

Pour calculer le jacobien on exprime \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r} et \vec{r}' en fonction des coordonnées cartésiennes. Tenant compte des changements des bornes d'intégration on aura alors :

$$p_1 = \frac{2}{(2\pi)^2 \sqrt{2}} M^* W(\vec{K}_1, -\vec{K}_2, \vec{K}_3, -\vec{K}_1, \vec{0}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, 1, 0) \quad (\text{III-1-14})$$

de la même façon on peut calculer p_2 .

$$p_2 = \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^2} M^* \int \frac{d^3 r_1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} d^3 r_2 e^{-i\vec{K}_1 \vec{r}_1} e^{i\vec{K}_2 \vec{r}_2} \chi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{K}_1 \vec{r}_1} e^{-\vec{r}_2} \quad (\text{III-1-15})$$

Le changement de variable

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{r}' = \vec{r}_2$$

nous permet, de la même manière que pour p_1 , d'exprimer p_2 en fonction de W . Ainsi :

$$p_2 = \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^2} M^* W(-\bar{K}_3, \bar{K}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_3 + \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \alpha_3, \alpha_2, \alpha_1, 0, 1, 0) \quad (\text{III-1-16})$$

Finalement on peut écrire en utilisant les équations (III-1-13) et (III-1-15) sous la forme :

$$p = \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^2} M^* \left[W(\bar{K}_1, -\bar{K}_2, \bar{K}_3, -\bar{K}_i, \bar{0}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, 1, 0) - W(-\bar{K}_3, \bar{K}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_3 + \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \alpha_3, \alpha_2, \alpha_1, 0, 1, 0) \right] \quad (\text{III-1-17})$$

q peut être calculé à partir de p en changeant \bar{K}_1 en \bar{K}_2 et inversement.

W peut être ramené (voir appendice E) à la forme :

$$W(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \bar{K}_3, \bar{P}_1, \bar{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = I(x=0) + \frac{e^{i\pi\alpha_3} - e^{-i\pi\alpha_3}}{2\pi i} \times \int_{+\infty}^{-\infty} dy \frac{e^y}{1+e^y} e^{i\alpha_3 y} (I(x) - I(x=0)) \quad (\text{III-1-18})$$

$$\text{où } x = \frac{1}{1+e^y}$$

et

$$I(x) = (4\pi)^2 \frac{\partial^2}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} \int_0^{+\infty} \frac{dv}{C} \left(\frac{C}{C+A_1} \right)^{-i\alpha_1} \left(\frac{C}{C+A_2} \right)^{-i\alpha_2} \times {}_2F_1 \left(-i\alpha_1, -i\alpha_2, 1, \frac{A_1 A_2 - BC}{(A_1 + C)(A_2 + C)} \right) \quad (\text{III-1-19})$$

avec $\beta_3 = \lambda_3 - i K_3 X$, A_1, A_2, B et C étant donnés dans l'appendice E.

La détermination de $I(x)$ nécessite la dérivation par rapport à λ_2 et β_3 que nous effectuons en suivant la procédure développée par Joulakian et al ⁽⁵⁷⁾. On pose :

$$D_n = \frac{1}{C} \left(\frac{C}{d_1} \right)^{a+n} \left(\frac{C}{d_2} \right)^{b+n} {}_2F_1(a+n, b+n, c+n, z) \quad (\text{III-1-20})$$

dans notre cas $n=0$, $a=-i\alpha_1$, $b=-i\alpha_2$, $d_1 = C + A_1$, $d_2 = C + A_2$, $z = \frac{d_3}{d_1 d_2}$ et

$$d_3 = A_1 A_2 - BC.$$

En utilisant la relation :

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} {}_2F_1(a+n, b+n, c+n, z(\lambda)) = z'(\lambda) {}_2F_1(a+n+1, b+n+1, c+n+1, z(\lambda)) \quad (\text{III-1-21})$$

nous pouvons écrire :

$$\frac{\partial D_0}{\partial \beta_3} = \Omega(0,3) D_0 + \beta(0,3) D_1 \quad (\text{III-1-22})$$

La deuxième composante de Ω et β qui est 3 indique qu'il s'agit d'une dérivation par rapport à β_3 .

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 D_0}{\partial \beta_3 \partial \lambda_2} = & \left[\frac{\partial \Omega(0,3)}{\partial \beta_3} + \Omega(0,3) \Omega(0,2) \right] D_0 + \left[\Omega(0,3) \beta(0,2) + \frac{\partial \beta(0,3)}{\partial \lambda_2} + \beta(0,3) \Omega(1,2) \right] D_1 \\ & \times \beta(0,3) \beta(1,2) D_2 \end{aligned} \quad (\text{III-1-23})$$

Les expressions de $\Omega(i, j)$, $\beta(i, j)$ et de leurs dérivées sont données dans l'appendice E.

-b- RESULTATS ET INTERPRETATIONS :

La section efficace différentielle, pour une valeur d'énergie incidente déterminée, dépend de quatre paramètres indépendants, les deux angles polaires θ_1 et θ_2 , l'angle azimutal φ_2 et l'énergie d'éjection E_2 . Le plan formé par les vecteurs \vec{K}_i et \vec{K}_1 est pris comme référence (fig. 2 du chap. I).

L'étude de l'ionisation peut être faite en variant un ou plusieurs de ces paramètres. Les courbes représentant la variation de la section efficace en fonction de l'angle d'éjection représentent deux maximums. Le premier dans la direction du moment du transfert $\vec{k} = \vec{K}_i - \vec{K}_1$ est appelé pic binaire et le second dans la direction opposée est appelé pic de recul. La figure (III-1-1) représente la section efficace différentielle où $(\sigma^5, \theta_2, \varphi_2)$ sont pris comme coordonnées polaires. L'énergie incidente est fixée à 250eV, et l'électron éjecté sort avec une énergie de 5eV. L'angle de diffusion $\theta_1=3^\circ$. Notons que le maximum de la courbe se trouve dans le plan formé par \vec{K}_i et \vec{K}_1 c'est à dire pour $\varphi_2=0^\circ$.

Les figures (III-1-2) et (III-1-3) représentent la section efficace en coordonnées polaires (σ^5, θ_2) en fonction de l'angle de l'électron éjecté. L'énergie incidente est de 54.4eV et l'énergie éjectée de 5 eV les angles de diffusion sont respectivement de 16° et 23° . Les pics binaire et de recul sont présents mais la symétrie par rapport à direction de transfert n'est pas vérifiée. Remarquons que l'amplitude de la section efficace diminue quand θ_1

augmente. La comparaison avec l'expérience de Schlemmer et al et Ehrhardt et al montre un bon accord entre les résultats.

Les figures (III-1-4) et (III-1-5) représentent également la section efficace en fonction de θ_2 en coordonnées polaires dans une géométrie coplanaire. L'énergie incidente est $E_i=150$ eV, l'énergie éjectée est $E_2=3$ eV. L'angle de diffusion a successivement pour valeurs 4 et 16°. On remarque également ici un très bon accord avec les mesures de Schlemmer et al et Ehrhardt et al qui sont données sur une échelle absolue, elles sont normalisées par rapport à la force d'oscillateur généralisée.

Les figures (III-1-6), (III-1-7) et (III-1-8) sont semblables aux figures (III-1-4) et (III-1-5) mais ici l'énergie de l'électron éjecté est fixée à 5 eV et $\theta_1=4, 10$ et 16° successivement. Nos résultats sont en bon accord avec les expériences de Schlemmer et al et Ehrhardt et al La comparaison entre les figures (III-1-3) et (III-1-8) montrent que la section efficace augmente avec l'énergie incidente lorsqu'on fixe tous les autres paramètres de la collision.

La figure (III-1-9) représente la variation de la section efficace différentielle en fonction des énergies des électrons éjecté et diffusé pour un angle de diffusion de 5° et un angle d'éjection de 285°. Le maximum de la courbe se trouve dans la région des énergies moyennes (E_1 est de l'ordre de 200 eV) et lorsque E_2 est faible.

Les figures (III-1-10), (III-1-11) et (III-1-12) représentent la variation de la section efficace en fonction de l'angle de l'électron éjecté. Son énergie est légèrement plus grande que les précédentes $E_2=50$ eV. θ_1 prend successivement pour valeurs 15, -20 et -25°. L'accord est très bon avec l'expérience de Weigold et al⁽⁹²⁾ (1977) moyennant une constante de normalisation. On peut remarquer la disparition du pic de recul, l'amplitude du pic binaire diminue quand θ_1 augmente.

Ceci est également visible dans les figures (III-1-13) et (III-1-14) qui représentent la section efficace en fonction de l'angle de diffusion pour $E_i=150$ eV et $\theta_2 = -60$ et 150° successivement. Le maximum de la courbe se trouve dans la région des angles de diffusion très faibles et diminue de part et d'autre de ces valeurs. Nos résultats sont comparés aux résultats expérimentaux de Schlemmer et Ehrhardt⁽³⁵⁾ et à ceux obtenus par la méthode des états couplés de Curran et al⁽²⁷⁾.

Nous avons systématiquement étudié l'influence de l'échange électronique sur nos résultats. On remarque qu'elle est pratiquement nulle pour les hautes et moyennes énergies. Ce n'est que pour les faibles énergies avec un grand angle de diffusion qu'elle devient importante. La figure (III-1-15) représente la variation de la section efficace en fonction de l'angle θ_2 dans le cas d'une diffusion asymétrique. L'énergie incidente est de 54.4 eV, l'énergie de l'électron éjecté est de 5 eV, l'angle de diffusion est fixé à 10 degrés. La courbe en ligne continue représente le résultat d'un calcul qui tient compte de l'échange et celle en ligne discontinue celui qui ne tient pas. La comparaison entre les deux courbes montre qu'il y a une légère différence au niveau des maximums, c'est à dire au niveau du lobe binaire et celui du recul. La courbe schématisée par des carrés représente les résultats expérimentaux obtenus par Schlemmer et al et Ehrhardt et al⁽³⁵⁾.

En haute énergie incidente le modèle BBK tend vers le modèle Projected Coulomb Wave First Born Approximation (PCWFBA), La figure (III-1-16) confirme ce résultat. Nous avons pris pour valeur de l'énergie incidente $E_1=5500\text{eV}$, celle de l'électron éjecté est $E_2=5\text{eV}$ et celle de l'angle de diffusion est $\theta_1=0.35^\circ$. L'accord entre les deux résultats est quasiment parfait. A plus faible énergie, la corrélation entre les électrons émergents est plus forte, le modèle CPWFBA n'en tient pas compte, au contraire le modèle BBK le fait, il donne donc des résultats plus proche de l'expérience. Nous avons fait une comparaison (figure (III-1-17)) entre les deux modèles dans le cas où la valeur de l'énergie incidente est $E_1=50\text{eV}$, l'électron éjecté à pour énergie $E_2=5\text{eV}$ et le diffusé sort dans la direction $\theta_1=5^\circ$. Les deux modèles donnent des résultats complètement différents. Contrairement au modèle CPWFBA, dans le modèle BBK l'amplitude du pic de recul est plus grande que celle du pic binaire. La direction du pic binaire dans le modèle CPWFBA est décalée de 10° par rapport au modèle BBK.

Les divers cas que nous avons étudié révèlent un excellent accord entre nos résultats et ceux des différentes mesures expérimentales. Ceci nous permet d'étendre notre procédure à l'ionisation de l'hydrogène dans son état (2s) et puis à celle du Lithium.

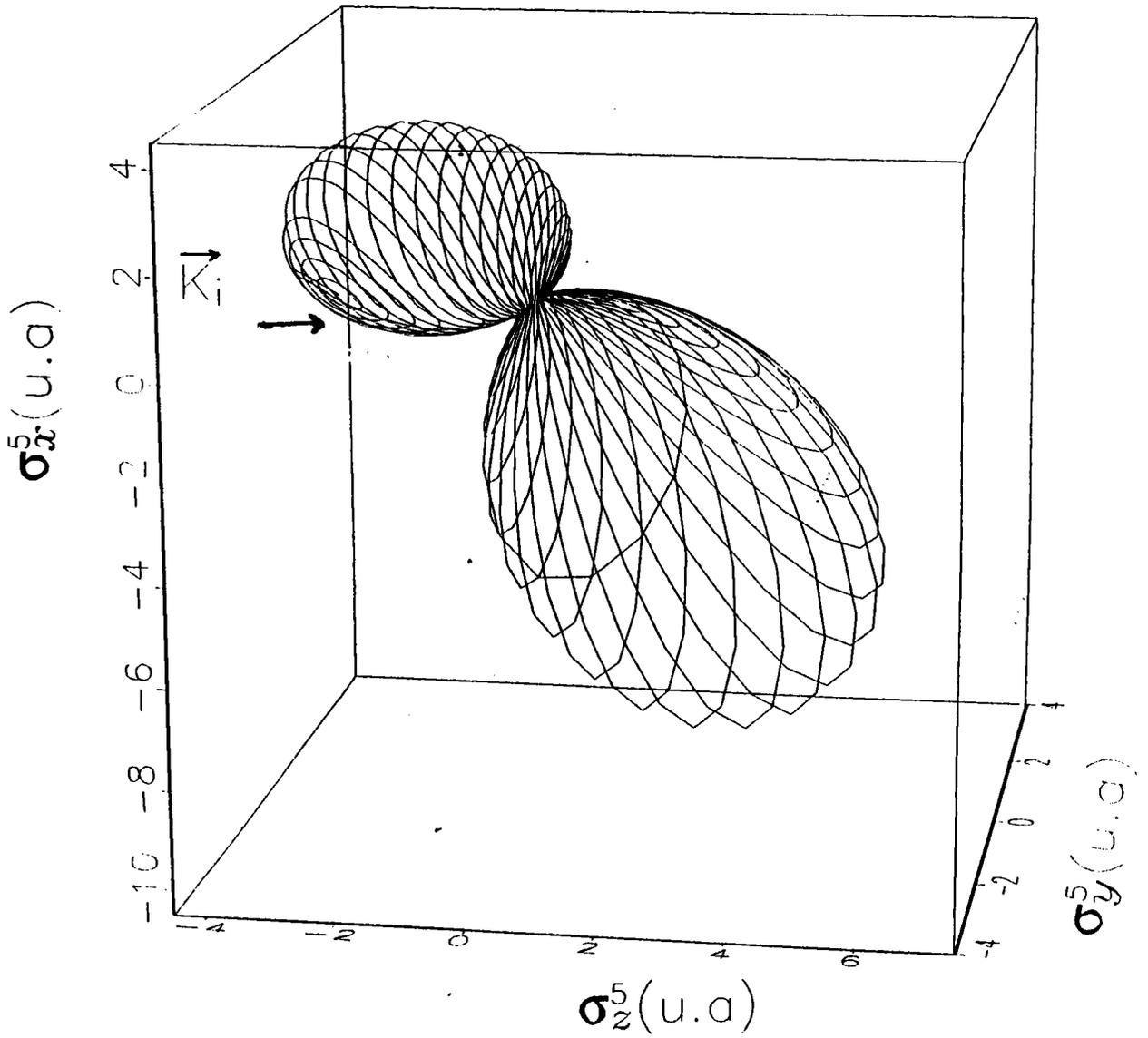


FIG. III-1-1. Section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène, à partir de l'état fondamental, par impact électronique en fonction des angles θ_2 et φ_2 .

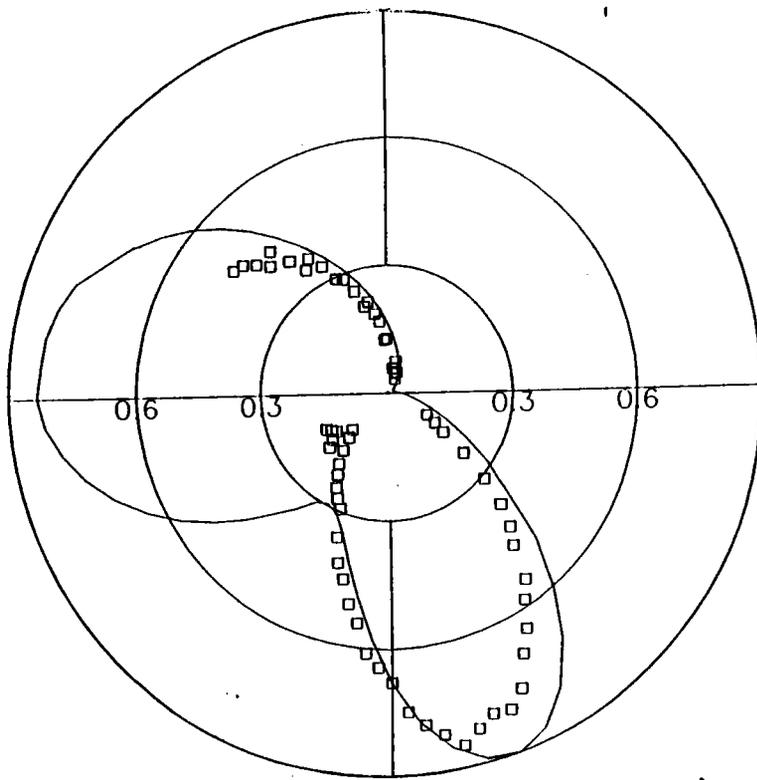


FIG. III-1-2. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_i=54.4$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=16^\circ$.

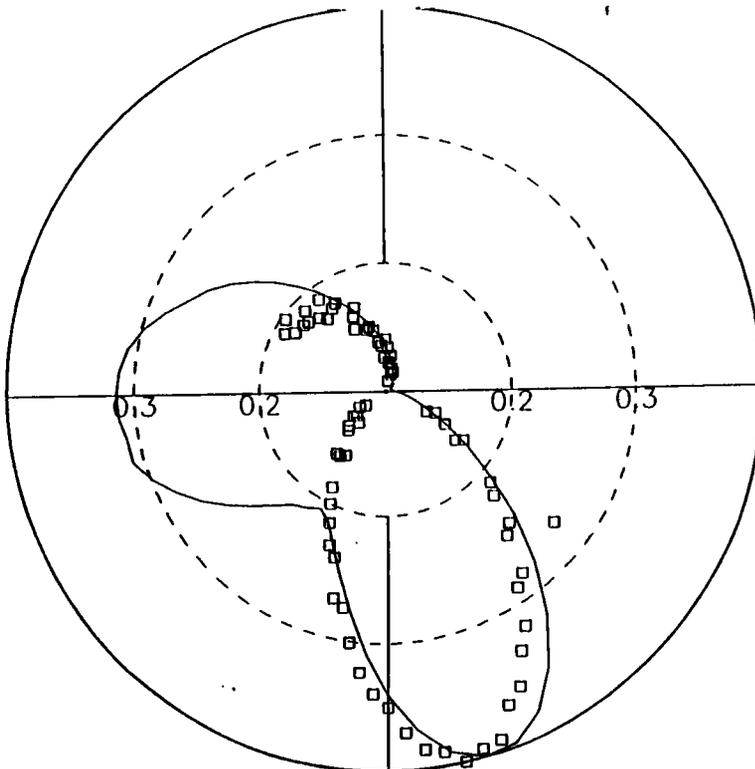


FIG. III-1-3. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_i=54.4$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=23^\circ$. —, modèle BBK; \square résultats des expériences de Ehrhardt.

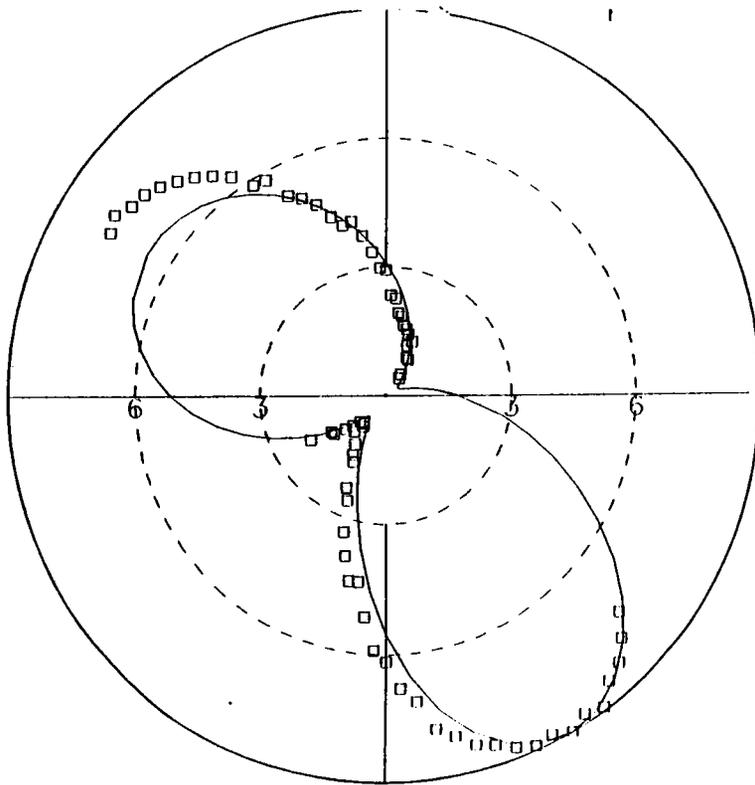


FIG. III-1-4. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=3$ eV et $\theta_1=4^\circ$. —, modèle BBK; \square résultats des expériences de Ehrhardt.

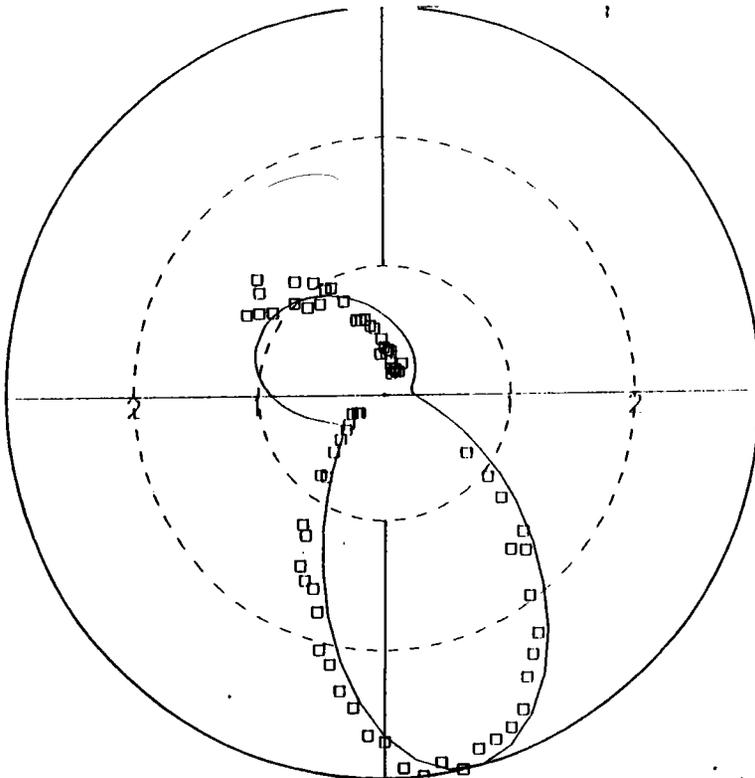


FIG. III-1-5. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=3$ eV et $\theta_1=16^\circ$. —, modèle BBK; \square résultats des expériences de Ehrhardt.

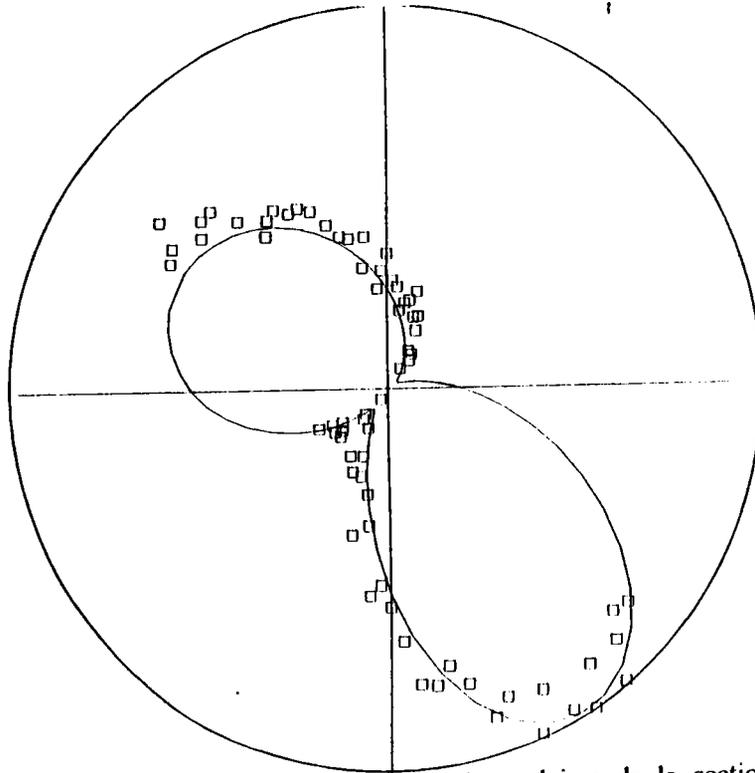


FIG. III-1-6. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=4^\circ$. —, modèle BBK; \square résultats des expériences de Ehrhardt.

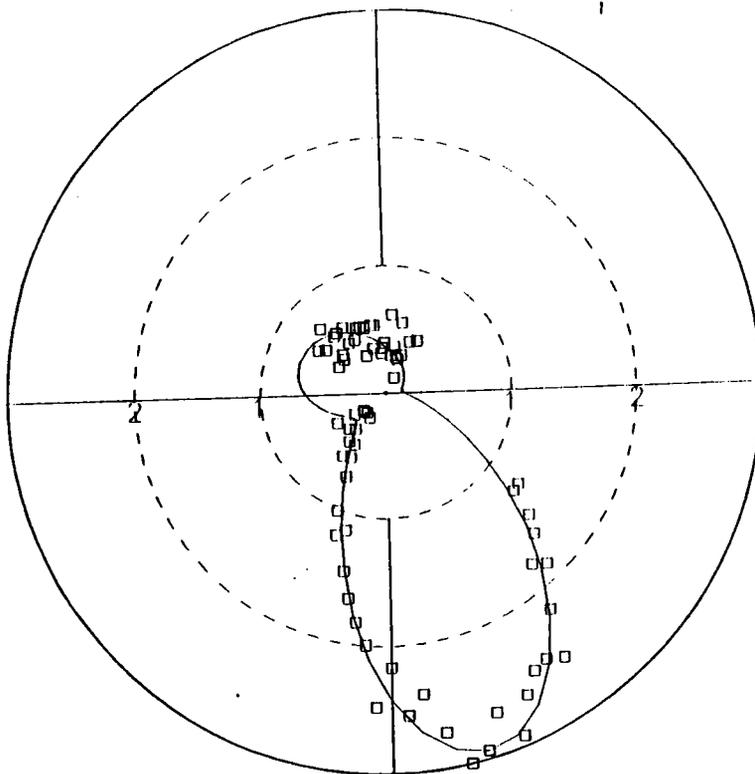


FIG. III-1-7. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=10^\circ$. —, modèle BBK; \square résultats des expériences de Ehrhardt.

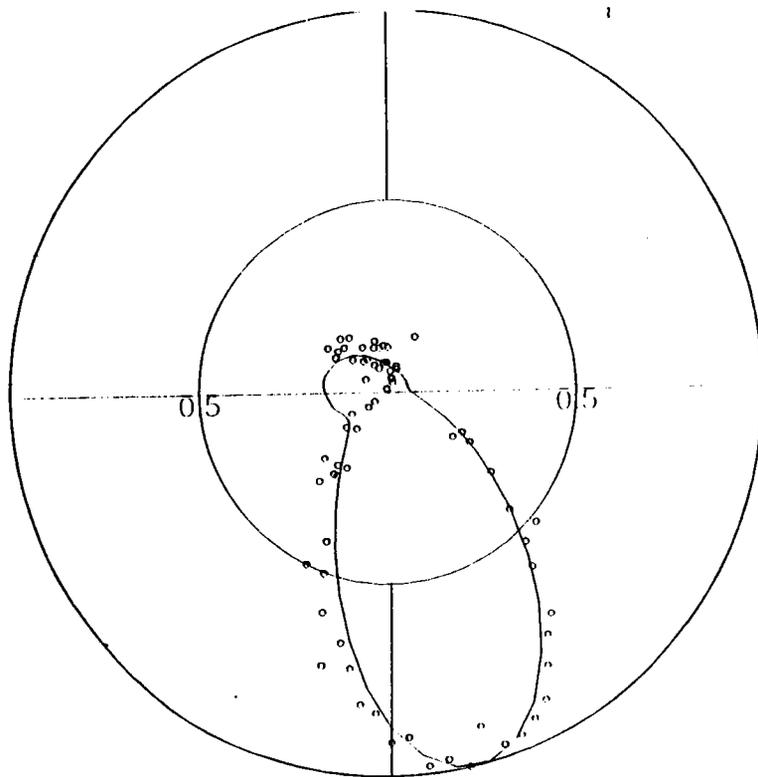


FIG. III-1-8. Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=16^\circ$. —, modèle BBK; o résultats des expériences de Ehrhardt.

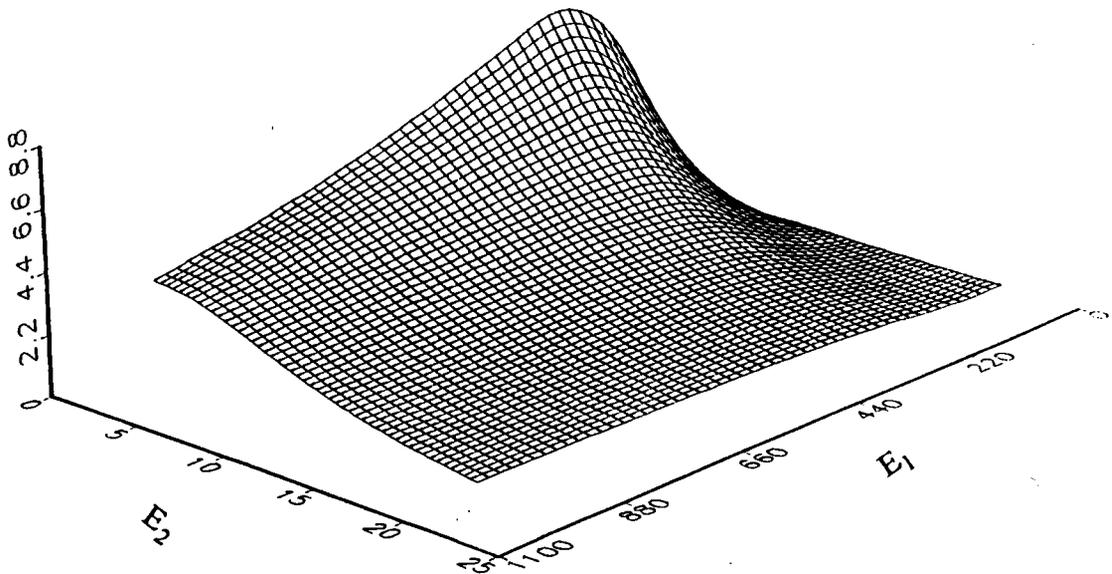


FIG. III-1-9. Variation de la section efficace différentielle en fonction des énergies E_1 et E_2 des électrons diffusé et éjecté pour des angles de diffusion et d'éjection fixés respectivement à $\theta_1=5^\circ$ et $\theta_2=285^\circ$.

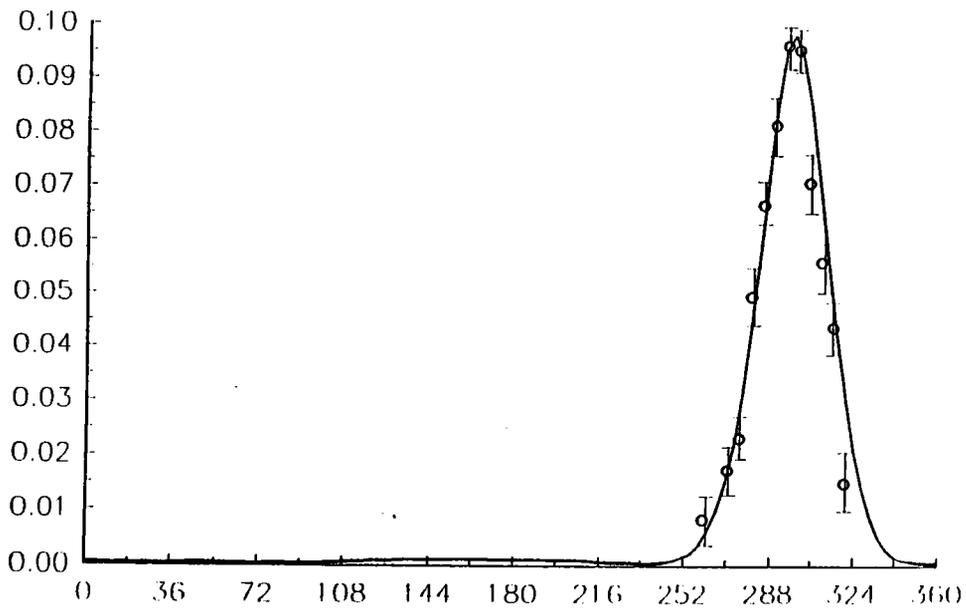


FIG. III-1-10. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=50$ eV, $\varphi_2=-180^\circ$, $\theta_1=-15^\circ$ et $\varphi_1=0^\circ$. —, modèle BBK; o résultats des expériences de Weigold et al.

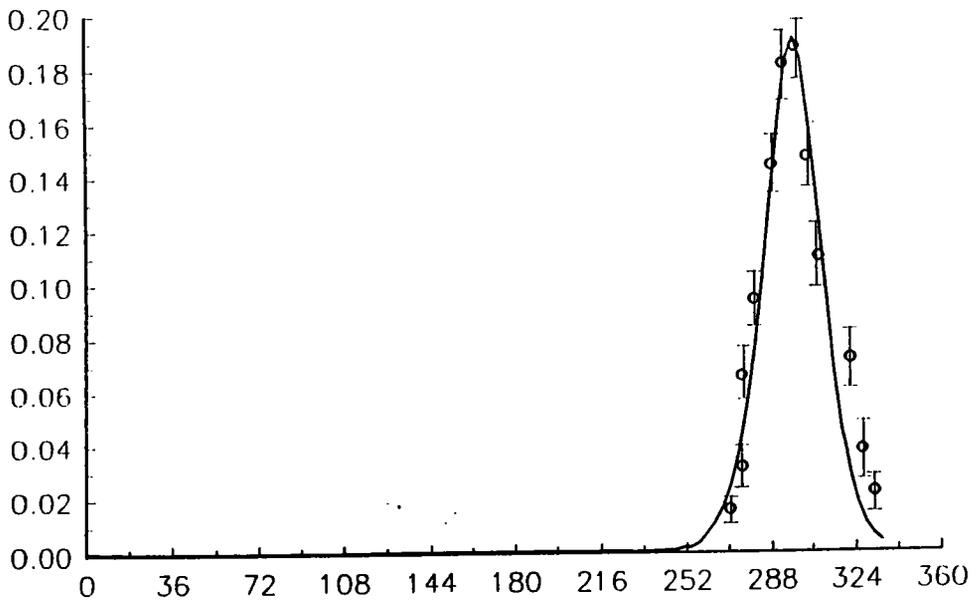


FIG. III-1-11. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=50$ eV, $\varphi_2=-180^\circ$, $\theta_1=-20^\circ$ et $\varphi_1=0^\circ$. —, modèle BBK; o résultats des expériences de Weigold et al.

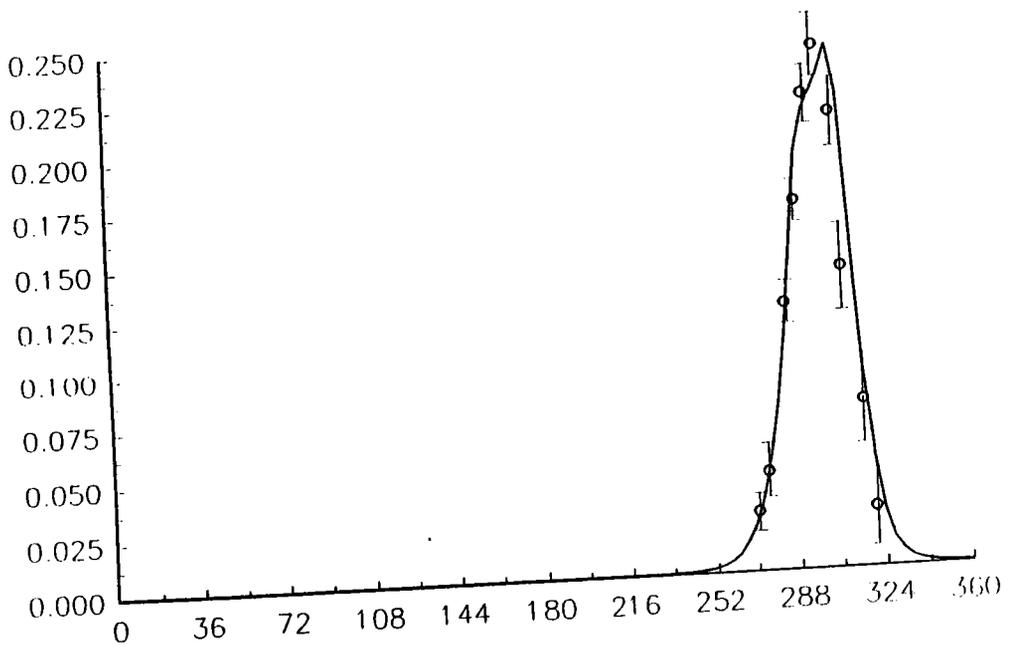


FIG. III-1-12. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_i=150$ eV, $E_2=50$ eV, $\phi_2=-180^\circ$, $\theta_1=-25^\circ$ et $\phi_1=0^\circ$. —, modèle BBK; o résultats des expériences de Weigold et al.

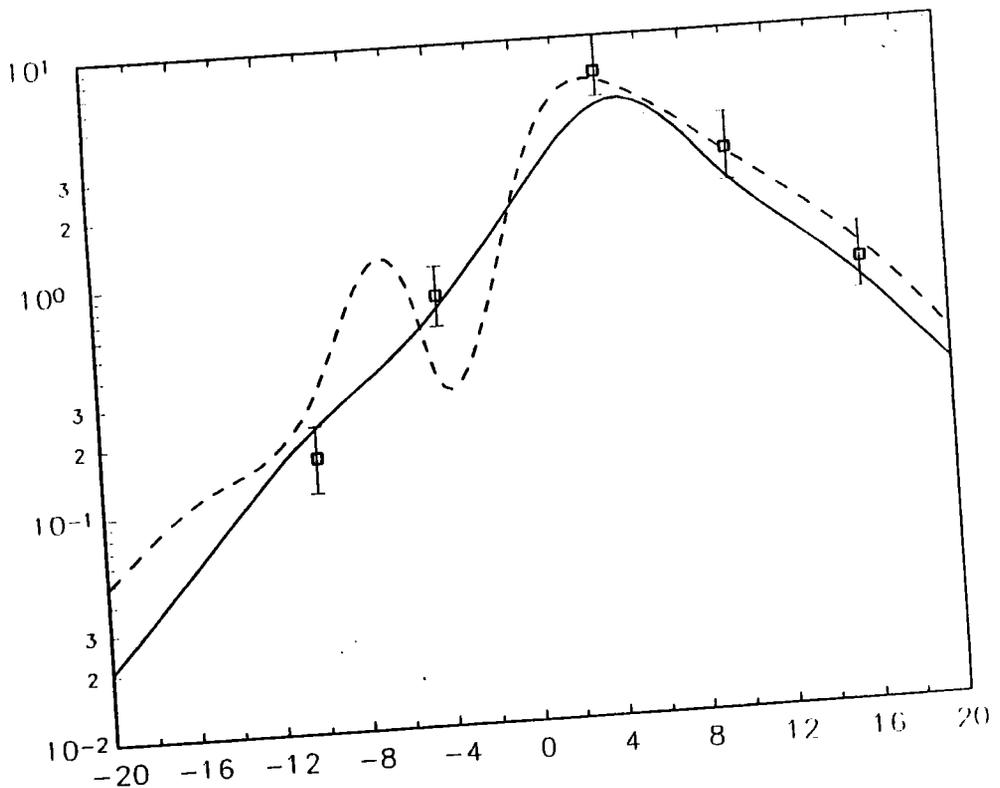


FIG. III-1-13. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_i=150$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=-60^\circ$. —, modèle BBK; ---- résultats de Curran et al par la méthode des états couplés; \square résultats des expériences de Schlemmer et Ehrhardt.

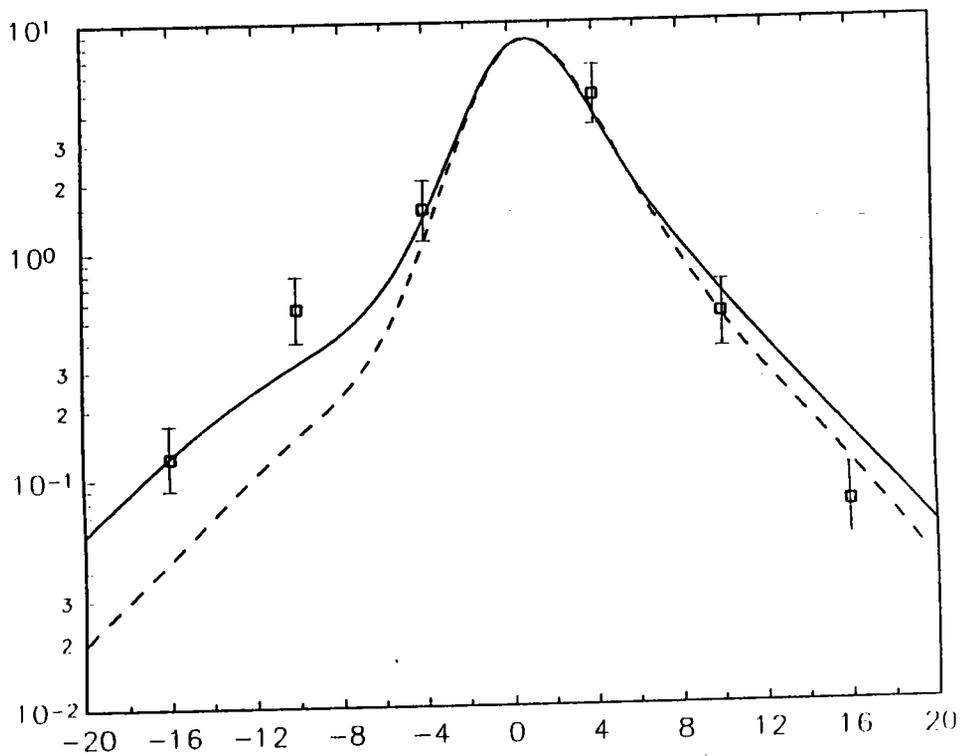


FIG. III-1-14. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1=150$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=150^\circ$. —, modèle BBK; ---- résultats de Curran et al par la méthode des états couplés; \square résultats des expériences de Schlemmer et Ehrhardt.

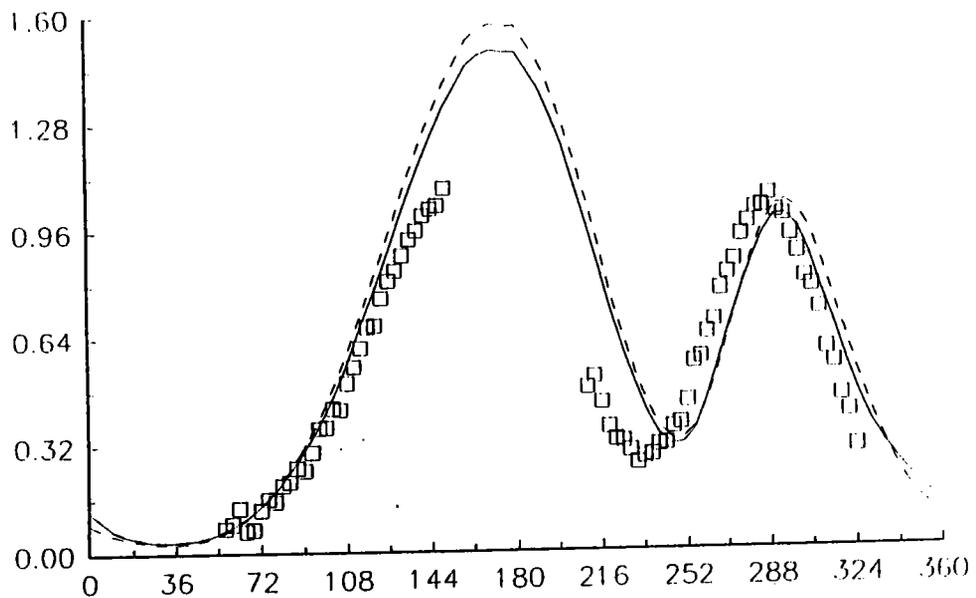


FIG. III-1-15. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1=54.4$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=10^\circ$. —, modèle BBK (sans échange); ---- modèle BBK (avec échange); \square résultats des expériences de Schlemmer et Ehrhardt.

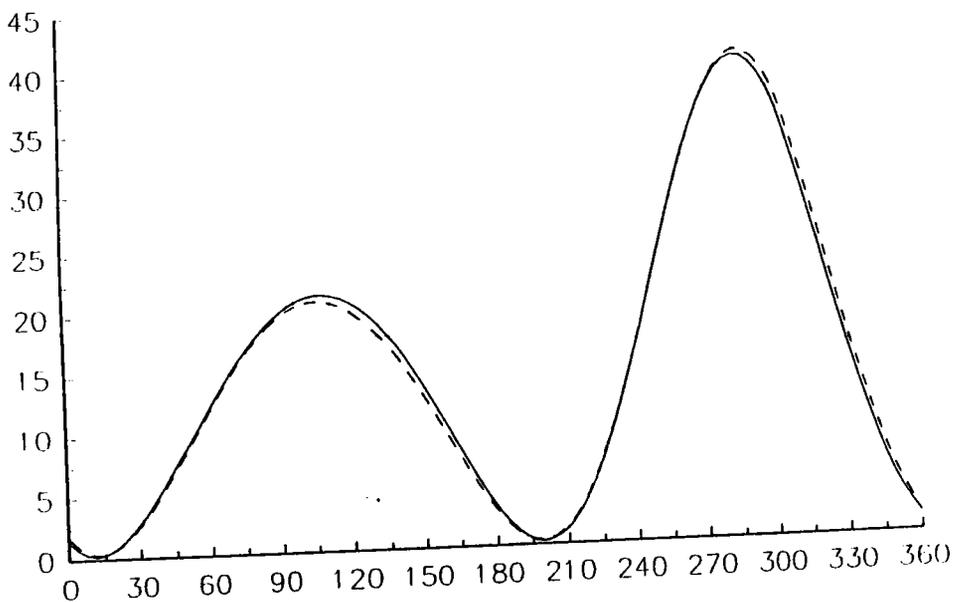


FIG. III-1-16. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1=5500$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=0.35^\circ$. —, modèle BBK; ---- modèle CPWFBA.

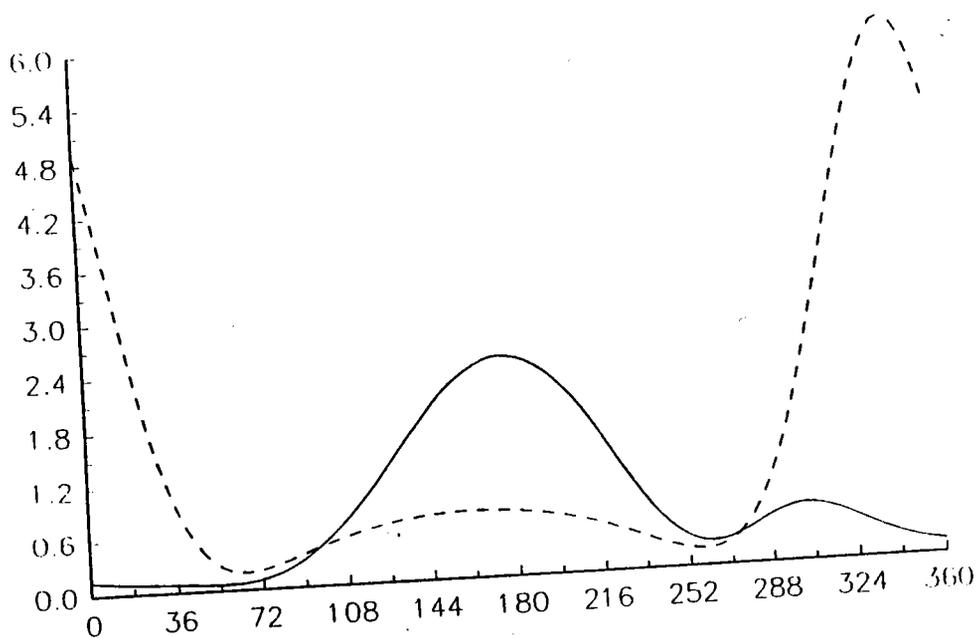


FIG. III-1-17. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1=50$ eV, $E_2=5$ eV et $\theta_1=5^\circ$. —, modèle BBK; ---- modèle CPWFBA.

2- ETUDE DE L'IONISATION DE H(2s) :

Les études de la collision (e-2e) qu'elles soient théoriques ou expérimentales portent en général sur des atomes ou des molécules à l'état fondamental. Cependant des méthodes de mesures de la section efficace totale ⁽³⁰⁾ sur des atomes à l'état excité ont commencé depuis 1958, se basant sur l'ionisation des atomes issus de la dissociation des molécules (par exemple la molécule H₂).

Des méthodes plus récentes consistent à exciter initialement la cible par un rayon Laser avant la collision ionisante, méthode utilisée récemment par Zheng et collaborateurs (1990)⁽⁹⁸⁾. Il serait également possible d'utiliser les atomes issus du photo-détachement de H⁻⁽²⁶⁾ qui laisse à l'état final des atomes d'hydrogène excités avec n=2.

Du point de vue théorique les premiers calculs concernant l'ionisation de l'hydrogène à l'état excité ont été réalisés par Vucic, Potvliege et Joachain (1987)^(77,90) dans le cadre de l'approximation de seconde ordre de Born. Ils ont été suivis par les travaux de Ray et Roy (1988)⁽⁷⁸⁾. Ces derniers ont testé plusieurs méthodes théoriques comme le modèle GA (Glauber Approximation) et l'approximation GA-PCI qui consiste à modifier l'approximation GA par un effet poste collisionnel classique décrit par Klar et al (1986)⁽⁵⁸⁾.

Nous présentons ici le calcul de la section efficace différentielle de l'ionisation de l'atome d'hydrogène à l'état (2s) en utilisant l'approximation B.B.K, dont les résultats seront comparés aux résultats de l'approximation de premier et de seconde ordre de Born et de l'approximation GA-PCI.

a- Modèle théorique :

Nous remplaçons dans l'expression de la section efficace différentielle (eq. III-1-3) la fonction d'onde ψ_i par le produit d'une onde plane de l'électron incident, qui a pour quantité de mouvement \vec{K}_i et des coordonnées \vec{r}_1 , et de la fonction φ_{2s} de l'état 2s de l'atome de l'hydrogène dont l'expression est:

$$\varphi_{2s}(\vec{r}_2) = \left(\frac{1}{2}\right)^{5/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} (2 - r_2) e^{-\frac{r_2}{2}} \quad (\text{III-2-1})$$

ψ_f , la fonction d'onde du double continuum, représentée par l'équation (III-1-6) décrit le mouvement des électrons éjecté et diffusé. Le potentiel V représente l'interaction coulombienne entre le projectile et la cible:

$$V = -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{|\bar{r}_2 - \bar{r}_1|} \quad (\text{III-2-2})$$

L'amplitude de diffusion directe peut être écrite comme précédemment sous la forme d'une somme de deux termes :

$$p = p_1 + p_2 \quad (\text{III-2-3})$$

avec :

$$p_1 = -\frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} M^* \left[\int \frac{d^3 r_1}{r_1} d^3 r_2 e^{-i\bar{K}_1 \bar{r}_1} e^{-i\bar{K}_2 \bar{r}_2} e^{-i\bar{K}_3 \bar{r}_3} \chi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2) e^{-\lambda_1 r_1} - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 r_1}{r_1} d^3 r_2 e^{-i\bar{K}_1 \bar{r}_1} e^{-i\bar{K}_2 \bar{r}_2} e^{-i\bar{K}_3 \bar{r}_3} \chi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2) e^{-\lambda_2 r_2} \right] \quad (\text{III-2-4})$$

La première intégrale peut être ramenée à W (équation I-3-12) par le changement de variable: $\bar{r}_1 = \bar{r}$ et $\bar{r}_2 = -\bar{r}'$, pour évaluer la deuxième on doit calculer une intégrale de la forme:

$$L = \int \frac{d^3 r_1}{r_1} d^3 r_2 {}_1F_1[-i\alpha_1, 1, i(\bar{K}_1 \bar{r}_1 + K_1 r_1)] e^{-i\bar{K}_1 \bar{r}_1 - i\bar{P}_1 \bar{r}_1 - \lambda_1 r_1} \times \\ {}_2F_1[-i\alpha_2, 1, i(\bar{K}_2 \bar{r}_2 + K_2 r_2)] e^{-i\bar{K}_2 \bar{r}_2 - i\bar{P}_2 \bar{r}_2 - \lambda_2 r_2} \times \\ {}_1F_1[-i\alpha_3, 1, i(\bar{K}_3 (\bar{r}_1 + \bar{r}_2) + K_{ba} |\bar{r}_1 + \bar{r}_2|)] e^{-\lambda_3 |\bar{r}_1 + \bar{r}_2|} \quad (\text{III-2-5})$$

Cette intégrale est obtenue à partir de W par une dérivation par rapport à λ_2 , c'est à dire d'après l'équation (III-1-12) :

$$L = \frac{\partial}{\partial \lambda_2} W \quad (\text{III-2-6})$$

A partir de l'expression de W on voit qu'il faut dériver $I(x)$ (eq. III-1-14) par rapport à λ_2 . Ceci veut dire qu'il faut calculer $\frac{\partial^3 D_0}{\partial^2 \lambda_2 \partial \beta_3}$ où D_0 peut être déduite de l'équation (III-1-15).

Les calculs conduisent à:

$$\frac{\partial^3 D_0}{\partial^2 \lambda_2 \partial \beta_3} = u_1 D_0 + u_2 D_1 + u_3 D_2 + u_4 D_3 \quad (\text{III-2-7})$$

où (voir appendice F) :

$$u_1 = \Omega(0,2)\phi_1 + \frac{\partial\phi_1}{\partial\lambda_2} \quad (\text{III-2-8})$$

$$u_2 = \beta(0,2)\phi_1 + \Omega(1,2)\phi_2 + \frac{\partial\phi_2}{\partial\lambda_2} \quad (\text{III-2-9})$$

$$u_3 = \beta(1,2)\phi_2 + \Omega(0,2)\phi_3 + \frac{\partial\phi_3}{\partial\lambda_2} \quad (\text{III-2-10})$$

$$u_4 = \beta(2,2)\phi_3 \quad (\text{III-2-11})$$

p_1 peut alors s'écrire :

$$p_1 = -\frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} M^* \left[W(\bar{K}_1, -\bar{K}_2, \bar{K}_3, -\bar{K}_i, \bar{0}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, \lambda_2, 0) \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial\lambda_2} W(\bar{K}_1, -\bar{K}_2, \bar{K}_3, -\bar{K}_i, \bar{0}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, \lambda_2, 0) \right] \quad (\text{III-2-12})$$

Calculons maintenant p_2 :

$$p_2 = -\frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} M^* \left[\int \frac{d^3 r_1}{|\bar{r}_2 - \bar{r}_1|} d^3 r_2 e^{-i\bar{K}_1 \cdot \bar{r}_1} e^{-i\bar{K}_2 \cdot \bar{r}_2} e^{-i\bar{K}_3 \cdot \bar{r}_2} \chi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2) e^{-\lambda_2 r_2} \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 r_1}{|\bar{r}_2 - \bar{r}_1|} d^3 r_2 r_2 e^{-i\bar{K}_1 \cdot \bar{r}_1} e^{-i\bar{K}_2 \cdot \bar{r}_2} e^{-i\bar{K}_3 \cdot \bar{r}_2} \chi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2) e^{-\lambda_2 r_2} \right] \quad (\text{II-2-13})$$

Le changement de variable : $\bar{r} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2$ et $\bar{r}' = \bar{r}_2$ ramène la première intégrale à une expression semblable à W et la deuxième intégrale à une expression semblable à L . On aura donc :

$$p_2 = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} M^* \left[W(-\bar{K}_3, \bar{K}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_3 + \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \alpha_3, \alpha_2, \alpha_1, 0, \lambda_2, 0) \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial\lambda_2} W(-\bar{K}_3, \bar{K}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_3 + \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \alpha_3, \alpha_2, \alpha_1, 0, \lambda_2, 0) \right] \quad (\text{III-2-14})$$

Finalement on déduit l'amplitude de diffusion directe p :

$$p = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^2} M^* \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial\lambda_2} \right] \left[W(\bar{K}_1, -\bar{K}_2, \bar{K}_3, -\bar{K}_i, \bar{0}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, 0, \lambda_2, 0) \right. \\ \left. + W(-\bar{K}_3, \bar{K}_2, \bar{K}_1, \bar{K}_3 + \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \bar{K}_1 - \bar{K}_i, \alpha_3, \alpha_2, \alpha_1, 0, \lambda_2, 0) \right] \quad (\text{III-2-15})$$

b- Résultats et interprétations :

Les résultats des expériences sur l'ionisation de l'atome d'hydrogène à l'état 2s sont annoncés (Zheng et al ⁽⁹⁸⁾), en attendant nous comparerons nos résultats avec les résultats des calculs équivalents par d'autres modèles théoriques. Les premiers calculs effectués sur cet état sont ceux de Vucic et al (1987)⁽⁹⁰⁾ par la seconde approximation de Born suivis par les travaux de Ray et Roy (1988)⁽⁷⁸⁾.

Notre but principal dans cette partie c'est de tester la validité du traitement des collisions par la méthode BBK et d'étudier l'effet de la corrélation entre les particules à l'état final. L'introduction de la corrélation par la fonction d'onde BBK s'est avérée efficace dans le cas des hautes et moyennes énergies, elle reproduit les résultats des expériences dans différentes situations d'énergies et d'angles. D'autres méthodes introduisent également cette corrélation comme celle appelée PCI qui tient compte des effets post collisionnel d'une manière classique (Klar 1986)⁽⁵⁸⁾.

La figure (III-2-1) donne une comparaison entre nos résultats et ceux de la seconde approximation de Born de Vucic et al (1987)⁽⁹⁰⁾ et ceux de Ray et al qui ont utilisé la méthode de Glauber modifiée par l'effet PCI classique. L'énergie incidente est de 250 eV, l'énergie éjectée est de 5eV et l'angle de diffusion est de 3°, l'accord entre les trois méthodes est bon. Cependant il faut préciser que le calcul de Vucic et al dépend d'un paramètre arbitraire $\bar{\omega}$ qui peut prendre plusieurs valeurs. Sa présence est justifiée par le fait que leur calcul tient compte du deuxième terme de la série de Born (eq. I-4-4) qui est très difficile à calculer. Il nécessite une sommation sur tous les états intermédiaires de la cible qu'ils soient discrets ou continus. Avant de quitter le champ du noyau l'électron doit passer par tous les états intermédiaires $|n\rangle$. Une approximation a été nécessaire pour déterminer le second terme de la série de Born. Elle consiste à remplacer le terme $(\omega_n - \omega)$ (eq. I-4-6) où ω_n est l'énergie de l'état $|n\rangle$ et ω l'énergie d'ionisation de l'électron cible par $\bar{\omega}$. Ceci facilite l'utilisation de la relation de fermeture qui permet d'éliminer la sommation sur les états intermédiaires (Byron et al 1985)⁽²⁴⁾.

Plusieurs valeurs de $\bar{\omega}$ sont possibles (voir figure (III-2-2)). Nous avons choisi de comparer nos résultats aux résultats des calculs faits avec la valeur $\bar{\omega} = 0.125$ qui correspond à

l'énergie d'ionisation de l'état 2s. l'accord entre nos résultats et ceux de la seconde approximation de Born semble parfait dans ce cas.

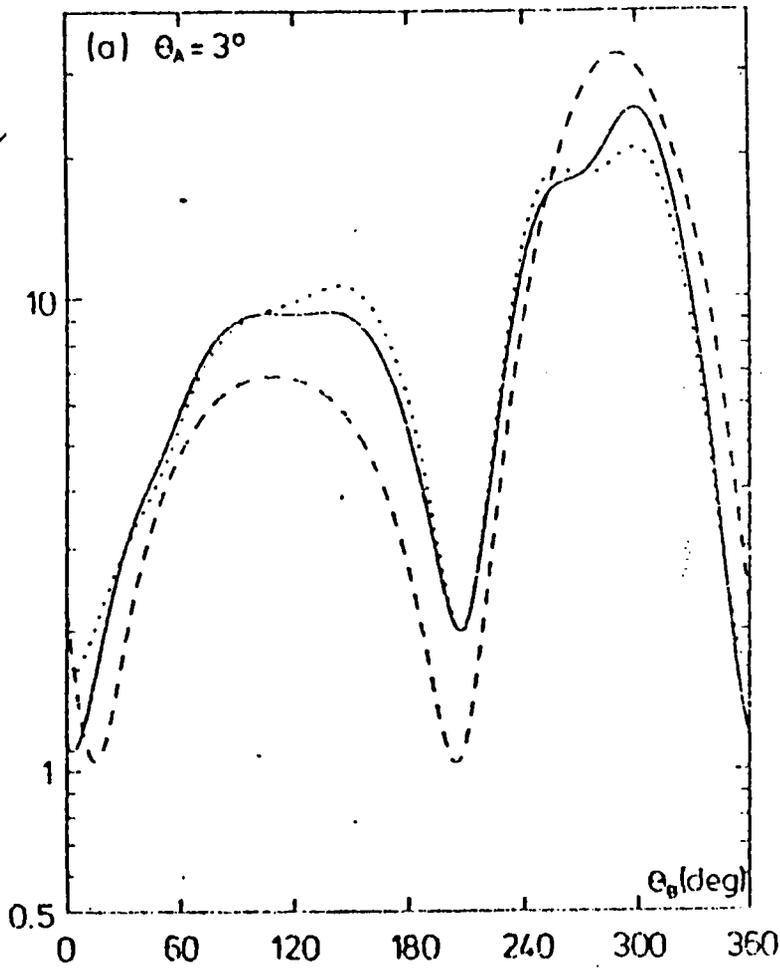


FIG. III-2-2. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 3^\circ$ en fonction de θ_2 . —, résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.125$; résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.25$; ----, modèle CPWFBA.

La structure de la section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état fondamental est caractérisée par la présence de deux pics: le pic binaire et le pic du recul. Cette structure peut être également observée lorsqu'on ionise l'atome d'hydrogène à partir de l'état 2s. La figure (III-2-3) représente la section efficace en trois dimensions de l'espace. L'énergie incidente est de 300 eV, l'énergie de l'électron éjecté est de 5 eV et l'angle de diffusion est de 3° . Les lobes sont bien visibles. Le lobe binaire se trouve dans le demi espace inférieur à \vec{K}_i et le lobe du recul se trouve dans le demi espace supérieur. Il est caractérisé par une amplitude plus faible. Le maximum de la courbe se trouve dans le plan formé par les vecteurs \vec{K}_i et \vec{K}_1 .

La comparaison avec la première approximation de Born montre que la corrélation a pour effet d'augmenter l'amplitude du pic du recul et de diminuer celle du pic binaire. L'introduction de la corrélation dans la fonction d'onde finale ne modifie pas la position des pics.

La figure (III-2-1) représente également une comparaison de nos résultats à ceux de Ray et Roy (1988), qui ont effectué le calcul en appliquant plusieurs approximations comme l'approximation (Glauber approximation modifiée par l'effet PCI) GA-PCI et (first Born approximation modifiée par l'effet PCI) FBA-PCI. Ces approximations consistent à corriger les approximations de Glauber et l'approximation de Born par un effet post collisionnel pour tenir compte de l'interaction à l'état final. La méthode PCI introduite par Klar (1986) divise la région de collision en deux parties, la région des courtes portées, traitée par la mécanique quantique et la région de la longue portée du potentiel coulombien traitée classiquement.

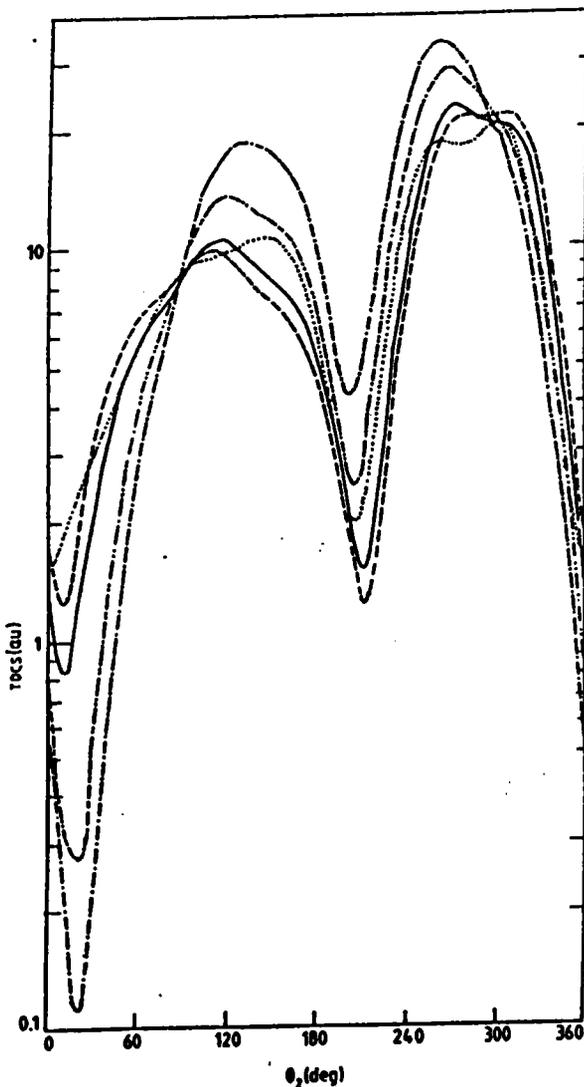


FIG. III-2-4. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_1 = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 3^\circ$ en fonction de θ_2 . —, méthode GA-PCI avec $r_{01} = 12.4$ $r_{02} = 1.6$; - - - - -, résultat de GAPCI avec $r_{01} = 2.8$ $r_{02} = 0.5$; - · - · - ·, GA-PCI avec $r_{01} = 4.0$ $r_{02} = 1.0$; ·····, résultats de GA; - - - - -, résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.25$.

Le PCI classique a pour conséquence de changer la trajectoire des deux électrons sortants. Ceci est dû à la grande portée du potentiel coulombien. En l'absence des forces coulombiennes les particules maintiendraient leurs directions $\theta_i(0)$ et leurs énergies $E_i(0)$ ($i=1,2$) de la région quantique et seraient détectées. Mais les forces coulombiennes ont tendance à changer les directions asymptotiques des particules qui sortent dans des directions modifiées. Les valeurs de $\theta_i(0)$ et $E_i(0)$ sont déduites du calcul par la méthode GA et incorporées dans les calculs classiques.

La méthode PCI dépend de deux paramètres arbitraires r_{01} et r_{02} qui représentent les positions initiales des deux électrons lorsqu'ils sortent de la région quantique. Différentes valeurs de ces paramètres ont été testées. La figure (III-2-4) représente la section efficace triplement différentielle calculée pour différentes valeurs de r_{01} et r_{02} . Dans le cas de l'ionisation de H(2s) les valeurs retenues sont quatre fois plus grandes que ceux de H(1s). Ceci peut être justifié par le fait que le rayon de l'orbitale 2s est quatre fois plus grand que celui de l'orbitale 1s ($\bar{r} = n^2 \bar{r}_0$).

D'après la figure (III-2-1) on voit bien que l'accord entre les trois méthodes est bon. Il est clair que pour un calcul plus simple il faut choisir le modèle le plus simple qui est la première approximation de Born, mais les résultats de ce modèle sont peu précises. La seconde approximation de Born et le PCI dépendent de certains paramètres difficile à préciser. La méthode BBK semble la mieux adaptée pour donner des valeurs conformes aux conditions expérimentales.

Comme il a été précisé précédemment la section efficace possède deux pics. Ceci est bien évident dans les figures (III-2-1) et (III-2-5) qui représentent la TDCS en fonction de l'angle d'éjection pour $E_1=250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta = 3^\circ$ et 5° . Cependant le pic du recul est remplacé par un minimum lorsque θ augmente, les figure (III-2-6), (III-2-7) et (III-2-8) qui représentent la section efficace en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_2 dans les mêmes conditions d'énergies décrites plus haut mais avec des angles de diffusions respectifs de 7° , 9° et 11° montrent cet effet.

Les figures précédentes représentent également une comparaison de nos résultats à ceux de Vucic et al, les deux méthodes prévoient la présence des pics dans les mêmes directions, mais l'amplitude qui est pratiquement la même pour $\theta = 3^\circ$ et 5° devient plus faible avec la méthode de BBK. On peut faire la même conclusion en comparant nos résultats à ceux de Ray et Roy.

La figure (III-2-9) représente la variation de la section efficace en fonction de l'angle de diffusion. Contrairement à l'ionisation de l'hydrogène à l'état fondamental, la section efficace présente ici deux pics, le premier dans la région de faibles angles de diffusion (θ comprise entre 1° et 2°) et le deuxième entre 9° et 10° d'amplitude plus grande. L'introduction de l'échange a pour effet d'augmenter les valeurs des deux maxima mais devient pratiquement sans effet ailleurs. La comparaison avec la première approximation de Born montre que cette dernière surestime ces maxima.

La comparaison entre l'ionisation H (1s) et celle de H (2s) pour les mêmes paramètres cinématiques montre que la valeur de la section efficace pour H(2s) est largement supérieure à celle de H(1s), ceci est dû à la faible énergie de liaison de l'électron 2s et à la large dispersion spatiale de cette orbitale. Elle est quatre fois plus large que celle de 1s. Le pic binaire pour H(2s) est plus aigu et le pic du recul n'est pas remplacé par un minimum pour les grandes valeurs de l'angle de diffusion dans le cas de l'ionisation de H(1s).

Outre les situations de détections coplanaires symétriques et asymétriques, une autre géométrie importante a été étudiée dernièrement expérimentalement par Woolf (1989)⁽⁹⁶⁾ Murry et al (1992)⁽⁷⁰⁾ et théoriquement par Zhang et al (1990) dans le cas de l'ionisation de l'hélium. Dans cette géométrie on considère que les deux électrons sortent dans un plan perpendiculaire à la direction de l'électron incident (voir fig. (III-1-10))

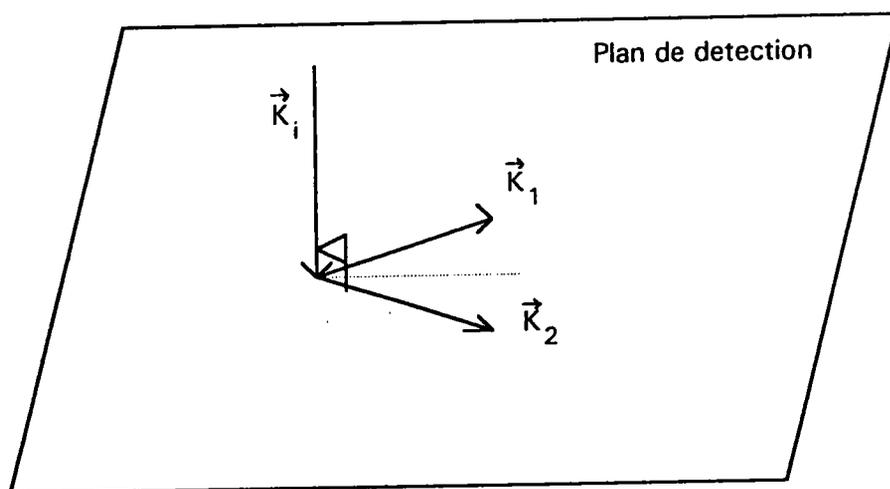


Figure (III-2-10) Plan de détection dans une géométrie perpendiculaire

Si les deux électrons détectés ont la même énergie on aura:

$$\|\vec{K}_2\| = \|\vec{K}_1\|, \quad \vec{K}_2 \vec{K}_i = \vec{K}_1 \vec{K}_i = 0 \quad \text{et} \quad \vec{K}_2 \vec{K}_1 = K_1^2 \cos \varphi$$

avec $\varphi = \varphi_2 - \varphi_1$ l'angle entre les deux électrons sortants.

L'axe Z est un axe de symétrie, c'est à dire les situations $0 < \varphi < 180$ et $80 < \varphi < 360$ sont identiques.

Zhang et al (1990) et Whelan et al (1993) ont déjà considéré ce problème pour l'hélium. Ils envisagent que la collision (e,2e) peut se faire selon deux mécanismes :

- Une diffusion simple où l'électron incident entre directement en collision avec l'électron de l'atome cible et les deux électrons sortent avec un angle $\varphi_2 - \varphi_1 = 180^\circ$.

- Un deuxième cas de diffusion double où l'électron incident entre en choc élastique avec le noyau il change de direction, son vecteur d'onde devient \vec{K}_1' orthogonal à \vec{K}_1 . on revient donc à une situation de collision coplanaire symétrique, les deux électrons sortent avec un angle de 45° chacun par rapport à la direction de \vec{K}_1' .

La figure (III-2-11) représente le cas de cette géométrie. L'énergie incidente est de 200 eV. On peut voir que les deux maximums de la courbe se trouvent à peu près à 90° . C'est donc le mécanisme de diffusion double qui est le plus probable. L'axe correspondant à $\varphi = 180^\circ$ est un axe de symétrie. Un deuxième pic mais d'amplitude plus faible est présent dans notre cas qui montre que les deux électrons peuvent sortir avec un angle φ plus faible, mais avec une probabilité plus petite.

L'énergie d'ionisation d'un électron de l'état 1s est quatre fois plus grande que celle d'un électron de l'état 2s. Il est donc plus facile d'ioniser un électron de l'état 2s. L'amplitude de la section efficace de l'ionisation d'un électron de ce niveau sera par conséquent plus grande. La figure (III-2-12) représente une comparaison entre l'ionisation des deux états lorsque $E_1 = 241.6 \text{ eV}$, $E_2 = 5 \text{ eV}$ et $\theta = 9^\circ$. Pour pouvoir comparer l'ionisation de H(1s) à H(2s) nous avons multiplié la section efficace de H(1s) par un coefficient qui représente le rapport des deux sections efficaces. Remarquons d'abord que ce coefficient est grand $\frac{\sigma^3(\text{H}(2s))}{\sigma^3(\text{H}(1s))} = 43.68$. Le pic binaire est plus large et le pic de recul est faible mais. Il n'y a pas de minimum dans cette direction contrairement au cas d'ionisation de H(2s).

En conclusion on peut dire que l'application de la fonction d'onde BBK du double continuum qui contient par sa nature la corrélation électronique est justifiée, car elle reproduit les résultats des expériences de l'ionisation de H(1s) et donne des résultats comparables à d'autres méthodes utilisant des procédures empiriques pour le cas de H(2s)⁽⁴⁸⁾. Ceci nous permet d'étendre notre calcul aux alcalins.

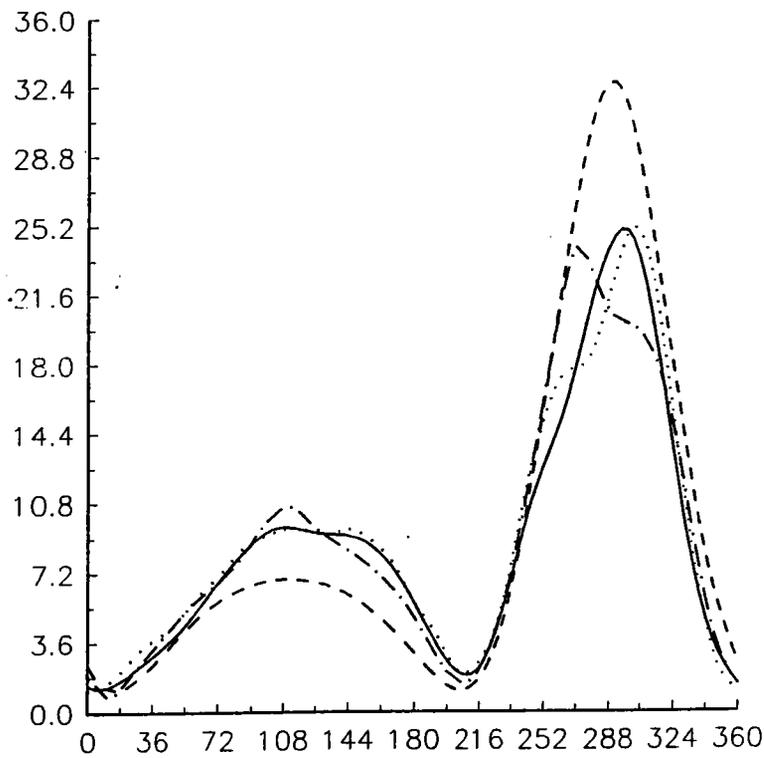


FIG. III-2-1. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 3^\circ$ en fonction de θ_2 . —, modèle BBK; - - - - - , modèle GA-PCI avec $r_{01} = 12.4$ $r_{02} = 1.6$ (résultats de Ray et Roy); , résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.25$ (résultats de Vucic et al.); - · - · - , modèle CPWFBA.

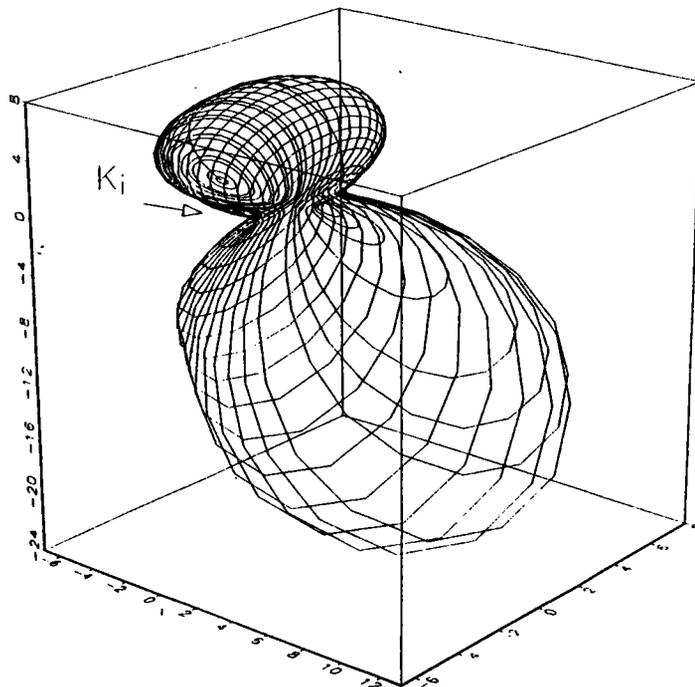


FIG. III-2-3. Section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène, à partir de l'état excité (2s), par impact électronique en fonction des angles θ_2 et φ_2 , avec $E_i = 300$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 3^\circ$.

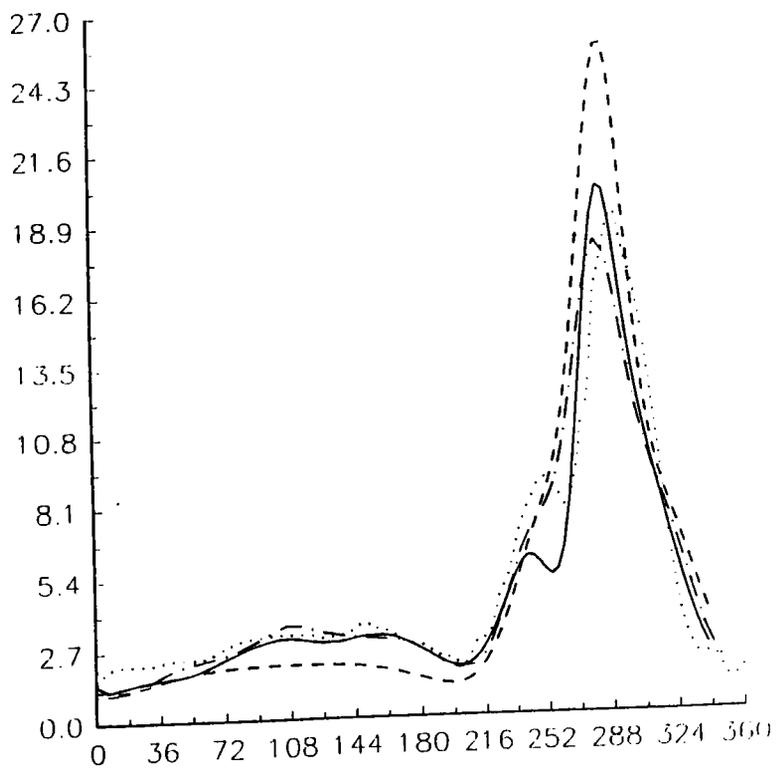


FIG. III-2-5. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 5^\circ$ en fonction de θ_2 .
 —, modèle BBK; - - - - - , modèle GA-PCI avec $r_{01} = 12.4$ $r_{02} = 1.6$ (résultats de Ray et Roy); , résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.25$ (résultats de Vucic et al); - · - · - , modèle CPWFBA.

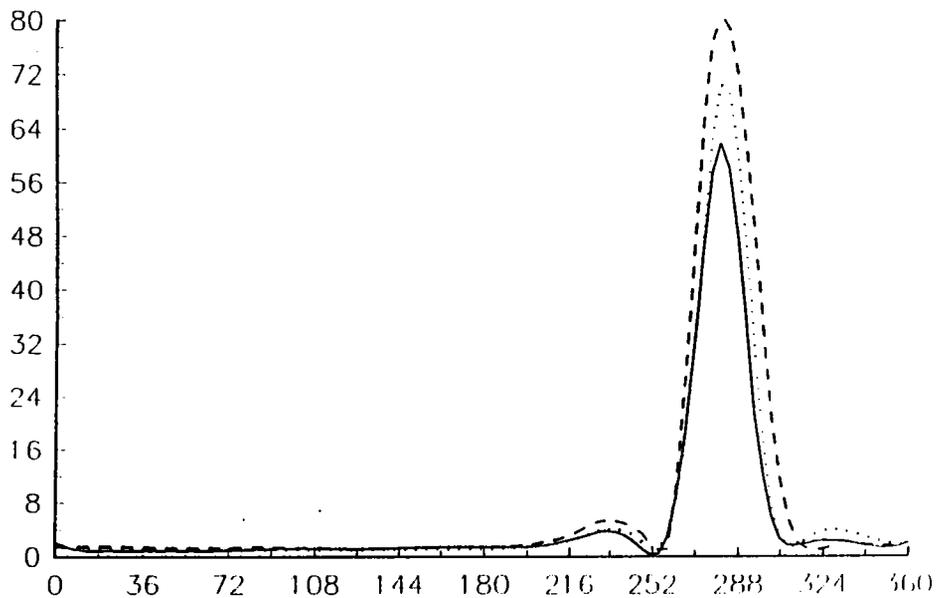


FIG. III-2-6. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 7^\circ$ en fonction de θ_2 .
 —, modèle BBK; , résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.25$ (résultats de Vucic et al); - · - · - , modèle CPWFBA.

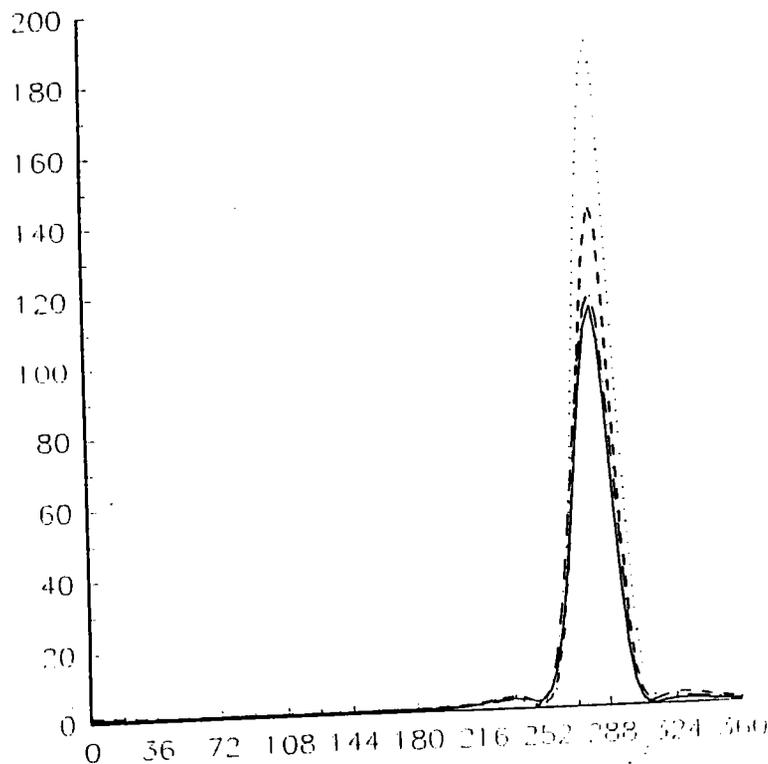


FIG. III-2-7. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 9^\circ$ en fonction de θ_2 . —, modèle BBK; - - - - - , modèle GA-PCI avec $r_{01} = 12.4$ $r_{02} = 1.6$ (résultats de Ray et Roy); , résultats de SBA avec $\bar{\omega} = 0.25$ (résultats de Vucic et al); - · - · - , modèle CPWFBA.

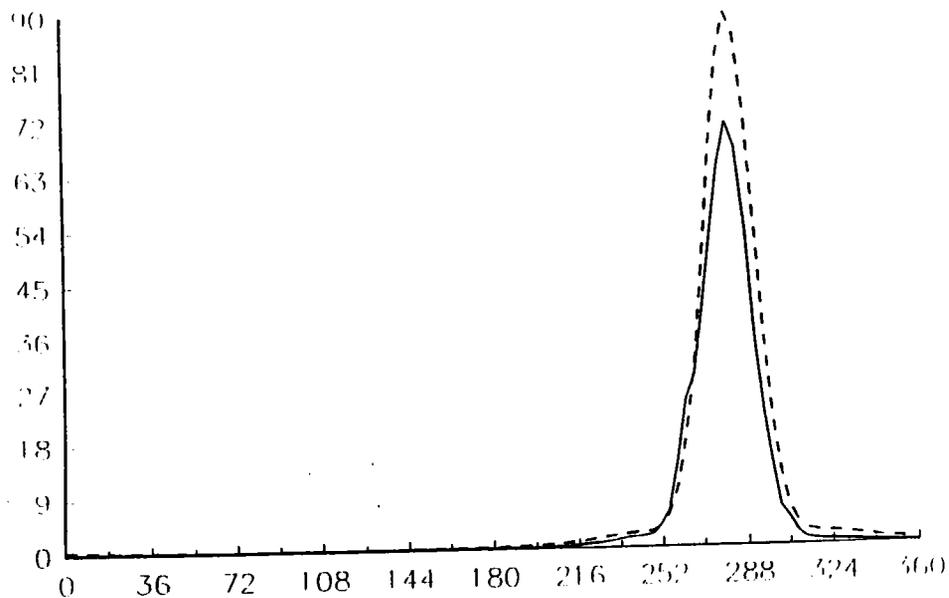


FIG. III-2-8. Section efficace différentielle d'ionisation de H(2s) par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 11^\circ$ en fonction de θ_2 . —, modèle BBK; - - - - - , modèle CPWFBA.

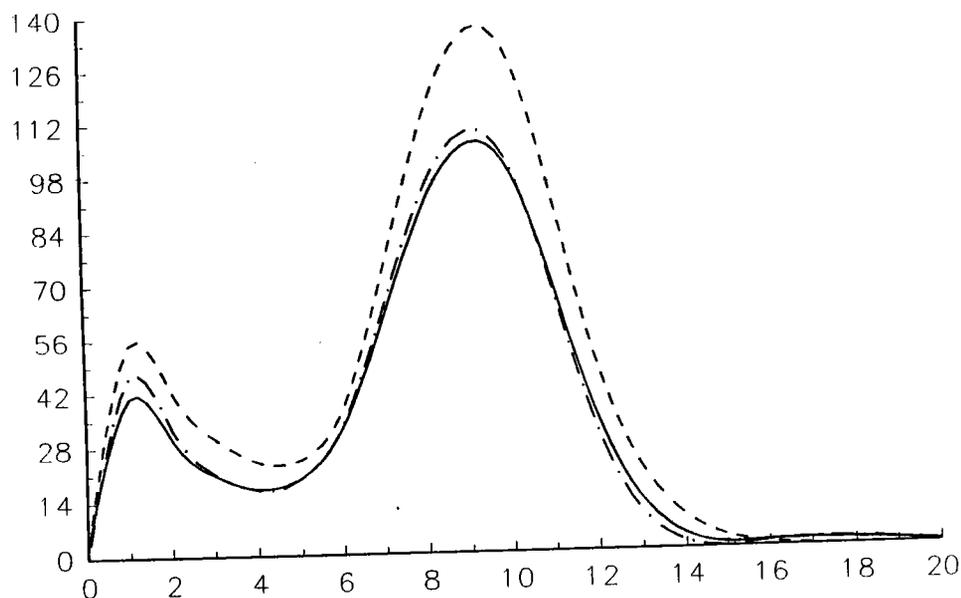


FIG. III-2-9. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état excité 2s en fonction de l'angle de l'électron diffusé dans le cas où $E_i = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_2 = 280^\circ$. —, modèle BBK (sans échange); - - - - -, modèle BBK (avec échange); - · - · -, modèle CPWFBA.

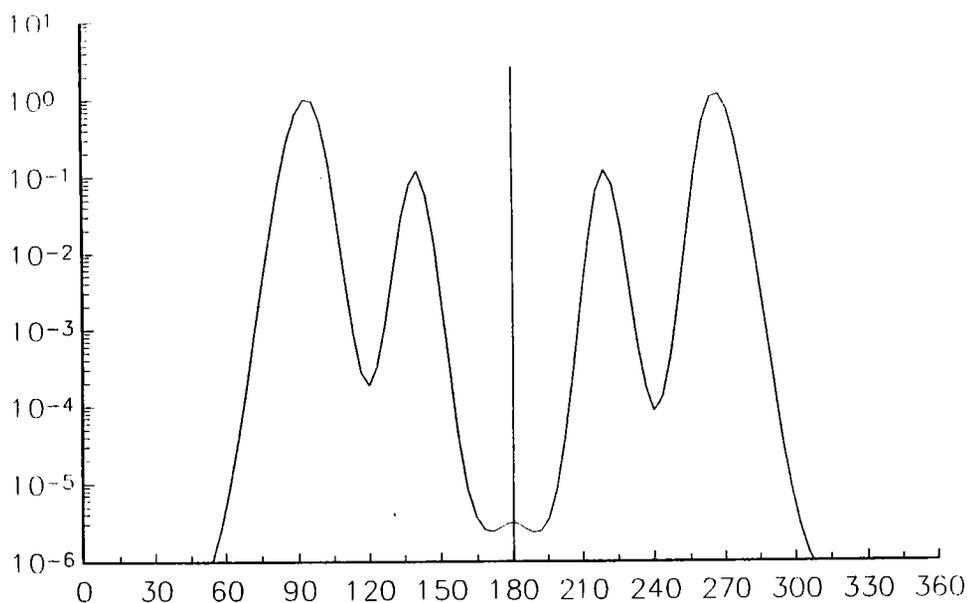


FIG. III-2-11. Variation de la section efficace différentielle en fonction de l'angle $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$. Les électrons sortants sont détectés dans un plan perpendiculaire à la direction de l'électron incident. L'énergie incidente est fixée à 200 eV celle des électrons diffusé et éjecté est tel que $E_2 = E_1$ et $\theta_2 = \theta_1 = 45^\circ$.

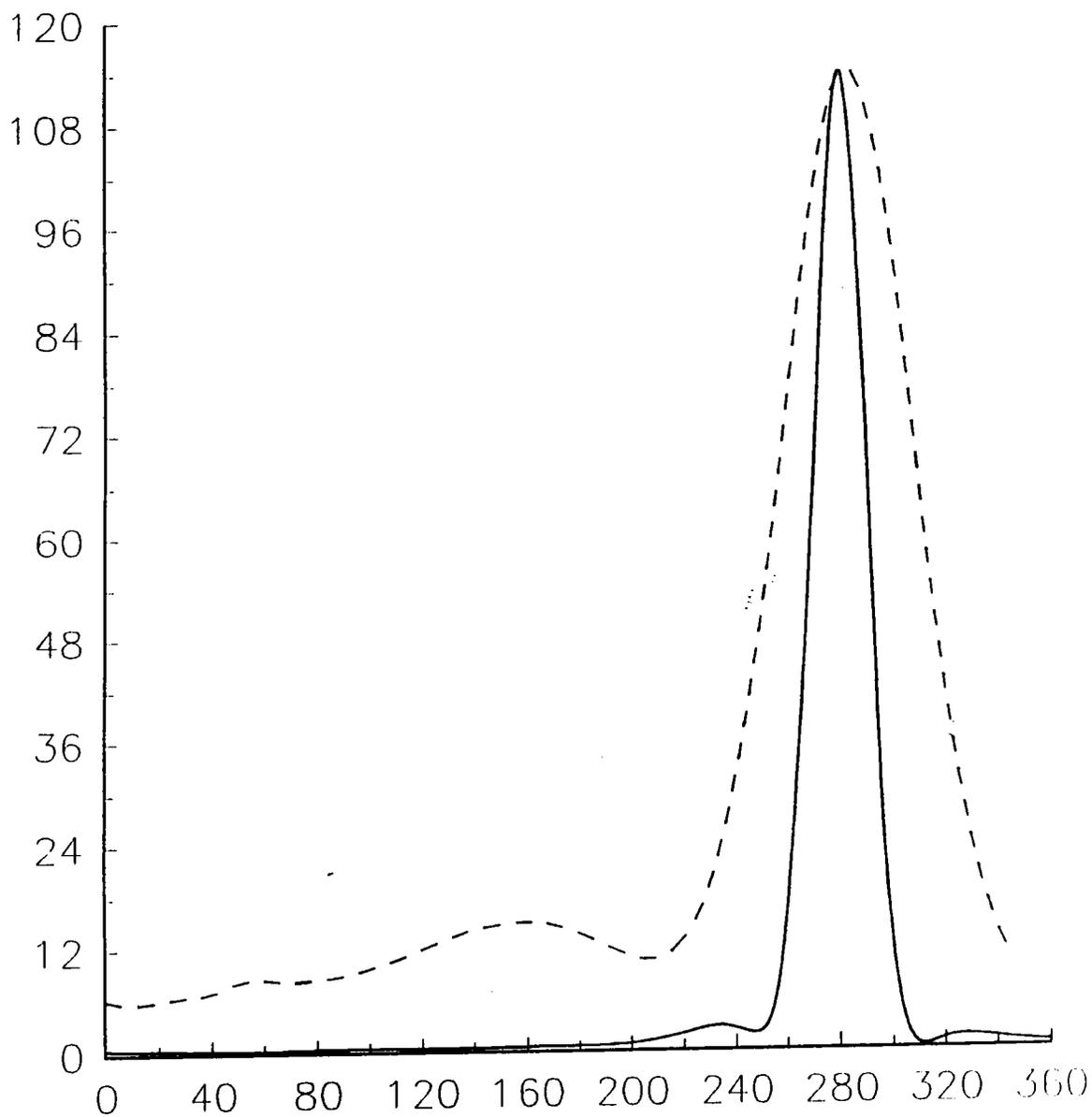


FIG. III-2-12. Comparaison entre la section efficace d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de son état fondamental 1s et excité 2s. L'énergie de l'électron diffusé est de 241.6 eV celle de l'électron éjecté est de 5 eV l'angle de diffusion est $\theta_1=9^\circ$.—, ionisation de H(2s) ; ----, ionisation de H(1s)(x 43.68).

L'étude de l'ionisation du Lithium par impact électronique a été limitée pendant longtemps au calcul de la section efficace totale. Plusieurs modèles théoriques ont été proposés qui donnent des accords plus ou moins satisfaisants avec l'expérience (McDowell et al 1964⁽⁶⁹⁾, Jalin et al⁽⁵²⁾ 1972, Bartschat⁽⁵⁾ 1989). Ce n'est que très récemment qu'une étude théorique de la section efficace différentielle par la méthode DWBA (Distorted Wave Born Approximation), qui décrit les électrons incident et diffusé en tenant compte de la polarisation par des ondes distordues, a été présentée par Zhang et al (1992)⁽⁹⁷⁾. Les résultats de ces calculs ont été comparés aux valeurs expérimentales obtenus par Frost et al⁽⁴⁰⁾ (1990). D'un autre côté Baum et al (1992)⁽⁶⁾ ont présenté la mesure du paramètre d'antisymétrie de l'ionisation d'un isotope du lithium polarisé par des électrons également polarisés dans une géométrie coplanaire symétrique, qui est la plus favorable pour une telle étude, vue l'importance de l'effet d'échange dans cette situation.

La difficulté de l'étude de l'ionisation des atomes à plusieurs électrons réside dans la complexité de la résolution de l'équation de Schrödinger lorsque le nombre des électrons de l'atome dépasse le un. L'atome du lithium possède trois électrons qui sont répartis sur deux couches, une première couche formée de deux électrons et une couche de valence ayant un seul électron dit, électron actif. Lors de son ionisation nous considérons que l'électron est éjecté de la couche de valence. De ce fait, pour déterminer la fonction d'onde de la cible, on considère qu'initialement l'électron actif se trouve dans un potentiel effectif qui est un potentiel modèle. Plusieurs formes de ce potentiel ont été proposées. Nous avons choisi de prendre la forme proposée par Klapisch⁽⁵⁷⁾ que nous présentons plus loin avec le calcul de la section efficace différentielle dans le cadre de l'approximation de Born utilisant la fonction du double continuum BBK. Les résultats de ce calcul seront comparés à ceux de Zhang et al⁽⁹⁷⁾ et aux résultats des mesures de Frost et al (1990)⁽⁴⁰⁾ les seuls existant à ce jour à notre connaissance.

1- ETAT INITIAL DE LA CIBLE :

On considère initialement que l'électron de valence se trouve dans un potentiel modèle de la forme Klapisch⁽⁵⁷⁾:

$$V_M(r_2) = \frac{-1}{r_2} - 2 \frac{e^{-\zeta r_2}}{r_2} - \beta e^{-\gamma r_2} \quad (\text{IV-1-1})$$

avec :

$$\zeta = 7.9 \quad \beta = 10.3 \quad \text{et} \quad \gamma = 3.893 \quad (\text{IV-1-2})$$

Soit H_{02} le Hamiltonien électronique de l'atome dans le système du centre de masses :

$$H_{02} = -\frac{\bar{\nabla}^2}{2} + V_M(r_2) \quad (\text{IV-1-3})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$H_{02}\varphi_{nl}(\vec{r}_2) = E_{02}\varphi_{nl}(\vec{r}_2) \quad (\text{IV-1-4})$$

L'expression du Laplacien en coordonnées sphériques nous permet de réécrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left(r_2^2 \frac{\partial \varphi_{nl}}{\partial r_2} \right) \right] + \frac{L^2}{r_2^2} \varphi_{nl} + V_M(r_2) \varphi_{nl} = E_{02} \varphi_{nl} \quad (\text{IV-1-5})$$

où L^2 représente le carré de l'opérateur moment cinétique. Nous cherchons une solution de la forme :

$$\varphi_{nl}(\vec{r}_2) = R(r_2) Y_l^m(\Theta_2, \Phi_2) \quad (\text{IV-1-6})$$

Pour l'état fondamental de Li $l=0$, et $m=0$. A partir des équations (IV-1-5) et (IV-1-6) on peut trouver l'équation à laquelle obéit la partie radiale de la fonction d'onde :

$$\frac{1}{2} \left[-\frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial r_2} \left(r_2^2 \frac{\partial R(r_2)}{\partial r_2} \right) \right] + \frac{l(l+1)}{r_2^2} R(r_2) + V_M(r_2) R(r_2) = E_{02} R(r_2) \quad (\text{IV-1-7})$$

Nous développons $R(r_2)$ sur une base de fonctions de Slater:

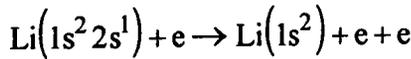
$$R(r_2) = \sum_{j=0}^M r_2^j \sum_{i=1}^N c_{ij} e^{-\nu_i r_2} \quad (\text{IV-1-8})$$

que nous déterminons par diagonalisation de la matrice du Hamiltonien dont les éléments sont donnés par :

$$\begin{aligned} \langle r^k e^{-\varepsilon r_2} | H_{02} | r^{k'} e^{-\xi r_2} \rangle = & \frac{1}{(\varepsilon + \xi)^{k+k'+1}} \left[\frac{1(1+1) - k(k+1)}{2} (k+k')! \right. \\ & \left. \frac{(\xi(k+1) - 1)(k+k'+1)!}{(\varepsilon + \xi)} \frac{\xi^2 (k+k'+2)!}{2 (\varepsilon + \xi)^2} \right] \\ & - 2 \frac{(k+k'+1)!}{(\varepsilon + \xi + \zeta)^{k+k'+2}} - \beta \frac{(k+k'+2)!}{(\varepsilon + \xi + \gamma)^{k+k'+3}} \end{aligned} \quad (\text{IV-1-9})$$

2- CALCUL DE LA SECTION EFFICACE :

On considère la réaction d'ionisation :



La fonction d'onde représentant le système (e+cible) avant le choc est le produit d'une fonction d'onde plane, décrivant l'électron incident par la fonction d'onde φ_{nl} (équation IV-1-6). Un développement de la fonction $R(r_2)$ [M=1, N=6] permet d'utiliser les procédures développées dans le chapitre 2 pour l'ionisation de H(1s) et H(2s).

En reprenant l'expression de la section efficace différentielle présentée dans le chapitre I :

$$\frac{\partial^5 \sigma}{\partial \Omega_1 \partial \Omega_2 \partial E} = (2\pi)^4 \frac{K_1 K_2}{K_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{IV-2-1})$$

où \vec{K}_i , \vec{K}_1 et \vec{K}_2 sont respectivement les vecteurs d'ondes de l'électron incident, diffusé et éjecté, et T_{fi} est l'élément de matrice T qui est donné par :

$$|T_{fi}|^2 = \frac{1}{4} |p+q|^2 + \frac{3}{4} |p-q|^2 \quad (\text{IV-2-2})$$

où p est l'amplitude de diffusion directe et q l'amplitude de diffusion d'échange,

$$\text{avec : } p = \langle \psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{IV-2-3})$$

La fonction d'onde initiale est donnée par :

$$\psi_i(\bar{r}_a, \bar{r}_b) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\bar{k}_i \cdot \bar{r}_i} \varphi_{nl}(\bar{r}_2) \quad (\text{IV-2-4})$$

La fonction d'onde corrélée BBK décrira l'état des deux électrons sortant qui sont soumis au champ du coeur alcalin.

Le potentiel V représentant l'interaction électron incident-atome sera donné par:

$$V = -\frac{1}{r_1} - 2\frac{e^{-\zeta r_1}}{r_1} - \beta e^{-\gamma r_1} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{IV-2-5})$$

où ζ , β et γ sont donnés par l'équation (IV-1-2) et $r_{12} = |\bar{r}_2 - \bar{r}_1|$ représente la distance entre l'électron incident et atomique.

Le calcul de l'élément de matrice T s'effectue de la même manière que pour les cas précédents (voir chap. III eq.(III-1-22) et (III-2-15)). Il a pour expression :

$$\begin{aligned} p = & \frac{1}{(2)^2} M^* \sum_{k=1}^{n_1} \left(c_{0k} - c_{1k} \frac{\partial}{\partial v_k} \right) \left\{ W(\bar{k}_1, -\bar{k}_2, -\bar{k}_{12}, \bar{k}_i, 0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_{12}, 0, v_k, 0) \right. \\ & - \beta \frac{\partial}{\partial v_k} W(\bar{k}_1, -\bar{k}_2, -\bar{k}_{12}, -\bar{k}_i, 0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_{12}, \gamma, v_k, 0) \\ & + 2W(\bar{k}_1, -\bar{k}_2, -\bar{k}_{12}, \bar{k}_i, 0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_{12}, \zeta, v_k, 0) \\ & \left. - W(-\bar{k}_{12}, \bar{k}_2, \bar{k}_1, \bar{k}_1 - \bar{k}_i + \bar{k}_{12}, \bar{k}_1 - \bar{k}_i, 0, \alpha_{12}, \alpha_2, \alpha_1, 0, v_k, 0) \right\} \quad (\text{IV-2-6}) \end{aligned}$$

où nous avons négligé la contribution du terme $\beta e^{-\gamma r_1}$ à la section efficace. En fait ce terme tend très vite vers 0 quand r_1 devient grand. Le tableau 1 montre la contribution de ce terme et celui de $-2\frac{e^{-\zeta r_1}}{r_1}$ à l'énergie. Les valeurs moyennes:

$$e_1 = \left\langle \varphi_{nl} \left| -2\frac{e^{-\zeta r_1}}{r_1} \right| \varphi_{nl} \right\rangle \quad \text{et} \quad e_2 = \left\langle \varphi_{nl} \left| -\beta e^{-\gamma r_1} \right| \varphi_{nl} \right\rangle$$

correspondent respectivement à :

e_1 (a.u)	e_2 (a.u)	I^+ (a.u)
-0.0404383	-0.015115	-0.396153853

Tableau 1

I^+ étant l'énergie d'ionisation de l'électron de valence. La contribution de $\langle \psi_f | -2 \frac{e^{-\sigma r_1}}{r_1} | \psi_i \rangle$ à la section efficace différentielle étant très faible devant celle de $\langle \psi_f | \frac{1}{r_1} | \psi_i \rangle$, notre approximation est largement justifiée.

Il faut noter que notre procédure représente une généralisation de situation plus simple, ce qui nous permet de déduire à partir de l'expression donnant la section efficace de Li (eq. IV-2-6) en même temps la section efficace de H(1s) et H(2s) et Li. En choisissant les paramètres appropriés c_{ij} et v_j on peut retrouver la fonction d'onde initiale relative à chaque atome (voir tableau 2).

	LITHIUM	HYDROGENE 2S	HYDROGENE 1S
c_{01}	-1.1270217	0.7071067	2
c_{11}	0	-0.3535533	-----
c_{02}	-0.3235305	-----	-----
c_{13}	1.6904053 10^{-4}	-----	-----
c_{14}	0.4000519	-----	-----
c_{15}	0.1048121	-----	-----
c_{16}	-0.4104118	-----	-----
v	2.4803	0.5	1
v_2	4.7071	-----	-----
v_3	0.3500	-----	-----
v_4	0.6600	-----	-----
v_5	1	-----	-----
v_6	1.7350	-----	-----

Tableau 2

Pour chaque atome il est possible de déterminer la section efficace par différentes approximations : l'approximation de l'onde plane où la fonction BBK est remplacée par deux ondes planes, l'approximation coulomb partial wave first Born approximation (CPWFBA) où une onde coulombienne remplace une onde plane, coulomb wave first Born approximation (CWFBA) où on prend l'état final comme produit de deux ondes coulombiennes et finalement l'approximation BBK. Il faut dans ce cas charger les valeurs appropriées de \bar{P}_i , \bar{K}_i , α_i et λ_i dans l'expression de W (eq. IV-2-6).

Le tableau 3 donne les valeurs de ces paramètres relatifs à la contribution des termes du potentiel $-2\frac{e^{-\alpha r_1}}{r_1}$ et $-\frac{1}{r_1}$ et le tableau 4 ceux correspondant au terme $\frac{1}{r_{12}}$.

	\bar{K}_1	\bar{K}_2	\bar{K}_3	\bar{P}_1	\bar{P}_2	α_1	α_2	α_3	λ	λ_2	λ_3
onde BBK	\bar{k}_1	$-\bar{k}_2$	$-\bar{k}_{12}$	\bar{k}_i	0	α_1	α_2	α_{12}	0	ν_j	0
Deux ondes coulombienne	\bar{k}_1	$-\bar{k}_2$	0	\bar{k}_i	0	α_1	α_2	0	0	ν_j	0

Tableau 3

	\bar{K}_1	\bar{K}_2	\bar{K}_3	\bar{P}_1	\bar{P}_2	α_1	α_2	α_3	λ	λ_2	λ_3
Onde BBK	$-\bar{k}_{12}$	$-\bar{k}_2$	\bar{k}_1	$\bar{k}_1 - \bar{k}_i$ $+ \bar{k}_{12}$	$\bar{k}_1 - \bar{k}_i$	α_{12}	α_2	α_1	0	ν_j	0
Deux ondes coulombienne	\bar{k}_1	\bar{k}_2	\bar{k}_1	$-\bar{k}_i$	$\bar{k}_1 - \bar{k}_i$	0	α_2	α_1	0	ν_j	0
Une onde coulombienne	0	\bar{k}_2	0	$\bar{k}_i - \bar{k}_1$	$\bar{k}_1 - \bar{k}_i$	0	α_2	0	0	ν_j	0
Onde plane	0	\bar{k}_2	0	$\bar{k}_i - \bar{k}_1$	$\bar{k}_1 - \bar{k}_i$	0	0	0	0	ν_j	0

Tableau 4

On note que dans le cas des deux dernières approximations on ne tient compte dans le potentiel que du terme $\frac{1}{r_{12}}$.

a- Résultats et discussions:

Malgré le fait que le lithium soit l'un des éléments ayant la structure électronique la plus simple après l'hydrogène et l'hélium, les études de son ionisation sont très peu nombreuses. La plupart des travaux réalisés concernent le calcul de la section efficace totale d'ionisation. McDowell et al (1964) et plus récemment Bartschat (1989) ont étudié le paramètre d'asymétrie associé à la section efficace totale en considérant la collision entre des électrons et des atomes alcalins polarisés (Li, Na, K).

Les seuls résultats à notre connaissance sur la section efficace triplement différentielle d'ionisation du lithium sont ceux obtenus expérimentalement par Frost et al (1990) et par la procédure d'ondes partielles DWBA modifiées de Zhang et al (1992) qui ont étudié les distributions angulaires de la section efficace différentielle pour les électrons éjectés, pour les valeurs d'énergie incidente de 100 eV et 54 eV.

Frost et al et Baum et al considèrent dans leurs expériences que les deux électrons sortants ont la même valeur d'énergie. Dans ces conditions l'indiscernabilité entre les deux électrons est totale et de ce fait on ne peut pas négliger le terme d'échange dans l'équation (IV-2-2). Les résultats que nous allons présenter dans ces conditions tiennent compte de cet effet.

Avant de présenter la variation de la section efficace en fonction des différents paramètres cinématiques de la collision nous comparons les résultats de nos calculs aux résultats existants. La figure (IV-1) représente la section efficace différentielle dans le cas symétrique où les deux électrons sortent avec la même énergie. En fixant l'énergie incidente à 100 eV et l'angle de diffusion à 45° par rapport à la direction d'incidence, nous présentons la variation en terme de l'angle d'éjection θ_2 . On peut tout d'abord observer l'accord entre les trois résultats. La section efficace représente un pic dans la direction $\theta_2 = 315^\circ$ et devient nulle lorsque les deux électrons sortent dans la même direction c'est à dire $\theta = \theta_2 = 45^\circ$, ceci peut s'expliquer par le fait que les deux électrons ne peuvent pas sortir avec la même vitesse dans la même direction. Dans ce cas on trouve que les amplitudes de la section efficace directe p et d'échange q sont nulles toutes les deux, alors que Zhang et al expliquent ceci par le fait que les amplitudes d'échange et directe doivent être égales et faibles mais non nulles. Les résultats de l'ionisation de l'hydrogène 2s dans ces conditions montrent comme nous pouvons le prévoir une similitude avec ceux du lithium. Ceci nous permet, dans le cas où des résultats de l'hydrogène sont disponibles, de faire des prédictions qualitatives sur le lithium.

Dans le cas asymétrique nous comparons nos résultats dans la figure (IV-2) à ceux de Zhang et al pour une valeur d'énergie incidente $E_i=100$ eV, en prenant $E_1=71$ eV et un angle de diffusion de 45° . Nous trouvons ici une différence au niveau du maximum. Cependant l'allure de la courbe est la même. Il y a un pic dans la direction du moment de transfert et un minimum dans le cas où $\theta = \theta_2 = 45^\circ$. Notons que dans cette direction la section efficace n'est plus nulle, c'est à dire que la probabilité pour que les deux électrons sortent dans la même direction, s'ils n'ont pas la même vitesse, n'est pas nulle. Ce minimum s'atténue quand la différence d'énergie entre les électrons émergents grandit.

Pour déterminer les conditions optimales angulaires pour une expérience de même type que celle réalisée par Frost et al, c'est à dire lorsque les deux électrons sortant ont la même énergie, nous représentons dans la figure (IV-3) la variation de la section efficace en fonction des angles θ et θ_2 pour une énergie incidente de 300 eV. Le maximum de la courbe correspond au cas où $\theta = 45^\circ$ et $\theta_2 = 315^\circ$, c'est à dire que l'angle entre les deux électrons est de 90° .

Dans le cas asymétrique la situation est différente. L'électron éjecté a tendance à sortir avec un grand angle alors que le diffusé sort avec un petit angle. Ceci est montré sur la figure (IV-4) qui représente la section efficace en fonction des angles θ et θ_2 avec $E_1=241.6$ eV et $E_2=5$ eV. La figure (IV-5) représente la variation de la section efficace en fonction des énergies des deux électrons pour $\theta = 11^\circ$ et $\theta_2=280^\circ$. On peut observer que le maximum de la courbe se trouve dans la région où l'énergie de l'électron éjecté est faible pour n'importe quelle valeur de l'énergie E_1 . Un maximum se trouve dans la région où E_1 est proche de 50 eV et E_2 de 5 eV et un autre dans le cas où E_1 est proche de 120 eV et E_2 de 5 eV. La valeur de la section efficace s'atténue au fur et à mesure qu'on s'éloigne de la région des faibles valeurs de E_2 .

On peut donc dire que:

- Dans le cas d'une collision symétrique coplanaire l'échange est important et la direction la plus probable est celle où les deux électrons sortent avec un angle de 90° entre eux.
- Dans le cas d'une collision non symétrique coplanaire, l'échange peut être négligé si la différence entre les énergies des deux électrons est grande. L'électron diffusé a tendance de garder la plus grande partie de l'énergie résiduelle et quitter le système dans θ très faible, contrairement à l'éjecté.

Il est intéressant de comparer l'ionisation de l'hydrogène excité à l'état 2s à celle du lithium. L'amplitude de la section efficace triplement différentielle d'ionisation de H(2s) est beaucoup plus grande. On peut voir ceci dans la figure (IV-6) qui représente la section efficace en fonction de θ_2 pour les conditions $E_1=241.6\text{eV}$, $E_2=5\text{ eV}$ et $\theta = 9^\circ$. La TDCS d'ionisation de Li doit être multipliée par un coefficient pour ramener le maximum de la courbe à celui de H(2s). On peut voir que les deux courbes se ressemblent, le pic binaire est aigu et dans la région du recul il y a un minimum.

Comme nous l'avons décrit dans le paragraphe (IV-2) nous pouvons calculer la section efficace d'ionisation à partir de l'équation (IV-2-6) pour différents modèles. Sur la figure (IV-7) nous représentons les sections efficaces correspondant à chacun des modèles cités plus haut dans le cas de l'ionisation de H(2s). On déduit que le modèle d'onde plane donne des valeurs trop grandes au niveau du pic binaire, et le pic de recul est absent. Le modèle CPWFBA surestime le pic binaire et ne donne pas un deuxième maximum relatif présent dans le modèle BBK qui reproduit le noeud de la fonction d'onde initiale. Le modèle correspondant au produit des deux ondes coulombiennes (CWFBA) décale légèrement la position du pic binaire.

La figure (IV-8) représente la même variation dans le cas d'ionisation du lithium. L'énergie de l'électron incident est fixée à $E_i=252\text{ eV}$, celle de l'électron éjecté à $E_2=5\text{ eV}$ et l'angle de diffusion à $\theta = 9^\circ$. On peut remarquer la différence d'amplitude de la section efficace entre les trois modèles, la section efficace calculée par le modèle BBK est plus faible d'un facteur de 1,8 par rapport au modèle (CPWFBA) et d'un facteur de 1,2 par rapport au modèle (CWFBA). La position du pic binaire est légèrement décalée dans les modèles (CPWFBA) et (CWFBA) par rapport à celui du modèle BBK.

Depuis les expériences de Ehrhardt et al (1969) on a pu vérifier d'une façon expérimentale ce que les résultats théoriques prévoient comme directions privilégiées d'éjection. La section efficace représente deux maximums, un dans la direction du moment de transfert \vec{K}_t et l'autre dans la direction opposée, c'est à dire pour $\theta_2=\theta_t$ et $\theta_2=\theta_t+\pi$. Ces deux directions correspondent aux minimums du recul de l'ion. Pour expliquer cette idée nous considérons \vec{q} la quantité de mouvement représentant le recul de l'ion. La conservation de la quantité de mouvement donne: $\vec{K}_i = \vec{K}_1 + \vec{K}_2 + \vec{q}$ et le moment de transfert est donné par $\vec{K}_t = \vec{K}_1 - \vec{K}_2$, le carré du module du moment de transfère est donné par $|\vec{q}|^2 = |\vec{K}_t - \vec{K}_2|^2$. Pour trouver les extremums de $|\vec{q}|^2$ il faut chercher les zéros de la dérivée partielle de $|\vec{q}|^2$ par rapport à θ_2 . On trouve que les extremums vérifient les conditions $\theta_2=\theta_t$ et $\theta_2=\theta_t+\pi$, qui sont justement les directions des pics binaire et de recul. On peut donc conclure que la section efficace est maximale quand le recul est minimum.

Partant de la même idée on peut chercher les extremums de la section efficace lorsqu'elle varie en fonction de l'angle de diffusion θ . On note $\vec{K}' = \vec{K}_i - \vec{K}_2$. La conservation de la quantité de mouvement donne: $\vec{K}_i = \vec{K}' + \vec{K}_2$, soit θ' l'angle que fait \vec{K}' avec la direction de l'électron incident. Les extremums de $|\vec{q}|^2$, quand θ est variable, vérifient la condition $\frac{\partial |\vec{q}|^2}{\partial \theta_1} = 0$. Les valeurs de θ qui vérifient cette condition sont $\theta = \theta'$ et $\theta = \theta' + \pi$.

Pour vérifier cette hypothèse nous avons représenté la section efficace en fonction de θ . La figure (IV-9) représente la variation de la DCS en terme de θ lorsque l'énergie incidente est fixée à $E_i=300$ eV et celle de l'éjecté à $E_2=3$ eV avec l'angle d'éjection $\theta_2= 280^\circ$. La comparaison entre les trois modèles CPWFBA, CCWFBA et BBK montre que pour le premier la section efficace est totalement décroissante, pour le deuxième modèle elle est décroissante jusqu'à $\theta = 4^\circ$ puis représente une variation semblable à celle du modèle BBK. La DCS calculée avec le modèle BBK à un maximum dans la direction de θ' qui est représentée par une flèche sur la figure (IV-9). La corrélation introduite dans la fonction d'onde BBK à pour effet de ramener la section efficace, qui est très grande au voisinage de 0 dans les autres modèles, à de faibles valeurs.

La figure (IV-10) représente également la section efficace en fonction de l'angle θ . Dans ce cas nous avons pris $E_i = 300$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_2 = 280^\circ$ comme précédemment la courbe représente un maximum dans la direction de θ' , mais légèrement décalé de sa direction exacte.

Nous montrons ainsi que la détermination de la section efficace différentielle avec un potentiel modèle et des fonctions corrélées du double continuum est possible et donne des résultats qui sont en meilleur accord avec les rares résultats expérimentaux existants que les autres méthodes.

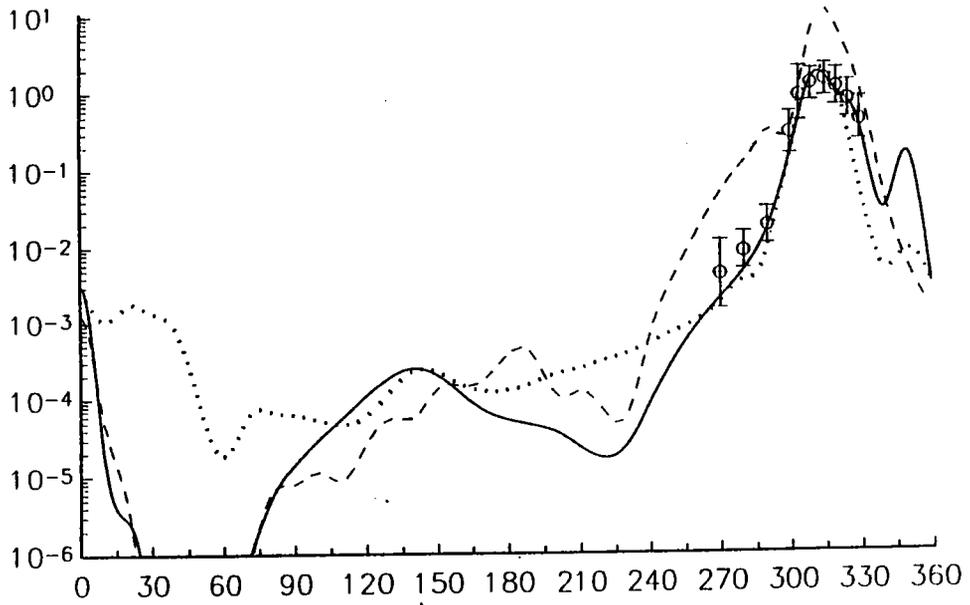


FIG. IV-1. Section efficace différentielle d'ionisation de Li par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 100$ eV, $E_2 = E_1$ et $\theta_1 = 45^\circ$ en fonction de θ_2 . —, modèle BBK;, modèle DWBA modifié résultats de (Zhang et al); o, résultats des expériences de Frost et al; -.-.-, section efficace d'ionisation de H(2s).

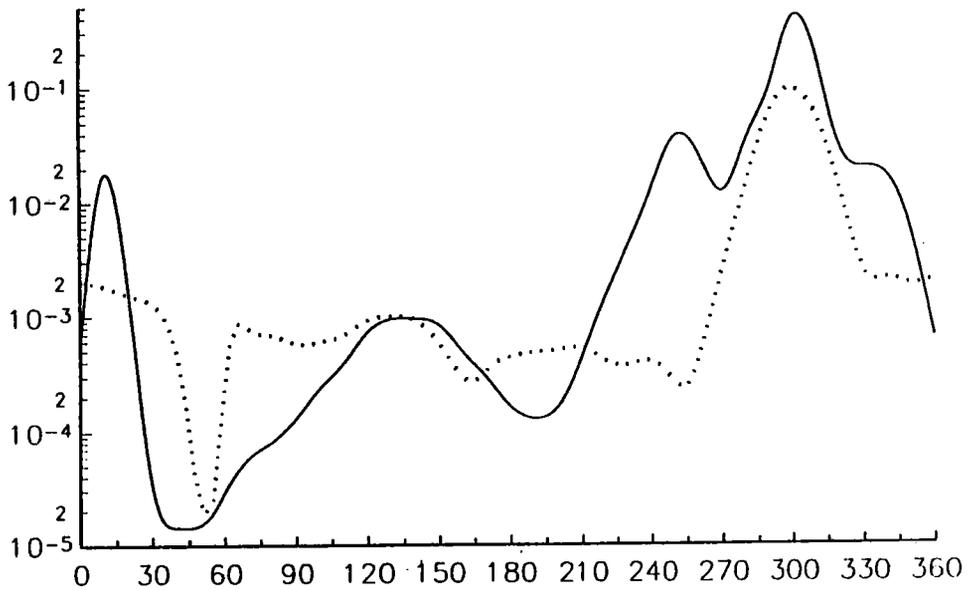


FIG. IV-2. Section efficace différentielle d'ionisation de Li par impact d'électrons dans le cas où $E_i = 100$ eV, $E_2 = E_1$ et $\theta_1 = 45^\circ$ en fonction de θ_2 . —, modèle BBK;, modèle DWBA modifié résultats de (Zhang et al).

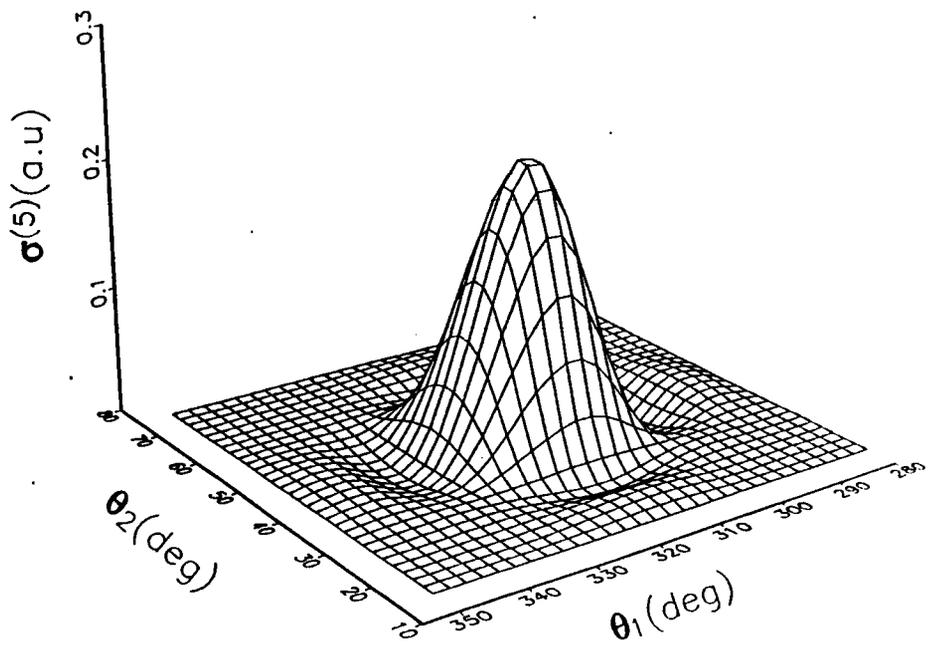


FIG. IV-3. Variation de la section efficace différentielle en fonction des angles θ_1 et θ_2 des électrons diffusé et éjecté. L'énergie de l'électron incident est de 300eV, les énergies de l'électron diffusion et éjecté vérifient $E_1=E_2$.

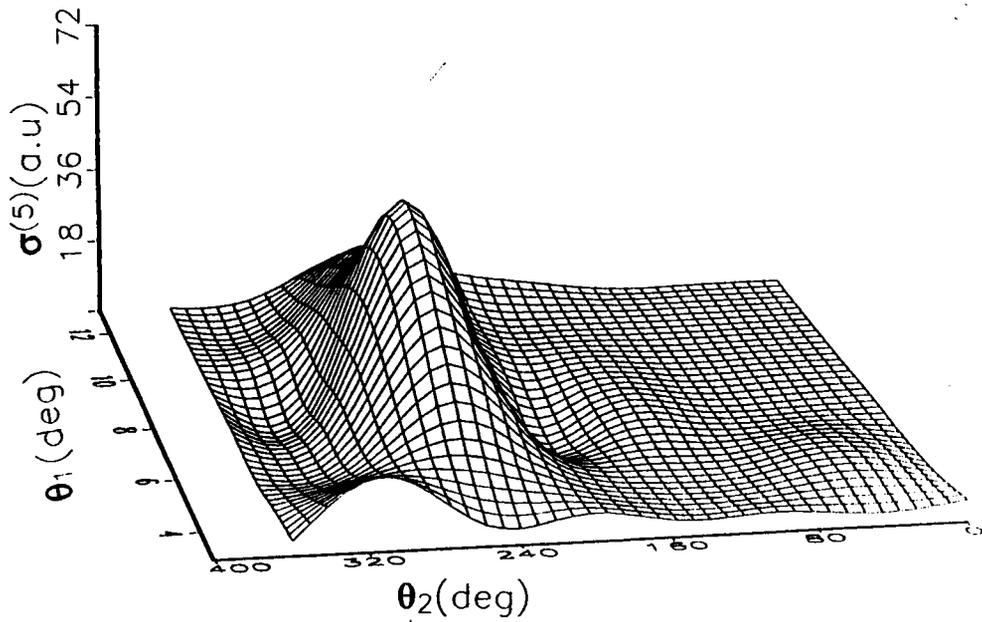


FIG. IV-4. Variation de la section efficace différentielle en fonction des angles θ_1 et θ_2 des électrons diffusé et éjecté. L'énergie de l'électron incident est de, les énergies de l'électron diffusion et éjecté sont fixées respectivement à $E_1= 241.6$ eV et $E_2=5.eV$.

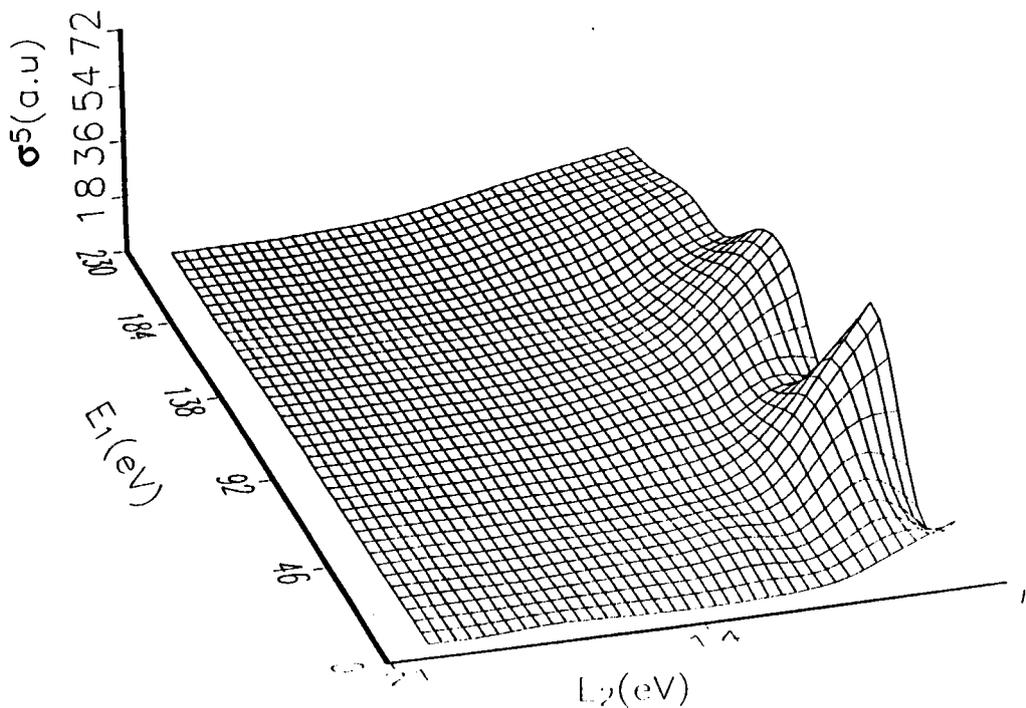


FIG. IV-5. Variation de la section efficace différentielle en fonction des énergies E_1 et E_2 des électrons diffusé et éjecté pour des angles de diffusion et d'éjection fixés respectivement à $\theta_1=11^\circ$ et $\theta_2=280^\circ$.

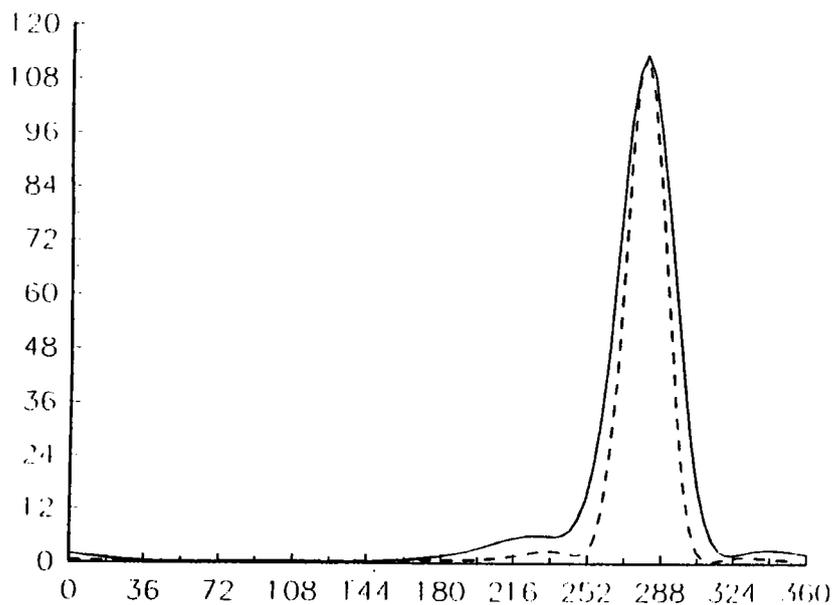


FIG. IV-6. Comparaison entre la section efficace d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de son état excité 2s et le lithium. L'énergie de l'électron diffusé est de 241.6 eV celle de l'électron éjecté est de 5 eV l'angle de diffusion est $\theta_1=9^\circ$. —, ionisation de Li (x 4,245); ----, ionisation de H(2s).

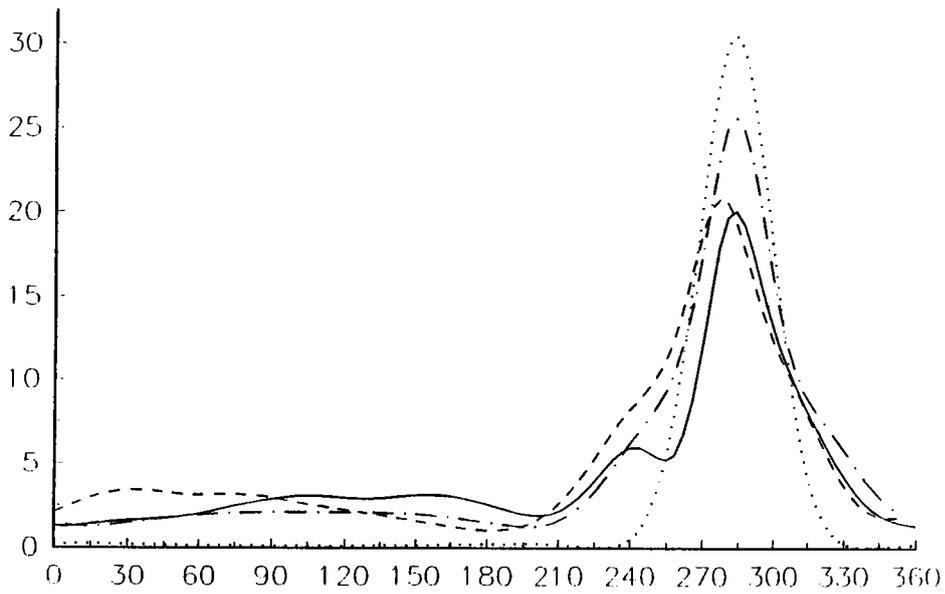


FIG. IV-7. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome d'hydrogène à partir de l'état excité 2s en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1 = 250$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta = 5^\circ$. —, modèle BBK ; , modèle CPWFBA; ----, modèle CWFBA;, modèle de l'onde plane. (la valeur de la section efficace est multipliée par $\frac{1}{20}$).

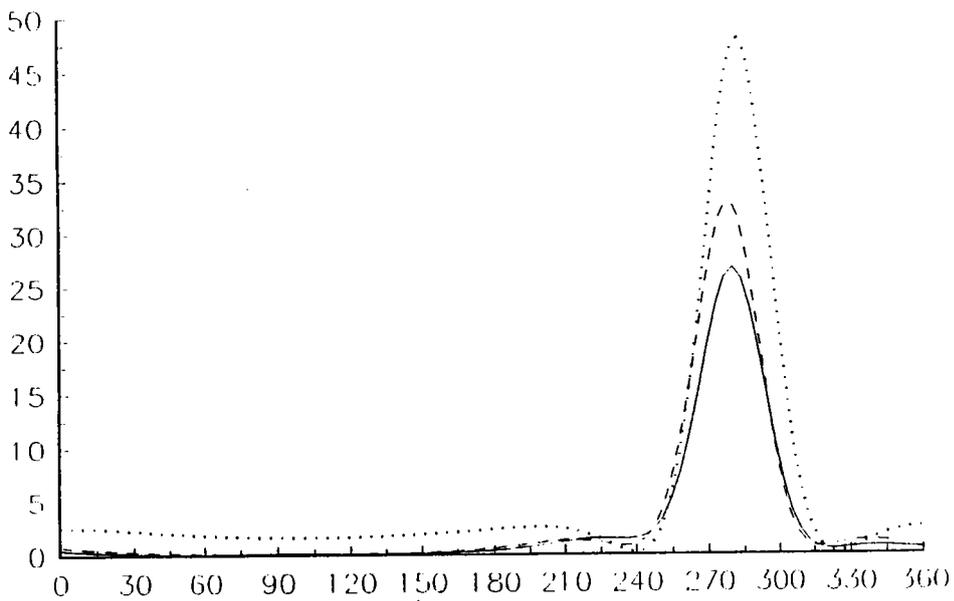


FIG. IV-8. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome de lithium en fonction de l'angle de l'électron éjecté dans le cas où $E_1 = 252$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_1 = 9^\circ$. —, modèle BBK ;, modèle CPWFBA; ----, modèle CWFBA.

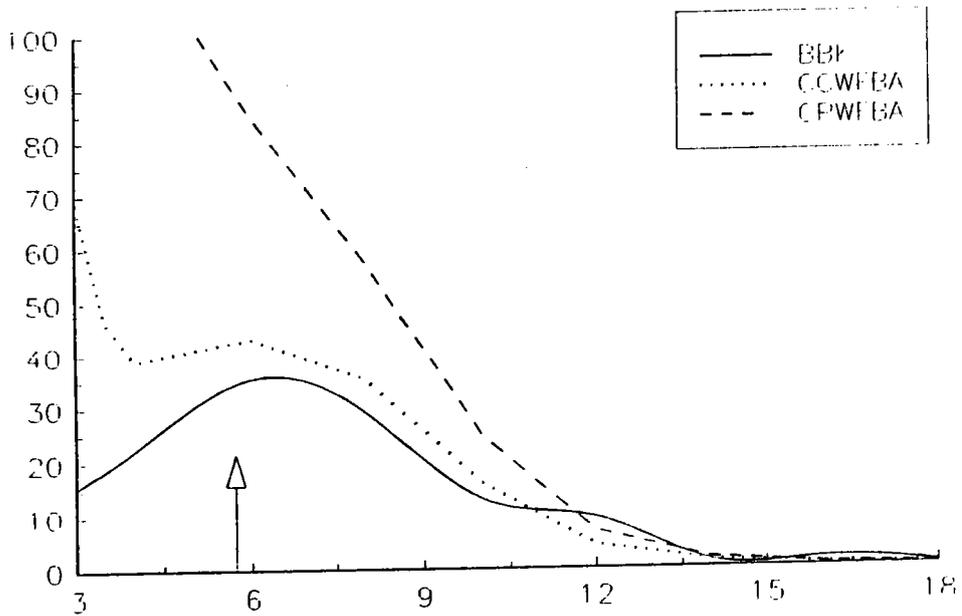


FIG. IV-9. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome de lithium en fonction de l'angle de l'électron diffusé dans le cas où $E_1 = 300$ eV, $E_2 = 3$ eV et $\theta_2 = 280^\circ$. —, modèle BBK ;, modèle CWFBA; ----, modèle CPWFBA.

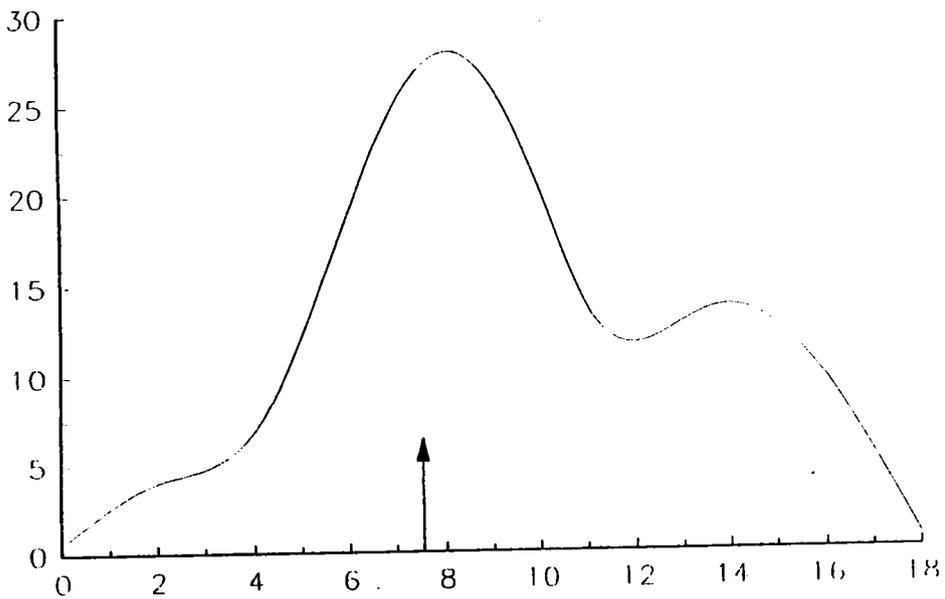


FIG. IV-10. Variation de la section efficace différentielle d'ionisation de l'atome de lithium en fonction de l'angle de l'électron diffusé dans le cas où $E_1 = 300$ eV, $E_2 = 5$ eV et $\theta_2 = 280^\circ$.

CONCLUSION

Nous avons présenté dans ce travail les principes théoriques d'une étude de l'ionisation simple des atomes à un électron actif par impact électronique. Ce travail nécessite la mise en place d'une description d'un problème à trois corps pour notre situation post collisionnelle où deux électrons du continuum se trouvent dans le champ coulombien de l'ion. Pour décrire ce système nous avons été amené à adopter des fonctions d'onde corrélées du type Pluinage. Après avoir créé les outils de base nécessaires, développé la procédure de calcul des éléments de matrice de transition à partir de ces fonctions et surmonté les difficultés créées par la présence des termes de corrélation nous avons entrepris l'étude de l'ionisation simple de l'hydrogène 1s et 2s et du lithium.

L'étude de l'ionisation de l'hydrogène, dont les fonctions d'onde sont exactement connues, présente l'avantage d'être un test direct pour les voies de sortie. Nos résultats pour l'état fondamental 1s sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux dans un très large domaine d'énergies des électrons émergents. La nécessité de l'introduction de la corrélation apparaît plus clairement quand on observe que des méthodes présentées dans le chapitre 3, basées sur d'autres approches plus simples comme la méthode CPWFBA, donnent des résultats comparables aux nôtres dans le domaine des hautes énergies incidentes (≈ 5 keV) mais sont incapables de décrire la collision dans le domaine des faibles énergies (moins de 3 fois l'énergie d'ionisation), où la corrélation électronique à l'état final apparaît très forte.

Une partie importante du travail est consacrée à l'étude de l'ionisation simple des états métastables. L'étude de l'ionisation de l'hydrogène dans son état 2s présente un double avantage. Elle donne des indications importantes sur les directions d'éjection et de diffusion dans les expériences qui sont en cours de préparation (Zheng et al) et permet de réaliser des études sur d'autres systèmes atomiques possédant un électron externe dans une orbitale 2s. Nos résultats comparés à ceux des méthodes introduisant l'approximation de Born de second ordre ou encore une méthodologie de type Glauber montrent que, comme pour l'état 1s, l'ionisation de l'état 2s est bien décrite par notre modèle. Nous avons observé également que la structure de la section efficace différentielle est semblable à celle de l'ionisation de H(1s), où les positions des pics binaires et de recul correspondent à une énergie minimale pour le recul de l'ion. Nous avons présenté les situations cinématiques et géométriques les plus favorables pour une expérience à moyenne énergie incidente.

L'étape suivante a été l'adaptation de notre procédure à l'ionisation du lithium, l'interaction projectile-cible étant décrite par un potentiel modèle. Nous avons développé nos calculs pour des situations cinématiques variées et pu vérifier que nos résultats étaient en excellent accord avec les quelques mesures expérimentales existantes.

En conclusion, nous avons développé une méthode de description des effets de corrélation dans un double continuum. Nous avons réussi pour la première fois à appliquer cette méthode à l'ionisation de l'hydrogène 2s et du lithium. Notre travail ouvre la voie pour une plus large application des fonctions corrélées du double continuum aux systèmes alcalins.

APPENDICE A

PROBABILITE DE TRANSITION

La probabilité de transition est associée à l'état initial et à l'état final par la relation :

$$P_{if} = \left| \langle \Psi'_0(\vec{r}, t) | \Psi(\vec{r}, t) \rangle \right|^2 \quad (A1)$$

On définit l'opérateur $U'(t, 0) = e^{iH_0 t} e^{-iH t}$ (A2)

La fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ s'écrit sous une forme où on voit apparaître les Hamiltoniens de l'état initial et de l'état final :

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-iH_0 t} U'(t, 0) \Gamma \quad (A3)$$

$$= e^{-iH_0 t} S X_i \quad (A4)$$

Où S représente la matrice de diffusion de Heisenberg elle est définie par:

$$S X_i = U'(t, 0) \Gamma \quad (A5)$$

En remplaçant (A5) et (I-2-34) dans (A1) la probabilité de transition s'écrit :

$$P_{i \rightarrow f} = \left| \langle \chi_f | S | X_i \rangle \right|^2 \quad (A6)$$

La matrice S est reliée à la matrice T par (voir appendice B) :

$$\langle \chi_f | S | X_i \rangle = \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 A(\vec{q}_1, \vec{q}_2) \left[\delta_{fi} - 2\pi \delta(E_i - E_f) \right] \langle f | T | i \rangle \quad (A7)$$

Le poids des états, $A(\vec{q}_1, \vec{q}_2)$, peut s'écrire comme le produit de deux termes: $a_1(\vec{q}_1 - \vec{p}_1) a_2(\vec{q}_2 - \vec{p}_2)$ où $a_j(\vec{q}_j - \vec{p}_j)$ est le poids de la particule j décrite par le paquet d'onde X_j et vérifie la relation :

$$\int |a_j(\vec{q}_j - \vec{p}_j)|^2 d\vec{q}_j = \quad (A8)$$

a_j est relié à l'amplitude du paquet d'onde par la relation :

$$G_j(\vec{r}) = \int a_j(\vec{p}) e^{i\vec{p}\vec{r}} d\vec{p} \quad (\text{A9})$$

et au paquet d'onde et à la densité de la particule incidente v respectivement par :

$$X_1 = \chi_{1,\vec{p}} G_1(\vec{r}) \quad (\text{A10})$$

$$v = (2\pi)^{-3} |G_1(\vec{r})|^2 \quad (\text{A11})$$

le flux de particules incidentes se déplaçant le long d'un axe oz ; c'est à dire le nombre de particules qui traversent la cible par unité de surface par seconde est:

$$F = (2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{+\infty} dz |G_1(0, 0, z)|^2 \quad (\text{A12})$$

en utilisant les équations (A6) et (A7) et introduisant la conservation de la quantité de mouvement par l'intermédiaire de la fonction de Dirac on obtient :

$$P_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 d\vec{q}'_1 d\vec{q}'_2 a_1(\vec{q}_1 - \vec{p}_1) a_1^*(\vec{q}'_1 - \vec{p}'_1) a_2(\vec{q}_2 - \vec{p}_2) a_2^*(\vec{q}'_2 - \vec{p}'_2) \\ \delta(E_i - E_f) \delta(E_i' - E_f') \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) \delta(\vec{P}_i' - \vec{P}_f') T_{if} T_{if}^* \quad (\text{A13})$$

où E_i et E_f sont les énergies de l'état initial et final du système, $\vec{P}_i = \vec{q}_1 + \vec{q}_2$ et $\vec{P}_i' = \vec{q}'_1 + \vec{q}'_2$. On note \vec{i} l'état du système au centre du paquet d'onde ce qui nous permet de faire l'approximation $T_{if} T_{if}^* \approx |T_{if}|^2$. De la même façon on peut faire l'approximation suivante:

$$\delta(E_i - E_f) \delta(E_i' - E_f') = \delta(E_i - E_f) \delta(E_i' - E_i) \approx \delta(E_i - E_f) \delta(E_i' - E_i) \quad (\text{A14})$$

$$\delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) \delta(\vec{P}_i' - \vec{P}_f') = \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) \delta(\vec{P}_i' - \vec{P}_i) \approx \delta(\vec{P}_i - \vec{P}_f) \delta(\vec{P}_i' - \vec{P}_i) \quad (\text{A15})$$

On pose :

$$\vec{p}_j = \vec{q}_j - \vec{p}_j \text{ et } \vec{p}'_j = \vec{q}'_j - \vec{p}'_j \quad (\text{A16})$$

Le développement en série de Taylor en \vec{p} ne tenant compte que des deux premiers termes donne :

$$E_{j,\vec{q}} = E_{j,\vec{p}} + \vec{p} \cdot \vec{\nabla} E_{j,\vec{p}} = E_{j,\vec{p}} + \vec{p} \cdot \vec{v} \quad (\text{A17})$$

ainsi :

$$E_{i,\bar{q}} - E_{f,\bar{q}} = (\bar{\rho}'_1 - \bar{\rho}_1) \bar{v}_1 + (\bar{\rho}'_2 - \bar{\rho}_2) \bar{v}_2 \quad (\text{A18})$$

D'après les équations (A16), (A18) et les lois de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie, l'équation (A13) devient :

$$P_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \int d\bar{\rho}_1 d\bar{\rho}_2 d\bar{\rho}'_1 d\bar{\rho}'_2 a_1(\bar{\rho}_1) a_1^*(\bar{\rho}'_1) a_2(\bar{\rho}_2) a_2^*(\bar{\rho}'_2) \delta((\bar{\rho}'_1 - \bar{\rho}_1) \bar{v}_1 + (\bar{\rho}'_2 - \bar{\rho}_2) \bar{v}_2) \delta(\bar{\rho}'_1 + \bar{\rho}'_2 - \bar{\rho}_1 - \bar{\rho}_2) |T_{if}|^2 \quad (\text{A19})$$

où on a noté l'élément de matrice T au centre du paquet d'onde par T_{if} . En intégrant par rapport à $\bar{\rho}'_2$ et en supposant ensuite que $a_2^*(\bar{\rho}_2 + \bar{\rho}_1 - \bar{\rho}'_1) = a_2^*(\bar{\rho}_2)$, on aura :

$$P_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \int d\bar{\rho}_1 d\bar{\rho}_2 d\bar{\rho}'_1 a_1(\bar{\rho}_1) a_1^*(\bar{\rho}'_1) |a_2(\bar{\rho}_2)|^2 \delta((\bar{\rho}'_1 - \bar{\rho}_1)(\bar{v}_1 - \bar{v}_2)) |T_{if}|^2 \quad (\text{A20})$$

La fonction δ peut s'écrire sous la forme :

$$\delta(\bar{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ixt} \quad (\text{A21})$$

Utilisant les équations (A8) et (A9) la probabilité de transition devient :

$$P_{i \rightarrow f} = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} dx |G_1(x(\bar{v}_1 - \bar{v}_2))|^2 |T_{if}|^2 \quad (\text{A22})$$

La probabilité de transition devient proportionnelle au flux des particules incidentes, en fait si on suppose que les particules se déplacent dans la direction de l'axe oz on aura d'après l'équation (A12) :

$$P_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\bar{P}_i - \bar{P}_f) |T_{if}|^2 \frac{F}{|\bar{v}_1 - \bar{v}_2|} \quad (\text{A23})$$

où \bar{v}_1 et \bar{v}_2 représentent respectivement les vitesses des particules incidentes et cible dans le repère lié au laboratoire.

Appendice B:

RELATION ENTRE LES MATRICES S ET T

Nous voulons démontrer que: $(\chi_f, S X_i) = \delta_{if} - 2\pi\delta(E_f - E_i)\langle f|T|i\rangle$.

On définit l'opérateur S par :

$$S X_i = U'(t, 0)U(t, 0)X_i \quad (\text{B-1})$$

U est l'opérateur unitaire d'évolution, il est définie par la relation (I-2-14) du chapitre I, X_i est le paquet d'onde associé à l'état i. En utilisant la relation (I-2-16) on peut écrire :

$$S X_i = e^{iH't} e^{iHt} \Gamma \quad (\text{B-2})$$

L'expression de Γ de l'équation (I-2-27) permet d'écrire :

$$S X_i = e^{iH't} e^{iHt} \lim_{\eta \rightarrow 0} \left[X_i + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V X_i \right] \quad (\text{B-3})$$

En remplaçant X_i par son expression de l'équation (I-2-8) on obtient :

$$S X_i = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int d\bar{q}_1 d\bar{q}_2 A(\bar{q}_1, \bar{q}_2) e^{iH't} e^{iHt} \left[\chi_i + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V \chi_i \right] \quad (\text{B-4})$$

$\left[\chi_i + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V \chi_i \right]$ étant vecteur propre de H pour la valeur propre E_i :

$$H \left[\chi_i + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V \chi_i \right] = E_i \left[\chi_i + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V \chi_i \right] \quad (\text{B-5})$$

$$\text{en fait : } (H - E_i) \lim_{\eta \rightarrow 0} \left[\chi_i + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V \chi_i \right] = (V \chi_i - V \chi_i) = 0 \quad (\text{B-6})$$

La relation (B-5) nous permet d'écrire le produit scalaire de χ_f avec $S X_i$ sous la forme :

$$(\chi_f, S X_i) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int d\bar{q}_1 d\bar{q}_2 A(\bar{q}_1, \bar{q}_2) e^{iH't} e^{iHt} \left[(\chi_f, \chi_i) + \frac{1}{E_i - i\eta - H} V(\chi_f, \chi_i) \right] \quad (\text{B-7})$$

La relation donnée par⁽⁴⁶⁾ $\lim_{t \rightarrow 0} \frac{e^{i(E_f - E_i)t}}{E_f - (E_i - i\eta)} = 2\pi\delta(E_f - E_i)$, les relations (A-7) et (I-2-8)

permettent finalement d'obtenir a partir de (B-7) :

$$(\chi_f, S X_i) = \delta_{if} - 2\pi\delta(E_f - E_i) \langle f | T | i \rangle \quad (\text{B-8})$$

APPENDICE C : SEPARATION DU MOUVEMENT DU CENTRE DE MASSES DE L'ION ET LES ELECTRONS EMERGENTS

Considérons un système formé de trois particules 1, 2, 3 de masses respectives m_1 , m_2 et m_3 . Dans un repère fixe d'origine O leurs coordonnées sont respectivement $\vec{\rho}_1$, $\vec{\rho}_2$ et $\vec{\rho}_3$ et leurs quantités de mouvements sont \vec{P}_1 , \vec{P}_2 et \vec{P}_3 . Suivant la méthode décrite dans le chapitre II on peut ramener le problème du mouvement des trois particules à celui du mouvement du centre de masses de deux particules et les distances relatives. Pour cela nous effectuons le changement de variable suivant:

$$\vec{r}_2 = \vec{\rho}_2 - \vec{\rho}_3 \quad (C-1)$$

$$\vec{R} = \frac{m_2 \vec{\rho}_2 + m_3 \vec{\rho}_3}{m_2 + m_3} \quad (C-2)$$

Soit o_{ij} le centre de masse des particules i et j . La figure C1 illustre les positions des vecteurs définits ci dessus, ainsi que la position des particules 1 et 2 par rapport à leurs centre de masse o_{12} .

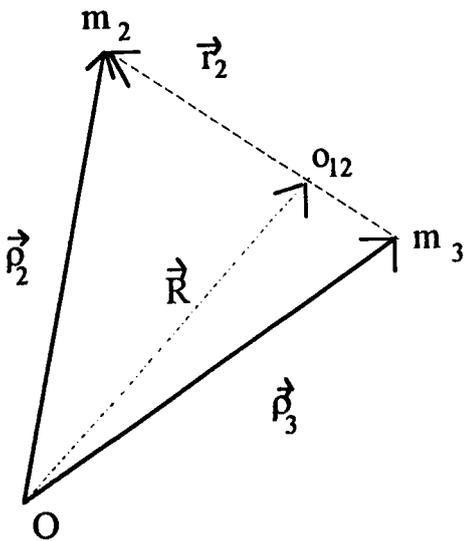


Figure B1

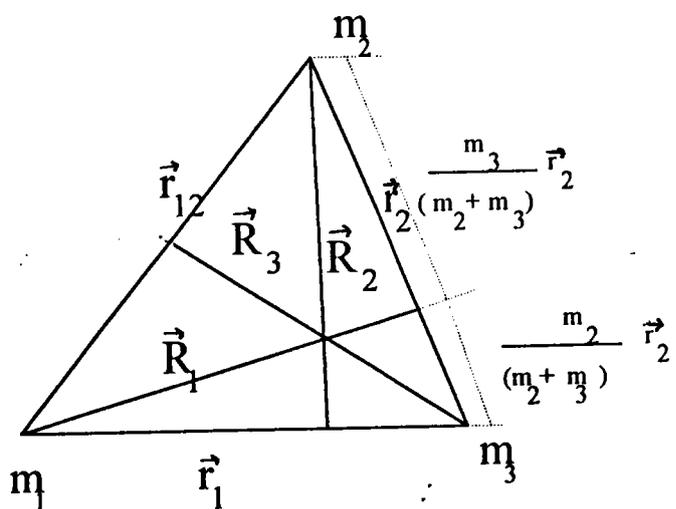


Figure B2

APPENDICE C : SEPARATION DU MOUVEMENT DU CENTRE DE MASSES DE L'ION ET LES ELECTRONS EMERGENTS

Considérons un système formé de trois particules 1, 2, 3 de masses respectives m_1 , m_2 et m_3 . Dans un repère fixe d'origine O leurs coordonnées sont respectivement $\vec{\rho}_1$, $\vec{\rho}_2$ et $\vec{\rho}_3$ et leurs quantités de mouvements sont \vec{P}_1 , \vec{P}_2 et \vec{P}_3 . Suivant la méthode décrite dans le chapitre II on peut ramener le problème du mouvement des trois particules à celui du mouvement du centre de masses de deux particules et les distances relatives. Pour cela nous effectuons le changement de variable suivant:

$$\vec{r}_2 = \vec{\rho}_2 - \vec{\rho}_3 \quad (C-1)$$

$$\vec{R} = \frac{m_2 \vec{\rho}_2 + m_3 \vec{\rho}_3}{m_2 + m_3} \quad (C-2)$$

Soit o_{ij} le centre de masse des particules i et j . La figure C1 illustre les positions des vecteurs définits ci dessus, ainsi que la position des particules 1 et 2 par rapport à leurs centre de masse o_{12} .

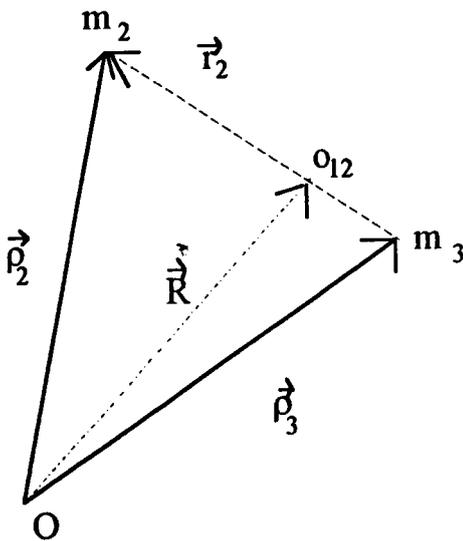


Figure B1

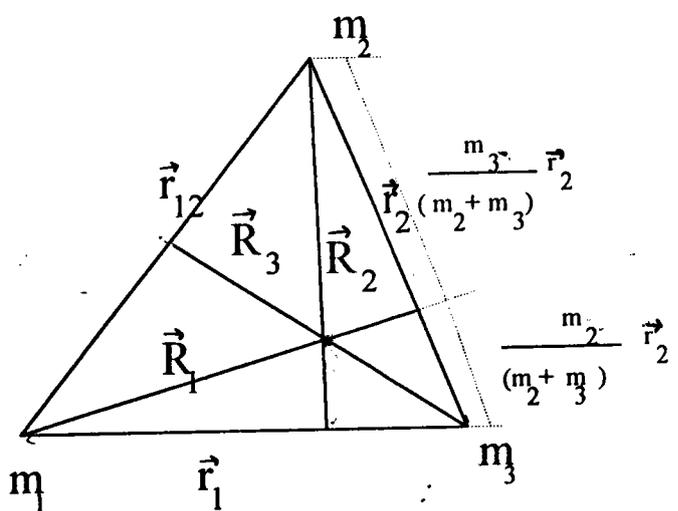


Figure B2

Un deuxième changement de variable nous donne $\bar{R}_1 = \bar{\rho}_1 - \bar{R}$, $\bar{R}' = \frac{(m_2 + m_3)\bar{R} + m_1\bar{\rho}_1}{m_1 + m_2 + m_3}$.

Ceci permet de séparer le mouvement des trois particules en un mouvement de centre de masses indépendamment du mouvement relatif des deux particules dont le Hamiltonien dépend de (\bar{r}_2, \bar{R}_1) , qui constitue un groupe de coordonnées de Jacobi.

De la même façon on peut définir deux autres groupes de coordonnées (\bar{r}_1, \bar{R}_2) et $(\bar{r}_{12}, \bar{R}_3)$ selon qu'on considère respectivement les combinaisons 2+(1,3) ou 3+(1,2) décrite dans le chapitre II.

les masses réduites associées à chaque groupe de coordonnées de Jacobi sont :

$$m_{ij} = \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} \quad M_i = \frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 + m_2 + m_3} \frac{1}{m_{jk}} \quad (i,j,k)=(1,2,3) \quad (C-3)$$

Nous cherchons à trouver les relations qui relient les groupes de coordonnées de Jacobi Pour cela nous nous référons à la figure C2 d'où on peut facilement déduire :

$$\bar{r}_2 = \frac{m_1}{m_1 + m_3} \bar{r}_1 + \bar{R}_2 \quad (C-4)$$

$$\bar{R}_1 = -\frac{m_2}{m_2 + m_3} \bar{R}_2 + \left(1 - \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)(m_2 + m_3)}\right) \bar{r}_1 \quad (C-5)$$

$$\bar{r}_{12} = \bar{R}_2 - \frac{m_3}{m_1 + m_3} \bar{r}_1 \quad (C-6)$$

$$\bar{R}_3 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \bar{R}_2 + \left(1 - \frac{m_2 m_3}{(m_1 + m_2)(m_1 + m_3)}\right) \bar{r}_1 \quad (C-7)$$

On peut définir de même les relations qui relient les différents groupes de moment (\bar{k}_2, \bar{K}_1) , $(\bar{k}_{12}, \bar{K}_3)$ et (\bar{k}_1, \bar{K}_2) . L'expression de \bar{R}_1 devient si on remplace \bar{R} par sa valeur :

$$\bar{R}_1 = \bar{\rho}_1 - \frac{m_2 \bar{\rho}_2 + m_3 \bar{\rho}_3}{m_2 + m_3} \quad (C-8)$$

On note que dans le système du centre de masses des deux particules (2,3) $\bar{P}_1 + \bar{P}_2 = 0$, si on dérive l'équation (C-8) par rapport au temps on déduit que le moment conjugué de \bar{R}_1 est :

$$\bar{K}_1 = \bar{P}_1 \quad (C-9)$$

Le moment conjugué de \bar{r}_2 est $\bar{k}_2 = m_{23} \frac{d}{dt} \bar{r}_2$, à partir de l'équation (C-1) en dérivant par rapport au temps on obtient : $\frac{\bar{k}_2}{m_{23}} = \frac{\bar{P}_2}{m_2} - \frac{\bar{P}_3}{m_3}$. Ce qui donne :

$$\bar{k}_2 = \frac{m_3 \bar{P}_2 - m_2 \bar{P}_3}{m_2 + m_3} \quad (C-10)$$

De la même façon si on prend la combinaison 2+(1+3) on peut définir les moments conjugués de \bar{r}_1 et \bar{R}_2 par

$$\bar{k}_1 = \frac{m_1 \bar{P}_3 - m_3 \bar{P}_1}{m_1 + m_3} \quad (C-11)$$

$$\bar{K}_2 = \bar{P}_2 \quad (C-12)$$

La quantité de mouvement dans le système centre de masses total est nulle c'est à dire :

$$\bar{P}_1 + \bar{P}_2 + \bar{P}_3 = 0 \quad (C-13)$$

D'après les relations (C-6) et (C-8) on peut écrire :

$$\bar{k}_1 = -\frac{m_3}{m_1 + m_3} \bar{P}_2 - \bar{P}_3 \quad (C-14)$$

et les relations (C-9), (C-10), (C-12), et (C-14) nous permettent d'écrire:

$$\begin{pmatrix} \bar{k}_2 \\ \bar{K}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m_3}{m_2 + m_3} & -\frac{m_2}{m_2 + m_3} \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{P}_2 \\ \bar{P}_3 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \bar{P}_2 \\ \bar{P}_3 \end{pmatrix} \quad (C-15)$$

et

$$\begin{pmatrix} \bar{K}_2 \\ \bar{k}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{m_3}{m_2 + m_3} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{P}_2 \\ \bar{P}_3 \end{pmatrix} \quad (C-16)$$

Si on multiplie par l'inverse de A les deux membres de l'équation (C-15) on peut exprimer $\begin{pmatrix} \bar{P}_2 \\ \bar{P}_3 \end{pmatrix}$ en fonction de $\begin{pmatrix} \bar{k}_2 \\ \bar{K}_1 \end{pmatrix}$, qu'on utilise dans l'équation (C-16). On obtient ainsi :

$$\begin{pmatrix} \bar{K}_2 \\ \bar{k}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{m_2}{m_2 + m_3} \\ \frac{m_1}{m_1 + m_3} & 1 - \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_3)(m_2 + m_3)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{k}_2 \\ \bar{K}_1 \end{pmatrix} \quad (C-18)$$

De manière analogue, on peut trouver la relation liant $\begin{pmatrix} \bar{k}_{12} \\ \bar{K}_3 \end{pmatrix}$ à $\begin{pmatrix} \bar{K}_2 \\ \bar{k}_1 \end{pmatrix}$ ainsi on ' a :

$$\bar{k}_{12} = \left(1 - \frac{m_2 m_3}{(m_1 + m_2)(m_1 + m_3)} \right) \bar{K}_2 - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \bar{k}_1 \quad (C-19)$$

$$\bar{K}_3 = \frac{m_3}{m_1 + m_3} \bar{K}_2 + \bar{k}_1 \quad (C-20)$$

$$\bar{K}_2 = \bar{k}_2 - \frac{m_2}{m_2 + m_3} \bar{K}_1 \quad (C-21)$$

$$\bar{k}_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_3} \bar{k}_2 + \left(1 - \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_3)(m_2 + m_3)} \right) \bar{K}_1 \quad (C-22)$$

Approximation de \bar{k}_{12} en fonction \bar{k}_1 et \bar{k}_2 :

D'après les équations (C-8) et (C-10) on peut écrire :

$$\bar{k}_{12} = \left(1 - \frac{m_2 m_3}{(m_1 + m_2)(m_1 + m_3)} \right) \left(\bar{k}_2 - \frac{m_2}{m_2 + m_3} \bar{K}_1 \right) - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \bar{k}_1 \quad (C-23)$$

En raison de la grande différence entre la masse de l'électron et celle du noyau : $m_1 = m_2 \ll m_3$, on peut faire l'approximation suivante :

$$\frac{m_2}{m_2 + m_3} = \frac{m_1}{m_1 + m_3} \rightarrow 0, \quad \frac{m_1}{m_1 + m_2} = \frac{1}{2} \text{ et } \frac{m_3}{m_1 + m_3} \approx 1.$$

\bar{k}_{12} devient alors :

$$\bar{k}_{12} = \frac{\bar{k}_2 - \bar{k}_1}{2} \quad (C-24)$$

La somme des produits du moment avec les coordonnées d'espace c'est à dire $\bar{k}_i \bar{r}_i + \bar{k}_j \bar{r}_j$ est la même dans chaque groupe de coordonnées de Jacobi. Ceci peut se déduire des relations de passage d'un système de coordonnées à l'autre. En fait d'après les relations (C-4), (C-5), (C-21), (C-22) on peut déduire que : $\bar{k}_2 \bar{r}_2 + \bar{K}_1 \bar{R}_1 = \bar{K}_2 \bar{R}_2 + \bar{k}_1 \bar{r}_1$ et de la même façon, les équations (C-6), (C-7), (C-19), (C-20) donnent : $\bar{k}_{12} \bar{r}_{12} + \bar{K}_3 \bar{R}_3 = \bar{K}_2 \bar{R}_2 + \bar{k}_1 \bar{r}_1$.

APPENDICE D :

NORME DE LA FONCTION D'ONDE BBK

Considérons la fonction d'onde déterminée dans le chapitre II :

$$\Psi_f(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \prod_{i=1}^3 \Psi_c^i(\bar{r}_i, \bar{k}_i, \alpha_i, \beta_i) \quad (D-1)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \alpha_1 = \frac{-Z}{k_1}, \alpha_2 = \frac{-Z}{k_2}, \alpha_3 = \frac{1}{k_3} = \frac{1}{k_{12}} \\ \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1, \varepsilon_3 = 0 \quad \bar{r}_3 = \bar{r}_2 - \bar{r}_1 \end{cases} \quad (D-2)$$

$$\text{et } \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \beta_j) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}\varepsilon_j} e^{-\frac{\pi\alpha_j}{2}} \Gamma(1-i\alpha_j) {}_1F_1(i\alpha_j, 1, -i[\bar{r}_j\bar{k}_j + r_j k_j]) \quad (D-3)$$

La norme de Ψ_f :

$$\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = \int d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \prod_{j=1}^3 \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \varepsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \varepsilon_j) \quad (D-4)$$

peut être écrite sous la forme:

$$\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = \prod_{j=1}^3 \int d\bar{r}_j \delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2 - \bar{r}_3) \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \varepsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \varepsilon_j) \quad (D-5)$$

En remplaçant la fonction δ par son expression intégrale :

$$\delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2 - \bar{r}_3) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\bar{p} e^{i\bar{p}(\bar{r}_1 - \bar{r}_2 - \bar{r}_3)} \quad (D-6)$$

nous obtenons:

$$\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = (2\pi)^{-3} \int d\bar{p} \prod_{j=1}^3 \int d\bar{r}_j e^{\pm i\bar{p}\bar{r}_j} \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \varepsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \varepsilon_j) \quad (D-7)$$

où le signe + pour $i=1$ et le signe - pour $i=2, 3$. On pose :

$$G_j = \int d\bar{r}_j e^{\pm i\bar{p}\bar{r}_j} \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \varepsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \varepsilon_j) \quad (D-8)$$

la norme devient alors :

$$\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle = (2\pi)^{-3} \int d\bar{p} \prod_{j=1}^3 G_j(\bar{k}_j, \bar{k}'_j, \alpha_j, \alpha'_j, \varepsilon_j, \bar{p}) \quad (D-9)$$

G_j peut être ramenée à une fonction plus simple si on multiplie les termes de l'intégrale par $\frac{e^{-x r_j}}{r_j}$ et on dérive par rapport à x puis tendre $x \rightarrow 0$:

$$G_j = - \lim_{x \rightarrow 0} \int d\bar{r}_j \frac{e^{-x r_j}}{r_j} e^{\pm i\bar{p}\bar{r}_j} \Psi_c^j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \varepsilon_j) \Psi_c^{j*}(\bar{r}'_j, \bar{k}'_j, \alpha'_j, \varepsilon_j) \quad (D-10)$$

Si on remplace Ψ_c^j et Ψ_c^{j*} par leurs valeurs de (D-3) on peut réécrire G_j sous la forme :

$$G_j = - \lim_{x \rightarrow 0} \frac{d}{dx} C_j I_j \quad (D-11)$$

avec :

$$C_j = (2\pi)^{-3\varepsilon_j} e^{-\frac{\pi}{2}(\alpha_j + \alpha'_j)} \Gamma(1 - i\alpha_j) \Gamma(1 - i\alpha'_j) \quad (D-12)$$

et

$$I_j = \int d\bar{r}_j e^{i[\varepsilon_j \bar{k}_j - \varepsilon'_j \bar{k}'_j \pm \bar{p}] \bar{r}_j} {}_1F_1(i\alpha_j, 1, -i[\bar{r}_j \bar{k}_j + r_j k_j]) {}_1F_1(-i\alpha'_j, 1, -i[\bar{r}_j \bar{k}'_j + r_j k'_j]) \quad (D-13)$$

La fonction hypergéométrique peut s'écrire sous la forme intégrale (voir M. Abramowitz and I. A. Stegun)⁽¹⁾ :

$${}_1F_1(a, b, z) = \frac{1}{B(a, b-a)} \int_0^1 e^{zt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt \quad (D-14)$$

où B désigne la fonction Beta. L'intégrale I_j devient alors :

$$I_j = \frac{1}{B(i\alpha_j, 1 - i\alpha_j) B(-i\alpha'_j, 1 + i\alpha'_j)} \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 t_1^{i\alpha_j - 1} (1-t_1)^{-i\alpha_j} t_2^{i\alpha'_j - 1} (1-t_2)^{-i\alpha'_j} g(t_1, t_2) \quad (D-15)$$

où :

$$g(t_1, t_2) = \int \frac{d\bar{r}_j}{r_j} e^{(-x-it_1 k_j + it_2 k'_j)r_j} e^{(\bar{q}_j - it_1 \bar{k}_j + it_2 \bar{k}'_j)\bar{r}_j} \quad (D-16)$$

et $\bar{q}_j = \varepsilon_j(\bar{k}_j - \bar{k}'_j) \pm \bar{p}$

L'intégrale g a pour valeur :

$$g(t_1, t_2) = -2\pi [(\delta + \beta)t_1 t_2 + (\gamma + \alpha)t_1 - t_2\beta - \alpha]^{-1} \quad (D-17)$$

avec:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}(\bar{q}_j^2 + x^2) \\ \beta &= \bar{k}'_j \bar{q}_j - i x k'_j \\ \delta &= \bar{k}_j \bar{k}'_j - k_j k'_j - \beta \\ \gamma &= \bar{q}_j \bar{k}_j - i x k_j - \alpha \end{aligned} \quad (D-18)$$

Si on remplace $g(t_1, t_2)$ dans l'équation (D-15), on obtient:

$$I_j = \frac{-2\pi}{B(i\alpha_j, 1 - i\alpha_j)B(-i\alpha'_j, 1 + i\alpha'_j)} \int_0^1 dt_2 t_2^{-i\alpha'_j - 1} (1 - t_2)^{i\alpha_j} f(t_2) \quad (D-19)$$

avec :

$$f(t_2) = \int_0^1 dt_1 t_1^{i\alpha_j - 1} (1 - t_1)^{-i\alpha_j} [((\delta + \beta)t_2 + \gamma + \alpha)t_1 - t_2\beta - \alpha]^{-1} \quad (D-20)$$

On peut réduire cette intégrale à une fonction Beta si on fait le changement de variable $t_1 = \frac{1}{1+v}$ ce qui donne :

$$\begin{aligned} f(t_2) &= \int_0^1 dv v^{i\alpha_j} [(S+R) + Sv]^{-1} \\ &= \frac{R^{i\alpha_j - 1}}{(S+R)^{i\alpha_j}} B(i\alpha_j, 1 - i\alpha_j) \end{aligned} \quad (D-21)$$

avec :

$$S = (\alpha + \beta)t_2 + \gamma + \alpha$$

$$R = -t_2\beta - \alpha$$

En remplaçant $f(t_2)$ dans l'équation (D-19) on obtient :

$$I_j = \frac{2\pi}{B(-i\alpha'_j, 1 + i\alpha'_j)} \int_0^1 dt_2 t_2^{-i\alpha'_j - 1} (1 - t_2)^{i\alpha_j} (\beta t_2 + \alpha)^{i\alpha_j - 1} (\delta t_2 + \gamma)^{-i\alpha_j} \quad (D-22)$$

Dans l'intégrale I_j les quatre termes dépendent de t_2 , qu'il faut réduire à trois et changer les bornes de l'intégration de 0 à $+\infty$ pour pouvoir écrire I_j en fonction de la fonction hypergéométrique ${}_2F_1(a, b, c, z)$, pour cela on change $t_2 = \frac{1}{y+1}$ ce qui nous donne :

$$I_j = \frac{2\pi}{B(-i\alpha'_j, 1+i\alpha'_j)} \alpha^{i\alpha_j-1} \gamma^{-i\alpha_j} \int_0^{+\infty} dy y^{i\alpha'_j} (b+y)^{-i\alpha_j} (c+y)^{i\alpha_j-1} \quad (D-23)$$

où on a posé $b = \frac{\delta+\gamma}{\gamma}$ et $c = \frac{\alpha+\beta}{\alpha}$. Cette intégrale peut finalement s'écrire⁽⁴⁷⁾ :

$$I_j = 2\pi \alpha^{i\alpha_j-1} \gamma^{-i\alpha_j} b^{-i\alpha_j} c^{i\alpha_j+i\alpha'_j} {}_2F_1\left(i\alpha_j, i\alpha'_j+1, 1, 1-\frac{c}{b}\right) \quad (D-24)$$

Utilisant la relation ${}_2F_1(a_1, a_2, a_3, z) = (1-z)^{-a_1} {}_2F_1\left(a_1, a_3-a_2, 1, \frac{z}{z-1}\right)$ et en remplaçant b et c par leurs valeurs on obtient :

$$I_j = 2\pi e^{-\pi\alpha_j} \alpha^{i\alpha_j-i\alpha'_j-1} \gamma^{-i\alpha_j} (\alpha+\beta)^{-i\alpha_j} {}_2F_1\left(i\alpha_j, -i\alpha'_j, 1, 1-\frac{\beta\gamma+\alpha\delta}{\gamma(\alpha+\beta)}\right) \quad (D-25)$$

Reprenons maintenant l'équation (D-11) :

$$G_j = -\lim_{x \rightarrow 0} \frac{d}{dx} C_j I_j = G_j = -C_j \lim_{x \rightarrow 0} \frac{d}{dx} I_j \quad (D-26)$$

La dérivée de I_j par rapport à x permet d'écrire G_j sous la forme de la somme de deux termes :

$$G_j = G_{j1} + G_{j2},$$

avec :

$$G_{j1} = -C_j \lim_{x \rightarrow 0} 2\pi e^{-\pi\alpha_j} (1-i\alpha_j+i\alpha'_j) \alpha^{i\alpha_j-i\alpha'_j} \left(\frac{d}{dx} \alpha^{-1}\right) \gamma^{-i\alpha_j} (\alpha+\beta)^{-i\alpha_j} {}_2F_1\left(i\alpha_j, -i\alpha'_j, 1, 1-\frac{\beta\gamma+\alpha\delta}{\gamma(\alpha+\beta)}\right) \quad (D-27)$$

et :

$$G_{j2} = -C_j \lim_{x \rightarrow 0} \left\{ \left[\frac{-i\alpha_j(x - ik_j)}{\gamma} + \frac{i\alpha'_j(x - ik'_j)}{\gamma} \right] I_j(x) + 2\pi e^{-\pi\alpha_j} \alpha_j \alpha'_j \alpha^{i\alpha_j - i\alpha'_j - 1} \gamma^{-i\alpha_j} (\alpha + \beta)^{-i\alpha_j} \right. \\ \left. \times \frac{d}{dx} \left(\frac{-\alpha(\delta + \gamma)}{\gamma(\alpha + \beta)} \right) {}_2F_1 \left(i\alpha_j + 1, 1 - i\alpha'_j, 2, 1 - \frac{\beta\gamma + -\alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)} \right) \right\} \quad (D-28)$$

Dans l'expression de G_{j1} apparaît la dérivée de $\frac{1}{\alpha}$ par rapport à x , qui se réduit à la fonction δ (voir Oh et col)⁽⁷¹⁾ en faite :

$$\lim_{x \rightarrow 0} 2 \frac{d}{dx} \frac{1}{x^2 + \bar{q}^2} = -4\pi^2 \delta(\bar{q}) \quad (D-29)$$

L'intégration sur \bar{p} dans (D-9) peut être réduite à une intégration sur \bar{q} , et en utilisant les équations (D-29), (D-12) et (D-18) on déduit que:

$$\int d\bar{p} \prod_{j=1}^3 G_{j1}(\bar{k}_j, \bar{k}'_j, \alpha_j, \alpha'_j, \varepsilon_j, \bar{p}) = \prod_{j=1}^3 (2\pi)^3 C_j e^{-\pi\alpha_j} (1 - i\alpha_j + i\alpha'_j) \lim_{x \rightarrow 0} \alpha^{i\alpha_j - i\alpha'_j} \gamma^{-i\alpha_j} \\ \times (\alpha + \beta)^{-i\alpha_j} {}_2F_1 \left(i\alpha_j, -i\alpha'_j, 1, 1 - \frac{\beta\gamma + -\alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)} \right) \delta(\bar{k}_a - \bar{k}'_a) \delta(\bar{k}_b - \bar{k}'_b) \quad (D-30) \\ = (2\pi)^3$$

La contribution de G_{j2} est négligeable⁽¹⁵⁾ puisque la deuxième partie de l'intégrale comprend le produit de $G_{j1} G_{j2}$, la fonction δ donne une contribution finie et si on écrit $\bar{k}'_a = \bar{k}_a + \bar{\varepsilon}_a$ et $\bar{k}'_b = \bar{k}_b + \bar{\varepsilon}_b$ avec $k_a \gg \varepsilon_a$ et $k_b \gg \varepsilon_b$ les termes croisés donnent des valeurs proportionnelles à ε_a et ε_b qui sont petits.

finalement d'après (D-9) et (D-30) on déduit que la norme est égale a 1.

APPENDICE E :

DETERMINATION DE L'INTEGRALE

$W(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \bar{K}_3, \bar{P}_1, \bar{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$

On pose

$\chi_j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \alpha_j, \beta_j) = e^{-i(\bar{k}_j + \bar{p}_j)\epsilon_j \bar{r}_j - \lambda_j \bar{r}_j} {}_1F_1(-i\alpha_j, 1, i[\bar{r}_j \bar{k}_j + \bar{r}_j k_j])$ (E-1)

avec :

$\epsilon_1 = \epsilon_2 = 1, \epsilon_3 = 0 \quad \bar{r}_3 = \bar{r}_2 + \bar{r}_1$ (E-2)

L'intégrale W devient :

$W(\bar{k}_1, \bar{k}_2, \bar{k}_3, \bar{P}_1, \bar{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \int \frac{d\bar{r}}{\eta} d\bar{r}_2 \prod_{j=1}^3 \chi_j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \bar{p}_j, \alpha_j, \lambda_j, \epsilon_j)$ (E-3)

L'expression de la troisième fonction hypergéométrique sous la forme intégrale, où l'intégration porte sur un contour ℓ incluant les points 0 et 1 (voir fig. (E-1)) est:

$F_1(a, b, z) = (2\pi i)^{-1} \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)} \int_{\ell} e^{zu} (-u)^{a-1} (1-u)^{b-a-1} du$ (E-4)
 $\Re(b-a) > 0$

W devient :

$W(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \bar{K}_3, \bar{P}_1, \bar{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (2\pi i)^{-1} \int_{\ell} du (-u)^{-i\alpha_3-1} (1-u)^{i\alpha_3} I(u)$ (E-5)

Où $\bar{q}_j = \bar{k}_j - \bar{k}_3 u$ et

$I(u) = \int \frac{d\bar{r}}{\eta} d\bar{r}_2 e^{i(k_3 u - \lambda_3) |\bar{r}_1 + \bar{r}_2|} \prod_{j=1}^2 \chi_j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \bar{q}_j, \alpha_j, \lambda_j, \epsilon_j)$ (E-6)

Remarquons que :

$F_1(a, 1, 0) = (2\pi i)^{-1} \int_{\ell} (-u)^{a-1} (1-u)^{-a} du = 1$ (E-7)

ceci veut dire que :

$$W(\bar{K}_1, \bar{K}_2, \bar{K}_3, \bar{P}_1, \bar{P}_2, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = I(0) + (2\pi i)^{-1} \int_{\mathcal{C}} du (-u)^{-i\alpha_3-1} (1-u)^{i\alpha_3} [I(u) - I(0)] \quad (E-8)$$

On peut décomposer le contour \mathcal{C} de la manière suivante : $\mathcal{C} = \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3 + \mathcal{C}_4 + \mathcal{C}_5 + \mathcal{C}_6$

L'intégrale sur \mathcal{C} devient donc la somme de 6 termes :

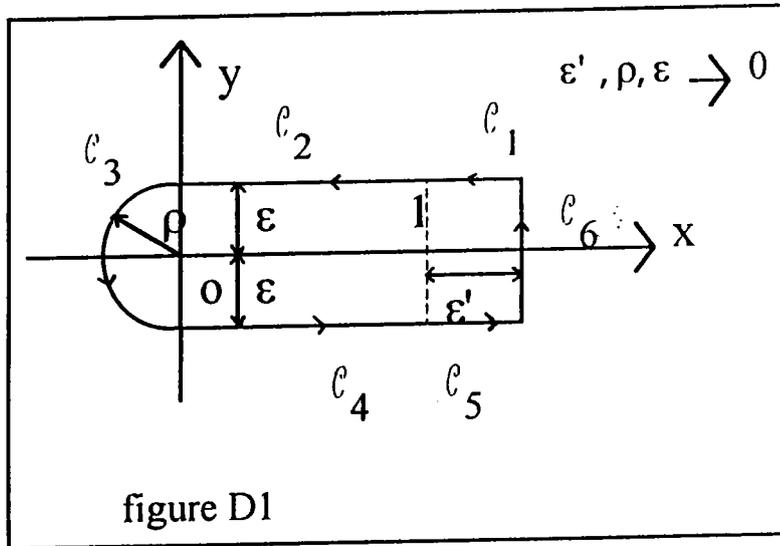


figure D1

$$\int_{\mathcal{C}} du (-u)^{-i\alpha_3-1} (1-u)^{i\alpha_3} [I(u) - I(0)] = \sum_{n=1}^6 \int_{\mathcal{C}_n} f(u) du \quad (E-9)$$

où :

$$f(u) = (-u)^{-i\alpha_3-1} (1-u)^{i\alpha_3} [I(u) - I(0)] \quad (E-10)$$

$$\int_{\mathcal{C}_6} f(u) du = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} i \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(1 + \epsilon' + iy) dy = 0 \quad (E-11)$$

L'intégrale sur \mathcal{C}_1 est opposée à celle sur \mathcal{C}_5 . En effet :

$$\int_{\mathcal{C}_1} f(u) du = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\epsilon'+1}^1 f(x + i\epsilon) dx \quad (E-12)$$

et

$$\int_{\mathcal{C}_5} f(u) du = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_1^{\epsilon'+1} f(x - i\epsilon) dx \quad (E-13)$$

$$\int_{\mathcal{C}_3} f(u) du + \int_{\mathcal{C}_1} f(u) du = 0 \quad (\text{E-14})$$

Si $\varepsilon \rightarrow 0$ le contour \mathcal{C}_3 devient équivalent au cercle de centre 0 et de rayon ρ qui a une singularité en $u=0$. D'après le théorème des résidus de Cauchy on a :

$$\int_{\mathcal{C}_2} f(u) du = \text{Res}(f, u = 0) = \lim_{u \rightarrow 0} [u f(u)] = 0 \quad (\text{E-15})$$

Prenons maintenant en considération le contour \mathcal{C}_2 . On peut développer u sous la forme trigonométrique : $u = r e^{i\varphi}$ où $\varphi = \arctg \frac{\varepsilon}{x}$ et $r = x \cos \varphi$.

Si $\varepsilon \rightarrow 0$ alors $\varphi \rightarrow 0$ et $r \rightarrow x$. Dans ce cas on peut écrire :

$$(-u)^{-i\alpha_3} (1-u)^{i\alpha_3} = (-re^{i\varphi})^{-i\alpha_3} (1-re^{i\varphi})^{i\alpha_3} = e^{-\pi\alpha_3 x - i\alpha_3(1-x)^{i\alpha_3}} \quad (\text{E-16})$$

Ceci nous permet d'écrire l'intégrale sur \mathcal{C}_2 sous la forme :

$$\int_{\mathcal{C}_2} f(u) du = e^{-\pi\alpha_3} \int_0^1 \left(\frac{1-x}{x} \right)^{i\alpha_3} \left[\frac{I(x) - I(0)}{x} \right] dx \quad (\text{E-17})$$

Sur \mathcal{C}_4 on a fait un tour dans ce cas la phase de u devient $2\pi - \varphi$, on a donc :

$$(-u)^{-i\alpha_3} (1-u)^{i\alpha_3} = e^{\pi\alpha_3 x - i\alpha_3(1-x)^{i\alpha_3}} \quad (\text{E-18})$$

Finalement si on utilise les équations (E-9), (E-11), (E-14), (E-15), (E-17) et (E-18) on obtient :

$$\int_{\mathcal{C}} f(u) du = (e^{\pi\alpha_3} - e^{-\pi\alpha_3}) \int_0^1 \left(\frac{1-x}{x} \right)^{i\alpha_3} \left[\frac{I(x) - I(0)}{x} \right] dx \quad (\text{E-19})$$

L'expression de l'intégrale I est déterminée analytiquement⁽¹³⁾. Elle est semblable à celle utilisée par Schultz⁽⁸⁴⁾ et Geltman et Hidalgo⁽⁴³⁾ qui ont proposé une expression bien adaptée à un traitement numérique. Oh et collaborateurs⁽⁷¹⁾ ont également donné une expression de cette intégrale. La méthode qu'on proposera par la suite est inspirée de celle de Sinha et Sil⁽⁸⁵⁾ et Roy et collaborateurs⁽⁷⁹⁾.

Dans la relation (E-6) on remplace le terme $e^{[ik_3 x - \lambda_3] [\bar{k} - \bar{k}_1]}$ par la forme intégrale suivante :

$$e^{[ik_3x - \lambda_3] \bar{r}_1 - \bar{r}_2} = \frac{\lambda_3 - ik_3x}{\pi^2} \int \frac{d\bar{\lambda}}{[\lambda^2 + (\lambda_3 - ik_3x)^2]} e^{i(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)\bar{\lambda}} \quad (E-20)$$

on obtient :

$$I(x) = \frac{\lambda_3 - ik_3x}{\pi^2} \int \frac{d\bar{\lambda}}{[\lambda^2 + (\lambda_3 - ik_3x)^2]} \int \frac{d\bar{r}}{\eta} d\bar{r}_2 \prod_{j=1}^2 \chi_j(\bar{r}_j, \bar{k}_j, \bar{q}_j, \alpha_j, \lambda_j, \varepsilon_j) e^{i\bar{r}_j \bar{\lambda}} \quad (E-21)$$

La fonction χ_j dépend de la fonction hypergéométrique confluyente qui peut s'écrire ⁽³⁷⁾ sous la forme :

$$F_1(a, b, z) = (2\pi i)^{-1} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)\Gamma(b-a)} \int_0^1 dt (t)^{a-1} (1-t)^{b-a-1} e^{zt} \quad (E-22)$$

$$\Re(b) > \Re(a) > 0$$

Pour que la condition sur a et b soit réalisée, on doit supposer que :

$$\begin{aligned} -i\alpha_1 &= -ia_1 + \varepsilon \\ \text{et } -i\alpha_2 &= -ia_2 + \varepsilon \end{aligned} \quad (E-23)$$

Si on utilise la relation (E-22) et on remplace χ_j par sa valeur, l'équation (E-21) devient :

$$I(x) = \frac{\lambda_3 - ik_3x}{\pi^2} \int \frac{d\bar{\lambda}}{[\lambda^2 + (\lambda_3 - ik_3x)^2]} \prod_{j=1}^2 [\Gamma(-i\alpha_j)\Gamma(1+i\alpha_j)]^{-1} \int_0^1 du_j u_j^{-i\alpha_j-1} (1-u_j)^{i\alpha_j} \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda_2}\right) \int \frac{d\bar{r}_j}{r_j} e^{i[\bar{k}_j(u_j - \varepsilon_j) + \varepsilon_j \bar{q}_j] \bar{r}_j} e^{i(k_j u_j - \lambda_j) r_j} e^{i\bar{r}_j \bar{\lambda}} \quad (E-24)$$

Si on intègre par rapport à r_j on obtient:

$$I(x) = \frac{ik_3x - \lambda_3}{\pi^2} \int \frac{d\bar{\lambda}}{[\lambda^2 + \beta_3^2]} \prod_{j=1}^2 [\Gamma(-i\alpha_j)\Gamma(1+i\alpha_j)]^{-1} \int_0^1 du_j u_j^{-i\alpha_j-1} (1-u_j)^{i\alpha_j} \left(-\frac{\partial}{\partial \lambda_2}\right) \frac{1}{\beta_j^2 + (\bar{\lambda} - \bar{n}_j)^2} \quad (E-25)$$

où on a posé :

$$\beta_j = \lambda_j - iu_j k_j \quad \text{pour } j=1,2$$

$$\begin{aligned}\beta_3 &= \lambda_3 - ik_3x \\ \bar{\eta}_j &= (1 - u_j)\bar{k}_j + \varepsilon_j \bar{q}_j\end{aligned}\quad (E-26)$$

La dérivée par rapport à β_3 nous permet de ramener l'intégrale I à la forme de l'intégrale de Lewis⁽⁶⁴⁾. Ainsi en développant le produit on obtient :

$$\begin{aligned}I(x) &= \frac{(4\pi)^2}{2\pi^2} \prod_{j=1}^2 [\Gamma(-i\alpha_j)\Gamma(1+i\alpha_j)]^{-1} \int_0^1 du_1 u_1^{-i\alpha_1-1} (1-u_1)^{i\alpha_1} \int_0^1 du_2 u_2^{-i\alpha_2-1} (1-u_2)^{i\alpha_2} \\ &\times \left(\frac{\partial^2}{\partial \beta_3 \partial \lambda_2} \right) \int \frac{d\bar{\lambda}}{[\lambda^2 + \beta_3^2]} \frac{1}{\beta_1^2 + (\bar{\lambda} - \bar{\eta}_1)^2} \frac{1}{\beta_2^2 + (\bar{\lambda} - \bar{\eta}_2)^2}\end{aligned}\quad (E-27)$$

L'intégrale sur λ donne⁽⁴⁷⁾ :

$$\int \frac{d\bar{\lambda}}{[\lambda^2 + \beta_3^2]} \frac{1}{\beta_1^2 + (\bar{\lambda} - \bar{\eta}_1)^2} \frac{1}{\beta_2^2 + (\bar{\lambda} - \bar{\eta}_2)^2} = 2\pi^2 \int_0^{+\infty} \frac{dv}{\alpha v^2 + \beta v + \gamma} \quad (E-28)$$

où :

$$\begin{aligned}\gamma &= \beta_1 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2}) [\eta_2^2 + (\beta_3 + \beta_2)^2] \\ \beta &= \beta_1 \beta_2 \beta_3 (2 + z_1 + z_2) + \beta_2 (\beta_3^2 + \eta_1^2 + \beta_1^2) \beta_1 (\beta_3^2 + \eta_2^2 + \beta_2^2) \\ \alpha &= \beta_2 (z_1^{1/2} + z_2^{1/2}) [\eta_1^2 + (\beta_3 + \beta_1)^2] \\ z_{12} &= \left[(\eta_1 - \eta_2)^2 + \beta_1^2 + \beta_2^2 \mp \left\{ [(\eta_1 - \eta_2)^2 + \beta_1^2 + \beta_2^2]^2 - 4\alpha_1^2 \beta_2^2 \right\}^{1/2} \right] / 2\beta_1 \beta_2\end{aligned}$$

Pour pouvoir intégrer sur u_1 et u_2 , il est plus commode d'écrire le dénominateur de la fonction sous l'intégrale (E-28) en fonction de ces variables. Ainsi en remplaçant les β_j et η_j par leurs valeurs on obtient :

$$\alpha v^2 + \beta v + \gamma = A_1 u_1 + A_2 u_2 + B u_1 u_2 + C \quad (E-29)$$

où :

$$\begin{aligned}A_i &= -2 \left[i(\lambda_i + \lambda_j) k_i + (\bar{k}_i + \bar{q}_i - \bar{k}_j - \bar{q}_j) \right] (v + 2\beta_3) v \\ &\quad - 2 \left[i \left((\lambda_j^2 + \beta_3^2) + (\bar{k}_j + \bar{q}_j)^2 \right) k_i + 2\lambda_j (i\lambda_i k_i + (\bar{k}_i + \bar{q}_i) \bar{k}_i) \right] v \\ &\quad - 2 \left[(\lambda_j + \beta_3)^2 + (\bar{k}_j + \bar{q}_j)^2 \right] \left[i(\lambda_i + \beta_3) k_i + (\bar{k}_i + \bar{q}_i) \bar{k}_i \right] \quad i,j=1,2\end{aligned}\quad (E-30)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{B} = & -2[k_1 k_2 + \bar{k}_1 \bar{k}_2](v + 2\beta_3)v \\
& -4\left[(\lambda_1 k_1 - i(\bar{k}_1 - i\bar{q}_1))k_2 + (\lambda_2 k_2 - i(\bar{k}_2 - i\bar{q}_2))k_2\right]v \\
& +4\left[(\lambda_1 + \beta_3)k_1 + (\bar{k}_1 + \bar{q}_1)\bar{k}_1\right]\left[i(\lambda_2 + \beta_3)k_2 + (\bar{k}_2 + \bar{q}_2)\bar{k}_2\right]
\end{aligned} \tag{E-31}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{C} = & \left[(\lambda_1 + \lambda_2)^2 + (\bar{k}_i + \bar{q}_i - \bar{k}_j - \bar{q}_j)^2\right](v + 2\beta_3)v \\
& +2\left[\lambda_2\left(\lambda_1^2 + \beta_3^2 + (\bar{k}_1 + \bar{q}_1)^2\right) + \lambda_1\left(\lambda_2^2 + \beta_3^2 + (\bar{k}_2 + \bar{q}_2)^2\right)\right]v \\
& +\left[(\lambda_1 + \beta_3)^2 + (\bar{k}_1 + \bar{q}_1)^2\right]\left[(\lambda_2 + \beta_3)^2 + (\bar{k}_2 + \bar{q}_2)^2\right]
\end{aligned} \tag{E-32}$$

si on remplace (E-28) et (E-29) dans (E-27) on obtient :

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}(\mathbf{x}) = & (4\pi)^2 \prod_{j=1}^2 \left[\Gamma(-i\alpha_j)\Gamma(1+i\alpha_j)\right]^{-1} \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta_3\partial\lambda_2}\right) \int_0^{+\infty} dv \int_0^1 du_1 u_1^{-i\alpha_1-1} (1-u_1)^{i\alpha_1} \\
& \times \int_0^1 du_2 u_2^{-i\alpha_2-1} (1-u_2)^{i\alpha_2} f(u_1, u_2)
\end{aligned} \tag{E-33}$$

avec

$$f(u_1, u_2) = \frac{1}{A_1 u_1 + A_2 u_2 + B u_1 u_2 + C} \tag{E-34}$$

L'intégrale sur u_2 peut s'écrire comme une fonction hypergéométrique. Pour cela on écrit f sous la forme suivante :

$$f(u_1, u_2) = [A_1 u_1 + C]^{-1} \left[1 + u_2 \frac{A_2 + B u_1}{A_1 u_1 + C}\right] \tag{E-35}$$

$\mathbf{I}(\mathbf{x})$ devient alors :

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}(\mathbf{x}) = & (4\pi)^2 \left[\Gamma(-i\alpha_1)\Gamma(1+i\alpha_1)\right]^{-1} \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta_3\partial\lambda_2}\right) \int_0^{+\infty} dv \int_0^1 du_1 u_1^{-i\alpha_1-1} (1-u_1)^{i\alpha_1} \\
& \times [A_1 u_1 + C]^{-1} {}_2F_1\left[1, -i\alpha_2, 1, -\frac{A_2 + B u_1}{A_1 u_1 + C}\right]
\end{aligned} \tag{E-36}$$

et en utilisant la relation (37):

$${}_2F_1[a, b, b, z] = (1-z)^{-a} \quad (\text{E-37})$$

on obtient :

$$I(x) = (4\pi)^2 [\Gamma(-i\alpha_1)\Gamma(1+i\alpha_1)]^{-1} \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta_3\partial\lambda_2} \right) \int_0^{+\infty} dv \int_0^1 du_1 u_1^{-i\alpha_1-1} (1-u_1)^{i\alpha_1} [A_1 u_1 + C]^{-1} \left[1 + \frac{A_2 + B u_1}{A_1 u_1 + C} \right]^{i\alpha_2} \quad (\text{E-38})$$

L'intégrale porte sur une fonction ne dépendant maintenant que de u_1 qu'on peut calculer en faisant le changement de variable :

$$v = \frac{C + A_2}{A_1 + A_2 + B + C} \left(\frac{1}{u_1} - 1 \right) \quad (\text{E-39})$$

Dans ces conditions se fait suivant un axe ρ faisant un angle θ avec l'axe des réelles dans le plan complexe comme l'indique la figure E2

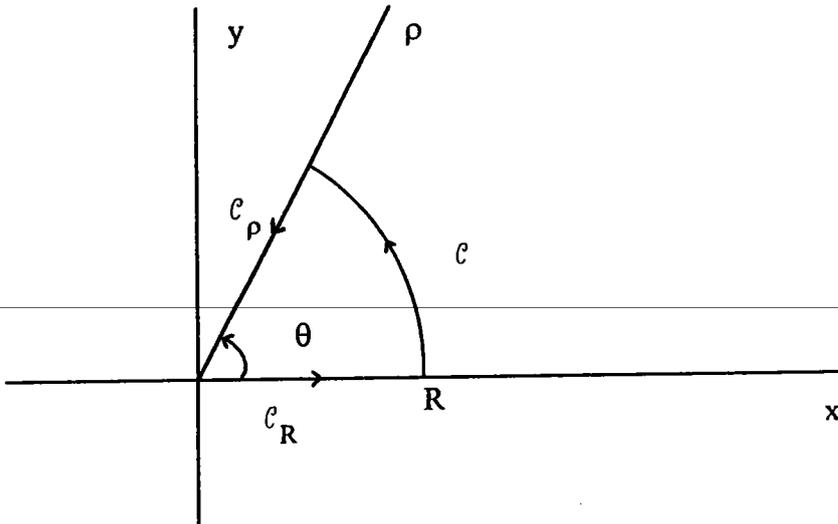


FIGURE E2

L'angle θ est donné par :

$$\theta = \arg \frac{C + A_2}{A_1 + A_2 + B + C} \quad (\text{E-40})$$

$$I(x) = (4\pi)^2 [\Gamma(-i\alpha_1)\Gamma(1+i\alpha_1)]^{-1} \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta_3\partial\lambda_2} \right) \int_0^{+\infty} dv \frac{(A_1 + A_1 + B + C)^{i\alpha_1 + i\alpha_2 + 1}}{(A_1 + C)^{i\alpha_2 + 1} (A_2 + C)^{i\alpha_1 + 1}} \\ \times \int_{\mathcal{C}_p} dv v^{i\alpha_1} (1+v)^{i\alpha_2} \left[1 + v \frac{C(A_1 + A_1 + B + C)}{(A_1 + C)(A_2 + C)} \right]^{-(i\alpha_2 + 1)} \quad (E-41)$$

L'intégrale sur v se fait sur une fonction qui a une singularité en $v_0 = -\frac{(A_1 + C)(A_2 + C)}{C(A_1 + A_1 + B + C)}$. Si on suppose que v_0 est à l'extérieure du contour $(\mathcal{C}_p + \mathcal{C}_R + \mathcal{C})$ on peut appliquer le théorème de Cauchy d'où:

$$I(x) = (4\pi)^2 [\Gamma(-i\alpha_1)\Gamma(1+i\alpha_1)]^{-1} \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta_3\partial\lambda_2} \right) \int_0^{+\infty} dv \frac{(A_1 + A_1 + B + C)^{i\alpha_1 + i\alpha_2 + 1}}{(A_1 + C)^{i\alpha_2 + 1} (A_2 + C)^{i\alpha_1 + 1}} \\ \times \int_0^{\infty} dv v^{i\alpha_1} (1+v)^{i\alpha_2} \left[1 + v \frac{C(A_1 + A_1 + B + C)}{(A_1 + C)(A_2 + C)} \right]^{-(i\alpha_2 + 1)} \quad (E-42)$$

En utilisant la fonction hypergéométrique sous la forme :

$${}_2F_1(a, b, c, 1-z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)} \int_0^{\infty} (1+zt)^{-a} (-t)^{b-1} (1-t)^{a-c} dt \quad (E-43)$$

et la relation :

$${}_2F_1(a, b, c, z) = (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-b, c-a, c, z) \quad (E-44)$$

On aboutit à l'expression de I sous la forme :

$$I(x) = (4\pi)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\beta_3\partial\lambda_2} \right) \int_0^{+\infty} \frac{dv}{C} \left(\frac{C}{A_1 + C} \right)^{i\alpha_1} \left(\frac{C}{A_2 + C} \right)^{i\alpha_2} {}_2F_1 \left(-i\alpha_1, -i\alpha_2, 1, \frac{A_1 A_2 - BC}{(A_1 + C)(A_2 + C)} \right) \quad (E-45)$$

L'équation (E-45) permet finalement de ramener W (eq. (E-8)) à une intégrale double.

APPENDICE F

CALCUL DES DERIVEES DE D_0

$$D_n = \frac{1}{C} \left(\frac{C}{d_1} \right)^{a+n} \left(\frac{C}{d_2} \right)^{b+n} {}_2F_1(a+n, b+n, c+n, z) \quad (\text{F-1})$$

Avec

$$d_1 = C + A_1 \quad (\text{F-2})$$

$$d_2 = C + A_2 \quad (\text{F-3})$$

$$d_3 = \frac{A_1 A_2 - BC}{d_2 d_3} \quad (\text{F-4})$$

et

$$z = \frac{d_3}{(C + A_1)(C + A_2)} \quad (\text{F-5})$$

Dans notre application à l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène dans son l'état 1s on doit prendre $n=0$, $a = -i\alpha_1$, $b = -i\alpha_2$ et $c=1$. La dérivée seconde par rapport à β_3 et λ_2 de D_0 donne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 D_0}{\partial \beta_3 \partial \lambda_2} = & \left[\frac{\partial \Omega(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2} + \Omega(0, \beta_3) \Omega(0, \lambda_2) \right] D_0 \\ & + \left[\Omega(0, \beta_3) \beta(0, \lambda_2) + \frac{\partial \beta(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2} + \beta(0, \beta_3) \Omega(1, \lambda_2) \right] D_1 \\ & + \beta(0, \beta_3) \beta(1, \lambda_2) D_2 \end{aligned} \quad (\text{F-6})$$

Les expressions des $\Omega(n, \xi)$ et de $\frac{\partial \Omega(n, \xi)}{\partial \lambda_2}$ où $n=0,1$ et $\xi = \beta_3, \lambda_2$ sont donnés par :

$$\Omega(n, \xi) = S(C, \xi, m)(1 - a - b - 2n) + (a + n)S(d_1, \xi, m) + (b + n)S(d_2, \xi, m) \quad (\text{F-7})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega(n, \xi)}{\partial \lambda_2} = & \frac{\partial S(C, \xi, 1)}{\partial \lambda_2} (1 - a - b - 2n) + (a + n) \frac{\partial S(d_1, \xi, 1)}{\partial \lambda_2} \\ & + (b + n) \frac{\partial S(d_2, \xi, 1)}{\partial \lambda_2} \end{aligned} \quad (\text{F-8})$$

où on a posé :

$$S(\mu, \xi, m) = -\frac{\partial^m \mu}{\partial \xi^m \mu} \quad (\text{F-9})$$

On aura besoin dans l'expression de $\Omega(0, \beta_3)$ et $\frac{\partial \Omega(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2}$ de $S(C, \beta_3, 1)$, $S(d_1, \beta_3, 1)$, $S(d_2, \beta_3, 1)$ et de leurs dérivées par rapport à β_3 qui ont pour valeurs :

$$S(C, \beta_3, 1) = -\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial \beta_3} \quad (F-10)$$

$$S(d_1, \beta_3, 1) = -\frac{1}{d_1} \left(\frac{\partial C}{\partial \beta_3} + \frac{\partial A_1}{\partial \beta_3} \right) \quad (F-11)$$

$$S(d_2, \beta_3, 1) = -\frac{1}{d_2} \left(\frac{\partial C}{\partial \beta_3} + \frac{\partial A_2}{\partial \beta_3} \right) \quad (F-12)$$

$$\frac{\partial S(C, \beta_3, 1)}{\partial \lambda_2} = -\frac{1}{C} \frac{\partial^2 C}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} + S(C, \beta_3, 1) S(C, \lambda_2, 1) \quad (F-13)$$

$$\frac{\partial S(d_1, \beta_3, 1)}{\partial \lambda_2} = -\frac{1}{d_1} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} + \frac{\partial^2 A_1}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} \right) + S(d_1, \beta_3, 1) S(d_1, \lambda_2, 1) \quad (F-14)$$

$$\frac{\partial S(d_2, \beta_3, 1)}{\partial \lambda_2} = -\frac{1}{d_2} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} + \frac{\partial^2 A_2}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} \right) + S(d_2, \beta_3, 1) S(d_2, \lambda_2, 1) \quad (F-15)$$

Les expressions des dérivées de C , A_1 , A_2 et B par rapport à β_3 et λ_2 peuvent facilement être calculés à partir des équations (E30, E31 et E32). $\Omega(0, \lambda_2)$ et $\Omega(1, \lambda_2)$ dépendent des fonctions $S(C, \lambda_2, 1)$, $S(d_1, \lambda_2, 1)$ et $S(d_2, \lambda_2, 1)$ qui ont pour valeurs :

$$S(C, \lambda_2, 1) = -\frac{1}{C} \frac{\partial C}{\partial \lambda_2} \quad (F-16)$$

$$S(d_1, \lambda_2, 1) = -\frac{1}{d_1} \left(\frac{\partial C}{\partial \lambda_2} + \frac{\partial A_1}{\partial \lambda_2} \right) \quad (F-17)$$

$$S(d_2, \lambda_2, 1) = -\frac{1}{d_2} \left(\frac{\partial C}{\partial \lambda_2} + \frac{\partial A_2}{\partial \lambda_2} \right) \quad (F-18)$$

Les expressions des $\beta(n, \xi)$ et $\frac{\partial \beta(n, \xi)}{\partial \lambda_2}$ où $n=0, 1$ et $\xi = \beta_3, \lambda_2$ sont données par :

$$\beta(n, \xi) = \frac{(a+n)(b+n)}{(c+n)} \frac{\partial z}{\partial \xi} G \quad (F-19)$$

$$\frac{\partial \beta(n, \xi)}{\partial \lambda_2} = \frac{(a+n)(b+n)}{(c+n)} \frac{\partial^2 z}{\partial \lambda_2 \partial \xi} G + \frac{(a+n)(b+n)}{(c+n)} \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial G}{\partial \lambda_2}$$

avec: $G = \frac{d_1 d_2}{C^2} \quad (F-20)$

$$\frac{\partial G}{\partial \lambda_2} = \frac{\partial d_1}{\partial \lambda_2} \frac{d_2}{C^2} + \frac{\partial d_2}{\partial \lambda_2} \frac{d_1}{C^2} + 2GS(C, \lambda_2, 1) \quad (F-21)$$

$$\frac{\partial z}{\partial \xi} = E(\xi) + zF(\xi) \quad (F-22)$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial \lambda_2 \partial \xi} = \frac{\partial E(\xi)}{\partial \lambda_2} + \frac{\partial z}{\partial \lambda_2} F(\xi) + z \frac{\partial F(\xi)}{\partial \lambda_2} \quad (\text{F-23})$$

$$E(\xi) = \frac{\partial d_3}{d\xi} \frac{1}{d_2 d_1} \quad (\text{F-24})$$

$$F(\xi) = S(d_1, \xi, 1) + S(d_2, \xi, 1) \quad (\text{F-25})$$

$$\frac{\partial E(\xi)}{\partial \lambda_2} = \frac{\partial^2 d_3}{\partial \lambda_2 \partial \xi} \frac{1}{d_1 d_2} + \frac{\partial d_3}{\partial \xi} F(\lambda_2) \quad (\text{F-26})$$

$$\frac{\partial F(\xi)}{\partial \lambda_2} = \frac{\partial S(d_1, \xi, 1)}{\partial \lambda_2} + \frac{\partial S(d_2, \xi, 1)}{\partial \lambda_2} \quad (\text{F-27})$$

Dans le cas de l'ionisation de l'hydrogène dans son état métastable 2s ou du Lithium un terme supplémentaire doit être ajouté dans l'expression de l'intégrale I(X) ce qui nécessite le calcul de $\frac{\partial^3 D_0}{\partial^2 \lambda_2 \partial \beta_3}$ dont l'expression est donnée par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 D_0}{\partial^2 \lambda_2 \partial \beta_3} = & \left[\Omega(0, \lambda_2) \Phi_1 + \frac{\partial \Phi_1}{\partial \lambda_2} \right] D_0 + \left[\beta(0, \lambda_2) \Phi_1 + \Omega(1, \lambda_2) \Phi_2 + \frac{\partial \Phi_2}{\partial \lambda_2} \right] D_1 \\ & + \left[\beta(1, \lambda_2) \Phi_2 + \Omega(2, \lambda_2) \Phi_3 + \frac{\partial \Phi_3}{\partial \lambda_2} \right] D_2 + \beta(2, \lambda_2) \Phi_3 D_3 \end{aligned} \quad (\text{F-28})$$

avec

$$\Phi_1 = \frac{\partial \Omega(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2} + \Omega(0, \beta_3) \Omega(0, \lambda_2) \quad (\text{F-29})$$

$$\Phi_2 = \frac{\partial \beta(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2} + \Omega(0, \beta_3) \beta(0, \lambda_2) + \beta(0, \beta_3) \Omega(1, \lambda_2) \quad (\text{F-30})$$

$$\Phi_3 = \beta(0, \beta_3) \beta(1, \lambda_2) \quad (\text{F-31})$$

Le calcul des dérivées de Φ_1 , Φ_2 et Φ_3 nécessite les dérivées secondes de $\Omega(0, \beta_3)$ et $\beta(0, \beta_3)$ par rapport à λ_2 , et qui ont pour valeur :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Omega(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2^2} = & \frac{\partial^2 S(C, \beta_3, 1)}{\partial \lambda_2^2} (1-a-b) + a \frac{\partial^2 S(d_1, \beta_3, 1)}{\partial \lambda_2^2} \\ \frac{\partial^2 \beta(0, \beta_3)}{\partial \lambda_2^2} = & \frac{ab}{c} \left(\frac{\partial^3 z}{\partial \lambda_2^2 \partial \beta_3} G + 2 \frac{\partial^2 z}{\partial \lambda_2 \partial \beta_3} \frac{\partial G}{\partial \lambda_2} + \frac{\partial z}{\partial \beta_3} \frac{\partial^2 G}{\partial \lambda_2^2} \right) \end{aligned} \quad (\text{F-32})$$

où :

$$\frac{\partial^3 z}{\partial \lambda_2^2 \partial \beta_3} = \frac{\partial^2 E(\beta_3)}{\partial \lambda_2^2} + \frac{\partial^2 z}{\partial \lambda_2^2} F(\beta_3) + 2 \frac{\partial z}{\partial \lambda_2} \frac{\partial F(\beta_3)}{\partial \lambda_2} + z \frac{\partial^2 F(\beta_3)}{\partial \lambda_2^2} \quad (\text{F-33})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 G}{\partial \lambda_2^2} &= \frac{\partial^2 d_1}{\partial \lambda_2^2} \frac{d_2}{C^2} + \frac{\partial^2 d_2}{\partial \lambda_2^2} \frac{d_1}{C^2} + 2 \frac{\partial d_1}{\partial \lambda_2} \frac{\partial d_2}{\partial \lambda_2} \frac{1}{C^2} \\ &+ 2 \frac{1}{C^2} \left(\frac{\partial d_1}{\partial \lambda_2} d_2 + \frac{\partial d_2}{\partial \lambda_2} d_1 + \frac{\partial G}{\partial \lambda_2} \right) S(C, \lambda_2, 1) \\ &2G \frac{\partial s(C, \lambda_2, 1)}{\partial \lambda_2} \end{aligned} \quad (\text{F-34})$$

Les dérivées secondes de E et F sont à calculer à partir des équations (F-26) et (F-27).

- [1] Abramowitz M and Stegun I A: Handbook of Mathematical Functions, New York: Dover 1972
- [2] Amaldi Jr U, Egidi A, Marconero R and Pizzella G (1969): Rev. Sci. Instr **40** 1001
- [3] Balian K S and Srivasta M K (1985): Phys. Rev. A **32**, 3098
- [4] Balian K S and Srivasta M K (1985): Phys. Rev. A **33**, 2155
- [5] Bartschat K (1990): J. Phys. B. **23**, 981
- [6] Baum G, Blask W, Freienstein L, Hesse S, Raith W, Rappolt P and Sterun M (1992): Phys. Rev. Lett. **69**, 3037
- [7] Berakdar J, Briggs J S and Klar H 1993 J.Phys.B. : At. Mol. Opt. **26**, 285
- [8] Berakdar J, Klar H, and Briggs J S 1990 Z. Phys. D **16**, 91
- [9] Bethe H A (1930): Ann.Der. Phys. **5**, 325
- [10] Blokhintsev D (principes de mecanique quantique) édition Mir, Moscou (1981)
- [11] Born M (1926): Z. Phys. : **37**, 863
- [12] Brauner M, Briggs J S (1991): J. Phys. B **24**, 2227
- [13] Brauner M, Briggs J S, and Klar H (1989): J. Phys. B: At. Mol. Opt. **22**, 2256
- [14] Brauner M, Briggs J S, and Klar H, Broad T, Rösel T, Jung K and Ehrhardt H (1991): J. Phys. B. **24**, 657
- [15] Brauner M, Briggs J S, and Klar H, Broad T: (1991): J. Phys. B. **24**, 287
- [16] Brauner M, Briggs J S, and Klar H. (1989): Z. Phys. D **11**,257
- [17] Byron F W and C.J. Joachain Phys.Report volume 179 number 4(213)
- [18] Byron F W Jr and Joachain C J (1973): Phys. Rev. A. **8**, 1267
- [19] Byron F W Jr and Joachain C J (1977): Phys. Rep. **34**, 233
- [20] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B (1980): J. Phys. B. **13**, 2673
- [21] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B (1980): J. Phys. B. **16**, L769
- [22] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B (1983): Phys. Lett. A. **99**, 427
- [23] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B (1984): Phys. Lett. A.**106**, 299
- [24] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B (1985): J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. **18**, 3203

- [25] Camilloni R, Giardini-Guidoni A, McCarthy I E and Stefani G (1978): *Phys. Rev. A.* **17**, 1637
- [26] Cortés M and F Martin (1993): *Phys. Rev. A.* **48**, 1227
- [27] Curran E P and Walters H R J (1987): *J Phys B. :At. Mol. Phys.* **20**, 337
- [28] Dal Cappello C, Joulakian B 1992 Proc.of the Nato Advanced Reseach workshop on (e,2e) and related process
- [29] Duguet A (1981) Thèse de Doctorat, Orsay
- [30] Earl W. McDaniel Atomic collisions (électron and photon projectile) edited by Wicly & sons (1989)
- [31] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Schelmmmer P (1986): *Z. Phys. D.* **1**, 3
- [32] Ehrhardt H, Fischer M, Jung K (1982) *Zeit. Phys. A.* **304**, 119
- [33] Ehrhardt H, Jung K, and Schubert E from coherence and correlation in atomic collisions edited by Kleinpoppen H and Williams J F (1980)
- [34] Ehrhardt H, Jung K, G Knoth and Schlemmer (1969): *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1807
- [35] Ehrhardt H, Knoth G, Schelmmmer P and Jung K (1985) *Phys. Lett.A.* **110**, 92
- [36] Ehrhardt H, Schultz M, Tekaats T and Willman K (1969) *Phys. Rev. Lett.* **22**, 89
- [37] Erdelyi A (1954) *Table of Integral Transforms:* ed Magnus W, Oberhettinger F. Triconi F G: Research associates
- [38] Fink M, Moore P G (1977) *Phys. Rev. A.* **15**, 112
- [39] Fournier-Lagarde P, Mazeau Jand Huetz A (1984): *J. Phys. B. At. Mol. Phys.* **17**, L591
- [40] Frost L, Freinstein P, Hess S, Blask W, Baum G and Raith W: 3rd European conf on (e,2e) Collisions and Related Problems: ed Stefani G (Rome: CNR-IMAI) invited papers and progress reports (1990) p. 295
- [41] Garibotti G and Miraglia J E (1980): *Phys. Rev. A.* **21**, 572
- [42] Gell-Mann , M. and Goldberger M L (1953), *Phys. Rev.* **91**, 398
- [43] Geltman S and Hidalgo M B (1974): *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **7**, 831
- [44] Glassgold.A.E and Ialongo G (1968) *Phys. Rev.* **175**, 151

- [45] Godunov A L, Kunikeev Sh D, Mileev V N and Senashenkov S (1983): proc 13th int onf on Physics of electronic and Atomic collisions (Berlin) ed J Eichler (Amsterdam, North-Holland) Abstracts p380
- [46] Goldberger M.L and Watson K.M : "collision theory" 3 th edition by John Wiley & sons , New York (1967).
- [47] Gradshteyn I S, Ryzhik I M (1965): "Table of Integrals, Series and Products" Academic Press New York and London
- [48] Hafid H, Joulakian B, Dal Cappello C (1993) J. Phys. B. **26**, 3415
- [49] Hda H, Dal Cappello C, Langlois J (1994) Z. Phys .D. **29**, 25
- [50] Hughes A L and Mc Millen J H (1932) Res. Rev. **39**, 585
- [51] Hylleraas E A (1929) Z. Phys. **54**, 347
- [52] Jalin R, Hogemann R and Botter R (1973): J. Chem. Phys. **59**, 952
- [53] Joachain C J, Piraux B, Potvliege R M, Furtado F and Byron F W Jr 1(1985) Phys. Lett. A. **112**, 138
- [54] Joachain J C, quantum collision theory (North Holland. comp, Amsterdam, (1975))
- [55] Joulakian B, Dal Cappello C (1993): Phys. Rev. A. **47**, 3788
- [56] Joulakian B, Dal Cappello C, Brauner M (1992): J. Phys .B : At. Mol. Opt. Phys. **25**, 2863
- [57] Klapish M (1971) Compt. Phys. Commun **2**, 239
- [58] Klar H, Tenhagen H and Franz A (1986) Z. Phys. D **1**, 373
- [59] Lahmam-Bennani A (1991): J. Phys. B. At. Mol. Opt. Phys. **24**, 2401
- [60] Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F ,Dal Cappello C, Rouanlt M, Duguet A (1983) J. Phys. B. **16**, 2219
- [61] Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Dal Cappello C and Duguet A 1984 J. Phys. B: At. .Mol. Phys. **17**, 3159
- [62] Landau et Lifchitz Physique théorique tome 3 edition Mir
- [63] Langmuir and Jones 1928 Phys. Rev. **31**, 357
- [64] Lewis R R (1956) Phys. Rev. **102**, 537

- [65] Lohman B, Mc Carthy I E, Stelbovics A and Weigold E 1984 Phys. Rev A **30**, 758
- [66] Madison D H, Calhoun R V and Shelton W N (1977) Phys. Rev. A. **16**, 553
- [67] Massey H S W and Mohr C B O (1933), Proc. R. soc. A. **140**, 613
- [68] McDaniel E.W and M R C McDowell (Case studies in atomic collision Physics II (North-Holand publishing company Amsterdam.) (1972)
- [69] McDowell R, Myercough V P and Peach G (1964): Proc. Phys. Soc **85**, 703
- [70] Murray A J, Woolf M B J and Read F H (1992) J.Phys.B: At. Mol. Opt. Phys. **25**, 3021
- [71] Oh S D, Macek J and Kelsey E (1978) Phys. Rev. A. **17**, 873
- [72] Peterkop R K (1961) Proc Phys. Soc. **77**, 1220
- [73] Peterkop R K (in Physics of one and two electron atomes), ed F Boppand, H Kleinppopen (North-Holand, Amsterdam, 1969) p.649
- [74] Peterkop R K, Izv Akad Nauk Latv SSR, N° 9 (1960) 79
- [75] Pluvinage P 1950 Ann.Phys. Paris **5**, 145
- [76] Pluvinage P 1951 Phys.Radium **12**, 789
- [77] Potvliege R M ,Vucic S and Joachain C J (1987), J. Phys. B. **20**, 4484
- [78] Ray H, Roy A C (1988) J.Phys.B: At. Mol. Phys. **21**, 3243
- [79] Roy A C, Roy K and Sil N C (1980) J. Phys. B.: Atom. Mol. Phys. **13**, 3443
- [80] Rudberg E (1930) Proc.Roy.soc (London) A **129**, 628
- [81] Rudge M R H (1968), Rev.Mod Phys. **40**, 564
- [82] Rudge M R H and Seaton M J (1964), Proc Phys. soc. **83**, 680
- [83] Schultz M (1973) J. Phys. B. **6**, 2580
- [84] Schultz M (1971) J. Phys. B: At. Mol. Phys. **4**, 1476
- [85] Sinha C, Roy K and Sil N C (1987) J. Phys. B. : Atom. Mol. Phys. **20**, 2545
- [86] Smirnov Yu and Neudatchin V G (1966), Zhet f Red **3**, 192
- [87] Smirnov Yu and Neudatchin V G (1966), Zhet f Red **3**, 298.
- [88] Tavard C (1965) Cahiers Phys. **20**, 397
- [89] Tavard C and Bonham R A (1969) J. Chem. Phys. **50**, 1736

- [90] Vucic S, Potvliege R M and Joachain C J (1987) *J. Phys. B* **22**, 3519
- [91] Wannier G H (1953) *Phys. Rev.* **90**, 817
- [92] Weigold E, Hood S T, Fuss I and Dixon A J (1977) *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **10**, L633
- [93] Wellenstein H F, Bonham R A (1973) *Phys. Rev. A.* **7**, 1568
- [94] Whelan C T, Walters H R J, Hanssen J, Dreizler R M (1989) *Z Phys. D* **14**
- [95] Whelan C T, Zhang X, and Walters H R J (1990) : 3rd European conf on (e,2e)
Collisions and Related Problems: ed Stefani G (Rome: CNR-IMAI) invited papers
and progress reports p31
- [96] Woolf M B J (1989) Ph. D Tesis University of Manchester
- [97] Zhang X, Whelan C T and Walters H R J (1992):*J. Phys. B* **25**, L457
- [98] Zheng Y, McCarthy I E, Weigold E and Zhang D 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1358