



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>

6130192

UNIVERSITÉ DE METZ
INSTITUT DE PHYSIQUE ÉLECTRONIQUE ET DE CHIMIE 0285
Laboratoire de physique Moléculaire et des collisions

THÈSE DE DOCTORAT

PRÉSENTÉE PAR

Abdelmounim EL MESSAOUDI

POUR L'OBTENTION DU TITRE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE METZ

(Spécialité Physique atomique)

**Simple Ionisation de la couche K des atomes lourds par
impact d'électrons relativistes**

Soutenu le jeudi 2 juillet 1998

Composition du jury :

<i>Rapporteurs :</i>	Pr.M.KIBLER	Université de Lyon I
	Pr.R.RIVAROLA	Université de Rosario (Argentine)
<i>Examineurs :</i>	Dr.H.J.AST	Université de Francfort (Allemagne)
	Dr.L.U.ANCARANI	Université de Cambridge (Angleterre)

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 190446 8

Directeur d.

ersité de Metz

ersité de Metz

UNIVERSITÉ DE METZ
INSTITUT DE PHYSIQUE ÉLECTRONIQUE ET DE CHIMIE
Laboratoire de physique Moléculaire et des collisions

THÈSE DE DOCTORAT

PRÉSENTÉE PAR

Abdelmounim EL MESSAOUDI

POUR L'OBTENTION DU TITRE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE METZ

(Spécialité Physique atomique)

**Simple Ionisation de la couche K des atomes lourds par
impact d'électrons relativistes**

Soutenu le jeudi 2 juillet 1998

Composition du jury :

Rapporteurs :	Pr.M.KIBLER	Université de Lyon I
	Pr.R.RIVAROLA	Université de Rosario (Argentine)
Examineurs :	Dr.H.J.AST	Université de Francfort (Allemagne)
	Dr.L.U.ANCARANI	Université de Cambridge (Angleterre)
	Dr.P.A.HERVIEUX	Université de Metz
Directeur de thèse :	Pr.B.JOULAKIAN	Université de Metz

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	19980485
Cote	S/M ₃ 98/23
Loc	1105a ^u

*Le Chemin était long et dur, mais il
a fallu y croire pour y arriver.*

A la mémoire de mon père

A ma très chère mère

A Mes très chers frères et soeurs

A ma très chère Halima

A toutes celles et tous ceux qui me sont très chers

Table des matières

Table des figures	11
Liste des tableaux	14
Introduction	17
1 Equation de Dirac et éléments de la théorie des collisions	
1.1 Introduction	25
1.2 L'équation de Dirac	26
a- Equation de <i>Dirac</i> pour un électron libre.....	26
b- Equation de <i>Dirac</i> pour un électron dans un champ électromagnétique.....	28
c- Interprétation physique.....	29
d- Forme covariante de l'équation de <i>Dirac</i>	30
1.3 Elément de la théorie relativiste des collisions	33
1.3.1 Propagateur non relativiste et fonction de <i>Green</i>	33
1.3.2 Equation différentielle de la fonction de <i>Green</i>	36
1.3.3 Théorie des propagateurs relativiste.....	37
a- Construction de la fonction de <i>Green</i> relativiste.....	37
b- Propagateur relativiste pour une particule libre.....	38
c- Equation intégrale des fonctions d'onde relativistes.....	39
d- Fonction de <i>Green</i> complète à partir de la fonction de <i>Green</i> libre.....	40
1.3.4 Elément de matrice de diffusion.....	41

Table des matières

a- Description d'un processus de diffusion.....	41
b- Préparation de l'état initial.....	42
c- Description de l'état final.....	43
d- Matrice de diffusion et matrice de transition.....	43
d.α- Matrice de diffusion S.....	43
d.β- Matrice de transition T.....	45
1.3.5 Développement de <i>Born</i>	46
1.4 Conclusion.....	47
2 Description relativiste du système cible-projectile et des électrons du continuum	
2.1 Introduction.....	49
2.2 Electron libre et ondes planes	50
a- Fonction de spin d'un électron.....	50
b- Ondes planes relativistes.....	53
2.3 Etat lié et état du continuum.....	56
a- Séparation de l'équation de <i>Dirac</i>	56
b- Solutions dans le cas où : $0 < E < m c^2$	60
c- Solutions dans le cas où : $E > m c^2$	65
2.4 Diffusion élastique des électrons relativistes.....	67
a- Forme asymptotique de l'onde diffusée.....	67
b- Décomposition en onde partielle relativiste.....	68

Table des matières

2.5 Système à deux électrons relativistes	71
a- Application au problème de deux électrons de la couche K d'un atome lourd.....	71
b- Calcul des éléments de matrice de l'énergie $E(z_e)$	73
2.6 Conclusion	75
3 Ionisation simple (e,2e) d'un électron de la couche K d'un atome lourd	
3.1 Introduction	77
3.2 Cinématiques de la simple ionisation (e,2e)	78
a- Description d'une réaction (e,2e).....	78
b- Géométrie symétrique coplanaire.....	79
c- Géométrie asymétrique coplanaire.....	80
3.3 Calcul de la section efficace	80
a- Section efficace de diffusion ou section efficace totale.....	81
b- Section efficace simplement différentielle.....	83
c- Section efficace doublement différentielle.....	83
d- Section efficace triplement différentielle.....	84
3.4 Calcul de la section efficace différentielle triple	85
a- Construction de la fonction d'onde initiale.....	85
b- Construction de la fonction d'onde finale.....	88
c- Calcul de l'élément de matrice de transition T_{fi}	90
d- Calcul de l'amplitude de diffusion directe.....	94

Table des matières

3.5 Résultats et discussions	97
a- Cinématiques asymétriques.....	97
b- Cinématiques symétriques.....	106
3.6 Conclusion	110
Publication I	112
4 L'interaction de Breit dans les processus de simple ionisation (e,2e) relativiste des atomes lourds	
4.1 Introduction	113
4.2 Interaction de <i>Breit</i>	114
a- L'équation de <i>Breit</i>	115
b- Expression de l'interaction de <i>Breit</i>	115
4.3 Calcul de la section efficace différentielle triple	118
a- Modèle théorique contenant l'interaction de <i>Breit</i>	118
b- Présentation du calcul.....	127
4.4 Résultats et discussions	131
a- Cinématiques asymétriques	131
b- Cinématiques symétriques.....	139
4.5 Conclusion	144
Publication II	146
Conclusion générale	147

ANNEXES	150
Annexe A : Forme intégrale du propagateur relativiste pour une particule libre.....	151
Annexe B : B1- Calcul de l'élément de matrice M_1	154
B2- Calcul de l'élément de matrice M_2	156
Annexe C : C1- Construction des fonctions d'onde finales.....	161
C2- Expression des déterminants de Slater en fonction de l'amplitude directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$, d'échange $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et de la capture $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	165
Annexe D : D1- Calcul des différents éléments de matrice donnant l'expression de l'amplitude de diffusion directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	168
D2- Orthogonalisation de <i>Schmidt</i> pour les états ψ_f et ψ_i	175
Annexe E Calcul de la forme intégrale générale $I(\vec{q}, \alpha, \beta, n)$	178
Annexe F : Expression de l'amplitude de transition T_{f_i} en fonction des amplitudes directe $\mathfrak{J}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, et en fonction des amplitudes d'échange $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$	181
Annexe G : Expression des amplitudes de diffusion directe $F(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ en fonction de la forme intégrale générale $I(\vec{q}, \alpha, \beta, n)$	190
Références	206

Table des figures

1.1 : Schéma simplifiée d'un processus collisionnel au cours du temps entre deux systèmes.....	42
3.1 : Figure désignant une cinématique d'une réaction de collision (e,2e) dans une géométrie coplanaire symétrique.....	79
3.2 : Figure simplifiée d'une réaction de collision (e,2e) dans une géométrie coplanaire asymétrique.....	80
3.3 : Figure représentant la section efficace triplement différentielle (SED _T) d'ionisation de la couche K de l'atome d'or (Au) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500\text{ keV}$, $E_1 = 319\text{ keV}$, $E_2 = 100\text{ keV}$ et $\theta_1 = -15^\circ$, comparée aux mesures expérimentales et au modèle rPWBA.....	99
3.4 : Représente la SED _T d'ionisation de la couche K de l'atome d'or (Au) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500\text{ keV}$, $E_1 = 319\text{ keV}$, $E_2 = 100\text{ keV}$ et $\theta_1 = -15^\circ$, comparée aux mesures expérimentales et à la littérature théorique.....	101
3.5 : Figure représentant la SED _T d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500\text{ keV}$, $E_1 = 375\text{ keV}$, $E_2 = 100\text{ keV}$ et $\theta_1 = -7^\circ$, comparée aux mesures expérimentales et au modèle rPWBA.....	102
3.6 : Représente la SED _T d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500\text{ keV}$, $E_1 = 375\text{ keV}$, $E_2 = 100\text{ keV}$ et $\theta_1 = -7^\circ$, comparée aux mesures expérimentales et à la littérature théorique.....	103
3.7 : Représente la SED _T d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500\text{ keV}$, $E_1 = 375\text{ keV}$, $E_2 = 100\text{ keV}$ et $\theta_1 = -15^\circ$, comparée aux mesures expérimentales et à la littérature théorique.....	104
3.8 : Représente la SED _T d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 300\text{ keV}$, $E_1 = 200\text{ keV}$, $E_2 = 74,5\text{ keV}$ et $\theta_1 = -10^\circ$, comparée aux mesures expérimentales et au modèle rPWBA.....	105

Table des figures

- 3.9** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre (Cu) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 300 keV$ comparée aux mesures expérimentales et aux résultats de la littérature théorique..... 106
- 3.10** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre (Cu) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 500 keV$ comparée aux mesures expérimentales et aux résultats de la littérature théorique..... 107
- 3.11** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 300 keV$ comparée aux mesures expérimentales et aux résultats de la littérature théorique..... 108
- 3.12** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 500 keV$ comparée aux mesures expérimentales et aux résultats de la littérature théorique..... 109
- 4.1** : Figure représentant la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'or (Au) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500 keV$, $E_1 = 319 keV$, $E_2 = 100 keV$ et $\theta_1 = -15^\circ$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux mesures expérimentales et au modèle rPWBA..... 132
- 4.2** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'or (Au) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500 keV$, $E_1 = 319 keV$, $E_2 = 100 keV$ et $\theta_1 = -15^\circ$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux mesures expérimentales et à la littérature théorique..... 133
- 4.3** : Figure représentant la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500 keV$, $E_1 = 375 keV$, $E_2 = 100 keV$ et $\theta_1 = -7^\circ$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux mesures expérimentales et au modèle rPWBA..... 135
- 4.4** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500 keV$, $E_1 = 375 keV$, $E_2 = 100 keV$ et $\theta_1 = -7^\circ$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux mesures expérimentales et à la littérature théorique..... 136

Table des figures

- 4.5** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 500 keV$, $E_1 = 375 keV$, $E_2 = 100 keV$ et $\theta_1 = -15^\circ$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux mesures expérimentales et à la littérature théorique..... 137
- 4.6** : Représente la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans les conditions cinématiques suivantes : $E_0 = 300 keV$, $E_1 = 200 keV$, $E_2 = 74,5 keV$ et $\theta_1 = -10^\circ$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux mesures expérimentales et au modèle rPWBA..... 138
- 4.7** : Représente la section efficace triplement différentielle (SEDT) d'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre (Cu) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 300 keV$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux résultats expérimentaux et à la littérature théorique..... 139
- 4.8** : Représente la section efficace triplement différentielle (SEDT) d'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre (Cu) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 500 keV$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux résultats expérimentaux et à la littérature théorique..... 140
- 4.9** : Représente la section efficace triplement différentielle (SEDT) d'ionisation de la couche K de l'atome de d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 300 keV$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux résultats expérimentaux et à la littérature théorique..... 141
- 4.10** : Représente la section efficace triplement différentielle (SEDT) d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie symétrique coplanaire avec une énergie incidente $E_0 = 500 keV$, comparaison entre nos résultats avec et sans le potentiel d'interaction de Breit, aux résultats expérimentaux et à la littérature théorique..... 142
- A.1** : Représente l'intégrale de la transformée de Fourier du propagateur de Green relativiste $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ dans le plan complexe p_0 152

Liste des tableaux

2.1 : Tableau de comparaison entre les valeurs de l'énergie héliumoïde et hydrogénoïde et les valeurs de z_e trouvées pour les atomes de cuivre (Cu), d'argent (Ag) et d'or (Au).....75

C2.1 : Calcul du terme $\left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle$ en fonction des amplitudes de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$, $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$165

C2.2 : Calcul du terme $\left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle$ en fonction des amplitudes de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$, $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$166

C2.3 : Calcul du terme $\left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle$ en fonction des amplitudes de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$, $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$167

F.1 : Tableau donnant la contribution de l'état $\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_s) \chi_{1/2}(\vec{k}_e) 1s_{1/2}(z) \right|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$181

F.2 : Tableau donnant la contribution de l'état $\left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_s) \chi_{-1/2}(\vec{k}_e) 1s_{-1/2}(z) \right|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$183

F.3 : Tableau donnant la contribution de l'état $\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_s) \chi_{1/2}(\vec{k}_e) 1s_{-1/2}(z) \right|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$184

F.4 : Tableau donnant la contribution de l'état $\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_s) \chi_{-1/2}(\vec{k}_e) 1s_{1/2}(z) \right|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$185

F.5 : Tableau donnant la contribution de l'état $\left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_s) \chi_{1/2}(\vec{k}_e) 1s_{1/2}(z) \right|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$186

Liste des tableaux

- F.6** : Tableau donnant la contribution de l'état $|\chi_{1/2}(\vec{k}_s)\chi_{-1/2}(\vec{k}_e)1s_{-1/2}(z)|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ 187
- F.7** : Tableau donnant la contribution de l'état $|\chi_{-1/2}(\vec{k}_s)\chi_{1/2}(\vec{k}_e)1s_{-1/2}(z)|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ 188
- F.8** : Tableau donnant la contribution de l'état $|\chi_{-1/2}(\vec{k}_s)\chi_{-1/2}(\vec{k}_e)1s_{1/2}(z)|$ en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ 189

Introduction

L'ionisation des atomes ou des molécules par impact électronique est un processus très important en physique atomique. Elle permet l'observation et l'analyse par des moyens macroscopiques (détecteurs ou émetteurs d'électrons) des phénomènes microscopiques comme les mécanismes réactionnels conduisant à l'ionisation, ceci peut avoir un grand intérêt théorique et expérimental dans l'analyse structurale de la matière. Son application se trouve dans différents domaines comme l'astrophysique et la physique des plasmas.

Le développement expérimental d'un tel processus a débuté par les expériences de *Langmuir J* et *Jones T* (1928) puis *Rudberg E* (1930), qui ont analysé la dépendance en énergie incidente des sections efficaces totales. *Hughes A L* et *McMillan J H* (1932) de leur côté ont mesuré les distributions en énergies et en angles des électrons diffusés. Parallèlement, un développement théorique considérable a été enregistré à partir des travaux de *Bohr N* (1913 et 1915) dans le cadre d'une théorie classique, puis par *Bethe H* (1930) dans un cadre quantique.

Dans une période plus récente ce domaine a connu une évolution rapide due à la réussite des expériences de *Erhardt* et al (1969) et *Amaldi* et al (1969), qui ont pu donner les premières mesures des sections efficaces triplement différentielles de la simple ionisation ($e, 2e$) de l'atome d'hélium et d'un film mince de carbone, respectivement dans des géométries asymétriques et symétriques. Dans leurs expériences ils ont réussi à utiliser les techniques

Introduction

d'observation par coïncidence des deux électrons émergents. Cette réussite a ouvert la voie à de nombreuses expériences du même type sur d'autres cibles atomiques qui ont pu servir de test à de multiples modèles théoriques. Les premiers calculs quantiques des sections efficaces ont été effectués par *Bethe H* (1930) et par *Massey* et *Mohr* (1933) dans le cadre de la première approximation de *Born*.

La particularité d'un processus de simple ionisation ($e,2e$) est la présence de deux électrons après la collision, l'un est le diffusé et l'autre est l'éjecté qui sont détectés en coïncidence, en prenant en compte leur temps du trajet vers leurs détecteurs. Les expériences ($e,2e$) se font généralement suivant deux géométries, la première dite asymétrique dans laquelle les deux électrons sortent avec des énergies différentes, elle peut être coplanaire ou non. Elle a été étudiée par *Ehrardt* et collaborateurs (réf 41). La seconde dite géométrie symétrique où les électrons diffusé et éjecté ont la même énergie, le moment de transfert est grand et les angles de diffusion et d'éjection sont égaux. Elle a été initialement proposée par *Amaldi* et collaborateurs (réf 4).

Une approche relativiste au problème de l'ionisation en général, et l'ionisation simple ($e,2e$) en particulier est nécessaire quand les électrons de la cible (atomes lourds) et l'électron projectile atteignent des vitesses relativistes. Les difficultés majeurs qui sont créés dans ce genre d'étude sont dues à la non conservation du spin total du système et aux approximations nécessaires pour la construction des fonctions d'onde pour la description relativiste du double continuum créé par les deux électrons émergents par exemple, ainsi que la nature relativiste des interactions électron-électron.

Les premiers travaux théoriques sur l'ionisation par impact d'électrons relativistes ont débuté avec les travaux de *Moller C* (1931) et ceux de *Bethe H* (1932), dans lesquels ils ont donné l'expression de la section efficace de diffusion des électrons relativistes par des électrons libres en fonction de l'énergie incidente et de l'énergie détectée. Ces travaux ont permis à *Fano U* (1956), *Ford G W* et *Mullin C J* (1958), d'aller plus loin et étudier la distribution en énergie et en angle de la diffusion inélastique par des électrons relativistes en utilisant l'expression de la section efficace de *Moller*, et en décrivant les électrons par des solutions relativistes de

Introduction

l'équation de *Dirac*. La même description a été utilisée par *Arthurs A M* et *Moiseiwitsch B L* (1958) pour étudier l'ionisation de la couche K d'un atome lourd par des électrons très énergétiques.

Ces travaux théoriques ont été suivi par des résultats expérimentaux. Plusieurs auteurs (*Rester D H* et *Dance W E* (1966), *Middleman L M* et al (1970), *Li-Scholz A* et al (1973) et *Anholt R* (1979)), ont présenté des mesures de la section efficace doublement différentielle. *Missoni G* et al (1970) et *Quarles C A* et *Faulk J D* en (1973), ont présenté des mesures expérimentales de la section efficace doublement différentielle sur l'atome de cuivre. Plus tard les mêmes mesures sur les atomes d'argent et d'or ont été données par (*Komma M* (1978), *Komma M* et *Nakel W* (1979 et 1982) et *Komma M* et *Ruoff H* (1981)).

Dans la même période, des résultats de plusieurs travaux théoriques ont été comparés à ces mesures. En (1967) la section efficace totale de l'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre a été calculée par *Kobenstvedt*. Notons également les travaux de (*Glassgold A E* et *Ialongo G* (1968), *Cooper J* et *Kolbenstvedt* (1972), *Cary Y* et *Sohrab R* (1975) et *Davidovic D M* et *Moiseiwitsch B L* (1975)) sur la diffusion relativiste. *Das J N* (1972-a, 1972-b et 1974) et *Das J N* et *Konar A N* (1974-a et 1974-b), ont utilisé dans leurs travaux des fonctions d'onde semi-relativistes de *Sommerfeld-Maue* pour décrire un des électrons sortants après une collision ionisante à très haute énergie. Ces mêmes fonctions d'onde ont été utilisées plus tard par *Ionescu* et *Eichler J* (1993). En (1978) *Davidovic D M* et al ont étudié l'ionisation de la couche K par des protons relativistes. *Moiseiwitsch B L* (1980) de son côté a introduit la contribution du changement de spin sur la section efficace différentielle triple d'ionisation.

Une autre vague de résultats expérimentaux a été créée dans les années 80. Elle a débuté par les mesures de la section efficace doublement différentielle d'ionisation par *Komma M* et *Nakel W* (1982), puis par *Marht* et al (1987) et *Stahl* et al (1988). Tous ces résultats ont été comparés aux travaux de *Das J N* (1972-a, 1972-b et 1974), *Das J N* et *Konar A N* (1974-a et 1974-b) et *Moiseiwitsch B L* et *Norrington P H* (1979). Les expériences les plus récentes sont de (*Schüle E* et *Nakel W* (1982), *Ruoff H* et *Nakel W* (1987), *Ruoff H* et al (1989), *Bonfert J* et al (1991), *Mergel E* et al (1991), *Walters H R J* et al (1992) et *Schröter C D* et al (1993 et

Introduction

1994)). Elles ont été effectuées sur plusieurs atomes lourds, spécifiquement sur les atomes de cuivre, d'argent et d'or dans différentes conditions énergétiques et dans des géométries symétriques et asymétriques. Ces travaux ont suscité le développement de nombreux modèles théoriques pour calculer la section efficace triplement différentielle en étudiant toutes les modifications sur la première approximation de *Born* et en se basant sur plusieurs approximations relativistes et semi-relativistes. *Fuss I* et al (1982), *Bell F* (1989) et *Cavalli A* et *Avaldi L* (1994) ont utilisé le modèle PWIA (*plane wave impulse approximation*) l'approximation impulsionnelle pour la détermination de la section efficace triplement différentielle d'ionisation relativiste, en décrivant tous les électrons non liés par des ondes planes relativistes, et en négligeant la contribution de l'interaction électron-noyau. *Jakubassa-Amundsen D H* (1989 et 1992) et *Popov Y V* et *Kuzmina N M* (1993) ont étudié l'influence du choix de différentes approximations semi-relativistes pour décrire les électrons diffusés et éjectés. *Jakubassa-Amundsen* décrit dans ses travaux les électrons non liés par des ondes coulombiennes non relativistes multipliées par un spineur constant de *Dirac*. *Walters H R J* et al (1992) ont montré l'importance de l'introduction du changement de spin dans des géométries symétriques coplanaires. *Keller S* et *Whelan C T* (1994-b) ont présenté des résultats sur différentes cibles et dans des conditions physiques variées avec le modèle rPWBA (*relativistic plane wave Born approximation*), modèle qui décrit tous les électrons non liés par des ondes planes relativistes et qui considère la cible comme un système monoélectronique.

Tous ces travaux ne font qu'estimer la section efficace triplement différentielle en donnant un bon accord dans des situations particulières. Nous constatons également leurs difficultés à donner le bon comportement de la section efficace dans les régions de faibles angles d'éjection. L'excellent accord entre la théorie et l'expérience obtenu par le modèle des ondes distordues dans le cadre de la première approximation de *Born* DWBA sur les atomes de néon et d'argon pour des énergies incidentes non relativistes présenté par *Zhang X* et al (1990 et 1992) et par *Whelan C T* et al (1992), ainsi que l'utilisation de ce modèle pour des énergies relativistes par *Pindzola M S* et collaborateurs (1988, 1989, 1990-a, 1990-b et 1992) a poussé un groupe de théoriciens à développer ce modèle rDWBA (*relativistic distorted-wave Born approximation*) d'une façon très rigoureuse dans le cadre de la simple ionisation de la couche K des atomes lourds. *Ast H* et al (1994), *Keller S* et al (1994) et *Whelan C T* et al (1995) ont réussi à donner une série de résultats théoriques sur plusieurs cibles en étudiant tous les effets relativistes dans

Introduction

le cadre de leur modèle qui sont en très bon accord avec les expériences les plus récentes du groupe Tübingen. Plus récemment (*Ast H* et al (1996), *Keller S* et al (1996-a), *Whelan C T* et al (1996), *Dreizler R M* et al (1997) et *Ancarani L U* et al (1998)) ont présenté des résultats concernant la méthode rDWBA en étudiant les différents effets relativistes de la distorsion soit dans l'état initial seul ou dans l'état final seul, en étudiant aussi l'influence des conditions limites de coulomb *Born* dans l'état final et l'état initial.

Dans ce travail nous développons une procédure relativiste basée sur l'approximation de *Born* de premier ordre, dans laquelle l'introduction de l'effet des autres électrons de la cible devient possible contrairement à la procédure rDWBA. Nous introduisons la corrélation dans l'état initial à l'aide du deuxième électron de la couche K. Notre méthode nous donne également l'avantage de pouvoir introduire l'interaction électron-électron relativiste sous forme du potentiel de *Breit* entre l'électron projectile et les électrons de la cible.

Pour présenter les idées de base sur lesquelles se construit notre travail, et pour présenter notre procédure et nos résultats, nous partageons ce mémoire en quatre chapitres et sept annexes. Les résultats de nos travaux seront étudiés dans le cadre de géométrie coplanaire. Les cinématiques ($e, 2e$) que nous considérons correspondent à des situations asymétriques coplanaires et à des situations symétriques coplanaires. Dans ces dernières on détecte expérimentalement les deux électrons sortants avec la même énergie et sous des angles d'émergence égaux de part et d'autre de la direction d'incidence, nous comparons avec les expériences les plus récentes et avec les résultats de nombreux modèles théoriques.

Dans le premier chapitre nous présentons un bref rappel de la théorie relativiste de l'électron qui découle de l'équation d'onde monoélectronique de *Dirac*. Nous présentons aussi le formalisme des propagateurs relativistes basé sur le propagateur de *Green*, afin de définir les expressions relativistes de la matrice de diffusion *S* et de la matrice de transition *T*, ainsi que la probabilité de transition dans le cadre de l'approximation de *Born* du premier ordre. Tous ces concepts nous seront utiles par la suite pour la description des processus de collisions ionisantes à très haute énergie.

Introduction

Dans le but de donner une description relativiste au système cible-projectile avant la collision, et aux électrons émergents après la collision, le deuxième chapitre sera consacré à la détermination des solutions de l'équation de *Dirac* pour un électron du continuum (ondes planes relativistes et ondes coulombiennes) d'une part, et aux électrons liés (électrons de la couche K) d'autre part. Nous étudions aussi la diffusion élastique par un potentiel coulombien, et nous donnons la description de l'état fondamental d'une cible atomique contenant deux électrons relativistes en se basant sur le principe variationnel de *Ritz*.

Dans le troisième chapitre, nous analysons en détail le problème d'ionisation simple ($e, 2e$) d'un électron de la couche K d'un atome lourd. Pour cela, nous commençons par la présentation de notre traitement relativiste conduisant à l'expression de la section efficace triplement différentielle relativiste caractérisant les processus d'ionisation (simple ou multiple) par impact électronique relativiste, qui constitue le test direct entre les expériences et les théories utilisées. Nous étudions pour la première fois l'importance de la corrélation dans l'état initial introduite par le deuxième électron de la couche K. Nous présentons en détail sa description à l'aide des solutions de l'équation de *Dirac* présentées au deuxième chapitre. Nous décrivons tous les électrons non liés par des ondes planes relativistes. A cause de la non conservation du spin total du système au cours du processus de collision, nous étudions toutes les possibilités d'obtention de l'état final pour décrire les deux électrons sortants et l'électron atomique restant de la couche K. Finalement nous comparons les résultats obtenus par nos travaux d'une part avec le modèle d'ondes planes rPWBA qui donne à la couche K de la cible une structure hydrogénéoïde, et d'autre part avec les mesures expérimentales. Nos résultats seront également confrontés aux résultats d'autres modèles théoriques, tel que le modèle rDWBA.

Dans le quatrième et le dernier chapitre nous étudions les effets des interactions relativistes du potentiel de *Breit* sur la section efficace triplement différentielle. Nous signalons que le potentiel de *Breit* contient deux termes correspondant aux interactions magnétique électron-électron et ceux de retard. Nous commençons ce chapitre par présenter l'expression du potentiel de *Breit* qui découle de la théorie des perturbations relativiste. Nous gardons la même description présentée au troisième chapitre du système cible-projectile avant la collision, et du

Introduction

systeme des trois electrons apres la collision en presentant tous les changements sur le calcul de la section efficace triplement differentielle introduits par le potentiel de *Breit*. Nous comparons ensuite les resultats de cette etude avec nos premiers resultats du troisieme chapitre et les autres resultats de la litterature.

Nous presentons a la fin de ce memoire sept annexes contenant les details des calculs, que nous jugeons utiles aux lecteurs.

Chapitre 1

Equation de Dirac et éléments de la théorie des collisions

1-1 Introduction

Satisfaire les propriétés d'invariance exigées par le principe de la relativité, ainsi que décrire l'évolution d'un électron dans un champ électromagnétique, nécessite l'introduction de l'équation d'onde monoélectronique de *Dirac*. La théorie relativiste de l'électron qui découle de l'équation de *Dirac* est exposée dans plusieurs ouvrages de la mécanique quantique cités dans la bibliographie. Nous allons cependant en faire un bref rappel dans le but de définir les outils nécessaires pour une description des processus de collisions ionisantes à très hautes énergies. Nous nous basons pour cela sur le formalisme des propagateurs relativistes. Nous définissons également les approximations et les principes fondamentaux pour la description relativiste des cibles et des électrons projectiles.

1-2 L'équation de Dirac

a- Equation de Dirac pour un électron libre

Dirac a établi (1926) une équation linéaire de premier ordre tant par rapport au temps que par rapport aux variables d'espaces, en partant de l'équation d'évolution de *Schrödinger* comme équation de base de la mécanique quantique relativiste et en introduisant l'énergie totale relativiste. Cette équation possède l'avantage de prévoir l'existence d'un continuum d'énergie négative, donc des antiparticules et de mettre en évidence de façon claire le spin de l'électron. En l'absence d'un champ électromagnétique l'équation d'onde monoélectronique de *Dirac* s'écrit sous la forme suivante : (voir les références 3, 83 et 102)

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H_D \psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

Avec :

$$H_D = c \vec{\alpha} \vec{p} + \beta m_0 c^2 \quad (1.2)$$

où m_0 désigne la masse au repos de la particule.

H_D représente l'hamiltonien de *Dirac*. Notons que H_D est un opérateur hermitique, qui doit être invariant par translation donc indépendant de \vec{r} . La substitution de l'équation (1.2) dans l'équation (1.1), permet une autre écriture de l'équation de *Dirac*, sous la forme :

$$(i \hbar \frac{\partial}{\partial t} + i \hbar c \vec{\alpha} \vec{\nabla} - \beta m_0 c^2) \psi(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.3)$$

qui comporte quatre opérateurs hermitiques, $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ et β agissant seulement sur les variables de spin indépendamment des coordonnées spatio-temporelles, car les seules quantités apparaissant dans l'hamiltonien H_D dépendant des coordonnées spatio-temporelles \vec{r} et t correspondent à l'énergie totale E et le moment p .

Pour déterminer les opérateurs $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ et β , nous utilisons la relation suivante :

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4 \quad (1.4)$$

pour que l'égalité $H_D^2 = E^2$ soit réalisée, nous trouvons que les opérateurs $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ et β anticommulent et que leur carré est égal à 1. Ce qui nous permet d'écrire les relations suivantes :

$$\begin{cases} \alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k = 2 \delta_{kl} \\ \alpha_k \beta + \beta \alpha_l = 0 \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \quad k, l = x, y, z \quad (1.5)$$

Notons que les seules matrices qui peuvent satisfaire ces conditions sont des matrices carrées de dimension quatre qui s'écrivent sous la forme suivante :

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i^p \\ \sigma_i^p & 0 \end{pmatrix} \quad i = x, y, z \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

où 0 est la matrice nulle d'ordre 2 ; I est la matrice unité d'ordre 2 et σ_i^p sont les matrices de Pauli qui caractérisent le spin données par :

$$\sigma_x^p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y^p = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z^p = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

Les composantes cartésiennes des opérateurs de spin de Dirac $\vec{\sigma}$ sont définies par :

$$\sigma_l = -i \sigma_k \sigma_i \quad (1.8)$$

où les indices (i, k, l) représentent toutes les permutations paires ou impaires des coordonnées cartésiennes (x, y, z).

A l'aide de ces représentations des matrices $\vec{\alpha}$ et β nous pouvons réécrire l'équation (1.3) sous la forme d'un système linéaire en donnant à la fonction d'onde solution une forme spinorielle de quatre composantes donnée par :

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} \phi_1(\vec{r}, t) \\ \phi_2(\vec{r}, t) \\ \phi_3(\vec{r}, t) \\ \phi_4(\vec{r}, t) \end{bmatrix} \quad (1.9)$$

La solution de l'équation de *Dirac* pour un électron libre va nous permettre comme nous allons voir plus loin de décrire les électrons des faisceaux électroniques de spin polarisés qui servent comme projectiles dans les processus de collisions.

b- Equation de Dirac pour un électron dans un champ électromagnétique

L'équation d'un électron soumis à un champ électromagnétique représenté par un potentiel scalaire V et un potentiel vecteur \vec{A} , est obtenue en faisant appel aux substitutions formelles suivantes dans l'équation de *Dirac* pour l'électron libre :

$$\begin{aligned} E &\rightarrow E + eV \\ \vec{p} &\rightarrow \vec{\pi} = \vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Dans ce cas l'équation de *Dirac* (1.3) devient :

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[c \vec{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta m_0 c^2 - e V I \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (1.11)$$

où I est la matrice unité de dimension quatre. Nous avons pour le cas des états stationnaires :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (1.12)$$

Ce qui nous permet la séparation de l'équation de *Dirac* sous la forme suivante :

$$\left[c \vec{\alpha} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \beta m_0 c^2 - e V I \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.13)$$

Nous allons faire appel plus loin à cette équation pour la description des électrons atomiques et les électrons du continuum positif se trouvant dans le champ des cibles diffusantes.

c- Interprétation physique

La densité de probabilité de présence et la densité de courant sont définies par les solutions de l'équation de *Dirac* qui obéissent à une équation dite de continuité. En écrivant les deux équations suivantes :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -i c \vec{\nabla} (\vec{\alpha} \psi(\vec{r}, t)) - \vec{\alpha} \vec{A} \psi(\vec{r}, t) + c^2 \beta \psi(\vec{r}, t) \quad (1.14)$$

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) = i c \vec{\nabla} (\psi^*(\vec{r}, t) \vec{\alpha}) - \psi^* \vec{\alpha} \vec{A} + c^2 \psi^*(\vec{r}, t) \beta \quad (1.15)$$

où $\psi^*(\vec{r}, t)$ est solution de l'équation hermitique conjuguée de l'équation (1.14). En multipliant l'équation (1.14) à gauche par $\psi^*(\vec{r}, t)$ et l'équation (1.15) à droite par $\psi(\vec{r}, t)$, et en faisant la différence des deux équations, nous obtenons l'équation de conservation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) + \vec{\nabla} (\psi^* c \vec{\alpha} \psi) = 0 \quad (1.16)$$

qui a la forme de l'équation de conservation de charge :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (1.17)$$

avec ρ : désignant la densité de charge

et \vec{j} : désignant la densité de courant

Nous définissons donc une densité de charge relativiste par :

$$P(\vec{r}, t) = \psi^* \psi \quad (1.18)$$

et une densité de courant relativiste par :

$$\vec{j} = \psi^* c \vec{\alpha} \psi \quad (1.19)$$

Nous représentons \vec{j} par les composantes suivantes :

$$(\psi^* \alpha_1 \psi, \psi^* \alpha_2 \psi, \psi^* \alpha_3 \psi) \quad (1.20)$$

d- Forme covariante de l'équation de Dirac

Pour écrire la forme covariante de l'équation de *Dirac*, nous partons de la définition d'un point de l'espace temps définie par :

$$\vec{r}^\mu = (r^0, r^k) = (r^0, r^1, r^2, r^3) \quad \mu = 0, 1, 2, 3 \quad (1.21)$$

tel que :

$$\begin{cases} r^0 = ct \\ r^1 = x \\ r^2 = y \\ r^3 = z \end{cases} \quad (1.22)$$

et le tenseur métrique $g_{\mu\nu}$ par :

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

Le vecteur \vec{r}^μ est appelé vecteur contravariant.

Le vecteur \vec{r}_μ est appelé vecteur covariant.

Le vecteur covariant \vec{r}_μ se déduit du vecteur contravariant \vec{r}^μ par l'application du tenseur métrique selon la relation suivante :

$$\bar{r}_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} \bar{r}^\nu \quad (1.24)$$

Ce qui nous donne : $\bar{r}_0 = \bar{r}^0$ et $\bar{r}_k = -\bar{r}^k$ (1.25)

Nous conservons également les notations habituelles du vecteur gradient définies par :

$$\bar{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \text{et} \quad \Delta = \bar{\nabla} \cdot \bar{\nabla} \quad (1.26)$$

Ainsi que les quatre opérateurs de dérivation partielle $\frac{\partial}{\partial \bar{r}^\mu}$ formant un vecteur covariant que nous représentons par le symbole ∂_μ selon la relation suivante :

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial(ct)}, \bar{\nabla} \right) \quad (1.27)$$

Nous avons également :

$$\partial^\mu = g^{\mu\nu} \partial_\nu = \left(\frac{\partial}{\partial(ct)}, -\bar{\nabla} \right) \quad (1.28)$$

Ainsi que le d'Alembertien défini par :

$$\square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta = \partial_\mu \partial^\mu \quad (1.29)$$

Nous utilisons aussi l'opérateur quadrivectoriel D_μ défini par :

$$D_\mu = \partial_\mu + i e \bar{A}_\mu = \left(\frac{\partial}{\partial(ct)} + i e \varphi; \bar{\nabla} - i e \bar{A} \right) \quad (1.30)$$

tel que : $A^\mu = (\varphi; \bar{A})$ désigne le potentiel électromagnétique qui est composé d'un terme vectoriel $\bar{A}(\bar{r}, t)$ et un potentiel scalaire $\varphi(\bar{r}, t)$ formant le quadrivecteur A^μ .

Nous pouvons à partir de ces définitions passer à la forme covariante de l'équation de Dirac en multipliant l'équation (1.11) par la matrice β , nous obtenons ainsi l'équation suivante :

$$\left[i\beta \frac{\partial}{\partial t} - \beta e\varphi + i\beta\vec{\alpha}\vec{\nabla} + e\beta\vec{\alpha}\vec{A} - m_0 \right] \psi = 0 \quad (1.31)$$

qui peut être écrite sous la forme de produits de deux quadrvecteurs selon :

$$\left[i(\beta, \beta\vec{\alpha}) \left(\frac{\partial}{\partial t} + ie\varphi, \vec{\nabla} - ie\vec{A} \right) - m_0 \right] \psi = 0 \quad (1.32)$$

Nous définissons maintenant l'écriture matricielle suivante :

$$\begin{cases} \gamma^0 = \beta \\ \vec{\gamma} = \beta\vec{\alpha} \end{cases} \quad (1.33)$$

Ainsi que le quadrvecteur γ^μ défini par :

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) = (\gamma^0, \vec{\gamma}) \quad (1.34)$$

En utilisant les deux équations (1.30) et (1.34), nous écrivons l'équation de *Dirac* sous sa forme covariante définie par :

$$\left[i\gamma^\mu D_\mu - m_0 \right] \psi = 0 \quad (1.35-a)$$

ou

$$\left[\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - m_0 \right] \psi = 0 \quad (1.35.b)$$

1-3 Elément de la théorie relativiste des collisions

Nous commençons dans cette partie par un rappel de la théorie des propagateurs non relativiste qui nous permet de passer à la théorie des propagateurs relativiste voir (les références 17, 92 et 106). Nous développons ensuite la méthode pour la détermination de la matrice de diffusion S et la matrice de transition T qui permettent de passer à l'expression de la section efficace de diffusion relativiste et à la section efficace différentielle d'ionisation qui sont liées directement aux observations expérimentales.

1-3-1 Propagateur non relativiste et fonction de Green

Considérons un système isolé décrit par un vecteur d'état $\langle \vec{r}, t | \chi \rangle$, l'évolution au cours du temps de ce système est décrite par l'équation de *Schrödinger* :

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(\vec{r}, t) = [H_0 + V(\vec{r}, t)] \chi(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) \quad (1.36)$$

où $\chi(\vec{r}, t)$ représente la fonction d'onde du système.

\vec{r} les positions des particules qui le composent.

Il est clair que la connaissance des valeurs de $\chi(\vec{r}, t)$, pour tout \vec{r} et pour un temps t donné, suffit pour déterminer $\chi(\vec{r}, t)$ pour toutes les valeurs de \vec{r} et de t.

Pour cela $\chi(\vec{r}, t)$ doit satisfaire l'équation intégrale homogène de la forme :

$$\chi(\vec{r}', t') = i \int G(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (1.37)$$

où l'intégrale porte sur tout l'espace. La fonction $G(\vec{r}', t', \vec{r}, t)$ est connue sous le nom de fonction de *Green*. Notons que l'équation (1.37) ne distingue pas entre la propagation en avant de $\chi(\vec{r}, t)$ dans un temps $t' > t$ et la propagation en arrière dans un temps $t' < t$.

Il est convenable d'avoir une nette séparation entre les deux cas :

Pour la propagation en avant, on définit la fonction de *Green* retardée ou la propagation retardée par :

$$\begin{cases} G^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) = G(\vec{r}', t', \vec{r}, t) & t' > t \\ = 0 & t' < t \end{cases} \quad (1.38)$$

Maintenant, nous introduisons la fonction échelon $\theta(\tau)$ définie par :

$$\begin{cases} \theta(\tau) = 1 & \tau > 0 \\ \theta(\tau) = 0 & \tau < 0 \end{cases} \quad (1.39)$$

A l'aide des équations (1.38) et (1.39), nous écrivons l'équation (1.37) sous la forme :

$$\theta(t' - t) \chi(\vec{r}', t') = i \int G^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (1.40)$$

Pour la propagation en arrière dans le temps, nous définissons d'une façon similaire la fonction de *Green* avancée $G^-(\vec{r}', t', \vec{r}, t)$ par l'équation suivante :

$$\theta(t - t') \chi(\vec{r}', t') = -i \int G^-(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (1.41)$$

En divisant l'intervalle de temps $(t' - t)$ en n parties $t_1, t_2, \dots, t_i, \dots, t_n$ et en permettant au potentiel d'agir en un temps court Δt_i entre t_{i+1} et t_i , nous pouvons exprimer le terme à gauche de l'équation (1.40) en terme de $G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t)$ fonction de *Green* libre dont l'expression est connue exactement. Ainsi on peut écrire pour $n \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned}
 \theta(t' - t) \chi(\vec{r}', t') &= i \int G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \\
 &+ \frac{i}{\hbar} \int dt_i \iint G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}_i, t_i) V(\vec{r}_i, t_i) G_0^+(\vec{r}_i, t_i, \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r}_i d\vec{r} \\
 &+ \frac{i}{\hbar^2} \int dt_i \int dt_j \int d\vec{r}_i d\vec{r}_j d\vec{r} G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}_i, t_i) V(\vec{r}_i, t_i) G_0^+(\vec{r}_i, t_i, \vec{r}_j, t_j) V(\vec{r}_j, t_j) G_0^+(\vec{r}_j, t_j, \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) + \dots
 \end{aligned}
 \tag{1.42}$$

la relation (1.42) peut être écrite sous la forme :

$$\begin{aligned}
 \theta(t' - t) \chi(\vec{r}', t') &= i \int G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \\
 &+ \frac{1}{\hbar} \int dt_i \int G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}_i, t_i) V(\vec{r}_i, t_i) d\vec{r}_i \\
 &\left[i \int G_0^+(\vec{r}_i, t_i, \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} + \frac{i}{\hbar} \int dt_j \iint G_0^+(\vec{r}_i, t_i, \vec{r}_j, t_j) V(\vec{r}_j, t_j) G_0^+(\vec{r}_j, t_j, \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r}_j d\vec{r} + \dots \right]
 \end{aligned}
 \tag{1.43}$$

Nous constatons que dans la relation (1.43) la série entre les crochets converge et nous obtenons finalement une équation intégrale pour la fonction d'onde χ qui contient seulement le propagateur libre G_0^+ sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \theta(t' - t) \chi(\vec{r}', t') &= i \int G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \\
 &+ \frac{1}{\hbar} \int dt_i \int G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}_i, t_i) V(\vec{r}_i, t_i) \chi(\vec{r}_i, t_i) d\vec{r}_i
 \end{aligned}
 \tag{1.44}$$

tel que l'intégration se fait entre les instants t et t' . Cette équation détermine la fonction d'onde d'une particule lors d'une propagation libre ou d'une propagation avec un potentiel diffuseur dans l'espace-temps.

En comparant les équations (1.40) et (1.44), nous obtenons une équation intégrale pour le propagateur de *Green* qu'on écrit sous la forme suivante :

$$G^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) = G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) + \frac{1}{\hbar} \iint G_0^+(\vec{r}', t', \vec{r}_i, t_i) V(\vec{r}_i, t_i) G_0^+(\vec{r}_i, t_i, \vec{r}, t) dt_i d\vec{r}_i
 \tag{1.45}$$

1-3-2 Equation différentielle de la fonction de Green

La fonction de *Green* satisfait une équation différentielle analogue à l'équation de *Schrödinger* (1.36). Pour déterminer cette équation nous prenons l'équation (1.40) et nous appliquons sur les deux membres de celle-ci l'opérateur suivant :

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{\hbar} H' \right) \quad (1.46)$$

où l'hamiltonien H' , est seulement l'hamiltonien H exprimé en variable r' et t' . Nous obtenons donc la relation suivante :

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{\hbar} H' \right) [\theta(t' - t) \chi(\vec{r}', t')] = \left(i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{\hbar} H' \right) \left[i \int G^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \right] \quad (1.47)$$

En utilisant la relation dérivée de la fonction échelon suivante :

$$\frac{d}{d\tau} \theta(\tau) = \delta(\tau) \quad (1.48)$$

où δ est la fonction de *Dirac*. Pour la partie gauche de la relation (1.47), nous obtenons :

$$\chi(\vec{r}', t') i \frac{\partial}{\partial t'} \left[\theta(t' - t) + \theta(t' - t) i \frac{\partial}{\partial t'} \chi(\vec{r}', t') - \frac{1}{\hbar} H' \theta(t' - t) \chi(\vec{r}', t') \right] \quad (1.49)$$

En utilisant les relations (1.39) et (1.48), la relation (1.49) se réduit à la quantité suivante :

$$i \delta(t' - t) \chi(\vec{r}', t')$$

Et par conséquent l'équation (1.47) devient :

$$i \delta(t' - t) \chi(\vec{r}', t') = i \int \left(i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{\hbar} H' \right) G^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) \chi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (1.50)$$

Ce qui montre que la partie droite de cette égalité doit être proportionnelle à $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$.

On aura donc finalement :

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t'} - \frac{1}{\hbar} H' \right) G^+(\vec{r}', t', \vec{r}, t) = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t' - t) \quad (1.51)$$

qui représente l'équation différentielle à laquelle doit satisfaire le propagateur de *Green*.

1-3-3 Théorie des propagateurs relativiste

a- Construction de la fonction de *Green* relativiste

Le propagateur de *Green* relativiste $\tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r})$ est défini d'une manière analogue au propagateur non relativiste vérifiant l'équation (1.45). Nous choisissons la forme covariante de l'hamiltonien de *Dirac* donnée par :

$$H_D = \gamma^\mu (i \partial_\mu - e A_\mu) - m_0 \quad (1.52)$$

Par analogie avec l'équation (1.51) et en utilisant l'hamiltonien donné par l'équation (1.52), nous écrivons l'équation différentielle du propagateur de *Green* relativiste sous la forme :

$$\left[\gamma^\mu \left(i \frac{\partial}{\partial r'_\mu} - e A_\mu(r') \right) - m_0 \right] \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (1.53)$$

où

$$\delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \delta(t' - t) \quad (1.54)$$

Notons que le propagateur relativiste $\tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r})$ est une matrice 4×4 , correspondant à la dimension de la matrice γ . Nous pouvons écrire l'équation (1.53) sous une autre forme plus simple. Nous définissons pour cela le potentiel électromagnétique \tilde{A} par :

$$\tilde{A} = \gamma^\mu A_\mu \quad (1.55)$$

En utilisant les quadrivecteurs γ^μ et A_μ définis respectivement par les équations (1.34) et (1.30), le potentiel électromagnétique \tilde{A} défini par la relation (1.55) devient :

$$\tilde{A} = \gamma^0 A^0 - \vec{\gamma} \vec{A} \quad (1.56)$$

tel que: $\gamma^0 = \beta \quad \gamma^i = \beta \alpha_i \quad i = 1, 2, 3$ (1.57)

En écrivant également le gradient $\tilde{\nabla}$ sous la forme :

$$\tilde{\nabla} = \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial r_\mu} = \frac{\gamma^0}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\gamma} \vec{\nabla} \quad (1.58)$$

En utilisant ces relations nous pouvons écrire l'équation différentielle du propagateur relativiste sous la forme suivante :

$$(i \tilde{\nabla}' - e \tilde{A}' - m_0) \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (1.59)$$

b- Propagateur relativiste pour une particule libre

D'après l'équation (1.59), nous écrivons l'équation du propagateur pour une particule libre sous la forme suivante :

$$(i \tilde{\nabla}' - m_0) \tilde{G}_F^0(\vec{r}', \vec{r}) = \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (1.60)$$

La transformée de *Fourier* du propagateur relativiste libre est donnée par :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}', \vec{r}) = \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-i \vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} \tilde{G}_F^0(p) \quad (1.61)$$

En insérant cette expression dans l'équation (1.60), nous avons :

$$(i \tilde{\nabla}' - m_0) \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-i \vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} \tilde{G}_F^0(p) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} (\tilde{p} - m_0) e^{-i \vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} \tilde{G}_F^0(p) \quad (1.62)$$

Nous écrivons d'autre part $\delta^4(\vec{r}' - \vec{r})$ sous sa forme intégrale donnée par :

$$\delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} \quad (1.63)$$

En comparant les équations (1.62) et (1.63), nous trouvons que :

$$\tilde{G}_F^0(p) = \frac{1}{\vec{p} - m_0} = \frac{\vec{p} + m_0}{p^2 - m_0^2} \quad \text{pour } p^2 \neq m_0^2 \quad (1.64)$$

Il est clair qu'il y a une singularité au point $p^2 = m_0^2$, c'est-à-dire à la valeur :

$$p_0 = \pm \sqrt{p^2 + m_0^2} = \pm E \quad (1.65)$$

En intégrant la transformée de *Fourier* de $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ donnée par les équations (1.61) et (1.64) sur le plan complexe p_0 (voir annexe A), nous trouvons deux expressions de $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$, une pour la propagation en avant, c'est-à-dire n'incluant que les fréquences positives donnée par :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} e^{-iE(t'-t)} \frac{E\gamma_0 - \vec{p}\vec{\gamma} + m_0}{2E} \quad t' > t \quad (1.66)$$

Et l'autre donnant lieu au propagateur contenant seulement les fréquences négatives donnée par :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} e^{+iE(t'-t)} \frac{-E\gamma_0 - \vec{p}\vec{\gamma} + m_0}{2E} \quad t' < t \quad (1.67)$$

c- Equation intégrale des fonctions d'onde relativistes

Soit $\chi^+(\vec{r}')$ la fonction d'onde qui décrit la solution d'énergie positive de l'électron, où sa propagation se fait en avant dans le temps, et $\chi^-(\vec{r}')$ la fonction d'onde qui décrit la solution d'énergie négative de l'électron où sa propagation se fait en arrière dans le temps. Par analogie avec l'équation (1.44), nous définissons les quantités $\chi^+(\vec{r}')$ et $\chi^-(\vec{r}')$ par les deux équations suivantes :

$$\theta(t' - t) \chi^+(\vec{r}') = i \int \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) \gamma_0 \chi^+(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.68)$$

et

$$\theta(t' - t) \chi^-(\vec{r}') = -i \int \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) \gamma_0 \chi^-(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.69)$$

$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ est défini comme étant le propagateur libre de *Feynman* (1949).

A partir du propagateur libre $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ nous pouvons construire de manière formelle la fonction de *Green* complète, ainsi que l'élément de matrice de diffusion *S* désignant l'amplitude de différents processus de diffusions des électrons relativistes.

d- Fonction de Green complète à partir de la fonction de Green libre

Comme dans le cas non relativiste (voir l'équation (1.45)) nous pouvons construire le propagateur complet de *Feynman* en fonction du propagateur libre relativiste. Nous partons de l'équation différentielle que vérifie le propagateur de *Feynman* donnée par :

$$(i \tilde{\nabla}' - e \tilde{A}' - m_0) \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) \quad (1.70)$$

Nous commençons par faire passer le potentiel électromagnétique de la partie gauche de l'équation (1.70), vers la droite de la même équation :

$$(i \tilde{\nabla}' - m_0) \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) + e \tilde{A}'(\vec{r}') \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) \quad (1.71)$$

En utilisant les deux propriétés suivantes de la fonction δ de *Dirac* :

$$\delta^4(\vec{r}' - \vec{r}) = \int d^4 \vec{r}_0 \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}_0) \delta^4(\vec{r}_0 - \vec{r}) \quad (1.72)$$

$$e \tilde{A}'(\vec{r}') \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \int d^4 \vec{r}_0 \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}_0) \tilde{G}_F(\vec{r}_0, \vec{r}) e \tilde{A}'(\vec{r}_0) \quad (1.73)$$

Nous pouvons écrire la relation (1.71) sous la forme suivante :

$$(i\tilde{\nabla}' - m_0) \tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \int d^4 \vec{r}_0 \delta^4(\vec{r}' - \vec{r}_0) \left[\delta^4(\vec{r}_0 - \vec{r}) + e \tilde{A}'(\vec{r}_0) \tilde{G}_F(\vec{r}_0, \vec{r}) \right] \quad (1.74)$$

Il est évident que nous avons exprimé le terme de droite comme une superposition de sources de fonctions δ de Dirac, ainsi une intégration sur ces sources et à l'aide de l'équation (1.60), nous obtenons une superposition du propagateur libre de Feynman selon la relation suivante :

$$\tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \int d^4 \vec{r}_0 \tilde{G}_F^0(\vec{r}', \vec{r}_0) \left[\delta^4(\vec{r}_0 - \vec{r}) + e \tilde{A}'(\vec{r}_0) \tilde{G}_F(\vec{r}_0, \vec{r}) \right] \quad (1.75)$$

qui peut être écrite sous une autre forme en utilisant encore les propriétés de la fonction δ :

$$\tilde{G}_F(\vec{r}', \vec{r}) = \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) + e \int d^4 \vec{r}_0 \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}_0) \tilde{A}'(\vec{r}_0) \tilde{G}_F(\vec{r}_0, \vec{r}) \quad (1.76)$$

qui représente le propagateur complet de Feynman en terme du propagateur libre.

1-3-4 Elément de matrice de diffusion

a- Description d'un processus de diffusion

Comme application du formalisme des propagateurs relativiste nous allons développer en premier lieu la procédure de détermination de la section efficace différentielle qui caractérise les problèmes de diffusion. Considérons un système physique isolé (absence de forces extérieures), formé d'un électron incident et d'un atome cible. Les processus de diffusion et d'ionisation se traduisent par le passage d'un système préparé dans un état initial, à un autre état appelé état final, tel que :

L'état initial, comporte les deux corps séparés, l'électron incident et l'atome cible, leur interaction étant nulle. Après l'interaction, dans le cas de l'ionisation l'état final comporte l'électron diffusé, l'atome ionisé et l'électron éjecté.

Ce processus de diffusion inélastique est simplifié par le schéma suivant :

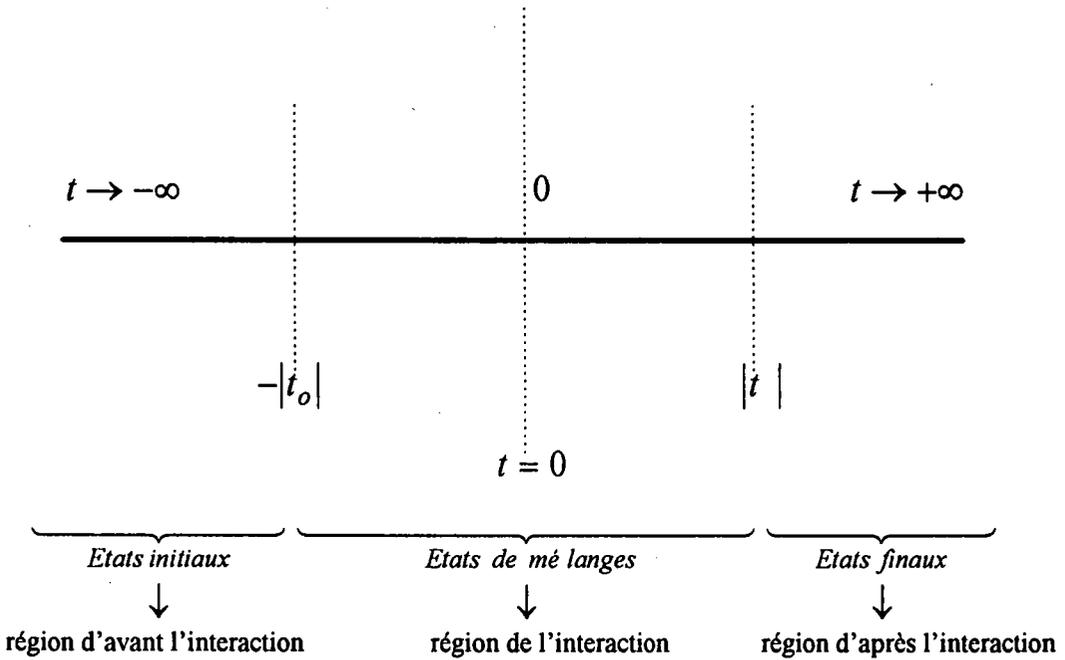


Figure 1.1 : Schéma simplifié d'un processus collisionnel au cours du temps entre deux systèmes.

Le schéma sépare le processus en trois régions. Une première région sans l'interaction à $t \rightarrow -\infty$, une deuxième région où l'interaction se produit entre les instants $-|t_0|$ et $|t_0|$, et finalement une troisième région également sans interaction à $t \rightarrow +\infty$.

b- Préparation de l'état initial

Dans l'état initial, lorsque $t \rightarrow -\infty$, les deux corps sont indépendants et le système est régi par un état propre $\varphi_i(\vec{r}, t)$, tel que $\varphi_i(\vec{r}, t)$ est le paquet d'onde représentant le système dans la région où il n'y a pas d'interaction, alors $\varphi_i(\vec{r}, t)$ est solution de l'équation de Dirac pour une particule libre. Au fur et à mesure que le temps t augmente et que nous nous approchons de la région d'interaction, la fonction d'onde représentant le système change et se propage dans l'espace temps. Par la suite cette fonction d'onde est transformée dans l'espace-temps en $\psi_i(\vec{r}', t')$ par la relation (1.76), ce qui nous donne :

$$\psi_i(\vec{r}', t') = \lim_{t' \rightarrow -\infty} \varphi_i(\vec{r}', t') + e \int d^4\vec{r}_0 \tilde{G}_F^0(\vec{r} - \vec{r}_0) \tilde{A}(\vec{r}_0) \psi_i(\vec{r}_0, t) \quad (1.77)$$

c- Description de l'état final

Dans la troisième région, c'est-à-dire la région après l'interaction, les deux systèmes décrits précédemment seront détectés dans des états $\varphi_f(\vec{r}, t)$ après avoir interagi. Le système émerge de la région d'interaction et les particules qui le constituent sont supposées être assez séparées dans l'espace-temps de telle sorte que leur interaction mutuelle devient pratiquement nulle. L'hamiltonien de *Dirac* associé aux nouvelles particules lorsque l'interaction est supprimée se réduit à K_D de telle sorte que l'ensemble des états $\varphi_f(\vec{r}, t)$ vérifient l'équation de *Dirac* suivante :

$$K_D \varphi_f(\vec{r}, t) = E_f \varphi_f(\vec{r}, t) \quad (1.78)$$

L'hamiltonien H_D du système complet dans le cas limite entre la deuxième et la troisième région est donné par :

$$H_D = K_D - e \tilde{A}' \quad (1.79)$$

tel que \tilde{A}' décrit l'interaction des particules juste avant qu'elles ne soient décrites par les fonctions $\varphi_f(\vec{r}, t)$, (voies de sortie du processus de diffusion). L'hamiltonien K_D est donné par l'équation suivante :

$$K_D = i \tilde{\nabla}' - m \quad (1.80)$$

d- Matrice de diffusion et matrice de transition

d- α - Matrice de diffusion S

Le but de définir une matrice de diffusion, est d'une part d'évaluer la probabilité de trouver les états finals $\varphi_f(\vec{r}, t)$, et d'autre part de rechercher toutes les informations relatives aux particules constituant le système qui sont obtenues à partir de l'amplitude de probabilité pour

que les particules aboutissent aux différents états finals. L'amplitude de probabilité de passage d'un état initial $|i\rangle$ à un état final $|f\rangle$ est donnée par l'élément de matrice S, appelé aussi matrice de diffusion, à noter que l'opérateur S a été introduit par *Heisenberg* (1946). L'élément de matrice S est donné par :

$$S_{fi} = \lim_{t' \rightarrow +\infty} \int \varphi_f^*(\vec{r}', t') \psi_i(\vec{r}', t') d\vec{r}' \quad (1.81)$$

En remplaçant $\psi_i(\vec{r}', t')$ par son expression donnée par l'équation (1.77) l'élément de matrice S_{fi} devient :

$$S_{fi} = \lim_{t' \rightarrow \pm\infty} \int d\vec{r}' \varphi_f^*(\vec{r}', t') \left[\varphi_i(\vec{r}', t') + e \int d^4\vec{r} \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) \tilde{A}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}, t) \right] \quad (1.82)$$

En développant cette équation, nous avons :

$$S_{fi} = \lim_{t' \rightarrow \pm\infty} \int d\vec{r}' \varphi_f^*(\vec{r}', t') \varphi_i(\vec{r}', t') + \int d^4\vec{r} d\vec{r}' \varphi_f^*(\vec{r}', t') \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) e \tilde{A}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}, t) \quad (1.83)$$

Etant donné que $\varphi_f(\vec{r}', t')$ et $\varphi_i(\vec{r}', t')$ sont des solutions libres de *Dirac*, S_{fi} devient :

$$S_{fi} = \delta^3(\vec{k}_f - \vec{k}_i) + \lim_{t' \rightarrow \pm\infty} e \int d\vec{r}' d^4\vec{r} \varphi_f^*(\vec{r}', t') \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) \tilde{A}(\vec{r}) \psi_i(\vec{r}, t) \quad (1.84)$$

Notons que lorsque $t \rightarrow -\infty$, $\psi_i(\vec{r}, t)$ désigne l'état initial $\varphi_i(\vec{r}, t)$ de moment \vec{k}_i .

Nous avons donc :

$$\lim_{t' \rightarrow -\infty} \int d\vec{r}' \tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) \varphi_i(\vec{r}, t) = -i \psi_i(\vec{r}, t) \quad (1.85)$$

Finalement la combinaison des équations (1.84) et (1.85) nous donne :

$$S_{fi} = \delta^3(\vec{k}_f - \vec{k}_i) + i e \int d^4\vec{r} \varphi_f^*(\vec{r}, t) \tilde{A}(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}, t) \quad (1.86)$$

En remplaçant \tilde{A} par son expression donnée par l'équation (1.55) nous obtenons l'expression finale de la matrice de diffusion S_{fi} donnée par :

$$S_{fi} = \delta^3(\vec{k}_f - \vec{k}_i) + ie \int d^4\vec{r} \varphi_f^*(\vec{r}, t) \gamma^\mu A_\mu \varphi_i(\vec{r}, t) \quad (1.87)$$

d-β- Matrice de transition T

Du fait qu'il est impossible d'observer chacune des interactions individuelles entre une particule incidente et une cible au cours du choc, une description probabiliste du processus de diffusion est exigée. Par conséquent, comme nous avons défini précédemment la matrice de diffusion S, il est nécessaire de définir une matrice de transition d'un état initial $|i\rangle$ à un état final $|f\rangle$, de telle sorte que cette matrice est appelée matrice de transition T. Les matrices S et T sont liées par la relation suivante :

$$S_{fi} = \langle \varphi_f | S | \varphi_i \rangle = \delta(f, i) - 2\pi i \delta(E_f - E_i) \delta(\vec{p}_f - \vec{p}_i) T_{fi} \quad (1.88)$$

Notons aussi :

$$T_{fi} = \langle \varphi_f | T | \varphi_i \rangle \quad (1.89)$$

La conservation des énergies et des quantités de mouvement totales entre les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$ sont assurées par la fonction δ de Dirac.

Les propriétés de la matrice de transition T découlent directement des propriétés caractéristiques de l'hamiltonien H qui contrôle la collision.

On définit aussi la probabilité de transition du système de l'état initial $|i\rangle$ à l'état final $|f\rangle$ à un instant t' que l'on notera par P_{fi} :

$$P_{fi} = \lim_{t' \rightarrow +\infty} P_{fi}(t') = \left| \langle \varphi_f | S | \varphi_i \rangle \right|^2 \quad (1.90)$$

Pour des transitions inélastiques de la cible ($|f\rangle \neq |i\rangle$), les équations (1.87), (1.88) et (1.90) se réduisent aux équations suivantes :

$$S_{f_i} = i e \int d^4 \vec{r} \varphi_f^* (\vec{r}, t) \gamma^\mu A_\mu (\vec{r}) \varphi_i (\vec{r}, t) \quad (1.91)$$

et :

$$\langle \varphi_f | S | \varphi_i \rangle = -2 \pi i \delta(E_f - E_i) \delta(\vec{p}_f - \vec{p}_i) \langle \varphi_f | T | \varphi_i \rangle \quad (1.92)$$

Ainsi que la probabilité de transition :

$$P_{f_i} = (2 \pi)^2 \delta(E_f - E_i) \delta(\vec{p}_f - \vec{p}_i) T_{f_i} T_{f_i}^* \quad (1.93)$$

La probabilité de transition, est une quantité directement liée au calcul de la section efficace.

1-3-5 Développement de Born

Le calcul des sections efficaces différentielles de diffusion que nous définissons par la suite s'effectue à partir de l'opérateur de transition T. Ce calcul présente un certain nombre de difficultés que l'on évitera par un traitement perturbatif.

Dans l'approximation de *Born* (1926), l'électron incident d'une part, et l'atome cible d'autre part sont considérés comme deux sous-systèmes indépendants avant et après la collision. En effet cette séparation est justifiée à haute énergie où la vitesse de l'électron incident est supérieure comparée à celle des électrons de la cible qui subissent le choc. La collision est donc considérée comme un problème stationnaire où chaque sous-système passe de l'un de ces états propres à d'autres, et où la fonction d'onde du système projectile-cible se réduit au simple produit des deux fonctions d'onde du projectile et de la cible que se soit avant ou après la collision.

La formulation de *Born* consiste à développer T selon la série suivante :

$$T = V + V G^0 V + V G^0 V G^0 V + \dots \quad (1.94)$$

ou bien:

$$T = V + \left[\sum_{n=1} (V G^0)^n \right] V \quad (1.95)$$

V étant le potentiel d'interaction entre les deux sous-système qui pourra être considérée comme une perturbation à haute énergie. G^0 étant l'opérateur ou le propagateur de *Green* pour l'électron libre.

La première approximation de *Born* consiste à retenir que le premier terme de ce développement, en négligeant les contributions des termes qui contiennent des puissances supérieures à celle de V .

Dans la théorie de *Dirac* relativiste, le potentiel V s'identifie au potentiel électromagnétique \tilde{A} , de même que la fonction de *Green* libre G^0 s'identifie à la fonction de *Green* libre relativiste \tilde{G}_F^0 .

1-4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté brièvement les principes de base d'un traitement relativiste du problème des collisions électron-atome. Pour cela nous avons tout d'abord présenté d'une part quelques propriétés de l'équation de *Dirac*, puis brièvement abordé la théorie des propagateurs relativiste et leurs utilités dans la détermination des probabilités de transitions dans les processus de collisions ionisantes à très haute énergie, le calcul de ces dernières est simplifié en considérant la première approximation de *Born*.

Chapitre 2

Description relativiste du système cible-projectile et des électrons du continuum

2-1 Introduction

D'après l'expression de la matrice de transition donnée dans le chapitre précédent par l'équation (1.89), il est clair que la description des états liés et des états du continuum d'un système cible-projectile par des fonctions d'onde solutions de l'équation de *Dirac* est nécessaire pour résoudre un problème de collision ionisante à très haute énergie.

C'est dans ce but que nous donnons dans ce chapitre les solutions des états stationnaires de l'équation de *Dirac* concernant d'une part l'électron libre sous forme d'ondes planes relativistes, et d'autre part la forme explicite des fonctions d'onde relativistes pour l'électron dans un champ coulombien, qu'il soit dans un état lié ($0 < E < m_0 c^2$) ou du continuum ($E > m_0 c^2$). Ces solutions serviront pour décrire respectivement les électrons liés de la cible et les électrons diffusé et éjecté. Pour compléter notre étude nous présentons la description relativiste de l'état fondamental d'un système à deux électrons relativistes en se basant sur le principe variationnel de *Ritz*.

2-2 Electron libre et ondes planes

a- Fonction de spin d'un électron

L'état dynamique d'un électron relativiste est représenté par une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ à quatre composantes. Dans cette représentation, chaque composante correspond à une orientation donnée du spin et à un signe donné de l'énergie.

Nous commençons par écrire le spineur de *Dirac* donné par l'équation (1.9) sous la forme suivante : (voir ref 92 et 102)

$$\psi(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} \chi(\vec{r}, t) \\ \varphi(\vec{r}, t) \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

où $\chi(\vec{r}, t)$ et $\varphi(\vec{r}, t)$ définissent la grande et la petite composante du spineur. Elles sont données par :

$$\chi(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} \phi_1(\vec{r}, t) \\ \phi_2(\vec{r}, t) \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \varphi(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} \phi_3(\vec{r}, t) \\ \phi_4(\vec{r}, t) \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

Dans le cas d'un électron d'énergie positive les fonctions $\chi(\vec{r}, t)$ et $\varphi(\vec{r}, t)$ peuvent être interprétées comme des vecteurs de l'espace des états de la théorie non relativiste à deux composantes. Pour examiner les solutions de l'équation de *Dirac* soit en l'absence de champ soit dans un potentiel coulombien, nous sommes amenés à définir la direction de la composante de spin \vec{S} dans laquelle on polarise. Nous commençons donc par quelques rappels sur le moment cinétique de spin \vec{S} dans l'espace des états à deux dimensions.

D'après l'écriture des matrices de *Pauli* $\vec{\sigma}$ donnée par les relations (1.7) et (1.8), nous avons:

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \vec{\sigma} \quad (2.3)$$

Notons que les deux opérateurs S_z et σ_z sont diagonaux et que S^2 et S_z commutent avec l'hamiltonien non relativiste, ils doivent donc satisfaire les équations suivantes :

$$S^2 \chi_m = s(s+1) \chi_m \quad (2.4)$$

$$S_z \chi_m = m \chi_m \quad \text{avec } m = \pm \frac{1}{2} \quad (2.5)$$

Nous avons donc deux fonctions d'onde $\chi_{\pm 1/2}$ représentant la base de l'espace des états. Elles sont exprimées à partir des matrices de S_z et de S^2 par les expressions suivantes :

$$\chi_{+1/2}(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \eta(\vec{r}, t) \quad \text{et} \quad \chi_{-1/2}(\vec{r}, t) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \eta(\vec{r}, t) \quad (2.6)$$

où la fonction d'onde $\eta(\vec{r}, t)$ est la solution décrivant l'état physique de la particule.

Toute fonction d'onde décrivant un électron dans la représentation de *Pauli* s'écrit comme une superposition linéaire de ces deux états selon :

$$\chi(\vec{r}, t) = a \chi_{+1/2}(\vec{r}, t) + b \chi_{-1/2}(\vec{r}, t) \quad (2.7)$$

où a et b désignent respectivement les probabilités de présence pour que l'électron soit polarisé dans l'état $\chi_{+1/2}$ ou dans l'état $\chi_{-1/2}$.

Considérons maintenant un électron dont le spin est polarisé dans une certaine direction quelconque ξ définie par les angles polaires (Θ, Φ) , notons que χ doit être état propre de l'opérateur S_ξ , tel que S_ξ est la composante de spin \vec{S} dans la direction ξ . Pour cela nous cherchons à représenter les matrices de *Pauli* $\vec{\sigma}$ de façon que $\vec{\sigma}$ soit de direction \vec{n} , où \vec{n} a pour coordonnées (n_x, n_y, n_z) dans un référentiel donné. Nous voulons maintenant trouver l'expression de $\chi(\vec{r}, t)$ dans ce référentiel, nous écrivons alors :

$$\chi = \sum_{m=-1/2}^{+1/2} a_m \chi_m \quad (2.8)$$

et nous imposons la condition suivante :

$$(\vec{\sigma} \vec{n}) \chi = \lambda \chi \quad (2.9)$$

car $(\vec{\sigma} \vec{n})$ est diagonale.

De plus, à l'aide de la relation vectorielle suivante :

$$(\vec{\sigma} \vec{A}) (\vec{\sigma} \vec{B}) = \vec{A} \vec{B} + i \vec{\sigma} (\vec{A} \wedge \vec{B}) \quad (2.10)$$

Nous avons :

$$(\vec{\sigma} \vec{n})^2 = 1 \quad (2.11)$$

La comparaison entre les deux équations (2.9) et (2.11), nous donne :

$$\lambda = \pm 1 \quad (2.12)$$

Puis en substituant l'équation (2.8) dans l'équation (2.9), nous obtenons :

$$(\vec{\sigma} \vec{n}) \sum_{m=-1/2}^{+1/2} a_m \chi_m = \lambda \sum_{m=-1/2}^{+1/2} a_m \chi_m \quad (2.13)$$

Une écriture linéaire de cette équation nous ramène au système suivant :

$$\begin{cases} (n_3 - \lambda) a_{+1/2} + n_- a_{-1/2} = 0 \\ n_+ a_{1/2} + (n_3 - \lambda) a_{-1/2} = 0 \end{cases} \quad (2.14)$$

avec : $n_{\pm} = n_1 \pm i n_2$ (2.15)

En posant le déterminant de ce système égal à zéro, nous obtenons :

$$a_{-1/2} = \frac{-n_3 - \lambda}{n_-} a_{1/2} \quad (2.16)$$

A l'aide de la représentation des vecteurs \vec{n} et des angles polaires (Θ, Φ) ainsi que la condition de normalisation suivante :

$$|a_{1/2}|^2 + |a_{-1/2}|^2 = 1 \quad (2.17)$$

nous trouvons que :

$$\text{Pour } \lambda = 1 \quad \begin{cases} a_{1/2} = e^{-i\Phi/2} \cos(\Theta/2) \\ a_{-1/2} = e^{i\Phi/2} \sin(\Theta/2) \end{cases} \quad (2.18-a)$$

$$\text{Pour } \lambda = -1 \quad \begin{cases} a_{1/2} = -e^{-i\Phi/2} \sin(\Theta/2) \\ a_{-1/2} = e^{i\Phi/2} \cos(\Theta/2) \end{cases} \quad (2.18-b)$$

Finalement, dans une direction \vec{n} quelconque nous obtenons deux représentations de la fonction de spin exprimées par :

$$\chi_{\uparrow} = \begin{bmatrix} e^{-i\Phi/2} \cos(\Theta/2) \\ e^{i\Phi/2} \sin(\Theta/2) \end{bmatrix} \eta(\vec{r}, t) \quad (2.19-a)$$

et

$$\chi_{\downarrow} = \begin{bmatrix} -e^{-i\Phi/2} \sin(\Theta/2) \\ e^{i\Phi/2} \cos(\Theta/2) \end{bmatrix} \eta(\vec{r}, t) \quad (2.19-b)$$

Lorsque les angles Θ et Φ tendent vers zéro, nous retrouvons les premières représentations $\chi_{+1/2}$ et $\chi_{-1/2}$. Cette dernière décomposition exprimée à l'aide des équations (2.19-a) et (2.19-b) représente la base générale d'une fonction de spin dans l'espace des états de spin.

b- Ondes planes relativistes

Nous cherchons à déterminer les solutions de l'équation de *Dirac* pour un électron libre représentant des ondes planes relativistes ayant une polarisation donnée. Dans le cas des états stationnaires les équations (1.2), (1.9) et (2.2) donnent le système suivant :

$$\begin{cases} (E - E_0) \chi = c \vec{\sigma}_p \vec{p} \varphi \\ (E + E_0) \varphi = c \vec{\sigma}_p \vec{p} \chi \end{cases} \quad (2.20)$$

A partir de la deuxième équation de ce système, nous pouvons écrire :

$$\varphi = \frac{c \vec{\sigma}_p \vec{p}}{E + E_0} \chi \quad (2.21)$$

Il est clair que les solutions de ce système sont des états propres avec la valeur propre $\hbar \vec{k}$, donc le spineur φ devient :

$$\varphi = \frac{c \hbar}{E + E_0} (\vec{k} \vec{\sigma}_p) \chi \quad (2.22)$$

tel que : $E_0 = m_0 c^2$ et $E^2 = E_0^2 + (\hbar k)^2$

Nous remarquons que d'après l'équation (2.22), une solution complète du système est obtenue à partir du spineur de *Pauli* χ , grande composante du spineur total. Cette dernière nous conduit à trouver la représentation des ondes planes relativistes qui dépendent de la valeur et de la direction de \vec{k} . Par conséquent, pour une valeur et une direction fixe de \vec{k} , le spineur χ s'écrit comme une superposition des deux spineurs linéairement indépendants donnés par les équations (2.19-a) et (2.19-b), qui sont fonctions propres de l'opérateur $(\vec{k} \vec{\sigma}_p)$. Donc pour avoir les solutions exactes de l'équation de *Dirac* pour une particule libre, nous avons besoin non seulement de connaître la valeur et la direction du moment \vec{k} mais aussi son état de polarisation, c'est-à-dire la direction de la composante de spin \vec{S} dans laquelle on polarise.

Par la suite nous présenterons les expressions des ondes planes relativistes qui sont solutions pour le cas particulier où l'axe de polarisation est dirigé suivant l'axe (Oz), c'est-à-dire aussi lorsque les angles polaires Θ et Φ tendent vers zéro.

Nous considérons l'équation (1.2) où l'hamiltonien se définit seulement à partir des matrices de *Dirac* $\vec{\alpha}$ et β . La solution de cette équation est équivalente à la recherche des solutions propres de l'hamiltonien H_D .

Du fait que :

$$[H_D, J] = 0 \quad (2.23-a)$$

$$[H_D, P] = 0 \quad (2.23-b)$$

Supposons alors que ψ est une fonction propre commune à J^2 , J_z et P , et nous désignons par (JM) les nombres quantiques fixant le moment cinétique, tel que :

$$J^2 \begin{bmatrix} \chi \\ \varphi \end{bmatrix} = J(J+1) \begin{bmatrix} \chi \\ \varphi \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad J_z \begin{bmatrix} \chi \\ \varphi \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \chi \\ \varphi \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

Avec ϕ et χ des fonctions de la composante radiale \bar{r} et de la composante de spin s suivant l'axe (Oz), elles sont tout à fait analogues aux fonctions d'onde de la théorie de *Pauli*.

Signalons que, d'après l'expression de H_D donnée par l'équation (1.2) la composante $\frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{2p}$ du spin \vec{S} suivant la direction de l'impulsion commute avec H_D , nous sommes donc amenés à chercher les solutions propres communes à H_D et $\frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{2p}$. Nous proposons de former des solutions propres à H_D correspondant à une valeur bien déterminée de l'impulsion \vec{p} , ce sont des ondes planes c'est-à-dire des fonctions d'onde de la forme :

$$\psi_j(\vec{r}, t) = u_j \exp i(\vec{k}\vec{r} - \frac{Et}{\hbar}) \quad j = 1, 2, 3, 4 \quad (2.25)$$

En substituant l'équation (2.25) dans l'équation de *Dirac* donnée par (1.1), nous obtenons une équation sous la forme :

$$E \psi_j(\vec{r}) = H_D \psi_j(\vec{r}) \quad (2.26)$$

Cette équation nous conduit à un système d'équation à quatre composantes en u_j qui admet des solutions en fonction du signe de l'énergie.

Les seules valeurs propres possibles de H_D sont deux valeurs opposées tel que :

$$E_\epsilon = \epsilon \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \quad \epsilon = \pm 1 \quad (2.27)$$

En conclusion, pour chaque énergie nous avons deux solutions indépendantes normalisées à l'unité. Dans le cas particulier simple où \vec{p} est dirigé suivant l'axe des z nous donnons ici, les deux solutions possibles pour la valeur de l'énergie E où $\varepsilon = +1$.

Pour $E = E_+ = +\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ et un spin: $\frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{2p} = \frac{1}{2}\sigma_z$

Les solutions possibles représentant l'ensemble des états stationnaires pour un électron libre de Dirac dans les deux états de polarisation $\chi_{+1/2}$ et $\chi_{-1/2}$ sont données par :

$$\text{pour : } +1/2 \quad \Psi_{+1/2}(\vec{k}, E, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{E_+ + E_0}{2E_+}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c k_z}{E_+ + E_0} \\ \frac{c(k_x + i k_y)}{E_+ + E_0} \end{bmatrix} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.28-a)$$

$$\text{pour : } -1/2 \quad \Psi_{-1/2}(\vec{k}, E, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{E_+ + E_0}{2E_+}} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{c(k_x - i k_y)}{E_+ + E_0} \\ -\frac{c k_z}{E_+ + E_0} \end{bmatrix} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.28-b)$$

2-3 Etat lié et état du continuum

a- Séparation de l'équation de Dirac

Nous nous proposons de chercher les solutions propres d'une particule dans un champ coulombien voir (réf 16), pour cela reprenons l'équation de Dirac en présence d'un champ électromagnétique défini au premier chapitre par l'équation (1.35-b), c'est-à-dire :

$$\left[\gamma^\mu (i\partial_\mu - e A_\mu) - m_0 \right] \Psi_\mu = 0 \quad (2.29)$$

Signalons que le potentiel vecteur \vec{A} du quadrivecteur A_μ est nul et que son potentiel scalaire V est donné par :

$$V = \frac{ze^2}{r} \quad (2.30)$$

Ainsi la fonction d'onde ψ_μ décrivant l'état dynamique de l'électron dans un tel potentiel est solution de l'équation d'onde stationnaire suivante :

$$H_D \psi_\mu = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\mu = E \psi_\mu \quad (2.31)$$

En utilisant la forme du spineur ψ_μ donnée par l'équation (1.9) nous obtenons un système de quatre équations différentielles du premier ordre pour les composantes ψ_μ avec $\mu = 1, 2, 3, 4$. Il est utile de chercher à séparer la solution en produit de fonction radiale et de fonction angulaire. Rappelons que le moment angulaire total est défini par :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (2.32)$$

tel que, \vec{S} désigne l'opérateur de spin et \vec{L} l'opérateur moment orbital. Notons que pour une fonction propre ψ des opérateurs \vec{J}, S^2, J^2 et \vec{L} nous avons :

$$J \psi = M \hbar \psi \quad (2.33-a)$$

$$S^2 \psi = s(s+1) \hbar \psi \quad (2.33-b)$$

$$J^2 \psi = j(j+1) \hbar \psi \quad (2.33-c)$$

$$\vec{L} = \hbar \vec{K} = \vec{r} \wedge \vec{p} \quad (2.33-d)$$

Nous avons donc $M = K + s$, et d'après la relation (2.32) nous déduisons que :

$$2\vec{K}\vec{S} = M^2 - K^2 - S^2 \quad (2.34)$$

Du fait que l'opérateur H_D commute avec J^2 et avec $\vec{K}\vec{S}$, par conséquent l'état stationnaire solution de l'équation (2.31) qui est un état propre de M^2 , K^2 , S^2 et M_z et aussi un état propre de l'opérateur $\vec{K}\vec{S}$. A chacun de ces opérateurs nous lui faisons correspondre sa valeur propre tel que :

$$K^2 \rightarrow l(l+1) \tag{2.35-a}$$

$$M^2 \rightarrow j(j+1) \tag{2.35-b}$$

$$S^2 \rightarrow s(s+1) \tag{2.35-c}$$

Et finalement à l'opérateur $2\vec{K}\vec{S}$ nous associons le nouveau nombre quantique que l'on notera par q tel que :

$$q = j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \tag{2.36}$$

Le moment angulaire total j peut prendre les deux valeurs suivantes : $j = l + \frac{1}{2}$ ou $j = l - \frac{1}{2}$, choisissons à cet effet un état fixe représenté par les nombres quantiques n et l, la fonction d'onde solution dans l'espace des états à deux dimensions a la forme suivante :

$$U_{n,l}(\vec{r}) = \begin{bmatrix} a Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) \\ b Y_{l,m'_l}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} R_{n,l}(r) \tag{2.37}$$

où θ et φ désignent les angles polaires dans les coordonnées sphériques de l'électron et la fonction $R_{n,l}(r)$ fixe la dépendance radiale.

a et b sont deux constantes de normalisation, m_l et m'_l sont deux nombres quantiques prenant les valeurs $-l, -l+1, \dots, +l$.

Du fait que l'hamiltonien total commute avec $M_z = K_z + S_z$, composante du moment angulaire total dans la direction (Oz), la fonction d'onde donnée par (2.37) est une fonction propre de M_z avec la valeur propre m. En utilisant également le fait que $U_{n,l}$ est une fonction

propre de $2\vec{K}\vec{S}$ avec la valeur propre q , nous trouvons les solutions suivantes qui sont caractérisées par le nouveau nombre quantique q .

Dans le cas où $q = l$ et $j = l + \frac{1}{2}$ nous avons :

$$\psi_{\mu} = \begin{bmatrix} g(r) \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ -g(r) \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m+1/2}(\theta, \varphi) \\ -i f(r) \sqrt{\frac{l-m+3/2}{2l+3}} Y_{l+1, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ -i f(r) \sqrt{\frac{l+m+3/2}{2l+3}} Y_{l+1, m+1/2}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} \quad (2.38-a)$$

Ainsi que dans le cas où $q = -(l+1)$ et $j = l - \frac{1}{2}$, nous trouvons d'une façon similaire que :

$$\psi_{\mu} = \begin{bmatrix} g(r) \sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ -g(r) \sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}} Y_{l, m+1/2}(\theta, \varphi) \\ -i f(r) \sqrt{\frac{l+m-1/2}{2l-1}} Y_{l-1, m-1/2}(\theta, \varphi) \\ -i f(r) \sqrt{\frac{l-m-1/2}{2l-1}} Y_{l-1, m+1/2}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} \quad (2.38-b)$$

tel que, les fonctions $f(r)$ et $g(r)$ fixent la dépendance radiale des composantes du spineur et $Y_{L,M}(\theta, \varphi)$ sont les harmoniques sphériques fixant la dépendance angulaire.

Pour déterminer les fonctions radiales $f(r)$ et $g(r)$ nous remplaçons le spineur ψ_{μ} par son expression donnée par les équations (2.38-a) et (2.38-b) dans les quatre équations différentielles de *Dirac* et nous obtenons ainsi que dans le cas où le nombre quantique q est donné par : $q = -(j + \frac{1}{2}) = -(l+1)$.

Les fonctions $f(r)$ et $g(r)$ vérifient le système d'équations différentielles suivant :

$$\begin{cases} \frac{1}{\hbar c} \left(E + \frac{ze^2}{r} + E_0 \right) f - \left(\frac{dg}{dr} + (1+q) \frac{g}{r} \right) = 0 \\ \frac{1}{\hbar c} \left(E + \frac{ze^2}{r} - E_0 \right) g + \left(\frac{df}{dr} + (1-q) \frac{f}{r} \right) = 0 \end{cases} \quad (2.39)$$

En résolvant ce système d'équation nous déterminons d'une façon exacte les solutions de l'équation de *Dirac*.

b- Solution dans le cas où : $0 < E < m_0 c^2$

En utilisant un traitement asymptotique semblable à celui de l'atome d'hydrogène dans la théorie de *Schrödinger*, plus la condition de normalisation des fonctions d'onde $f(r)$ et $g(r)$, nous obtenons les expressions des fonctions d'onde radiales données par :

$$f(r) = C A_1(r) B(r) \quad (2.40-a)$$

$$g(r) = C A_2(r) B(r) \quad (2.40-b)$$

tel que la constante C est donnée par :

$$C = - \frac{\sqrt{\Gamma(2\gamma + n' + 1)}}{\Gamma(2\gamma + 1) \sqrt{n'!}} \frac{1}{\sqrt{4N(N-q)}} \quad (2.41)$$

et les fonctions $A_1(r)$, $A_2(r)$ et $B(r)$ sont données par :

$$A_1(r) = \left(\frac{2z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{zr}{Na_0}} \sqrt{1-\varepsilon} \left(\frac{2zr}{Na_0} \right)^{\gamma-1} \quad (2.42-a)$$

$$A_2(r) = \left(\frac{2z}{Na_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{zr}{Na_0}} \sqrt{1+\varepsilon} \left(\frac{2zr}{Na_0} \right)^{\gamma-1} \quad (2.42-b)$$

et finalement :

$$B(r) = \left[-n' F(-n'+1, 2\gamma+1, \frac{2zr}{Na_0}) + (N-x) F(-n', 2\gamma+1, \frac{2zr}{Na_0}) \right] \quad (2.42-c)$$

Nous définissons ici tous les paramètres qui interviennent dans les expressions des fonctions radiales $f(r)$ et $g(r)$.

q est le nombre quantique défini à partir de la relation (2.36).

Le paramètre γ est défini par :

$$\gamma = \sqrt{q^2 - \alpha^2 z^2} \quad (2.43-a)$$

tel que α désigne la constante de structure fine de *Sommerfeld* donnée par :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,037} \quad (2.43-b)$$

ε est donné par :

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} \quad (2.44)$$

tel que E désigne l'énergie relativiste et $E_0 = m_0 c^2$ l'énergie au repos.

Aussi la quantité n' est exprimée en fonction de ε et de γ par les relations suivantes :

$$n' = \frac{\alpha z \varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} - \gamma \quad (2.45-a)$$

ou bien en remplaçant γ par sa valeur nous avons :

$$n' = \frac{\alpha z \varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} - \sqrt{q^2 - \alpha^2 z^2} \quad (2.45-b)$$

Notons aussi que :

$$n = n' + k \quad \text{et} \quad k = |q| = j + \frac{1}{2} \quad (2.46-a)$$

et finalement N est défini comme un nombre quantique principal par :

$$N = \sqrt{n^2 - 2n'(k - \sqrt{k^2 - \alpha^2 z^2})} \quad (2.46-b)$$

Connaissant n' et γ nous redéfinissons ε par :

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} = \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{\alpha^2 z^2}{(n' + \gamma)^2}}} \quad (2.47-a)$$

ou bien :

$$\varepsilon = \frac{E}{E_0} = \sqrt{\frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha z}{n - k + \sqrt{k^2 - \alpha^2 z^2}}\right)^2}} \quad (2.47-b)$$

Nous signalons finalement que, a_0 désigne le rayon de Bohr, $\Gamma(x)$ désigne la fonction gamma et $F(x, y, z)$ désigne la fonction hypergéométrique confluyente.

Nous donnons également la forme explicite des fonctions radiales $f(r)$ et $g(r)$ pour un électron lié à la couche K ou à la couche L d'un atome donné, solutions qui nous seront utiles par la suite.

Pour un électron lié à la couche K, c'est-à-dire un électron dans l'état 1s, ces nombres quantiques sont définis par :

$$n = 1, \quad l = 0 \quad \text{et} \quad j = \frac{1}{2}$$

Et ces fonctions d'onde radiales $f(r)$ et $g(r)$ sont données par les expressions suivantes:

$$g(r) = \left(\frac{2z}{a_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{1 + \varepsilon_1}{2 \Gamma(2\gamma_1 + 1)}} e^{-\frac{\rho_1}{2}} \rho_1^{\gamma_1 - 1} \quad (2.48-a)$$

et

$$f(r) = -\sqrt{\frac{1 - \varepsilon_1}{1 + \varepsilon_1}} g(r) \quad (2.48-b)$$

Pour un électron dans l'état 2s possédant les nombres quantiques suivants :

$$n = 2, \quad l = 0, \quad j = \frac{1}{2}$$

Ces fonctions d'onde radiales sont données par :

$$g(r) = \left(\frac{2z}{N_2 a_0} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{2\gamma_2 + 1}{\Gamma(2\gamma_2 + 1)}} \sqrt{\frac{1 + \varepsilon_2}{4N_2(N_2 + 1)}} e^{-\frac{\rho_2}{2}} R(\rho_2) \quad (2.49-a)$$

tel que
$$R(\rho_2) = \left[N_2 \rho_2^{\gamma_2 - 1} - \frac{N_2 + 1}{2\gamma_2 + 1} \rho_2^{\gamma_2} \right] \quad (2.49-b)$$

et

$$f(r) = -\sqrt{\frac{1 - \varepsilon_2}{1 + \varepsilon_2}} \frac{(2\gamma_2 + 1)(N_2 + 1) - (N_2 + 1)\rho_2}{(2\gamma_1 + 1)N_2 - (N_2 + 1)\rho_2} g(r) \quad (2.49-c)$$

Les paramètres $\gamma_1, \gamma_2, N_1, N_2, \varepsilon_1, \varepsilon_2$ et ρ_i sont donnés par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \gamma_1 = \sqrt{1 - \alpha^2 z^2} \\ \gamma_2 = \sqrt{4 - \alpha^2 z^2} \end{cases} \quad (2.50-a)$$

$$\begin{cases} N_1 = 1 \\ N_2 = \sqrt{2(\gamma_2 + 1)} \end{cases} \quad (2.50-b)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_1 = \left(1 + \left(\frac{\alpha z}{\gamma_1}\right)^2\right)^{-1/2} \\ \varepsilon_2 = \left(1 + \left(\frac{\alpha z}{1 + \gamma_2}\right)^2\right)^{-1/2} \end{cases} \quad (2.50-c)$$

et finalement :

$$\rho_i = \frac{2z}{N_i a_0} r \quad (i=1,2) \quad (2.50-d)$$

En remplaçant les nombres quantiques par leurs expressions et en insérant les solutions radiales données par les équations (2.48-a) et (2.48-b) dans les relations (2.38-a) et (2.38-b), nous donnons les expressions des fonctions d'onde totales représentant un électron lié à la couche K d'un atome donné par le champ coulombien de cet atome. Nous notons ces fonctions d'onde par $1s_{+1/2}(z, \vec{r})$ pour un spin up, et $1s_{-1/2}(z, \vec{r})$ pour un spin down, leurs expressions sont données par les deux relations suivantes :

$$1s_{+1/2}(z, \vec{r}) = \begin{bmatrix} Y_0^0(\theta, \varphi) \\ 0 \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_1}{1+\varepsilon_1}} Y_1^0(\theta, \varphi) \\ i \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_1}{1+\varepsilon_1}} Y_1^1(\theta, \varphi) \end{bmatrix} g(z, r) \quad (2.51-a)$$

et

$$1s_{-1/2}(z, \vec{r}) = \begin{bmatrix} 0 \\ -Y_0^0(\theta, \varphi) \\ i \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_1}{1+\varepsilon_1}} Y_1^{-1}(\theta, \varphi) \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_1}{1+\varepsilon_1}} Y_1^0(\theta, \varphi) \end{bmatrix} g(z, r) \quad (2.51-b)$$

tel que :

$$\varepsilon_1 = \gamma_1 = \left(1 - \frac{z^2}{c^2}\right)^{1/2} \quad (2.52-a)$$

et la fonction radiale $g(r)$ est donnée par :

$$g(z, r) = N(z) e^{-Zr} r^{\gamma_1-1} \quad (2.52-b)$$

$$N(z) = (2z)^{\gamma_1+1/2} \sqrt{\frac{1+\gamma_1}{2 \Gamma(2\gamma_1+1)}} \quad (2.52-c)$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$ définissent les harmoniques sphériques qui caractérisent la dépendance angulaire.

Les relations (2.51-a) et (2.51-b) avec la relation (2.52-b) constituent les solutions simplifiées d'un électron 1s de la couche K d'un atome dans un champ coulombien, solutions que nous utiliserons par la suite.

c- Solution dans le cas où : $E > m_0 c^2$

La solution dans ce cas est un spectre continu d'état stationnaire dans le nuage électronique $E > m_0 c^2$ et ces fonctions d'onde correspondantes sont également fonctions propres du moment angulaire total J^2 et J_z correspondant aux nombres quantiques j et m . Donc pour des valeurs fixes de $E > m_0 c^2$ et de j et m nous avons toujours deux solutions indépendantes, la dépendance angulaire et de spin de la première solution est fixée par $j = l + \frac{1}{2}$, elle est donnée par l'équation (2.38-a) et l'autre solution est fixée par $j = l - \frac{1}{2}$, elle est donnée par l'équation (2.38-b). Les fonctions radiales $g(r)$ et $f(r)$ satisfont au système d'équations différentielles (2.39) et asymptotiquement oscillent comme des ondes sphériques. Les expressions analytiques exactes de ces fonctions radiales dans un champ de potentiel coulombien en termes de fonctions hypergéométriques ont été données pour la première fois par *Darwin* en (1928).

Dans le cas où $j = l - \frac{1}{2}$, nous trouvons que :

$$g = g_{-l-1} = N_{-l-1} (2kr)^{\gamma_l} e^{-i\vec{k}\vec{r}} A(r) \quad (2.53)$$

tel que la fonction $A(r)$ est donnée par :

$$A(r) = (\gamma_l - i\eta) F(\gamma_l + i\eta, 2\gamma_l + 1, 2i\vec{k}\vec{r}) - (l - i\eta') F(\gamma_l + 1 + i\eta, 2\gamma_l + 1, 2i\vec{k}\vec{r}) \quad (2.54)$$

Le facteur de normalisation N_{-l-1} est donné par la relation suivante :

$$N_{-l-1} = \frac{1}{2} \frac{|\Gamma(\gamma_l + 1 + i\eta)|}{\Gamma(2\gamma_l + 1)} \frac{\exp\left(\frac{\pi\eta}{2}\right)}{\sqrt{(i\eta' - l)(\gamma_l - i\eta)}} \quad (2.55)$$

Et les paramètres γ_l , η et η' sont donnés par les expressions suivantes :

$$\gamma_l = \sqrt{l^2 - \alpha^2 z^2} \quad (2.56-a)$$

$$\begin{cases} \eta = \frac{z \alpha \varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - 1}} \\ \eta' = \frac{z \alpha}{\sqrt{\varepsilon^2 - 1}} \end{cases} \quad (2.56-b)$$

Ici ε désigne le rapport entre l'énergie totale et l'énergie au repos, tel que :

$$\varepsilon = \frac{E}{m_0 c^2} \quad (2.56-c)$$

La forme asymptotique de la fonction radiale g est donnée par :

$$g = g_{-l-1} \approx r^{-1} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \sigma_{-l-1}\right) \quad (2.57)$$

Le coefficient σ_{-l-1} étant une constante de déphasage qui se détermine par la condition à la limite, lorsque $r \rightarrow 0$ g_{-l-1} est finie, elle est donnée par l'équation suivante :

$$\exp(-2i\sigma_{-l-1}) = \frac{l-i\eta'}{\gamma_l - i\eta} \frac{\Gamma(\gamma_l + l - i\eta)}{\Gamma(\gamma_l + l + i\eta)} \exp(\pi i(l - \gamma_l)) \quad (2.58)$$

Dans le cas où $j = l + \frac{1}{2}$, la fonction radiale g_l a la même expression que g_{-l-1} , et son comportement asymptotique est donné par :

$$g = g_l \approx r^{-1} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \sigma_l\right) \quad (2.59)$$

La phase σ_l est donnée par :

$$\exp(-2i\sigma_l) = \frac{l+1+i\eta'}{\gamma_{l+1} + i\eta} \frac{\Gamma(\gamma_{l+1} - i\eta)}{\Gamma(\gamma_{l+1} + i\eta)} \exp(\pi i(l+1 - \gamma_{l+1})) \quad (2.60)$$

En utilisant d'une part les expressions de g_l et de g_{-l-1} données respectivement par les équations (2.59) et (2.57) et d'autre part l'équation exprimant les grandes composantes en fonction des petites composantes du spineur donnée par l'équation (2.21), nous pourrions déterminer complètement le comportement asymptotique des quatre composantes de la fonction d'onde totale ψ_μ qui représente la solution dans le continuum voir (ref 16).

2-4 Diffusion élastique des électrons relativistes

a- Forme asymptotique de l'onde diffusée

Yennie D R et al (1954) et Louis K et Acheson J R (1951) ont traité en détail le problème de diffusion élastique des électrons relativistes, nous allons en exposer brièvement les résultats. Cette étude nous permet de décrire l'état d'un électron s'approchant ou quittant le champ d'un noyau atomique, les solutions sont données sous forme d'ondes partielles relativistes que nous allons dans un premier temps assimiler à des ondes planes relativistes pour tester notre modèle. Le problème de la diffusion élastique se ramène à celui de la diffusion d'un électron par un potentiel central $\varphi(r)$ sans transmutations des particules ou sans changement de leur état interne. Considérons un électron libre se déplaçant sur l'axe d'incidence (Oz), nous le décrivons par une onde plane relativiste de la forme :

$$\psi_{\mu} = u_{\mu} e^{ikz} \quad \mu = 1, 2, 3, 4 \quad (2.61)$$

La fonction d'onde exacte solution de l'équation de Dirac en présence du champ central $\varphi(r)$, doit avoir aux grandes distances la forme asymptotique suivante :

$$\psi_{\mu} \approx u_{\mu} e^{ikz} + \frac{e^{i\bar{k}r}}{r} v_{\mu}(\theta, \varphi) \quad (2.62)$$

Rappelons que pour une énergie $E > m_0 c^2$ et k donné, la base des états de spin parallèle et antiparallèle est définie par :

$$U_{\uparrow} = \begin{bmatrix} \cos(\Theta/2) \\ \sin(\Theta/2) e^{i\Phi} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad V_{\downarrow} = \begin{bmatrix} -\sin(\Theta/2) e^{-i\Phi} \\ \cos(\Theta/2) \end{bmatrix} \quad (2.63)$$

où (Θ, Φ) désignent les angles polaires caractérisant la direction du polarisation.

Notons alors qu'en présence du potentiel central $\varphi(r)$, les deux premières composantes du spineur total des états diffusés ont la forme asymptotique suivante :

$$\phi \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{ikz} + r^{-1} f_1(\theta, \varphi) \begin{bmatrix} 1 \\ \text{tg}(\Theta/2) e^{i\Phi} \end{bmatrix} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.64-a)$$

$$\chi \approx \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{ikz} + r^{-1} f_2(\theta, \varphi) \begin{bmatrix} -\text{tg}(\Theta/2) e^{-i\Phi} \\ 1 \end{bmatrix} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.64-b)$$

Dans ce cas signalons que la section efficace de diffusion dans l'angle solide $d\Omega$ est donnée par :

$$|f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega = \left[|f_1(\theta, \varphi)|^2 + |f_2(\theta, \varphi)|^2 \right] d\Omega \quad (2.65)$$

Par conséquent la diffusion d'un électron incident est décrite complètement par les deux fonctions $f_1(\theta, \varphi)$ et $f_2(\theta, \varphi)$. Nous avons vu que dans le cas de *Dirac*, nous avons besoin de spécifier non seulement la valeur et la direction du moment de l'électron incident mais aussi son état de polarisation, nous nous plaçons donc dans le cas où l'électron incident est dans la direction (Oz) avec un moment $\hbar\vec{k}$ et un spin up.

b- Décomposition en onde partielle relativiste

L'onde plane incidente solution de l'équation de *Dirac* libre peut être décomposée en onde partielle caractérisée par le moment angulaire total et sa composante selon (Oz) :

$$\phi = \sum_{m=\pm 1/2} \sum_j a_{jm} \phi_{jm} \quad (2.66)$$

avec toujours :

$$J^2 \phi_{jm} = j(j+1) \hbar^2 \phi_{jm} \quad (2.67-a)$$

$$J_z \phi_{jm} = m \hbar \phi_{jm} \quad (2.67-b)$$

tel que :
$$\vec{J} = \vec{r} \wedge \vec{p} + \frac{1}{2} \vec{\sigma} \hbar \quad (2.67-c)$$

Pour l'onde plane incidente dans la direction (Oz), nous avons :

$$J_z \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{ikz} = \frac{1}{2} \hbar \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{ikz} \quad (2.68)$$

Notre étude se limitera aux états $\phi_{j,1/2}$.

La partie angulaire de spin de ces états a la forme suivante (voir *Louis K et Acheson J R* (1951)) :

$$\chi_j^1 = \begin{bmatrix} (j + \frac{1}{2}) P_{j-1/2}(\cos \Theta / 2) \\ -P_{j-1/2}^1(\cos \Theta / 2) e^{i\Phi} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \chi_j^2 = \begin{bmatrix} (j + \frac{1}{2}) P_{j+1/2}(\cos \Theta / 2) \\ P_{j+1/2}^1(\cos \Theta / 2) e^{i\Phi} \end{bmatrix} \quad (2.69)$$

avec $P_{j-1/2}$ et $P_{j+1/2}$ des polynômes de *Legendre*.

L'onde partielle $\phi_{j,1/2}$ solution a la forme suivante :

$$\phi_{j,1/2} = r^{-1} [G_j(r) \chi_j^1 + i F_j(r) \chi_j^2] \quad (2.70)$$

tel que les fonctions radiales F_j et G_j vérifient le système suivant (voir *Acheson L K* (1951)).

$$\begin{cases} \frac{dG_j}{dr} - \frac{(j + \frac{1}{2})}{r} G_j + \frac{(E - V)}{\hbar c} F_j = 0 \\ \frac{dF_j}{dr} + \frac{(j + \frac{1}{2})}{r} F_j - \frac{(E - V)}{\hbar c} G_j = 0 \end{cases} \quad (2.71)$$

A des grandes distances du noyau, nous trouvons une solution avec la forme asymptotique suivante :

$$\begin{aligned} \phi &\approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{ikr \cos(\theta)} + r^{-1} k f(\theta) \begin{bmatrix} 1 \\ \text{tg}(\Theta / 2) e^{i\Phi} \end{bmatrix} e^{ikr \cos(\theta)} \\ &= \phi_{\text{inci}} + \phi_{\text{diff}} \end{aligned} \quad (2.72)$$

En utilisant maintenant le développement de l'onde plane incidente en expression de somme d'ondes partielles nous avons : (voir *Watson G N, Theory of Bessel Functions* p 128, 1946).

$$\phi_{inci} \approx \sum_{j-1/2}^{\infty} \left(\frac{\pi}{2r}\right)^{1/2} i^{j-1/2} \left[J_j \chi_j^1 + i J_{j+1} \chi_j^2 \right] \quad (2.73)$$

où J_j et J_{j+1} sont des fonctions de *Bessel*

La décomposition de l'onde totale est semblable à celle de l'onde incidente :

$$\phi_{total} \approx \sum_{j-1/2}^{\infty} r^{-1} i^{j-1/2} e^{i\eta_j} \left[G_j \chi_j^1 + i F_j \chi_j^2 \right] \quad (2.74)$$

La phase η_j est déterminée en comparant les formes asymptotiques données par les relations (2.73) et (2.74) et en insérant les équations suivantes :

$$\left(\frac{\pi r}{2}\right)^{1/2} J_j(r) \approx \sin\left(kr - \frac{1}{2}\left(j - \frac{1}{2}\right)\pi\right) \quad (2.75-a)$$

et

$$G_j \approx \sin\left(kr - \frac{1}{2}\left(j - \frac{1}{2}\right)\pi + \eta_j\right) \quad (2.75-b)$$

Nous retrouvons ainsi l'équation (2.60) qui détermine la phase η_j .

Maintenant en combinant les formes asymptotiques données par les équations (2.72), (2.73) et (2.74) et en faisant la différence suivante :

$$\phi_{total} - \phi_{inci} = \phi_{diff} \quad (2.76)$$

nous trouvons que l'amplitude de diffusion $f(\theta)$ est donnée par l'équation suivante :

$$f_1(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{j-1/2}^{\infty} (e^{2i\eta_j} - 1) \left(j + \frac{1}{2}\right) (P_{j-1/2} + P_{j+1/2}) \quad (2.77)$$

Notons que la même étude est valable pour un état de spin down.

A l'aide de l'expression de l'amplitude de diffusion nous remontons au calcul de la section efficace de diffusion à partir de la relation (2.65).

2-5 Système à deux électrons relativistes

Contrairement aux solutions de l'équation de *Dirac* monoélectronique données plus haut, les solutions pour un système à deux électrons relativistes ne peuvent être formulées qu'avec des méthodes approchées. La construction des fonctions propres $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ d'un hamiltonien relativiste obtenu par une somme de hamiltoniens de *Dirac* et la détermination des énergies propres correspondantes sont effectuées par des méthodes d'approximations comme la méthode variationnelle de *Ritz*. Cette méthode consiste à résoudre de manière approchée l'équation de *Dirac* à deux électrons en choisissant la fonction d'onde de ces derniers en fonction d'un paramètre variationnel.

a- Application au problème de deux électrons de la couche K d'un atome lourd

La détermination de la fonction d'onde des deux électrons de la couche K d'un atome lourd, nécessite la résolution de l'équation de *Dirac* suivante :

$$H_D(1,2) \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.78)$$

L'hamiltonien de *Dirac* $H_D(1,2)$ est donné par : (*Swirles B* (1935))

$$H_D(1,2) = H_1 + H_2 + \frac{1}{r_{12}} \quad (2.79)$$

$$\text{où} \quad H_i = -i c \vec{\alpha}_i \cdot \vec{\nabla}_i + \beta_i m_0 c^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (2.80)$$

avec $i = 1, 2$

et $\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est la fonction d'onde solution de l'équation de *Dirac* à deux électrons écrite comme somme de deux équations de *Dirac* monoélectronique d'une façon séparée. D'après les solutions données par les équations (2.51-a) et (2.51-b) et à l'aide du principe d'exclusion de *Pauli* nous avons :

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1s_{+1/2}(\vec{r}_1) 1s_{-1/2}(\vec{r}_2) - 1s_{+1/2}(\vec{r}_2) 1s_{-1/2}(\vec{r}_1)] \quad (2.81)$$

avec $1s_{+1/2}(\vec{r}_1)$ et $1s_{-1/2}(\vec{r}_2)$ désignant les solutions de l'équation de *Dirac* monoélectronique des états liés données par les équations (2.51-a) et (2.51-b) respectivement pour un spin up et un spin down.

L'idée de base consiste à appliquer la méthode variationnelle en introduisant un paramètre variationnel z_e . Nous écrivons l'hamiltonien de *Dirac* de chacun des deux électrons de la couche K sous la forme :

$$H_D(i) = \vec{\alpha}_i \cdot \vec{p}_i + \beta m_0 c^2 - \frac{z}{r_i} = \vec{\alpha}_i \cdot \vec{p}_i + \beta m_0 c^2 - \frac{z_e}{r_i} - \frac{z - z_e}{r_i} \quad (2.82)$$

avec $i = 1, 2$

L'équation d'onde variationnelle de *Dirac* décrivant les deux électrons atomiques dans leurs états liés est donnée par l'équation suivante :

$$H_D(1,2)\varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = E(1,2)\varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.83)$$

où $\varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est la fonction d'onde variationnelle qui représente l'état physique des deux électrons; d'après le principe de *Pauli* cette fonction s'écrit :

$$\varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \quad (2.84)$$

et l'hamiltonien de *Dirac* $H_D(1,2)$ est donné par :

$$H_D(1,2) = H_D(1) + H_D(2) + \frac{1}{r_{12}} \quad (2.85)$$

En respectant la condition de normalisation suivante :

$$\langle 1s_{m_i}(z_e, \vec{r}_i) | 1s_{m_i}(z_e, \vec{r}_i) \rangle = 1 \quad (2.86)$$

Et en utilisant les deux expressions (2.83) et (2.85), l'énergie totale $E(1,2)$ des deux électrons est donnée par l'équation suivante :

$$E(1,2) = \langle \varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | H_D(1,2) | \varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (2.87)$$

En substituant d'une part l'équation (2.82) dans l'équation (2.85), et d'autre part en remplaçant la fonction $\varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ par la relation (2.84) dans l'équation (2.87), l'énergie $E(z_e)$ des deux électrons relativistes est donnée par l'équation suivante :

$$E(z_e) = 2E_{1s_{+1/2}}(z_e) - \left\langle 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) \left| \frac{z-z_e}{r_1} \right| 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle - \left\langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \left| \frac{z-z_e}{r_2} \right| 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \\ + \left\langle 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (2.88)$$

Donc après avoir minimisé l'énergie nous trouvons le paramètre variationnel z_e . Nous remplaçons dans l'équation (2.82), et la fonction d'onde décrivant l'état fondamental des deux électrons de la couche K est donnée par :

$$\varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) - 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_2) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_1) \right] \quad (2.89)$$

Nous signalons ici que notre méthode permet d'éviter la chute dans la région des énergies négatives.

c- Calcul des éléments de matrice de $E(z_e)$

L'application du principe variationnel nécessite dans un premier temps la vérification de la normalisation de la fonction d'onde choisie, c'est-à-dire la vérification de la relation suivante :

$$\langle \varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = 1 \quad (2.90)$$

Cette relation étant bien vérifiée, le calcul de l'énergie $E(z_e)$ nous ramène au calcul des deux éléments de matrice de base suivants :

$$M_1 = \left\langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \left| \frac{z-z_e}{r_1} \right| 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (2.91)$$

et

$$M_2 = \langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) | \frac{1}{r_{12}} | 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (2.92)$$

En calculant ces éléments de matrice (voir Annexe B), nous trouvons :

$$M_1 = 2 z_e (z - z_e) \frac{\Gamma(2\gamma_1^*)}{\Gamma(2\gamma_1^* + 1)} \quad (2.93)$$

avec γ_1^* n'est que $\gamma_1(z_e)$ donnée à l'aide de la relation (2.52-a)

$$M_2 = 2 z_e \frac{1}{2^{4\gamma_1^*}} \frac{\Gamma(4\gamma_1^* + 1)}{(2\gamma_1^* + 1)(\Gamma(2\gamma_1^* + 1))^2} {}_2F_1(1, 4\gamma_1^* + 1, 2\gamma_1^* + 2, 1/2) \quad (2.94)$$

où ${}_2F_1(a, b, c, d)$ désigne la fonction hypergéométrique à quatre paramètres.

Nous trouvons finalement l'énergie $E(z_e)$ en fonction du paramètre variationnel z_e :

$$E(z_e) = 2E_{1s}(z_e) - \frac{z_e(z - z_e)}{\gamma_1^*} + \frac{z_e}{2^{4\gamma_1^* - 1}} \frac{\Gamma(4\gamma_1^* + 1)}{(2\gamma_1^* + 1)(\Gamma(2\gamma_1^* + 1))^2} {}_2F_1(1, 4\gamma_1^* + 1, 2\gamma_1^* + 2, 1/2) \quad (2.95)$$

avec $E_{1s}(z_e)$ désignant l'énergie de liaison d'un électron à la couche K, en considérant cette dernière comme un hydrogénoïde, $E_{1s}(z_e)$ est donnée par les relations (2.47-a) et (2.47-b).

En minimisant cette expression, nous donnons ici les résultats trouvés pour les atomes de cuivre, d'argent et d'or en les comparant avec les énergies trouvées en considérant la couche K comme un hydrogénoïde, nous donnons aussi les valeurs de z_e correspondants aux mêmes atomes, qui nous seront utiles pour la construction des fonctions d'onde totales pour la description du système cible-projectile lors d'une collision ionisante à très haute énergie. (voir *Joulakian B et El Messaoudi A (1997)*).

ATOME A	Charge nucléaire Z	Potentiel d'ionisation expérimental de la couche K (u.a)	Potentiel d'ionisation calculé par $A^{*(Z,1)}$ (u.a)	Potentiel d'ionisation calculé par $A^{*(Z,2)}$ (u.a)	Energie électronique pour $A^{*(Z,2)}$ (u.a)	Charge effective z_e
Cu	29	-323,3	-425,32	-406,88	-832,3	28,69
Ag	47	-937,6	-1139,1	-1000,1	-2139,0	45,1
Au	79	-2965,8	-3434,8	-3313,2	-6748,0	76,5

tableau 2.1 : Comparaison entre les valeurs de l'énergie héliumoïde et hydrogéoïde et les valeurs de z_e trouvées pour les atomes Cu, Ag et Au

2-6 Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre les solutions de l'équation de *Dirac* pour un électron libre sous forme d'ondes planes relativistes avec un spin polarisé. Nous avons également donné les solutions dans le continuum lorsque $E > m_0 c^2$, ainsi que les solutions des états liés dans le domaine d'énergie $0 < E < m_0 c^2$, et enfin nous avons déterminé la fonction d'onde décrivant l'état fondamental de deux électrons relativistes liés à la couche K respectivement des atomes de cuivre, d'argent et d'or. Dans les chapitres trois et quatre, nous utiliserons toutes ces solutions pour la description du système cible-projectile avant la collision et des électrons dans le continuum après la collision pour l'étude d'un problème de simple ionisation des atomes lourds à très haute énergie.

Chapitre 3

Ionisation simple (e,2e) d'un électron de la couche K d'un atome lourd

3-1 Introduction

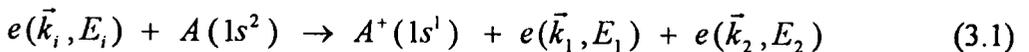
L'étude de l'ionisation simple (e,2e), nécessite la détermination de la section efficace différentielle triple notée (SED_T) dont le calcul constitue un test direct entre les théories utilisées et les expériences. Après avoir donné une description du dispositif expérimental nous allons présenter notre traitement relativiste pour l'obtention de la SED_T. L'étude des solutions de l'équation de *Dirac* dans le continuum et dans un champ coulombien développées au deuxième chapitre ainsi que l'état fondamental d'un système à deux électrons relativistes seront utilisés pour décrire le système cible-projectile avant et après la collision à l'aide d'un modèle d'ondes planes à trois électrons relativistes qui introduit la corrélation dans l'état initial en considérant le deuxième électron de la couche K. Finalement nous comparons l'étude proposée aux résultats expérimentaux et au modèle d'ondes planes relativistes (rPWBA) ainsi qu'aux autres modèles théoriques proposés.

3-2 Cinématique de la simple ionisation (e,2e)

a- Description d'une réaction (e,2e)

Nous étudions la section efficace relativiste triplement différentielle lors d'une simple ionisation de la couche K d'atomes lourds par des électrons très énergétiques (300, 500 keV). Les expériences sont effectuées par bombardement de couches fines de l'ordre de $50 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ assimilées à un gaz de telle sorte d'avoir un seul choc par particule. Les techniques utilisées dans ce genre d'expériences sont exposées dans les premiers travaux de *Schüle et Nakel* (1982), *Ruoff et Nakel* (1987) et *Bonfert et al* (1991).

Dans une expérience (e,2e) on réalise la réaction suivante :



où $A(1s^2)$ désigne La cible; dont $1s^2$ représente la configuration électronique de la couche interne K. Dans la voie d'entrée nous sommes en présence d'un électron incident de vecteur d'onde \vec{k}_i et d'énergie E_i qui heurte une cible lourde supposée immobile dans le repère du laboratoire. Après la collision dans la voie de sortie, nous sommes en présence de deux électrons qui émergent de la réaction et qui sont détectés en coïncidence. Le diffusé est désigné par un vecteur d'onde \vec{k}_1 et d'énergie E_1 et l'éjecté par le vecteur d'onde \vec{k}_2 et d'énergie E_2 et finalement l'atome ionisé possédant un seul électron lié à la couche K est désigné par $A^+(1s^1)$. Lors de la collision toutes les lois de conservation des énergies totales et des quantités de mouvements totales sont respectées.

Nous pouvons classer l'étude de cette réaction de collision ionisante en deux cinématiques, la géométrie asymétrique et la géométrie symétrique qui feront l'objectif principal de notre étude dans cette partie.

b- Géométrie symétrique coplanaire

Notons qu'en général les trois vecteurs \vec{k}_i , \vec{k}_1 et \vec{k}_2 ne se trouvent pas dans le même plan, sauf dans le cas où l'angle azimutal relatif aux deux électrons émergents, défini par $\phi = \phi_1 - \phi_2$, prend les valeurs 0 ou π . Cette géométrie de la réaction est appelée géométrie coplanaire, qui correspond généralement aux montages expérimentaux actuels.

Dans le cas d'une géométrie coplanaire symétrique les deux électrons sortent avec les mêmes énergies ($E_1 = E_2$) et sont détectés en coïncidence sous des angles égaux ($\theta_1 = \theta_2 = \theta$) de part et d'autre de la direction d'incidence voir (figure 3.1). Ces conditions simplifient la détection en coïncidence au niveau expérimental. Dans cette géométrie le moment de transfert $|\vec{k}|$ défini par $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_1$ est grand. On parle d'une collision binaire, où l'électron incident est dévié suivant un grand angle de diffusion et avec une grande perte d'énergie, dans ce cas nous pouvons utiliser l'approximation impulsionnelle qui consiste à décrire l'électron éjecté avec une onde plane et à négliger la contribution du potentiel nucléaire dans la section efficace.

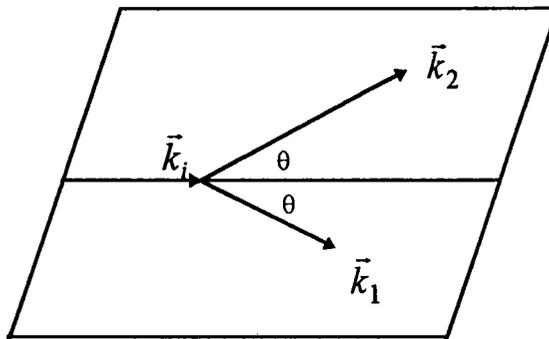


Figure 3.1: Figure désignant une cinématique d'une réaction de collision (e,2e) dans une géométrie coplanaire symétrique.

c- Géométrie asymétrique coplanaire

Dans cette géométrie, après la collision les deux électrons émergents sont détectés en coïncidence dans des directions différentes et avec des vitesses différentes (voir Figure 3.2), l'un est rapide et il est diffusé dans une direction de petit angle de diffusion, l'autre est lent. Dans cette géométrie on parle de domaine à petit transfert d'impulsion $|\vec{k}| = |\vec{k}_i - \vec{k}|$ et de régime dipolaire. On note l'existence de deux directions préférentielles d'éjection, l'une est appelée binaire dans la direction du transfert \vec{k} et la seconde est appelée direction de recul qui est due au noyau phénomène qui persiste lors d'une collision à une très grande énergie incidente.

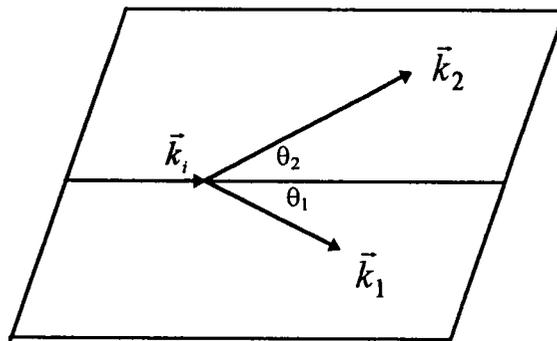


Figure 3.2: Figure simplifiée d'une réaction de collision (e,2e) dans une géométrie coplanaire asymétrique

3-3 Calcul de la section efficace

Le processus d'ionisation que nous traitons dans cette thèse est un processus inélastique, de ce fait il n'existe pas de relation univoque entre l'énergie et l'angle d'éjection de l'électron. En effet, pour une valeur donnée de l'énergie d'éjection l'angle d'éjection peut prendre des valeurs comprises entre 0° et 180° , mais chacune d'elles est engendrée par une probabilité qui dépend

de l'énergie d'éjection considérée. En fait, le processus de collision ou d'ionisation est caractérisé par la section efficace.

a- Section efficace de diffusion ou section efficace totale

Dans la théorie des collisions, la section efficace est une quantité directement mesurable. Par conséquent on présente les mesures expérimentales d'un tel processus sous forme d'une section efficace, appelée section efficace de diffusion ou section efficace totale.

Considérons un flux F de particules incidentes, monoénergétiques et homogènes qui rentrent en collision avec une cible constituée de N_i particules identiques, et soit N le nombre de particules diffusées par unité de temps.

La section efficace totale est donnée par la relation suivante :

$$\sigma = \frac{N}{F} \frac{1}{N_i} \tag{3.2}$$

Elle est aussi reliée à la probabilité de transition par unité de temps par la relation suivante :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{i \rightarrow f}}{F} \tag{3.3}$$

Cette quantité est mesurée en m^2 et elle est relative à tous les états de la voie de sortie $|f\rangle$.

Après avoir défini la section efficace totale par la relation (3.3), qui est reliée à la probabilité de transition, ou encore à l'élément de matrice de transition $T_{i \rightarrow f}$ qui caractérise en général la transition entre deux états quantiques $|i\rangle$ et $|f\rangle$. Il est clair que la probabilité de transition $P_{i \rightarrow f}$ dépend de son côté de l'état final et de l'état initial, elle est donc reliée à la matrice de transition T par la relation suivante :

$$P_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_f) \left| T_{i \rightarrow f} \right|^2 \frac{F}{|\vec{v}_i|} \tag{3.4}$$

\vec{v}_i désigne la vitesse incidente dans le repère du laboratoire.

Notons que les seules transitions permises sont celles qui satisfont les relations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement totale décrites par la fonction δ de Dirac. Nous pouvons également exprimer la vitesse incidente \vec{v}_i en fonction de k_i et E_i , l'impulsion et

l'énergie de la particule incidente. Par conséquent, nous reprenons la relation qui exprime l'énergie totale relativiste E_i en fonction de la quantité de mouvement donnée par l'équation suivante :

$$E_i = \sqrt{p_i^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (3.5)$$

Sachant que la quantité de mouvement $|\vec{p}_i|$ est donnée par :

$$|\vec{p}_i| = m |\vec{v}_i| = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}}} v_i \quad (3.6)$$

tel que : $v_i = |\vec{v}_i|$

En substituant la relation (3.6) dans l'équation (3.5), nous avons :

$$E_i = \frac{p_i c^2}{v_i} \quad (3.7)$$

Ainsi, on en déduit que :

$$\frac{1}{v_i} = \frac{E_i}{p_i c^2} = \frac{E_i}{k_i c^2} \quad (3.8)$$

D'après l'équation (3.8), l'équation (3.4) devient :

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4}{k_i c^2} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_f) |T_{i \rightarrow f}|^2 F E_i \quad (3.9)$$

En utilisant les équations (3.3) et (3.9) la section efficace de transition devient :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \frac{E_i}{k_i c^2} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_f) |T_{i \rightarrow f}|^2 \quad (3.10)$$

En tenant compte de la dégénérescence sur l'orientation de la particule diffusée ou éjectée, la section efficace est donnée par :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = (2\pi)^4 \frac{E_i}{k_i c^2} \int d\vec{k}_i \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_f) |T_{i \rightarrow f}|^2 \quad (3.11)$$

où \vec{k}_i désigne l'impulsion de l'électron diffusé ou éjecté.

b- Section efficace simplement différentielle

A partir de l'expression de la section efficace d'ionisation exprimée par la relation (3.11) nous pouvons définir la section efficace simplement différentielle en angle. Elle est associée à la probabilité de détecter des particules d'impulsion \vec{k}_1 diffusées ou éjectées sous un angle solide $d\Omega_1$ pour une énergie incidente E_i donnée. Compte tenu de la relation entre l'angle solide et l'impulsion, nous écrivons :

$$d\vec{k}_1 = k_1^2 dk_1 d\Omega_1 \tag{3.12}$$

Or d'après la relation (3.5) nous avons :

$$k_1 dk_1 = \frac{E_1 dE_1}{c^2} \tag{3.13}$$

La relation (3.12) permet d'écrire la relation (3.13) sous la forme suivante :

$$d\vec{k}_1 = \frac{k_1 E_1 dE_1}{c^2} d\Omega_1 \tag{3.14}$$

Finalement en utilisant la relation (3.14), la section efficace simplement différentielle par unité d'angle solide de la particule diffusée ou éjectée s'écrit :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_1} = (2\pi)^4 \frac{E_i}{k_i c^4} \int k_1 E_1 dE_1 \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_f) |T_{i \rightarrow f}|^2 \tag{3.15}$$

c- Section efficace doublement différentielle

La section efficace doublement différentielle représente la distribution en énergie et en angle de la particule éjectée ou diffusée après la collision (dans notre cas les électrons).

Elle est donnée à partir de la relation (3.15) par :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_1 dE_1} = (2\pi)^4 \frac{E_i E_1}{c^6} k_i^{-1} k_1 \delta(E_i - E_f) |T_{i \rightarrow f}|^2 \quad (3.16)$$

Cette quantité est une fonction de l'énergie incidente, de l'énergie et de l'angle de sortie de l'une des deux particules. Expérimentalement, on fixe deux paramètres et on mesure la section efficace doublement différentielle en fonction du troisième. A ce niveau on peut mesurer deux sections efficaces doublement différentielles, c'est-à-dire, séparer celle qui détecte la particule éjectée de celle qui détecte la particule diffusée c'est le mode de non-coïncidence qui est valable dans une situation à haute énergie. Pour réaliser les mesures expérimentales, on place deux détecteurs séparés de façon à obtenir les deux sections efficaces doublement différentielles, $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_2 dE_2}$ et $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_1 dE_1}$ et on aura une distinction entre la particule éjectée et la particule diffusée, par contre à basse énergie incidente un seul détecteur est suffisant, sans distinguer la particule éjectée de celle diffusée.

d- Section efficace triplement différentielle

La section efficace triplement différentielle correspond à la probabilité de détection de deux électrons après un processus de simple ionisation. Elle est une fonction de tous les paramètres cinématiques de la collision. Elle donne la description détaillée d'une telle collision que nous appelons collision (e,2e). La section efficace triplement différentielle dans le cas d'une collision par impact électronique d'énergie relativiste est donnée par :

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = \frac{(2\pi)^4}{c^6} E_i E_1 E_2 k_i^{-1} k_1 k_2 |T_{i \rightarrow f}|^2 \quad (3.17)$$

La détection en coïncidence des deux électrons émergents est la technique expérimentale utilisée pour la mesure de la section efficace triplement différentielle, cette dernière qui constitue actuellement le test direct entre les théories et les expériences décrivant les problèmes d'ionisation simples.

3-4 Calcul de la section efficace différentielle triple

Nous avons vu que lors d'une collision ionisante la détection en coïncidence des deux électrons émergents permet de déterminer la section efficace triplement différentielle que l'on notera par SEDT, cette dernière est donnée par la relation (3.17), dont $T_{i \rightarrow f}$ représente l'amplitude de transition entre l'état initial $|i\rangle$ et l'état final $|f\rangle$ en tenant compte de tous les effets, tels que l'effet d'échange et l'effet de polarisation du spin de l'électron. Il est clair qu'un calcul plus ou moins rigoureux de la SEDT nécessite un calcul détaillé de l'amplitude de diffusion $T_{i \rightarrow f}$. Pour calculer cette amplitude nous sommes amenés à définir d'une part la fonction d'onde totale décrivant l'état initial c'est-à-dire le système cible-projectile avant la collision, et d'autre part la fonction d'onde totale décrivant l'état final après la collision constitué de l'atome ionisé et les deux électrons diffusé et éjecté.

a- Construction de la fonction d'onde initiale

Dans le cas d'un problème de simple ionisation (e,2e) que nous traitons dans cette partie, la réaction (3.1) s'assimile à l'ionisation sur des couches minces d'un atome lourd (Cu, Ag ou Au) par un électron relativiste suffisamment énergétique (300, 500 keV) pour éjecter un électron de la couche interne K. Les travaux théoriques cités précédemment ont traité le problème d'ionisation de la couche K d'un atome lourd comme un problème d'ionisation d'un atome de type hydrogénoïde relativiste, c'est-à-dire en considérant la cible comme un système monoélectronique.

La particularité de notre travail est que nous traitons pour la première fois le problème d'ionisation d'un atome lourd par un électron relativiste comme le problème d'un système héliumoïde en introduisant la contribution du deuxième électron de la couche K, c'est-à-dire, en introduisant l'effet de la corrélation dans la fonction d'onde décrivant l'état initial. Nous considérons ainsi un système à trois particules, l'électron incident de vecteur d'onde \vec{k}_i et d'énergie incidente E_i et les deux électrons atomiques de la couche K de l'atome considéré

qui ont pour structure électronique d'après le principe d'exclusion de *Pauli* $1s_{1/2}$ et $1s_{-1/2}$ (voir la voie d'entrée de la réaction (3.1)).

Nous écrivons donc l'hamiltonien total du système comme la somme des différents hamiltoniens de *Dirac*. Le premier est celui de l'électron incident considéré comme un hamiltonien de *Dirac* libre, et le second est celui des deux électrons atomiques considéré comme un hamiltonien de *Dirac* à deux électrons dans un champ coulombien, aux quels nous ajoutons les interactions entre l'électron incident et les différents éléments de l'atome. Nous précisons qu'on ne tient compte que de la contribution des électrons de la couche K et nous négligeons la contribution des électrons des autres couches, nous justifions cette approximation par le fait que les orbites des autres couches sont supposées suffisamment éloignées. L'hamiltonien total du système s'écrit alors :

$$H_D = H(0,1,2) + V(r_0, r_{01}, r_{02}) \quad (3.18)$$

avec :

$$H(0,1,2) = H_0 + H_1 + H_2 + \frac{1}{r_{12}} \quad (3.19)$$

H_0 est l'hamiltonien de *Dirac* libre décrivant l'électron incident indicé par 0 et il est donné par:

$$H_0 = c \vec{\alpha}_0 \vec{p}_0 + \beta m_0 c^2 \quad (3.20)$$

et H_i étant l'hamiltonien des électrons atomiques ($i = 1, 2$) est donné par :

$$H_i = c \vec{\alpha}_i \vec{p}_i + \beta_i m_0 c^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (3.21)$$

Le potentiel vu par l'électron incident est donné par :

$$V(r_0, r_{01}, r_{02}) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \quad (3.22)$$

avec $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2$ désignent respectivement les positions de l'électron incident et des deux électrons atomiques liés à la cible, les quantités $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ tel que ($i \neq j = 0, 1, 2$) représentent les distances interatomiques.

La fonction d'onde $\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ décrivant le système complet des trois particules dans sa voie d'entrée est solution de l'équation de *Dirac* suivante :

$$H_D \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.23)$$

La solution de l'équation (3.23) est séparable, et nous conduit à une solution complète $\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ qui s'écrit comme produit des fonctions d'onde décrivant respectivement le mouvement de l'électron projectile et les mouvements des électrons atomiques de la cible, ainsi nous obtenons l'équation suivante :

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.24)$$

tel que $\varphi(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ et $\Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sont respectivement les solutions approchées pour l'électron projectile et les électrons atomiques.

Pour l'électron incident le flux incident est non polarisé, nous pouvons l'assimiler à un flux où les électrons ont une chance égale d'avoir un spin up $+1/2$ ou un spin down $-1/2$, ces électrons sont décrits par des ondes planes relativistes de *Dirac* données par les deux équations (2.28-a) et (2.28-b).

Maintenant pour décrire les deux électrons atomiques de la couche K nous utilisons la procédure variationnelle développée au deuxième chapitre. Donc d'après le principe d'exclusion de *Pauli*, la fonction d'onde décrivant les deux électrons de la couche K est donnée par :

$$\Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) - 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_2) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_1) \right] \quad (3.25)$$

où z_e est le paramètre variationnel donné par le tableau (2.1) pour les atomes Cu, Ag, et Au, $1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_i)$ et $1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_i)$ désignent respectivement les solutions de *Darwin* pour les états de spin $+1/2$ et de spin $-1/2$ et qui sont données au deuxième chapitre par les relations (2.51-a) et (2.51-b) en remplaçant la charge z par la charge effective z_e .

Puisque nous avons considéré un flux d'électron incident non polarisé, et comme le système des trois particules est constitué de l'électron incident et des deux électrons atomiques alors ce

dernier a une chance égale d'avoir un spin total qui prend les deux valeurs suivantes ($S = 1/2, M_s = +1/2$) ou ($S = 1/2, M_s = -1/2$) et on peut écrire la fonction d'onde initiale comme suite :

$$\psi_{i\pm}(S = 1/2, M_s = \pm 1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \varphi_{\pm 1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right| - \left| \varphi_{\pm 1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi(z_e, \vec{r}_2, \vec{r}_1) \right| \right] \quad (3.26)$$

La fonction $\Phi(z_e, \vec{r}_i, \vec{r}_j)$ est donnée par la relation (3.25) et $\left| \varphi_{\pm}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right|$ désigne le déterminant de Slater qui caractérise tous les échanges entre le flux incident et les électrons de coeur dans l'état initial, ce déterminant est donné par :

$$\left| \varphi_{\pm}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right| = \frac{1}{\sqrt{3!}} \left[\varphi_{\pm}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi(z_e, \vec{r}_1, \vec{r}_2) - \varphi_{\pm}(\vec{k}_i, \vec{r}_1) \Phi(z_e, \vec{r}_0, \vec{r}_2) + \varphi_{\pm}(\vec{k}_i, \vec{r}_2) \Phi(z_e, \vec{r}_0, \vec{r}_1) \right] \quad (3.27)$$

Il est évident, puisque nous avons le même paramètre variationnel z_e dans les deux états $1s_{1/2}$ et $1s_{-1/2}$, les deux déterminants de l'équation (3.26) sont identiques mais de signe opposés, dans ce cas nous pouvons écrire :

$$\psi_{i\pm}(S = 1/2, M_s = \pm 1/2) = \left| \varphi_{\pm 1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \quad (3.28)$$

qui désigne la fonction d'onde décrivant le système dans son état initial avant la collision (voir voie d'entrée de la réaction (3.1)).

b- Construction de la fonction d'onde finale

L'ionisation simple (e,2e) d'un atome lourd par impact électronique donne lieu à un état final du système constitué par l'atome ionisé et deux électrons émergents, le diffusé et l'éjecté (voie de sortie de la réaction (3.1)) qui sont détectés en coïncidence. Dans le cas où l'un des deux électrons est plus rapide que l'autre, l'effet d'échange lié à l'indiscernabilité des électrons est très faible. Dans ce cas l'électron le plus rapide est l'électron diffusé, d'énergie E_1 et de

quantité de mouvement \vec{k}_1 , il est émis dans une direction $d\Omega_1$. Le second électron est éjecté dans une direction $d\Omega_2$ avec une énergie E_2 et une quantité de mouvement \vec{k}_2 . Cette première situation de la voie de sortie de la réaction (3.1) est la situation asymétrique qui sera analysée par la suite. Nous faisons également l'étude de la situation symétrique où les énergies des deux électrons sortants sont égales et avec un effet d'échange important.

La fonction d'onde totale décrivant le système dans son état final est solution de l'équation de *Dirac* suivante :

$$H_{Df} \psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_f \psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.29)$$

où H_{Df} désigne l'hamiltonien de *Dirac* de l'état final décrivant les deux électrons dans le continuum et l'électron de l'ion résiduel et E_f son énergie totale. L'indice $i = 0, 1, 2$ repère respectivement l'électron diffusé, éjecté et l'électron atomique de l'ion résiduel.

Du fait qu'en théorie relativiste le spin total du système n'est pas conservé, nous sommes amenés à considérer tous les états de spin possibles qui seront désignés par le couple (S, M_s) . Ceci est explicité dans l'annexe C1, suivant la méthode utilisée par *Schulz M* (1973).

Finalement pour décrire l'état final de la réaction (3.1) nous utilisons toutes les combinaisons des produits de trois fonctions de *Dirac* décrivant respectivement l'électron diffusé, éjecté et l'électron atomique restant lié à la couche K de l'atome (Cu, Ag ou Au). Nous adoptons les notations suivantes pour les fonctions d'onde décrivant l'état individuel de chaque électron :

$\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1)$, $\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2)$ et $1s_{\pm 1/2}(z_f)$ désignent respectivement les fonctions d'onde individuelles de l'électron diffusé de vecteur d'onde \vec{k}_1 , de l'éjecté de vecteur d'onde \vec{k}_2 et de celui atomique, dans les deux états de spin up désigné par l'indice $+1/2$ et de spin down désigné par l'indice $-1/2$. Les fonctions d'onde représentant l'électron atomique $1s_{\pm 1/2}(z_f)$ dans les deux états de spin sont données par les solutions de *Dirac* exprimées à l'aide des relations (2.51-a) et (2.51-b). Nous avons choisi de décrire les deux électrons émergents pour tester notre modèle par des ondes planes relativistes données par les relations (2.28-a et b).

Nous obtenons pour un système à trois électrons huit états possibles représentés par huit fonctions d'onde qui s'écrivent en fonction des déterminants de *Slater*, elles sont données par les équations suivantes :

$$\psi_{f\ 1\pm}^{(-)}(S=3/2, M_S = \pm 3/2) = \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\pm 1/2}(z_f) \right| \quad (3.30)$$

$$\psi_{f\ 2\pm}^{(-)}(S=3/2, M_S = \pm 1/2) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\begin{array}{l} \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\mp 1/2}(z_f) \right| + \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\pm 1/2}(z_f) \right| \\ + \left| \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\pm 1/2}(z_f) \right| \end{array} \right] \quad (3.31)$$

Pour les états ($S = 1/2, M_S = \pm 1/2$) deux combinaisons sont considérées *Schulz M* (1973) :

$$\psi_{f\ 3\pm}^{(-)}(S=1/2, M_S = \pm 1/2) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\begin{array}{l} - \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\mp 1/2}(z_f) \right| - \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\pm 1/2}(z_f) \right| \\ + 2 \left| \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\pm 1/2}(z_f) \right| \end{array} \right] \quad (3.32)$$

et finalement

$$\psi_{f\ 4\pm}^{(-)}(S=1/2, M_S = \pm 1/2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\mp 1/2}(z_f) \right| - \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_1) \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_2) 1s_{\pm 1/2}(z_f) \right| \right] \quad (3.33)$$

où \vec{k}_1 et \vec{k}_2 désignent respectivement les vecteurs d'ondes de l'électron diffusé et éjecté et z_f la charge vue par l'électron atomique $1s$.

c- Calcul de l'élément de matrice T_{fi}

D'après l'équation (3.17), le calcul de la section efficace différentielle triple nécessite le calcul de l'amplitude de diffusion T_{fi} . En appliquant les résultats du précédent paragraphe, c'est-à-dire en tenant compte de tous les états de spin possibles qui sont désignés par le couple (S, M_S) , nous écrivons le carré de l'élément de matrice de diffusion à l'aide de l'expression suivante :

$$|T_{fi}|^2 = \sum_{\eta=1}^8 \sum_{\nu=1}^2 |(T_{fi})_{\eta\nu}|^2 \quad (3.34)$$

où $(T_{fi})_{\eta\pm\pm}$ désigne l'élément de matrice suivant :

$$(T_{fi})_{\eta\pm\pm} = \langle \psi_{f\eta\pm}^- | V(r_0, r_{01}, r_{02}) | \psi_{i\nu\pm} \rangle \quad (3.35)$$

où $V(r_0, r_{01}, r_{02})$ est donné par l'équation (3.22), ψ_i décrit l'état initial du système avant la collision et ψ_f^- décrit le système dans son état final après la collision. ν désigne les deux valeurs de spin total de l'état initial ($S = 1/2, M_S = \pm 1/2$) et η toutes les valeurs de spin de l'état final. La relation (3.34) peut s'écrire sous une autre forme donnée par :

$$|T_{fi}|^2 = \sum_{\eta=+1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 + \sum_{\eta=-1}^4 |T_{fi}|_{\eta--}^2 \quad (3.36)$$

D'autre part, nous avons l'égalité suivante :

$$\sum_{\eta=+1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 = \sum_{\eta=-1}^4 |T_{fi}|_{\eta--}^2 \quad (3.37)$$

Finalement la relation (3.34) devient :

$$|T_{fi}|^2 = 2 \sum_{\eta=+1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 \quad (3.38)$$

Pour établir l'élément de matrice donné par l'équation (3.38), il va falloir multiplier la fonction d'onde initiale par toutes les fonctions d'onde finales définies auparavant. Nous remarquons que seules les combinaisons où il y a conservation du spin de chaque état individuel contribuent au calcul de l'élément de matrice de transition, dans ce cas les seuls éléments de matrice non nuls sont donnés par :

$$(T_{fi})_{2^{++}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle + \\ & \left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{1/2}(z, \vec{r}_2) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle + \\ & \left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \end{aligned} \right] \quad (3.39)$$

et

$$(T_{fi})_{4^{++}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle - \\ & \left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{1/2}(z, \vec{r}_2) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \end{aligned} \right] \quad (3.40)$$

En calculant ces éléments de matrice (voir annexe C2), nous trouvons les résultats suivants :

$$(T_{fi})_{2^{++}} = \langle \psi_{f2}^- | V | \psi_i^- \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} \left[g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - h(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \right] \quad (3.41)$$

$$(T_{fi})_{4^{++}} = \langle \psi_{f4}^- | V | \psi_i^- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[2f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - h(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \right] \quad (3.42)$$

où :

$$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) \left| V \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.43)$$

désigne l'amplitude de diffusion directe où l'indice de l'électron incident est le même que celui du diffusé et,

$$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) \middle| V \middle| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.44)$$

désigne l'amplitude d'échange où l'indice de l'électron incident est le même que celui de l'éjecté. Nous pouvons vérifier que l'amplitude de diffusion directe et celle d'échange sont reliées par la relation de *Peterkop* (1962) suivante :

$$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = f(\vec{k}_2, \vec{k}_1) \quad (3.45)$$

et finalement :

$$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_2) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_0) \middle| V \middle| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.46)$$

qui désigne l'amplitude dite de capture électronique où l'indice de l'électron incident est le même que celui de la couche atomique après la collision.

Il convient de noter que lorsque nous opérons dans un domaine d'énergie où le projectile possède une vitesse supérieure à celle des particules de la cible, tout phénomène d'échange entre le projectile et les électrons atomiques est peu probable. Vu notre domaine d'énergie d'incidence relativiste, nous signalons que dans nos calculs on tient compte seulement de l'amplitude directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et de celle d'échange $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ par contre le terme de capture électronique $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ est négligé, en effet la probabilité de la capture de l'électron incident très énergétique par l'atome est faible.

En remplaçant les différents termes par leurs expressions dans l'expression de la section efficace triplement différentielle SEDT, cette dernière est donnée par :

$$SEDT = (2\pi)^4 k_i^{-1} k_1 k_2 E_1 E_2 \frac{E_i}{c^6} \frac{1}{4} \left[|2f - g - h|^2 + 3|g - h|^2 \right] \quad (3.47)$$

Nous multiplions par le facteur $\frac{1}{4}$, étant donné que nous avons à l'état final l'occupation de quatre états équiprobables.

d- Calcul de l'amplitude de diffusion directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

En remplaçant le potentiel $V(r_0, r_{01}, r_{02})$ par l'équation (3.22) nous écrivons l'amplitude de diffusion directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ sous la forme d'une somme de trois termes :

$$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = f_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) + f_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2) + f_3(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \quad (3.48)$$

avec :

$$f_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \psi_f^-(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} \right| \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.49-a)$$

$$f_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \psi_f^-(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \right| \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.49-b)$$

$$f_3(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \psi_f^-(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} \right| \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.49-c)$$

En remplaçant les fonctions d'onde par leurs expressions ces termes s'écrivent :

$$f_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \left| -\frac{2}{r_0} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \right\rangle J_0(z, z_e) J_1(\vec{k}_2, z_e) \quad (3.50-a)$$

$$f_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle J_0(z, z_e) \quad (3.50-b)$$

$$f_3(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle J_1(\vec{k}_2, z_e) \quad (3.50-c)$$

Les quantités $J_0(z, z_e)$ et $J_1(\vec{k}_2, z_e)$ désignent respectivement les produits scalaires donnés par les deux équations suivantes :

$$J_0(z, z_e) = \langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (3.51-a)$$

$$J_1(\vec{k}_2, z_e) = \langle \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) | 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (3.51-b)$$

Le calcul de ces différents éléments de matrice est détaillé dans l'annexe D1.

Nous obtenons finalement :

$$f_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = -2 \frac{A}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2} G(\vec{k}_2) \quad (3.52)$$

$$f_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{A}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2} G(\vec{k}_2 - \vec{k}) \quad (3.53)$$

$$f_3(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{A}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2} \frac{\Gamma(\gamma_T)}{z_T^{\gamma_T}} I(\vec{k}, z_T, \gamma_T - 3, 0) \quad (3.54)$$

où $G(\vec{q})$ est donné par

$$G(\vec{q}) = I(\vec{q}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + B I(\vec{q}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \quad (3.55)$$

$G(\vec{q})$ est exprimé en fonction de l'intégrale générale que nous présentons sous la forme suivante :

$$I(\vec{q}, \alpha, \beta, n) = \int r^\beta e^{-i(\vec{q}\vec{r} - \alpha r)} \cos(\theta)^n d\vec{r} \quad (3.56)$$

avec β un paramètre non entier.

Les deux intégrales $I(\vec{q}, \alpha, \beta, 0)$ et $I(\vec{q}, \alpha, \beta, 1)$ sont déterminées analytiquement (voir annexe E), nous obtenons :

$$I(\vec{q}, \alpha, \beta, 0) = \frac{4\pi}{q} \operatorname{Im} \left[\frac{\Gamma(\beta+2)}{(\alpha - iq)^{\beta+2}} \right] \quad (3.57-a)$$

$$I(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = \frac{4\pi}{qi} \left[\frac{1}{q} \operatorname{Im} \left[\frac{\Gamma(\beta+1)}{(\alpha-iq)^{\beta+1}} \right] - \operatorname{Re} \left[\frac{\Gamma(\beta+2)}{(\alpha-iq)^{\beta+2}} \right] \right] \quad (3.57-b)$$

A et B sont deux constantes données par les relations suivantes :

$$A = \sqrt{\frac{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)(E_2 + E_0)}{E_i E_1 E_2}} \left[1 + \frac{c^2 k_{1z} k_{iz}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \left[1 + \sqrt{\frac{1-\varepsilon_e}{1+\varepsilon_e}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_e}{1+\varepsilon_e}} \right] N(z) N^2(z_e) \quad (3.58)$$

$$B = i \sqrt{\frac{1-\varepsilon_e}{1+\varepsilon_e}} \frac{c k_{2z}}{E_2 + E_0} \quad (3.59)$$

le vecteur $\bar{k} = \bar{k}_i - \bar{k}_1$ désigne le transfert d'impulsion et z_T et γ_T sont deux paramètres définis pour simplification, ils sont donnés par :

$$z_T = z + z_e \quad (3.60-a)$$

$$\gamma_T = \gamma + \gamma_e + 1 \quad (3.60-b)$$

Finalement l'amplitude de diffusion directe $f(\bar{k}_1, \bar{k}_2)$ du processus est donnée par :

$$f(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = \frac{A}{(2\pi)^4} \frac{1}{k^2} \left[\frac{\Gamma(\gamma_T)}{z_T^{\gamma_T}} \left[-2G(\bar{k}_2) + G(\bar{k}_2 - \bar{k}) \right] + G(\bar{k}_2) I(\bar{k}, z_T, \gamma_T - 3, 0) \right] \quad (3.61)$$

3-5 Résultats et discussions

Nous présentons dans ce qui suit les résultats que nous avons obtenus sur différentes situations symétriques et asymétriques coplanaires, en utilisant notre modèle de trois particules relativistes qui introduit la corrélation dans l'état initial à l'aide de la contribution du deuxième électron de la couche K, nous comparons ensuite les résultats de nos calculs aux résultats expérimentaux et aux résultats obtenus par autres modèles théoriques.

a- cinématiques asymétriques

La distribution angulaire de la section efficace différentielle triple d'ionisation relativiste (SEDT) pour une valeur d'énergie incidente déterminée dépend des deux angles polaires θ_1 et θ_2 et de l'énergie d'éjection E_2 . L'étude de la SEDT peut être faite en variant un ou plusieurs de ces paramètres. Les courbes représentant la variation de la SEDT en fonction de l'angle d'éjection révèlent l'existence de deux lobes, le premier maximum est environ dans la direction du transfert $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_1$, appelé pic binaire et le second est dans la direction opposée appelé pic de recul.

Dans les problèmes de collisions ionisantes à très hautes énergies, ces effets ont été observés expérimentalement. Théoriquement le seul modèle capable de reproduire ces deux effets est le rDWBA (travaux de *Ast H et al (1994)*, *Keller S et al (1994-a)* et *Whelan C T et al (1995)*) et actuellement notre modèle d'ondes planes à trois particules relativistes introduisant la corrélation des deux électrons de la couche K dans l'état initial. Par contre dans les autres modèles théoriques nous notons l'absence de la structure de recul.

Nous signalons que nous représentons trois types de résultats de la section efficace triplement différentielle. Le premier consiste à considérer l'interaction coulombienne entre les trois électrons, telle type d'interaction étant absent dans le traitement de l'électrodynamique quantique. Le second type en négligeant cette interaction, c'est-à-dire en posant l'amplitude de diffusion $f_1(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = 0$, dans ce cas l'amplitude de diffusion totale est donnée par :

$$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = f_2(\vec{k}_1, \vec{k}_2) + f_3(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \quad (3.62)$$

Le troisième type de résultat, en orthogonalisant la fonction d'onde finale décrivant les deux électrons dans le continuum par rapport à la fonction d'onde initiale décrivant les deux électrons de la cible, c'est la procédure d'orthogonalisation de *Schmidt*. Comme il a été montré dans plusieurs travaux (par exemple *Dal Cappello et Le Rouzo (1991)* et *Joulakian et Dal Cappello (1993)*) le problème se réduit à la détermination de l'amplitude de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ pour une charge effective $Z(\vec{k})$, ce qui consiste tout simplement à remplacer le potentiel $(-2/r_0)$ par le potentiel perturbatif $(-Z(\vec{k})/r_0)$, où $Z(\vec{k})$ est donnée par :

$$Z(\vec{k}) = \langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (3.63)$$

où
$$\varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 1s_{1/2}(\vec{r}_1) 1s_{-1/2}(\vec{r}_2) \quad (3.64)$$

Dans ce cas l'amplitude de diffusion directe est donnée par :

$$f_{on}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = D \left[\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | -Z(\vec{k}) + e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \right] \quad (3.65)$$

où
$$\varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \chi_{1/2}(\vec{r}_1) 1s_{-1/2}(\vec{r}_2) \quad (3.66)$$

Il est facile de vérifier que la quantité : $\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$ est celle donnée par les deux potentiels $\frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}}$. Le nouveau terme à calculer est

$\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | -Z(\vec{k}) | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$, pour tous les détails de calcul (voir annexe D2).

Dans ce cas des fonctions d'onde orthogonales l'amplitude de diffusion d'échange obéit toujours à la relation de *Peterkop*, donc elle est donnée par :

$$g_{on}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = D \langle \varphi_{on}^-(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | -Z(\vec{k}') + e^{i\vec{k}'\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}'\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (3.67)$$

avec \vec{k}' qui désigne le vecteur transfert d'échange défini par $\vec{k}' = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$

Les données qui correspondent aux conditions expérimentales sont, des énergies d'incidence $E_0 = 500 \text{ keV}$, diffusée $E_1 = 319 \text{ keV}$ et celle d'éjection $E_2 = 100 \text{ keV}$, l'angle de diffusion est fixé à $\theta_1 = -15^\circ$. La comparaison faite à l'aide de cette figure montre une nette amélioration du modèle rPWBA hydrogénéoïde à deux électrons actifs, en effet nous remarquons l'apparition du pic de recul dans nos calculs comme le prévoit la théorie de collision non relativiste. Par contre cette structure est absente dans le modèle rPWBA (travaux de Keller S et Whelan C T (1994-b)). Ainsi que l'amélioration de l'amplitude de probabilité dans ce dernier modèle. Notons une légère différence dans la direction du maximum binaire par rapport aux mesures expérimentales, ceci est due à plusieurs effets relativistes qu'on a négligé dans nos calculs et que l'on introduira par la suite.

Dans la figure (3.4), on représente la même situation physique de la SEDT pour l'ionisation de la couche K de l'atome d'or (Au), nous comparons dans cette figure les résultats obtenus par nos calculs aux différents modèles théoriques utilisés auparavant, tels que les travaux de Jakubassa-Amundsen (1989) et (1992), qui étudie l'influence de toutes les approximations semi-relativistes des fonctions d'onde décrivant les électrons de la cible et l'électron diffusé, dans cette approximation elle décrit les électrons non liés par des ondes coulombiennes non relativistes multipliées par un spineur constant de Dirac. Nous comparons également avec les travaux de (Walters H R J et al (1992)) où ils utilisent une onde coulombienne semi-relativiste pour décrire l'électron éjecté et deux ondes planes relativistes pour décrire l'électron incident et le diffusé en introduisant la contribution du changement de spin, toujours en assimilant la couche K de l'atome d'or à un hydrogénéoïde relativiste. Nous comparons aussi avec le modèle rDWBA (travaux de Ast H et al (1994), Keller S et al (1994-a) et Whelan C T (1995)), modèle délicat basé sur l'utilisation des ondes distordues relativistes dans les voies d'entrée et de sortie et du propagateur photonique total. Nous remarquons que le seul accord quasiment parfait est celui donné par le modèle rDWBA. Les résultats de nos calculs décrivent d'une façon approchée cette structure où nous remarquons l'existence des deux structures, la structure binaire et celle de recul comme le prévoit la théorie de collision ionisante non relativiste, mis à part le petit décalage dans la direction des deux lobes par rapport aux mesures expérimentales. Notons l'absence de la structure de recul dans les autres modèles.

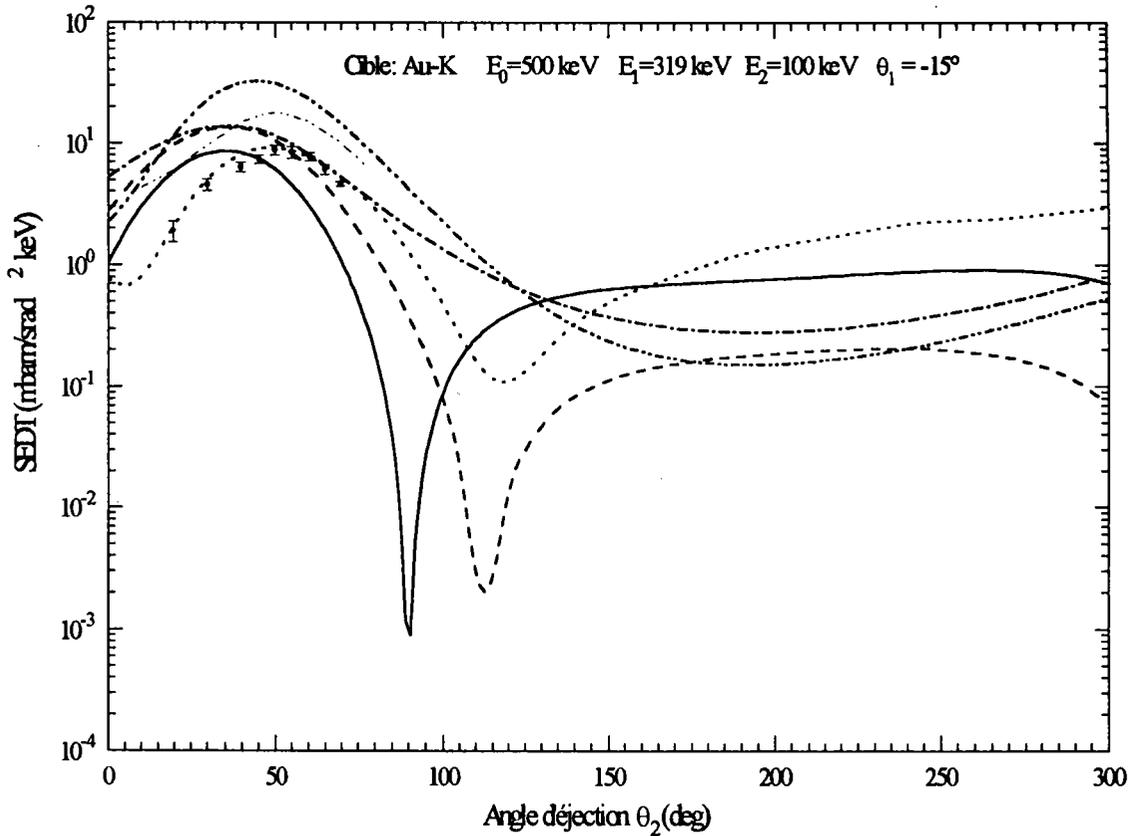


FIG 3.4 La SEDT d'ionisation de l'atome Au en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique à la figure (3.3), .. - - - - - résultats de calcul *Jakubassa-Amudsen* (1989).résultats de rDWBA *Keller et al* (1994) et .. - - - - - résultats de *Walters et al* (1992).

La figure (3.5), représente également la section efficace différentielle triple d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_2 dans une géométrie coplanaire asymétrique calculée en première approximation de *Born*, dans cette situation physique l'énergie incidente est $E_0 = 500 \text{ keV}$, l'énergie diffusée est $E_1 = 375 \text{ keV}$ et celle éjectée est $E_2 = 100 \text{ keV}$, l'angle de diffusion est fixé à $\theta_1 = -7^\circ$. Nous comparons nos calculs aux mesures expérimentales de *Bonfert et al* (1991), ainsi qu'aux résultats du modèle rPWBA hydrogénoïde (travaux de *Keller S et Whelan C T* (1994-b)). Nous remarquons que les deux lobes binaire et de recul sont présents dans les résultats de nos calculs et l'absence de



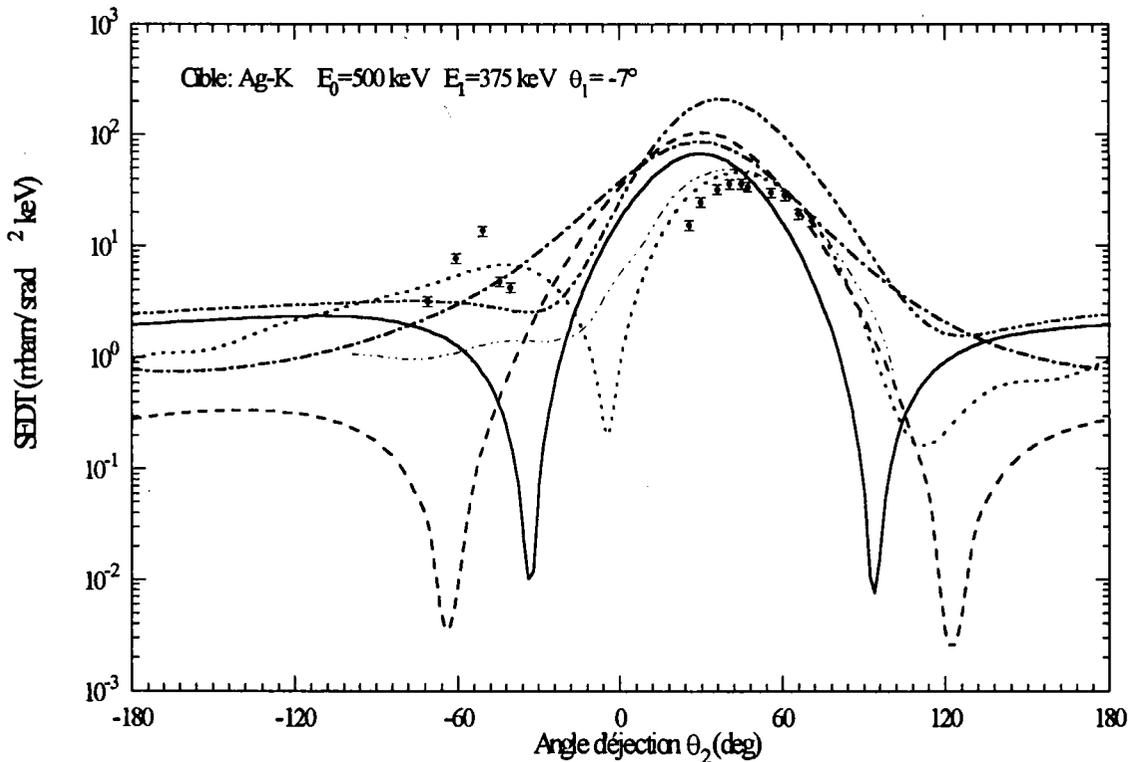


FIG 3.6 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique à la figure (3.5), $\cdot\cdot - \cdot\cdot - \cdot\cdot -$ résultats de calcul *Jakubassa-Amudsen* (1989).résultats de *rDWBA Keller et al* (1994) et $\cdot\cdot - \cdot\cdot - \cdot\cdot -$ résultats de *Walters et al* (1992).

Dans la figure (3.6), nous nous plaçons dans les mêmes conditions expérimentales que pour la figure (3.5), à l'aide d'une comparaison entre nos calculs et les autres modèles cités précédemment, nous notons toujours l'apparition de la structure de recul absente dans les autres modèles sauf dans le modèle *rDWBA*.

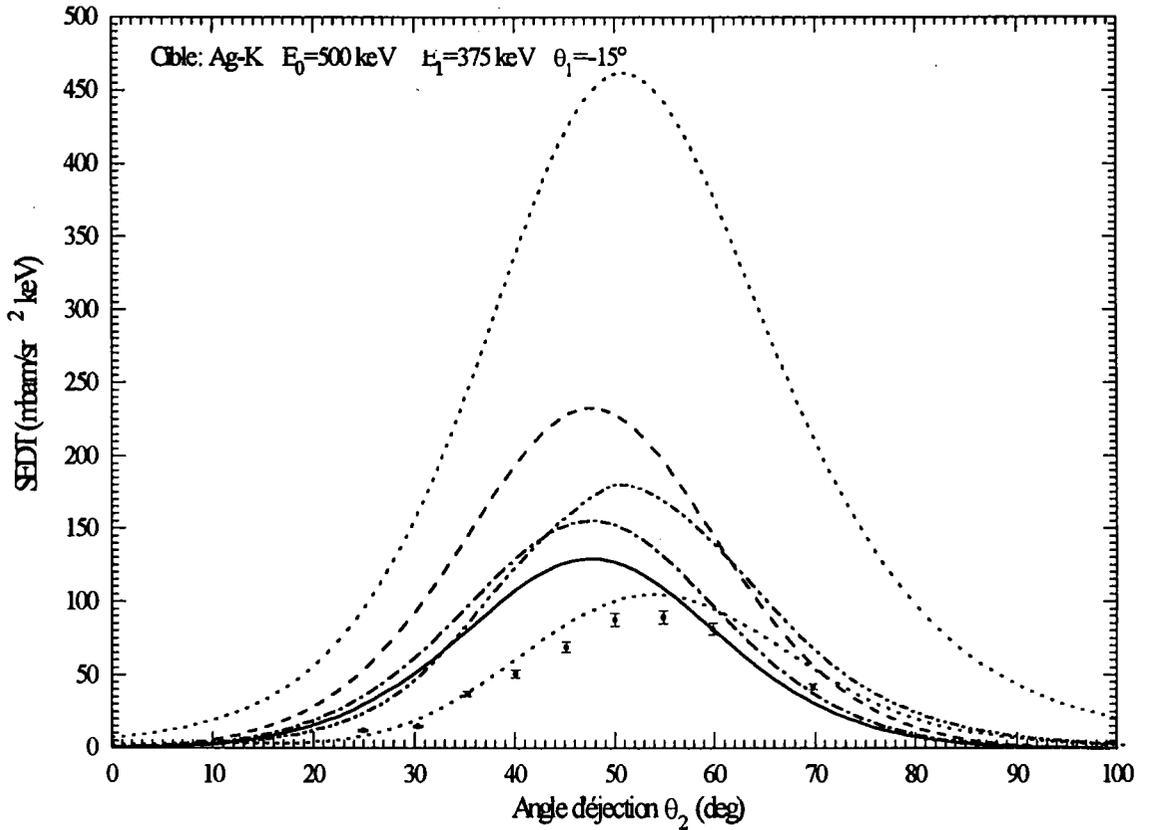


FIG 3.7 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique à la figure (3.6). Résultats de calcul derPWBA Keller and Whelan (1994).résultats de rDWBA Keller et al (1994) et .. - .. - .. - résultats de Walters et al (1992).

Dans la figure (3.7), on représente toujours la distribution angulaire de la SEDT en fonction de l'angle d'éjection θ_2 de la couche K de l'atome d'argent (Ag) avec les mêmes conditions expérimentales que pour la figure (3.5) mis à part qu'on fixe l'angle de diffusion à $\theta_1 = -15^\circ$. Nous comparons toujours avec les résultats expérimentaux de Bonfert et al (1991) et avec le calcul du modèle d'ondes planes relativistes à deux électrons actifs rPWBA (1994), nous remarquons une nette amélioration de ce dernier. Nous comparons également avec les résultats du calcul rDWBA Keller et al (1994) et avec les calculs de Walters et al (1992) utilisant deux ondes planes relativistes et une fonction d'onde coulombienne semi-relativiste, nous constatons

que seul le rDWBA produit d'une façon nette la structure expérimentale de la SEDT, et les résultats de nos calculs sont proches de la structure expérimentale avec le même décalage.

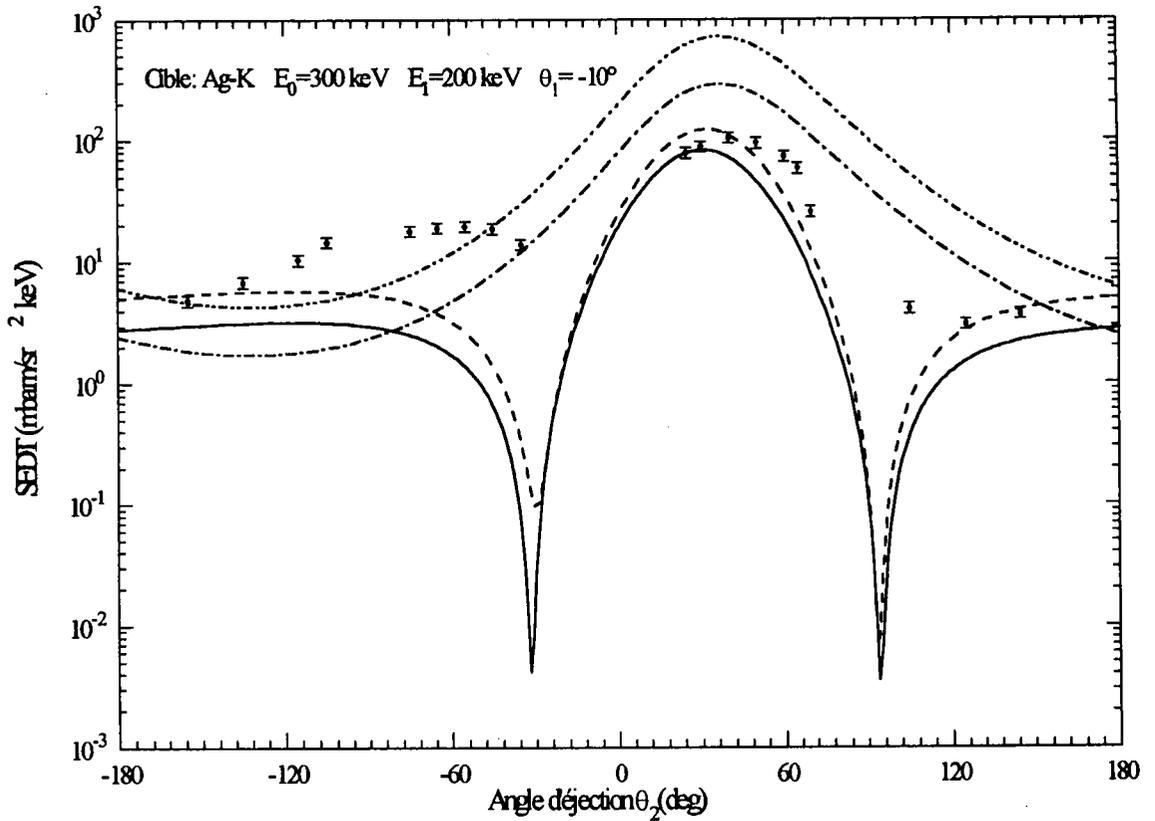


FIG 3.8 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux de *Prinz et al (1995)* sont représentés d'une façon identique aux autres figures, " - - - - résultats de calcul de rPWBA *Keller and Whelan (1994)*.

La figure (3.8), représente la distribution angulaire de la SEDT de la couche K de l'atome d'argent (Ag) comparée aux mesures expérimentales faites dans les conditions suivantes, énergie incidente $E_0 = 300 \text{ keV}$, énergie diffusée $E_1 = 200 \text{ keV}$ et celle éjectée $E_2 = 74,5 \text{ keV}$ et l'angle de diffusion est fixé à $\theta_1 = -10^\circ$. En comparant nos résultats avec les mesures expérimentales de *Prinz et al (1995)* et le modèle rPWBA hydrogénoïde, nous notons toujours les mêmes remarques, la présence des deux pics binaire et de recul et l'absence de ce dernier dans le modèle rPWBA.

b- Cinématiques symétriques

Nous présentons dans ce paragraphe, la section efficace différentielle triple d'ionisation relativiste dans une situation de double symétrie en énergies et en angles, les deux électrons sortants sont détectés dans deux directions symétriques de part et d'autre de la direction d'incidence ($|\theta_1| = |\theta_2|$).

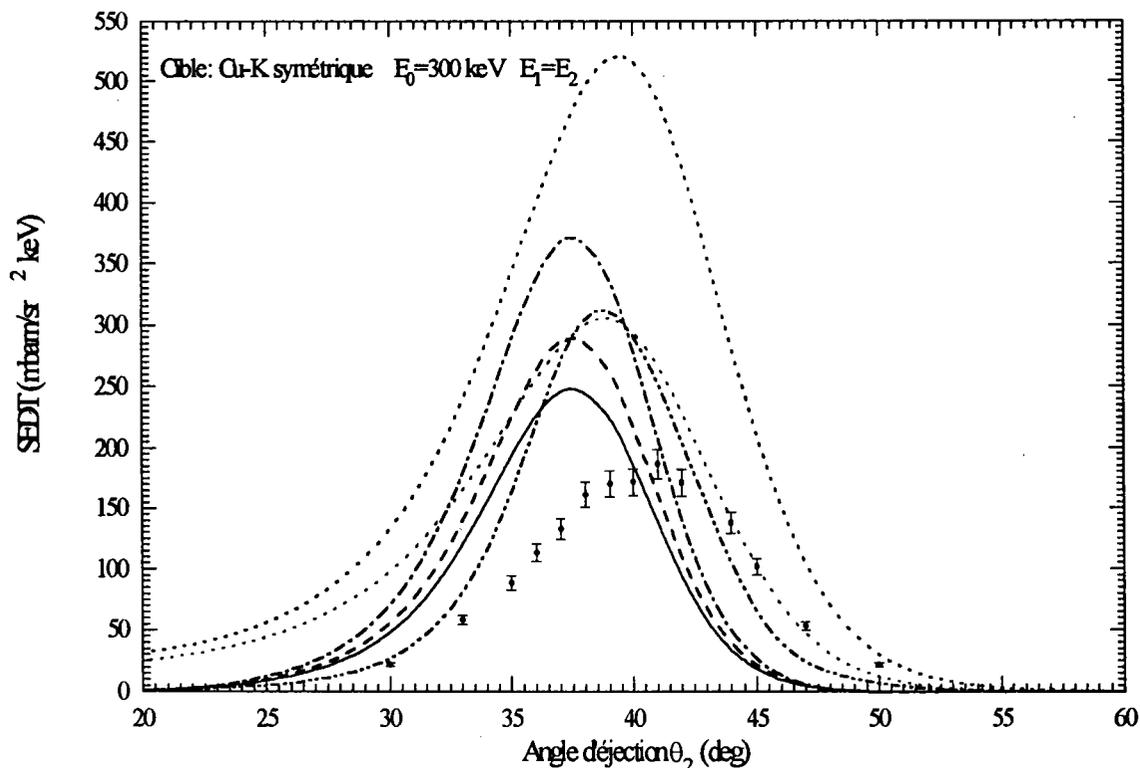


FIG 3.9 La SEDT d'ionisation de l'atome Cu en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique aux autres figures. résultats de *Jakubassa-Amundsen* (1992). - - - et désignent respectivement résultats de calcul de rPWBA de *Keller and Whelan* (1994) sans et avec orthogonalisation.

Dans la figure (3.9), nous représentons la distribution angulaire de la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre (Cu) calculée en première approximation de *Born* à l'aide du même modèle dans une géométrie coplanaire symétrique où nous signalons l'importance de

l'effet d'échange. L'énergie incidente est $E_0 = 300 \text{ keV}$, dans ce cas nous notons l'absence des résultats avec le modèle rDWBA, nous comparons donc nos résultats aux mesures expérimentales, et au niveau théorique nous comparons aux résultats donnés par le rPWBA et aux résultats de *Jakubassa-Amundsen*. Cette comparaison montre que nos résultats sont satisfaisants par une nette amélioration de l'amplitude de diffusion. On constate aussi le petit décalage dans la direction du pic binaire de nos résultats par rapport à celui expérimental dû aux effets relativistes négligés dans nos calculs, tels que l'interactions magnétique électron-électron et celle de retard. Ces deux effets que nous allons introduire par la suite dans nos calculs sont représentés par l'opérateur de Breit voir (*Walker D W (1975), Carse G D et Walker D W (1975) et Goldman S P (1988)*).

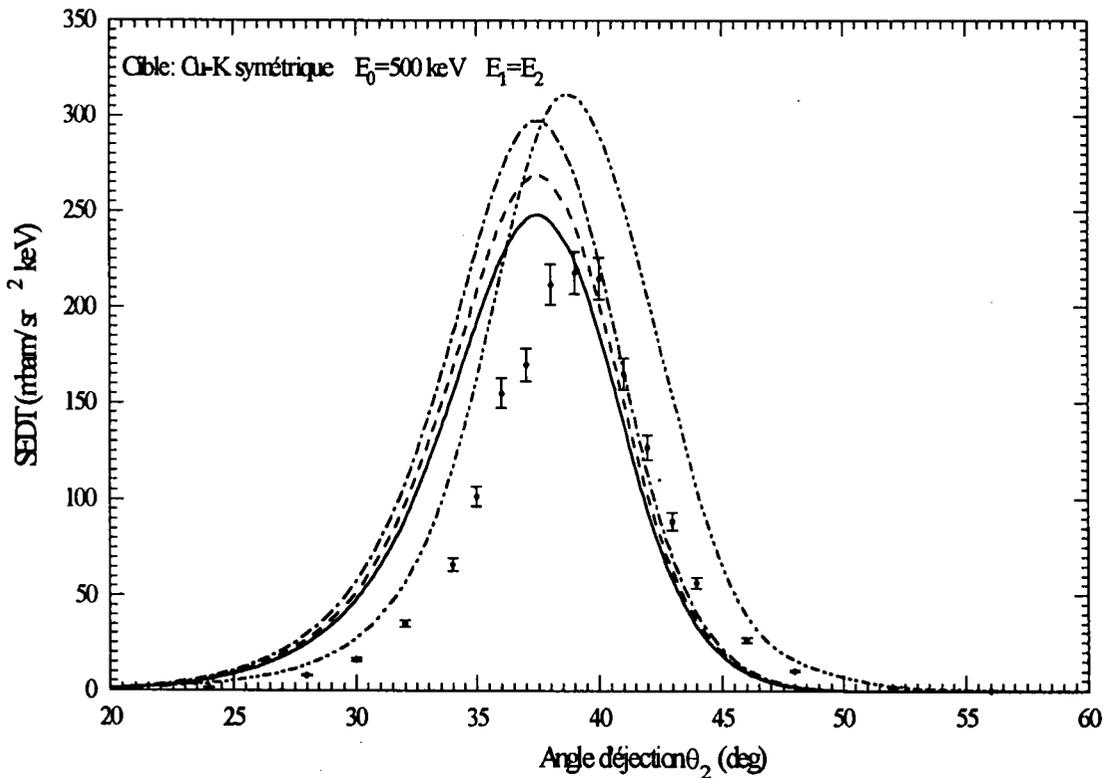


FIG 3.10 La SEDT d'ionisation de l'atome Cu en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique aux autres figures, " - - - - " résultats de calcul de rPWBA de *Keller and Whelan (1994)*.

Dans la figure (3.10), c'est la même situation physique pour l'atome de cuivre (Cu) dans une géométrie coplanaire symétrique mais avec une énergie incidente $E_0 = 500 \text{ keV}$. Nous faisons les mêmes conclusions que pour la figure (3.9).

Dans la figure (3.11), nous représentons la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) dans une géométrie coplanaire symétrique avec une énergie incidente $E_0 = 300 \text{ keV}$. Nous comparons au modèle rPWBA hydrogénoïde, aux résultats expérimentaux et au calcul rDWBA de Keller et al, nous avons les mêmes interprétations que pour les figures (3.9) et (3.10) pour l'atome de cuivre.

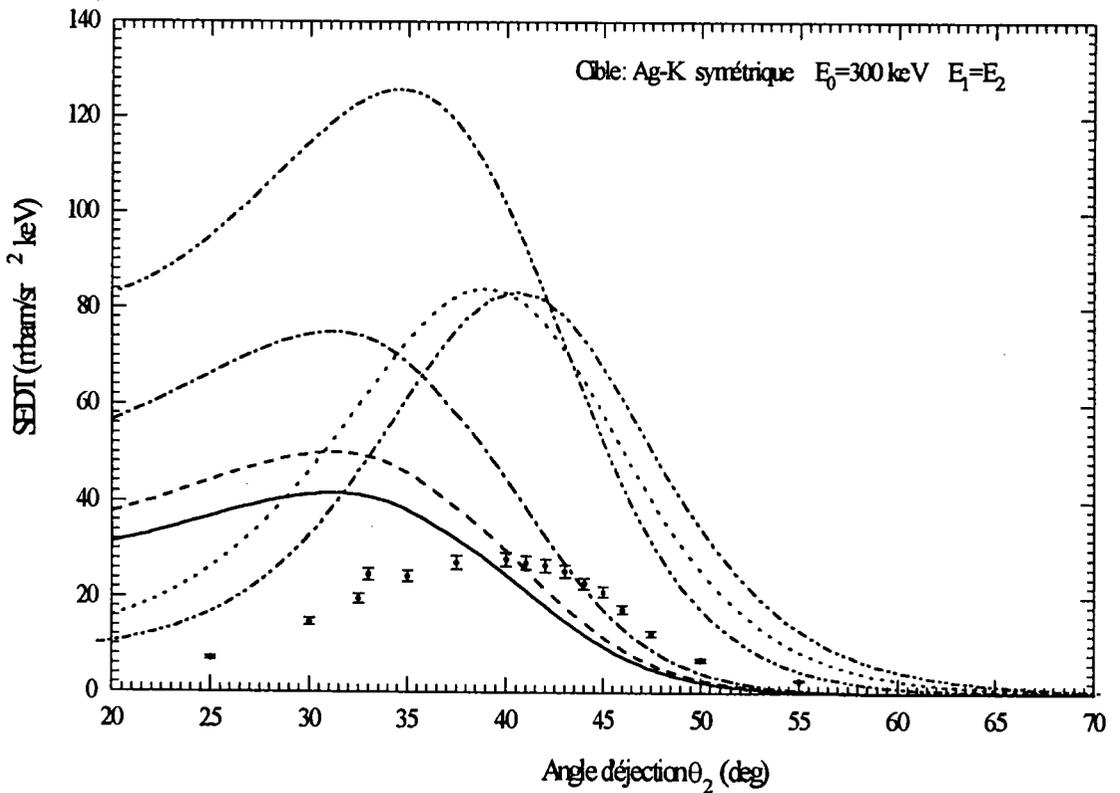


FIG 3.11 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique aux autres figures. · - · - · - résultats de calcul de rPWBA Keller and Whelan (1994), résultats de calcul de Walters et al (1992) et - - - - - résultats de calcul du modèle rDWBA.

3-6 Conclusion

Dans ce chapitre, après avoir rappelé l'expression de la section efficace différentielle triple (SED_T) relativiste de la simple ionisation (e,2e) par impact électronique très rapide, et après avoir étudié les résultats de notre modèle théorique nous sommes arrivés aux conclusions suivantes :

- Nous avons développé un modèle à trois électrons relativistes pour la détermination de la SED_T d'ionisation de la couche K d'atomes lourds à l'aide d'une procédure perturbative basée sur le développement de *Born*.
- Contrairement à tous les autres modèles théoriques qui considèrent la cible comme un système monoélectronique, nous avons introduit la corrélation entre les deux électrons de la couche K en décrivant les électrons liés de la cible avec une fonction d'onde variationnelle de *Dirac* à deux électrons.
- Pour tester ce modèle, nous avons décrit tous les électrons non liés par des ondes planes relativistes, nous avons montré pour la première fois l'importance de cette corrélation, en effet nous avons amélioré le comportement de la SED_T dans la région de faible angle d'éjection par rapport aux autres modèles théoriques, en faisant apparaître les deux structures binaire et de recul de la SED_T comme prévue par la théorie de collision, contrairement au modèle rPWBA (modèle d'ondes planes relativistes hydrogénoïde) où nous signalons l'absence de la structure de recul.

Nous avons également reproduit la structure de la SED_T dans les situations physiques symétriques où l'énergie de l'électron diffusé est égale à celle de l'électron éjecté pour les atomes de cuivre et d'argent, nous signalons l'absence des résultats pour l'atome de cuivre dans cette cinématique pour le modèle rDWBA.

- En ce qui concerne les difficultés rencontrées durant l'élaboration de notre modèle, nous signalons essentiellement le décalage entre le maximum binaire dans nos résultats et les résultats expérimentaux. Nous proposerons pour cela des corrections relativistes qui se traduisent par l'introduction de l'interaction de *Breit*. Ce qui fera l'objectif du quatrième chapitre. Notons également l'absence des résultats pour l'atome d'or concernant la géométrie symétrique coplanaire.

Publication I :

**Relativistic K shell ionisation of heavy atoms by electron impact :
use of a relativistic helium-like bound state wave function**

Relativistic K shell ionisation of heavy atoms by electron impact use of a relativistic helium-like bound state wave function

B. Joulakian, A. El Messaoudi

Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Institut de Physique, 1 Bld Arago, Technopôle 2000, F-57078 Metz Cedex 3, France (Fax: + 33 – 0387315801, Tel.: + 33 – 0387315898, e-mail: joul@lpli.univ-metz.fr)

Received: 21 March 1996 / Final version: 23 September 1996

Abstract. The effect of the correlation between the two K shell electrons on the relativistic triple differential cross section of the simple K shell ionisation of some heavy atoms by very energetic electrons (300, 500 keV) is studied. A relativistic first Born procedure is developed which permits the use of a variational relativistic helium-like wave function for the description of the two K shell electrons, and the introduction of the nuclear term in the perturbation potential. The results obtained by the neglect of the relativistic part of the electron-electron interaction, and thus spin flip, show the effect of the initial state correlation when compared to relativistic plane wave Born calculations. This work is a first step for future applications of many electrons relativistic models in the heavy atom $e, 2e$ calculations.

PACS: 34.80.Dp

1 Introduction

The study of the K shell ionisation of heavy atoms by very energetic electrons is one of the particular branches of the ($e, 2e$) studies, which presents interesting unexplored physical situations, and where the relativistic quantum mechanical and the quantum electrodynamical models could be tested. The inelastic scattering of relativistic charged particles studied by Bethe, Fermi and Moller [1,2] was pursued by U. Fano [3], who studied the angular distribution of the scattering of an electron by a bound electron. Ford and Mullin [4], and later (1971) Cooper and Kolbernstvedt [5] have calculated the differential cross sections of the ionisation of atoms by relativistic electrons. The later compare their results on gold to the experimental ones given by G. Missoni et al. [6]. On the other hand Das [7] has calculated the differential cross section by applying a semi-relativistic procedure including only the coulomb interactions and using the Schrodinger wave functions for the atomic electrons. More recent experiments concerning directly the K shell ionisation of heavy atoms performed by the Tübingen group [8–10] have

created a growing interest on this subject. Many theoretical models based on relativistic propagator theory have been proposed. Bell [11] has performed an impulsive treatment related to that of Cooper and Kolbernstvedt [5]. Other procedures followed [12–16] which use simple or sophisticated relativistic wave functions in the description of the primary or the secondary electrons. In all these works the electronic structure of the heavy target is assimilated to a one electron atomic centre. From this point of view and in spite of the recent success of the relativistic distorted Born approximation (rDWBA) method [16] in reproducing some of the existing experimental results by the use of an important computational effort, the mechanism of the relativistic ionisation is still not well comprehended. The absence of an appropriate many electron Dirac approximation, the roll of the different boundary conditions for the initial and final state of the ionisation process have still to be studied as well as the importance of the retardation effects.

The principal aim of the present paper is to look in this problem through the angle of relativistic perturbative Born procedure in which the interactions of the incident electron with the atomic nucleus as well as with the two K shell electrons are taken into account. This approach permits, in contrast to quantum field theoretical methods, the use of a relativistic many electron description of the electronic structure of the target, specially that of the two K shell electrons, whose interaction is not negligible if we compare the ionisation potential of a heavy hydrogen-like system to that of a helium-like system as shown from the bound state energy values shown on Table 1. We will restrict ourselves as a first step to the plane wave representation of the continuum electrons, and compare our results to those presented in [17].

2 Theory

We consider the ionisation of a heavy atom by high energy electrons as a system of three particles, the incident and the two atomic $1s_{-1/2}$ and $1s_{1/2}$ bound electrons. We write the total hamiltonian as the sum of the individual

Table 1. The nuclear charges, the experimental ionisation potentials, compared to the corresponding calculated ionisation potential of hydrogen-like and the helium-like ionic systems, together with the

Atom <i>A</i>	Nuclear charge <i>Z</i>	Experimental <i>K</i> shell ionization potential (a.u.)	Calculated ionization potential of $A^{+(Z-1)}$ (a.u.)	Calculated ionization potential of $A^{+(Z-2)}$ (a.u.)	Electronic energy of $A^{+(Z-2)}$ (a.u.)	Variational parameter Z_c
Cu	29	- 323.3	- 425.32	- 406.88	- 832.3	28.69
Ag	47	- 937.6	- 1139.1	- 1000.1	- 2139.0	45.1
Au	79	- 2965.8	- 3434.8	- 3313.2	- 6748.0	76.5

electronic energy values, and the corresponding variational parameters Z_c (16), for the atoms of Cu, Ag and Au

Dirac hamiltonians of a free electron and two atomic Coulomb electrons to which we add the interactions between the incoming electron with the different elements of the atom. r_0 designates the positions of the incoming electron, r_1 and r_2 those of the atomic ones. We consider that, at the energy domains studied, the impact parameter is very small and, as assumed in the preceding calculations, the electrons other than the *K* shell ones do not participate to the ionisation process their orbit being relatively very far from the *K* shell.

Following Walker [18], we write the three electron hamiltonian in the following form:

$$H = H(0, 1, 2) + V(r_0, r_{01}, r_{02}) \quad (1)$$

with

$$H(0, 1, 2) = H_0 + H_1 + H_2 + \frac{1}{r_{12}} \quad (2)$$

Where

$$H_0 = c\alpha_0 \cdot p_0 + \beta c^2 \quad (3)$$

and

$$H_i = c\alpha_i \cdot p_i + \beta_i c^2 - \frac{Z}{r_i} \quad (i = 1, 2) \quad (4)$$

The potential «seen» by the incoming electron:

$$V(r_0, r_{01}, r_{02}) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + B(0, 1) + B(0, 2) \quad (5)$$

represents the perturbation, with $B(i, j)$ the relativistic part of the electron-electron interaction, which is usually approximated either by the Breit's operator [19–21]:

$$B(i, j) = -\frac{1}{2r_{ij}} \left(\alpha_i \cdot \alpha_j + \frac{(\alpha_i \cdot r_{ij})(\alpha_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right) \quad (6)$$

in which the first term represents the magnetic interaction and the second the retardation, or by the Moller operator [21, 22]

$$B(i, j) = -\frac{e^{i\omega r_{ij}}}{r_{ij}} \alpha_i \cdot \alpha_j \quad (7)$$

With s the energy change of the electron j . Now it is evident that these two terms should not give the same results, as one neglects the energy transfer s in the derivation of the Breit's expression, which has, on the other hand, the advantage of including the instantaneous

Coulomb interaction in the hamiltonian. It would be, in any case, interesting to do comparative calculations with these two operators to see the influence of each.

In a relativistic variant of the Born development [18], we will consider that the solution of the relativistic equation:

$$H(0, 1, 2)\psi_i(0, 1, 2) = E\psi_i(0, 1, 2) \quad (8)$$

in the initial channel is known and is given by the product of a Dirac plane wave for the incident electron and a relativistic *Z*-variational solution of helium-like system for the two *K* shell electrons. Now considering an unpolarised incident beam, which can be assimilated to a beam, where the electrons have equal chance to have a spin up or down, the incident electrons will be given by the following Dirac plane wave:

$$\chi_{1/2}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{E + E_0}{2E}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{ck_x}{E + E_0} \\ \frac{c(k_x + ik_y)}{E + E_0} \end{bmatrix} \quad (9)$$

for the spin up, and

$$\chi_{-1/2}(\mathbf{k}, E, \mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \sqrt{\frac{E + E_0}{2E}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{c(k_x - ik_y)}{E + E_0} \\ -\frac{ck_x}{E + E_0} \end{bmatrix} \quad (10)$$

Here E_0 represents the energy of the electron at rest, with E and \mathbf{k} its kinetic energy and the wave vector with the components k_x , k_y and k_z .

To describe the two bound *K*-shell electrons we have developed a variational procedure for the corresponding Dirac equation, which avoids the minimisation instability of the energy, due to the existence of negative energy continuum. Another alternative was to use more elaborate multiconfigurational relativistic wave functions given by Grant [23], or the numerical wave functions given by Desclaux [24], but we have preferred, as a first stage, to

construct the following one-configurational function.

$$\phi(Z_0, r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1s_{1/2}(Z_0, r_1) 1s_{-1/2}(Z_0, r_2) - 1s_{1/2}(Z_0, r_2) 1s_{-1/2}(Z_0, r_1)] \quad (11)$$

by Darwin wave functions [20]:

$$1s_{1/2}(Z, r_i) = \begin{bmatrix} g(Z, r_i) Y_0^0(\theta_i, \varphi_i) \\ 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} f(Z, r_i) Y_1^0(\theta_i, \varphi_i) \\ -i\sqrt{2/3} f(Z, r_i) Y_1^1(\theta_i, \varphi_i) \end{bmatrix} \quad (12)$$

and

$$1s_{-1/2}(Z, r_i) = \begin{bmatrix} 0 \\ -g(Z, r_i) Y_0^0(\theta_i, \varphi_i) \\ -i\sqrt{2/3} f(Z, r_i) Y_1^{-1}(\theta_i, \varphi_i) \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} f(Z, r_i) Y_1^0(\theta_i, \varphi_i) \end{bmatrix} \quad (13)$$

with

$$g(Z, r) = (2Z)^{(\gamma+1/2)} \sqrt{\frac{1+\gamma}{2\Gamma(2\gamma+1)}} e^{-\rho/2} (\rho)^{\gamma-1} \quad (14)$$

and

$$f(Z, r) = -\sqrt{\frac{1-\gamma}{1+\gamma}} g(Z, r) \quad (15)$$

$$\text{Here } \rho = 2Zr, \quad \gamma = \sqrt{1 - Z^2/c^2}$$

Now Z_0 is the variational parameter (11) is obtained by minimizing the bound energy E_b of the two electron heavy atom system

$$\frac{dE_b}{dZ_0} = \frac{d}{dZ_0} \left\langle \phi(Z_0, r_1, r_2) \left| H_1 + H_2 + \frac{1}{r_{12}} \right| \phi(Z_0, r_1, r_2) \right\rangle = 0 \quad (16)$$

The values obtained corresponding to copper, silver and gold are given on Table 1.

As we consider an unpolarised incident electron beam, the system constituted by the incident and the two atomic electrons will have equal chance to be in one of the two states, with total spin values ($S = 1/2$, $M_s = \pm 1/2$) and will be described by:

$$\psi_{1\pm} \left(S = \frac{1}{2}; M_s = \pm \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i) 1s_{1/2} 1s_{-1/2} \rangle - |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i) 1s_{-1/2} 1s_{1/2} \rangle \} \quad (17)$$

where

$$|\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i) 1s_{1/2} 1s_{-1/2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i, r_0) \phi(Z_0, r_1, r_2) - \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i, r_1) \phi(Z_0, r_0, r_2) + \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i, r_2) \phi(Z_0, r_0, r_1) \} \quad (18)$$

the usual Slater determinants. Now having only one variational parameter Z_0 (11) the two determinants (17) are identical and we can write:

$$\psi_{1\pm} \left(S = \frac{1}{2}; M_s = \pm \frac{1}{2} \right) = |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_i) 1s_{1/2} 1s_{-1/2} \rangle \quad (19)$$

In the description of the final state we will use the adequate combinations of the products of the three Dirac wave functions describing the scattered, ejected and the remaining bound $1s$ electron having the same form as those presented (9-12).

In contrast to the non-relativistic case the spin of the system is not conserved, and we have to consider all possible spin states, designated by (S, M_s):

$$\psi_{1f\pm} \left(S = \frac{3}{2}; M_s = \pm \frac{3}{2} \right) = |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\pm 1/2} \rangle \quad (20)$$

$$\psi_{2f\pm} \left(S = \frac{3}{2}; M_s = \pm \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{3}} \{ |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\mp 1/2} \rangle + |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\mp 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\pm 1/2} \rangle + |\chi_{\mp 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\pm 1/2} \rangle \} \quad (21)$$

For the states ($S = 1/2$; $M_s = \pm 1/2$), two combinations should be considered: (see [25])

$$\begin{aligned} \psi_{3f\pm} \left(S = \frac{1}{2}; M_s = \pm \frac{1}{2} \right) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ -|\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\mp 1/2} \rangle \\ &- |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\mp 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\pm 1/2} \rangle \\ &+ 2|\chi_{\mp 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\pm 1/2} \rangle \} \end{aligned} \quad (22)$$

which combines the spin of the scattered with the triplet of the atomic electrons, and

$$\psi_{4f\pm} \left(S = \frac{1}{2}; M_s = \pm \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\mp 1/2} \rangle - |\chi_{\pm 1/2}(\mathbf{k}_s) \chi_{\mp 1/2}(\mathbf{k}_e) 1s_{\pm 1/2} \rangle \} \quad (23)$$

which combines the spin of the scattered electron with the singlet of the atomic electrons. Here \mathbf{k}_s and \mathbf{k}_e represent the wave vector of the scattered and ejected electrons respectively.

In a first Born treatment of the ionisation problem we can write the relativistic variant of the triple differential

cross section as:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 k_i^{-1} k_s k_e E_1 E_2 \frac{E_0}{c^6} \sum_j |T_{fi,j}|^2 \quad (24)$$

Where $T_{fi,j}$ represents the transition matrix elements given by:

$$T_{fi,j} = \langle \psi_{f\nu}^- | V(r_0, r_{01}, r_{02}) | \psi_{i\nu} \rangle \quad (25)$$

Here ν designates the two spin values ($S = 1/2$; $M_s = \pm 1/2$) of the initial state (19) and η the spin values of the final state (20–23), and the index j , will designate all possible couples (ν, η). The energy conservation in the collision process demands that $E_i - E_d = E_1 + E_2$ where the excess energy $E_i - E_d$ can be shared between the kinetic energies E_1 and E_2 of the two outgoing electrons (E_d is the binding energy). As we neglect the spin dependent terms (5), only the following transition matrices have non zero values:

$$T_{fi,1} = \langle \psi_{f3}^- | V | \psi_{i+} \rangle = \langle \psi_{f3}^- | V | \psi_{i-} \rangle = \sqrt{\frac{3}{2}} (g - h) \quad (26)$$

$$T_{fi,2} = \langle \psi_{f4}^- | V | \psi_{i+} \rangle = \langle \psi_{f4}^- | V | \psi_{i-} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (2f - g - h) \quad (27)$$

where

$$f(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \langle \chi_{1/2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{r}_0) \chi_{1/2}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1) 1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) | V | \chi_{1/2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_0) \times 1s_{1/2}(\mathbf{r}_1) 1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (28)$$

represents the direct term. Here the index of the incoming electron is the same as that of the scattered one,

$$g(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \langle \chi_{1/2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{r}_1) \chi_{1/2}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_0) 1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) | V | \chi_{1/2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_0) \times 1s_{1/2}(\mathbf{r}_1) 1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (29)$$

the exchange term, where the index of the incoming electron is the same as that of the ejected electron, and which can be determined by using the following property

$$g(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = f(\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_s) \quad (30)$$

and finally the capture term:

$$h(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \langle \chi_{1/2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{r}_1) \chi_{1/2}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_2) 1s_{-1/2}(\mathbf{r}_0) | V | \chi_{1/2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_0) \times 1s_{1/2}(\mathbf{r}_1) 1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (31)$$

which is negligible, as the incident electron has very little chance to replace the remaining bound electron at the high energy domain considered.

Finally the differential cross section can be expressed as:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 k_i^{-1} k_s k_e E_1 E_2 \frac{E_0}{c^6} \frac{1}{4} \times \{ |(2f - g - h)|^2 + 3|(g - h)|^2 \} \quad (32)$$

where the term $1/4$ comes from the fact that we are adding four terms and the probability should be normalised. Now performing the integration over r_0 using the Bethe trans-

formation:

$$\frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}}{K^2} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^2} d\mathbf{r} \quad (33)$$

and the other two space co-ordinates using the basic integral:

$$I(q, \alpha, \beta, n) = \int r^\beta e^{-(q\cdot r - \alpha r)} (\cos \theta)^\alpha d\mathbf{r} \quad (34)$$

we can write

$$f(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \frac{A}{(2\pi)^4} \frac{1}{K^2} \left(\left[\frac{(Z_T)^{\gamma_T}}{\Gamma(\gamma_T)} I(\mathbf{K}, Z_T, \gamma_T - 3, 0) - 2 \right] \times G(\mathbf{k}_e) + G(\mathbf{K} - \mathbf{K}_e) \right) \quad (35)$$

where A is a constant, and $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ the momentum transfer.

We have defined for simplification $Z_T = Z + Z_e$ and $\gamma_T = \gamma + \gamma_e + 1$ and

$$G(\mathbf{k}) = I(\mathbf{k}, Z_e, \gamma_e - 1, 0) + BI(\mathbf{k}, Z_e, \gamma_e - 1, 1) \quad (36)$$

where B is also a constant.

3 Results

The main interest of our approach, as we mentioned above, is to put in evidence the importance of the introduction of the electronic correlation in the initial state by using a relativistic helium like variational wave function and considering the coulomb interactions between the three electrons, which are absent in the exact quantum electro-dynamical treatment as its applications meets huge mathematical and conceptual difficulties. From this point of view, our method appears as an acceptable compromise. We have produced three types of results. One with the procedure described above plotted in full lines, which we will call (a), a second, with the same procedure but with neglecting of the nuclear attraction potential ($-2/r_0$) (5), which we will call (b), and third, with the same as (a) but with Schmidt orthogonalised final state wave function of the atomic electrons, which we will call (c), and which is equivalent as shown in the appendix to the introduction of an effective charge $Z(\mathbf{K})$ in the perturbing potential (i.e. $-Z(\mathbf{K})/r_0$ instead of $-2/r_0$ of Eq. 5).

We first show on Fig. 1 the variation of the triple differential cross section (TDCS) in terms of the ejection angle for the K-shell ionisation of gold in coplanar asymmetric geometry at an impact energy of 500 keV. The scattered outgoing electron having an energy of $E_1 = 319$ keV and the ejected one having the relativistic energy value of $E_2 = 100$ keV. The scattering angle is fixed to -15 degrees. It is seen that only the results of Keller et al. [16] are in a fairly good agreement with the experience. They arrive to this result by using a relativistic distorted wave treatment in both the initial and final channels and the full photon propagator. Walters et al. [14] use a Darwin-Coulomb wave for the ejected electron, and include spin-flip contributions, while Jakubassa-Amundsen [12] uses non relativistic Coulomb functions

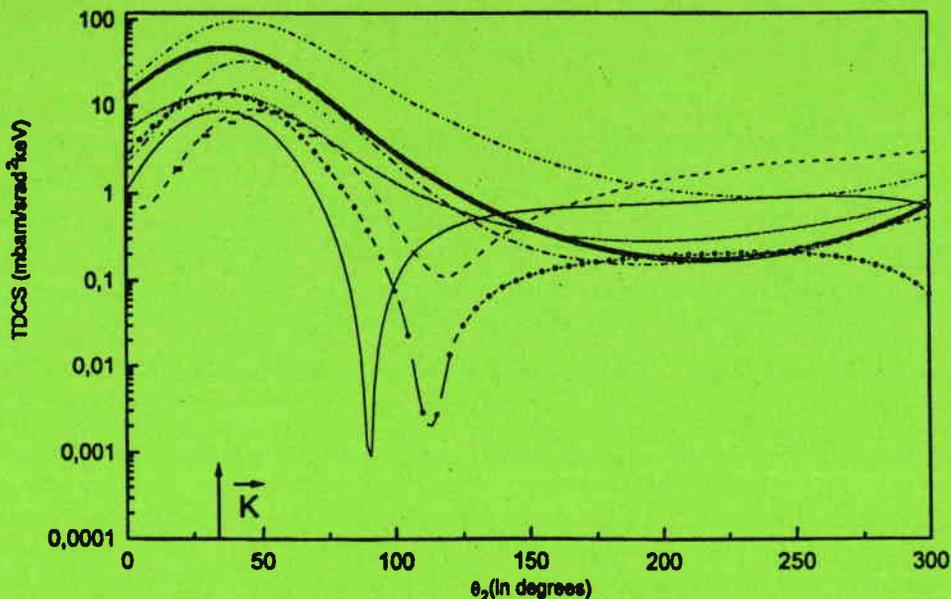


Fig. 1. The triple differential cross section for the K -shell ionisation of gold by electron impact in terms of the ejection angle. The scattering angle is fixed to -15° with respect to the direction of incidence. The energy of the incident electron is fixed to 500 keV the scattered energy to 319 keV and that of the ejected electron, 100 keV. Present results are given by a continuous lines —. The curve with long dashes and small circles gives the results obtained by orthogonalised final state wave functions. The dotted curve gives

our result without the electron nucleus term. · · · · ·, represent rPWBA results [17] with full photon propagator. The small squares represent rPWBA with pure Coulomb interaction. —, give the experimental data of Bonfert et al. [10]. - - - - represent Dirac distorted waves results of Keller et al. [16]. - · - · - , plane-wave Born results including spin-flip of Walters et al. [14]. represent Coulomb-Born results of Jakubassa-Amundsen [12]

multiplied by a free electron Dirac spinor for both outgoing electrons. It is evident that our results should not be compared to these results, which include interactions or effects that we ignore. Nevertheless the effect of the first order electron nucleus interaction can be seen by comparing the continuous curve which represents our results obtained by the procedure (a) to the dotted one which gives the results obtained by (b) and to the curve formed by small squares, which represents the relativistic PWBA results of Keller and Whelan [17] with pure Coulomb interaction in which the nuclear term is also absent. Now the common feature of these two curves is the absence of the recoil structure, which is present in the results obtained by (a). This shows that the recoil effect, which is also present in the rDWBA results (the dashed curve) is a scattering effect of the incoming electron by the nucleus at these energy values. More if we replace the nuclear charge by $Z(K)$, which results, as we show in the appendix, from our orthogonalisation procedure, the recoil effect persists and the most probable ejection direction does not change.

The effect of the correlation in the initial state bound state electrons can be seen comparing the pure Coulomb PWBA curve to our results of (b). The influence is principally in the magnitude of the TDCS, as the two curves show nearly the same structure.

The effect of the relativistic electron-electron interaction can be studied, in our case, by including the Breit operator (6) in our potential. This will be the subject of a following work. Now to our knowledge the influence of this operator has never been determined in past K shell ionisation calculation in its explicit form, but the PWBA

results of Keller and Whelan [17] using the full photon propagator, shown on Fig. 1 by the dash dot dot curve, show that the introduction of retardation increases the magnitude of the TDCS and translates the maximum towards the experimental one.

The same remarks can be repeated for the results of Fig. 2, where we consider the variation of the TDCS of the ionisation of silver by 500 keV electrons. We fix the scattering angle to -7 degrees and the energy values $E_1 = 375$ keV and $E_2 = 100$ keV. Here also, the absence of the nuclear term erases the recoil structure, retardation increases the magnitude of the TDCS and translates the curve towards the experimental ejection direction and the correlation of the initial state decreases the magnitude TDCS.

For the coplanar symmetric geometry case we consider the ionisation of copper by 300 keV electrons. In this case the two emerging electrons are detected in two symmetric directions with respect to the incidence direction ($|\theta_2| = |\theta_1| = \theta$). In this case rDWBA results do not exist to our knowledge, so we compare on Fig. 3, our results for the variation of the TDCS in terms of detection of one of the emerging electrons to experimental, the Coulomb Born and rPWBA ones. In this geometry the exchange effects become very important. This fact does not influence the observations done on the two preceding curves. The introduction of the first order nuclear term improves the results, but the introduction of the relativistic part of the electron-electron interaction translates the curve towards the exact experimental direction but increases the magnitude of the TDCS, as in the two preceding figures.

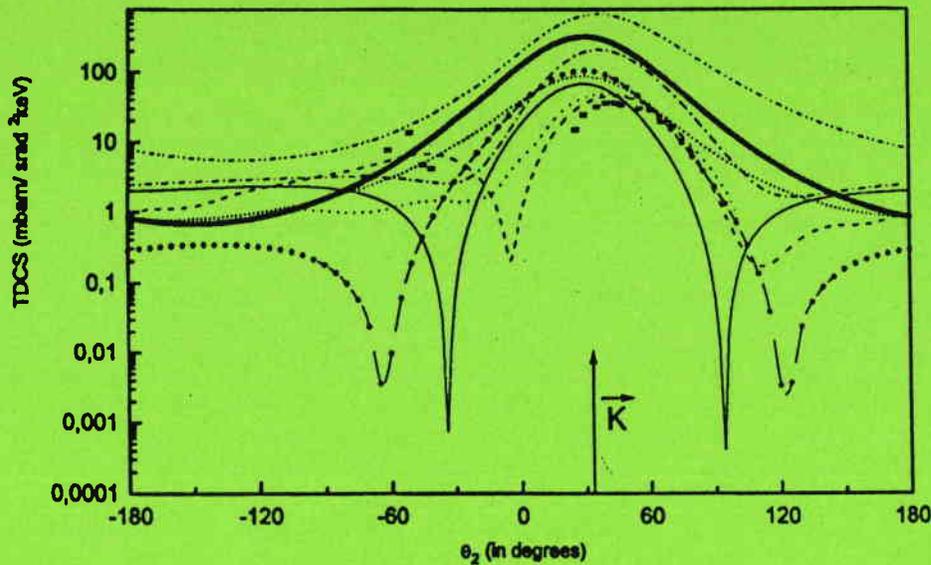


Fig. 2. Same as Fig. 1, but for silver with the scattering energy 375 keV and scattering angle -7°

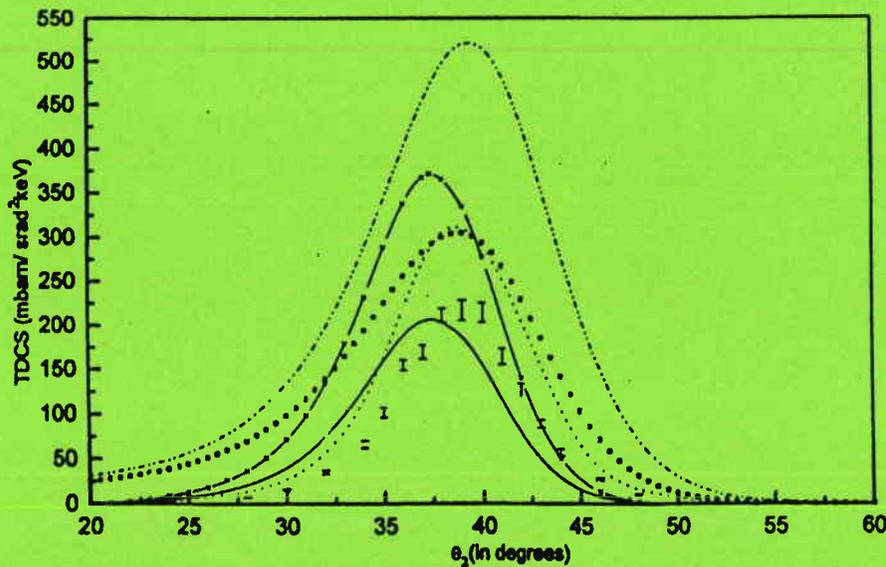


Fig. 3. The triple differential cross section of the K -shell ionisation of copper at 300 keV impact energy in coplanar symmetric geometry ($|\theta_1| = |\theta_2| = \theta$) plotted against the detection direction of one of the outgoing electron. \bullet represent the experimental data of Bonfert et al. [3]. \cdots Coulomb-Born Jakubassa-Amundsen [13]. The two rPWBA results are given by the same types of lines as on Fig. 1. The present results are given by the full line and the curve with crosses gives the present results without the electron nucleus term

4 Conclusion

We have developed a three particle model for the determination of the TDCS of the K -shell ionisation of heavy targets using a helium-like relativistic bound state wave function in a procedure which permits the introduction of the electron nucleus interaction. We have as a first step neglected the relativistic part of electron-electron interaction and used only relativistic plane wave description of the continuum electrons. The results for some heavy targets as gold and silver in coplanar asymmetric geometry and for copper in a coplanar symmetric geometry at an impact energy of 500 keV show the importance of the initial bound state electron correlation and that of the first order electron-nucleus interaction. The necessity of the introduction of the relativistic electron-electron interaction is also shown. The major advantage of our procedure

is in the possibility of applying a many electron description in the relativistic treatment of the ionisation of heavy atoms

We would like to thank Dr. Stefan Keller for fruitful discussions and for having communicated his data obtained by rDWBA and rPWBA in tabular form.

Appendix

Schmidt orthogonalisation of the final state wave function of the atomic electrons

Let us consider the direct term in the transition matrix element (27)

$$f(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \left\langle \chi_{1/2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{r}_0) \varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_0) \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle \quad (\text{A.1})$$

where

$$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1s_{1/2}(\mathbf{r}_1)1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) \quad (\text{A.2})$$

and

$$\varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \chi_{1/2}(\mathbf{r}_1)1s_{-1/2}(\mathbf{r}_2) \quad (\text{A.3})$$

Now we can show that orthogonalising the final state wave function of the atomic electrons is equivalent to orthogonalising of $\varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ to $\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ in f, g and h . For that we write $\varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ in the following orthogonalised form:

$$\langle \varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}} | = \langle \varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \langle \varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \quad (\text{A.4})$$

Replacing $\varphi_{\bar{f}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ by $\varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ in (A.1) we obtain:

$$f_{\text{ort}}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = \left\langle \chi_{1/2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{r}_0) \varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left| \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_0) \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle \quad (\text{A.5})$$

Now using the Bethe transformation (33) for \mathbf{r}_0 with:

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e,$$

$$f_{\text{ort}}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = D \langle \varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | -2 + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{A.6})$$

$$\text{as } \langle \varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | -2 | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle = 0$$

$$f_{\text{ort}}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = D \langle \varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{A.7})$$

where D is a constant. Replacing $\varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ by its expression in (A.4) we can write:

$$f_{\text{ort}}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = D \left[\langle \varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle - \langle \varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \langle \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \right] \quad (\text{A.8})$$

Defining

$$Z(\mathbf{K}) = \langle \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{A.9})$$

we can write finally

$$f_{\text{ort}}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = D \langle \varphi_{\bar{f}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | -Z(\mathbf{K}) + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{A.10})$$

which has the same form as f in which the nuclear charge is replaced by a given function depending on \mathbf{K} . We can similarly write for the exchange term:

$$g_{\text{ort}}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e) = D \langle \varphi_{\bar{f}_{\text{ort}}}(\mathbf{k}_e, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | -Z(\mathbf{K}') + e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r}_2} | \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle \quad (\text{A.11})$$

$$\mathbf{K}' = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_e.$$

We do not present the orthogonalised form of the capture term h , as we have neglected it in our calculations.

References

1. Bethe, H.A., Fermi, E.: Z Phys. 77, 269 (1932)
2. Moller, C.: Ann. Phys. 14, 531 (1932)
3. Fano, U.: Phys. Rev. 102, 385 (1956)
4. Ford, G.W., Mullin, C.J.: Phys. Rev. 110, 520 (1958)
5. Cooper, J.W., Kolbenstvedt, H.: Phys. Rev. A 5, 677 (1972)
6. Missoni, G., Dick, C.E., Placious, R.C., Motz, J.W.: Phys. Rev. A 2, 2309 (1970)
7. Das, J.N., Konar, A.N.: J. Phys. B 7, 2417 (1974)
8. Schule, E., Nakel, W.: J. Phys. B 15, L 639 (1982)
9. Ruoff, H., Nakel, W.: J. Phys. B 20, 2299 (1987)
10. Bonfert, J., Graf, H., Nakel, W.: J. Phys. B 24, 1423 (1991)
11. Bell, F.: J. Phys. B 22, 287 (1989)
12. Jakubassa-Amundsen, D.H.: Z. Phys. D 11, 305 (1989)
13. Jakubassa-Amundsen, D.H.: J. Phys. B 25, 1297 (1992)
14. Walters, H.R.J., Ast, H., Whelan, C.T., Dreizler, R.M., Graf, H., Schoter, C.D., Bonfert, J., Nakel, W.: Z. Phys. D 23, 353 (1992)
15. Zhang, X., Whelan, C.T., Walters, H.R.J., Allan, R.J., Bickert, P., Hink, W., Schönberg, W.: J. Phys. B 25, 4325 (1992)
16. Keller, S., Whelan, C.T., Ast, H., Walters, H.R.J., Dreizler, R.M.: Phys. Rev. A 5, 3865 (1994)
17. Keller, S., Whelan, C.T.: J. Phys. B 27, L771 (1994)
18. Walker, D.W.: J. Phys. B 7, 97 (1974)
19. Walker, D.W.: J. Phys. B 8, 760 (1975)
20. Bethe, H.A., Salpeter, E.E.: Quantum mechanics of one and two-electron atoms 1st edn. Berlin, Göttingen, Heidelberg: Springer 1957
21. Rose, M.E.: Relativistic electron theory. New York: Wiley 1961

22. Moller, C.: Z. Phys. 70, 786 (1931)
23. Grant, I.P., Mckenzie, B.J., Norrington, P.H., Mayer, D.F., Puper, N.C.: Comput. Phys. Commun. 21, 207 (1980)
24. Desclaux, J.P.: At. Data Nucl. Data Tables 12, 311 (1973)
25. Schulz, M.: J. Phys. B 6, 2580 (1973)

Chapitre 4

L'interaction de Breit dans les processus de simple ionisation (e,2e) relativiste des atomes lourds

4-1 Introduction

Nous avons mentionné dans la partie résultats du troisième chapitre, que le décalage existant pour les pics binaires et de recul entre les résultats de nos calculs et ceux des mesures expérimentales d'une part, et d'autre part entre les résultats obtenus par le calcul du modèle rDWBA et les calculs fait par notre modèle est dû à la négligence de plusieurs effets relativistes dans notre modèle, tel que l'effet des interactions magnétique électron-électron et ceux de retard. Ces deux effets sont présent dans le potentiel de *Breit*. Ce potentiel à été introduit dans les travaux de *Breit G* en (1929, 1930 et 1932) sous la forme d'un opérateur qui contient deux termes d'interaction relativiste, un terme d'interaction magnétique entre deux électrons et un terme d'interaction de retard. L'opérateur de *Breit* a été utilisé dans les travaux de *Carse G D* et *Walker D W* en (1973) et dans les travaux de *Walker D W* en (1974 et 1975) dans les

problèmes d'excitation d'un ion hydrogénéoïde par impact électronique relativiste, et également dans les travaux de (*Goldman S P* (1988)). Dans ce chapitre, nous rappelons brièvement l'origine du potentiel de *Breit*. Ensuite nous l'introduisons dans nos calculs précédents en étudiant tous les changements théoriques sur notre modèle proposé. Finalement nous comparons les résultats de cette étude à nos résultats du même modèle, mais sans l'introduction de l'interaction de *Breit*. Ainsi qu'aux mesures expérimentales et aux résultats de la littérature pour conclure à la fin les corrections apportées par l'introduction de ces effets sur la section efficace différentielle triple de l'ionisation de la couche K des atomes lourds.

4-2 L'interaction de Breit

Mann et Johnson en (1971) ont présenté l'interaction de *Breit* sous trois formes différentes, la première forme est celle proposée dans les travaux de *Breit*, où cette interaction est présentée comme une correction relativiste de l'interaction coulombienne, elle correspond à un développement du premier ordre de la théorie des perturbations relativiste de l'émission d'un photon virtuel par le premier électron, puis ce photon est absorbé par le deuxième électron. Cette approximation a été utilisé dans les travaux de *Kim Y K* en (1967) et dans ceux de *Grant I P* en (1961, 1965 et 1970). La seconde forme de cette interaction est une généralisation de la première, elle est obtenue en utilisant un développement du deuxième ordre de la théorie des perturbations. La dernière forme est la plus simple, elle est utilisée lorsque les électrons sont décrits par des fonctions d'onde solutions de l'hamiltonien local de *Dirac*, et lorsque le transfert d'énergie entre les deux électrons de la couche K est supposé nul. Dans le cas contraire où le transfert d'énergie est supposé non nul, l'interaction de *Breit* est remplacée par celle de *Moller*, (voir les travaux de *Moller C* (1931) et (1932) et *Brown G E* (1952)), donnée par :

$$H(i, j) = -\frac{e^{i s \hbar_j}}{r_{ij}} \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \quad (4.1)$$

où $s = |E_i - E_j|$ désigne le transfert d'énergie entre l'électron i et l'électron j , et $|\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ désigne la distance entre les deux électrons.

a- L'équation de Breit

La théorie relativiste exacte pour un système à deux électrons ne pouvant être donnée sous une forme simple, il s'agit donc de donner les corrections relativistes aux valeurs propres de l'énergie d'un atome type l'hélium. L'équation de *Breit* est une équation différentielle pour une fonction d'onde relativiste $\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ décrivant l'état d'un système à deux électrons interagissant l'un avec l'autre et avec un champ électromagnétique externe. Cette équation est similaire à l'équation de *Dirac* pour un électron, mais contrairement à cette dernière elle n'est pas invariante par une transformation de *Lorentz*.

Pour un état stationnaire l'équation de *Breit* est donnée par :

$$\left[E - H_D(1) - H_D(2) - \frac{e^2}{r_{12}} \right] \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{e^2}{r_{12}} \left[\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 + \frac{(\vec{\alpha}_1 \vec{r}_{12})(\vec{\alpha}_2 \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} \right] \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{4.2}$$

$H_D(i)$ désigne l'hamiltonien local de *Dirac* donné par :

$$H_D(i) = -e\phi(\vec{r}_i) + \beta_i m_0 c^2 + \vec{\alpha}_i (c\vec{p}_i + e\vec{A}(\vec{r}_i)) \tag{4.3}$$

La fonction d'onde $\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dépend de la position des deux électrons. Le terme de droite de l'équation (4.2) n'est qu'une approximation de l'interaction relativiste entre les deux électrons, cette équation est compatible avec l'équation de *Dirac* pour un électron et avec la théorie de paire.

b- Expression de l'interaction de Breit

Si nous négligeons les effets de l'électrodynamique quantique, l'équation d'onde semi-relativiste pour un système à deux électrons est donnée par l'équation (4.2) dont le terme de droite est nul, c'est-à-dire à l'aide de l'équation suivante :

$$\left[E(1,2) - H_D(1) - H_D(2) - \frac{e^2}{r_{12}} \right] \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (4.4)$$

Cette équation satisfait à deux conditions, la première si nous prenons la limite non relativiste elle doit se réduire à l'équation de *Schrödinger*. La seconde si nous négligeons l'interaction coulombienne $\frac{e^2}{r_{12}}$ les solutions de cette équation sont données par la fonction :

$$\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \chi_1(\vec{r}_1) \chi_2(\vec{r}_2) \quad (4.5)$$

telle que chaque fonction d'onde $\chi_i(\vec{r}_i)$ satisfait l'équation de *Dirac* monoélectronique.

Les corrections relativistes entre les deux électrons sont données par l'électrodynamique quantique. Plusieurs méthodes sont proposées pour traiter ces interactions. Nous utilisons celle qui est basée sur la théorie des perturbations. Nous supposons que tous les états propres monoélectronique $\chi_n(\vec{r}_n)$ et leurs énergies $E(n)$ sont connus et nous cherchons à évaluer les changements d'énergie ΔE dû à la perturbation. Selon la théorie de paire de *Dirac* nous trouvons deux types de termes de perturbation. Le premier type désigne l'émission d'un photon virtuel par le premier électron, puis ce photon est absorbé par le deuxième électron. Le second type désigne l'émission et l'absorption du photon virtuel par le même électron. Ce terme est petit comparé au premier.

La correction d'énergie due à l'échange du photon virtuel entre les deux électrons est donnée par la méthode des perturbations relativiste qui est similaire à la méthode des perturbations non relativiste. En sommant sur toutes les directions de polarisation et en intégrant sur toutes les directions de \vec{k} , ΔE est donné à l'aide de l'équation suivante :

$$\Delta E = -\frac{e^2 c}{4\pi^2} \sum_p \int \frac{d\vec{k}}{k} \sum_n \frac{\langle 0 | \alpha_{1p} e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | n \rangle \langle n | e^{-i\vec{k}\vec{r}_2} \alpha_{2p} | 0 \rangle}{kc + E(n) - E(0)} \quad (4.6)$$

α_{ip} désignant la composante de la matrice de Dirac $\vec{\alpha}$ dans la direction de polarisation p , $\langle 0 | A | n \rangle$ désignant l'élément de matrice de transition de l'opérateur A entre l'état initial $| 0 \rangle$ et l'état intermédiaire $| n \rangle$, la sommation sur n s'étend sur tous les états du spectre discret et du continuum de l'équation (4.4). p est sommé sur deux directions de polarisations perpendiculaires entre elles et au vecteur \vec{k} , cette correction énergétique donnée par l'équation (4.6) correspond au photon virtuel partant de l'électron 1 vers l'électron 2.

Il est difficile d'évaluer exactement l'équation (4.6), elle est simplifiée si nous négligeons la différence $E(n) - E(0)$ comparé à kc , cette approximation conduit à l'expression de l'interaction de Breit.

En utilisant cette approximation, la sommation sur n dans la relation (4.6) est éliminée par la règle de fermeture. En sommant également sur les deux directions de polarisations nous obtenons l'équation suivante :

$$\Delta E = \langle 0 | -\frac{e^2}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}_{12}} \left[\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 - \frac{(\vec{\alpha}_1 \vec{k})(\vec{\alpha}_2 \vec{k})}{k^2} \right] | 0 \rangle \quad (4.7)$$

Nous posons aussi la relation suivante :

$$\Delta E = \langle 0 | B(1,2) | 0 \rangle \quad (4.8)$$

En comparant les deux équations (4.7) et (4.8), nous avons :

$$B(1,2) = -\frac{e^2}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}_{12}} \left[\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 - \frac{(\vec{\alpha}_1 \vec{k})(\vec{\alpha}_2 \vec{k})}{k^2} \right] \quad (4.9)$$

Nous allons utiliser les deux relations suivantes pour déterminer l'expression de $B(1,2)$, à partir de l'intégrale de *Bethe* nous avons l'équation suivante :

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (4.10)$$

nous avons également la relation gradient définie par :

$$-i \left[\vec{\nabla}(V(\vec{r})) \right] U(\vec{r}) = \left[\vec{k} V(\vec{r}) - V(\vec{r}) \vec{k} \right] U(\vec{r}) \quad (4.11)$$

En partant de la quantité définie par l'équation (4.10), et en utilisant la relation (4.11), nous avons :

$$\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{(\vec{a}\vec{k})(\vec{b}\vec{k})}{k^2} = \frac{i}{2} \left[\vec{a} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right] \int d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{r}} \left[\vec{b} \frac{\partial}{\partial \vec{k}} \right] \frac{1}{k^2} \quad (4.12)$$

En utilisant la relation (4.11), nous avons :

$$\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{(\vec{a}\vec{k})(\vec{b}\vec{k})}{k^2} = \frac{1}{2} \left[\vec{a} \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \right] \left[\vec{b} \vec{r} \frac{1}{r} \right] \quad (4.13)$$

Donc finalement cette relation devient :

$$\frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{(\vec{a}\vec{k})(\vec{b}\vec{k})}{k^2} = \frac{1}{2r} \left[\vec{a}\vec{b} - \frac{(\vec{a}\vec{r})(\vec{b}\vec{r})}{r^2} \right] \quad (4.14)$$

Maintenant, en substituant l'équation (4.14) dans l'expression de $B(1,2)$, nous trouvons finalement l'expression de l'interaction de *Breit* donnée par :

$$B(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{e^2}{2r_{12}} \left[\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 + \frac{(\vec{\alpha}_1 \vec{r}_{12})(\vec{\alpha}_2 \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} \right] \quad (4.15)$$

Cette expression désigne l'opérateur de *Breit* conduisant à la correction relativiste de l'interaction entre deux électrons, le premier terme désigne l'interaction magnétique électron-électron et le second terme celle de retard.

4-3 Calcul de la section efficace différentielle triple (SEDT) en introduisant l'interaction de *Breit*

a- Modèle théorique en introduisant l'interaction de Breit

Nous rappelons que nous avons défini dans le troisième chapitre la section efficace triplement différentielle (SEDT) d'un processus de collision ionisante d'un atome lourd à très haute énergie par la relation suivante :

$$SED T = \frac{d^3 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = \frac{(2\pi)^4}{c^6} E_1 E_1 E_2 k_i^{-1} k_1 k_2 |T_{fi}|^2 \quad (4.16)$$

L'expression de l'élément de matrice de transition T_{fi} entre l'état initial $|i\rangle$ et l'état final $|f\rangle$ est donnée par la relation (3.34). Il est clair que le calcul de T_{fi} est basé à la fois sur la description des états initiaux et finaux et sur le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible dans la voie d'entrée de l'équation (3.1). Pour établir ce calcul, nous rappelons en premier lieu que le carré de l'élément de matrice T_{fi} est donné par la relation suivante :

$$|T_{fi}|^2 = \sum_{\eta=1}^8 \sum_{\nu=1}^2 |(T_{fi})_{\eta\nu}|^2 \quad (4.17)$$

$T_{\eta\nu}$ désigne le nouvel élément de matrice de transition qui se traduit par l'équation suivante

$$(T_{fi})_{\eta\nu} = \langle \Psi_{f\eta}^- | \mathcal{V}(r_0, r_{01}, r_{02}) | \Psi_{i\nu} \rangle \quad (4.18)$$

Nous rappelons alors que l'état initial $\Psi_{i\nu}$ est donné par la relation (3.28), et que les huit possibilités définissant l'état final sont données par les relations (3.30), (3.31), (3.32) et (3.33). Le potentiel est exprimé à l'aide de la relation suivante :

$$\mathcal{V}(r_0, r_{01}, r_{02}) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + B(0,1) + B(0,2) \quad (4.19)$$

où $\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2$ désignent respectivement les positions de l'électron incident et des deux électrons atomiques, $|\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ avec $(i \neq j)$ désigne la distance entre les deux électrons et $B(i, j)$ représente la partie de l'interaction relativiste électron-électron donnée par la relation (4.15).

Le couple d'indice (ν, η) représente respectivement les deux possibilités de spin total de l'état initial ($S = 1/2, M_S = \pm 1/2$) données par l'équation (3.28), et les différentes possibilités de spin total de l'état final définies en détail dans l'annexe C1. En remplaçant le couple (ν, η) par leurs valeurs, la relation (4.17) devient :

$$|T_{fi}|^2 = \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta-+}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta+-}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta--}^2 \quad (4.20)$$

Nous signalons que, si on considère l'électron incident dans un état de spin $(-\frac{1}{2})$ down nous avons les même résultats que si on considère l'électron incident dans un état de spin $(\frac{1}{2})$ up; nous avons alors l'égalité suivante :

$$\sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta-+}^2 = \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta+-}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta--}^2 \quad (4.21)$$

La relation (4.20) devient :

$$|T_{fi}|^2 = 2 \left[\sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta-+}^2 \right] \quad (4.22)$$

Il est clair que en comptant toutes les contributions avec les deux états initiaux définis par la relation (3.28), nous avons alors à l'état final l'occupation de 16 états équiprobables, ce qui nous permet d'écrire la section efficace différentielle triple relativiste en introduisant l'interaction de *Breit* sous la forme suivante :

$$SED T = (2\pi)^4 k_i^{-1} k_1 k_2 E_1 E_2 \frac{E_i}{c^6} \frac{1}{8} \left[\sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta++}^2 + \sum_{\eta=1}^4 |T_{fi}|_{\eta-+}^2 \right] \quad (4.23)$$

Pour établir l'élément de matrice donné par l'équation (4.18) nous suivons la même procédure que celle développée au troisième chapitre. Nous combinons les huit fonctions d'onde finales avec la fonction d'onde initiale. Contrairement à l'étude effectuée au troisième chapitre, le fait d'introduire l'interaction de *Breit* dans cette étude rend les éléments de matrice entre les états de spin différents non nuls. Dans cette partie l'électron diffusé est désigné par le vecteur d'onde \vec{k}_s et celui éjecté par le vecteur d'onde \vec{k}_e . Les éléments de matrices s'écrivent :

$$(T_{fi})_{1,\pm\pm} = \left\langle \psi_{f1\pm} (S = 3/2, M_S = \pm 3/2) \mid \mathcal{V} \mid \psi_{i+} (S = 1/2, M_S = +1/2) \right\rangle \quad (4.24-a)$$

En remplaçant les fonctions d'onde finales et initiale par les relations (3.28) et (3.30), nous avons :

$$(T_{fi})_{1,\pm\pm} = \left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \mid \mathcal{V} \mid \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \quad (4.24-b)$$

$$(T_{fi})_{2,\pm\pm} = \left\langle \psi_{f2\pm} (S = 3/2, M_S = \pm 1/2) \mid \mathcal{V} \mid \psi_{i+} (S = 1/2, M_S = 1/2) \right\rangle \quad (4.25-a)$$

En remplaçant les fonctions d'onde finales et initiale par les relations (3.28) et (3.31), nous avons :

$$(T_{fi})_{2,\pm\pm} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \mid \mathcal{V} \mid \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle + \right. \\ \left. \left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \mid \mathcal{V} \mid \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle + \right. \\ \left. \left\langle \left| \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \mid \mathcal{V} \mid \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \right] \quad (4.25-b)$$

$$(T_{fi})_{3,\pm\pm} = \left\langle \psi_{f3\pm} (S = 1/2, M_S = \pm 1/2) \mid \mathcal{V} \mid \psi_{i+} (S = 1/2, M_S = 1/2) \right\rangle \quad (4.26-a)$$

En remplaçant les fonctions d'onde finales et initiale par les relations (3.28) et (3.32), nous avons :

$$(T_{fi})_{3,\pm\pm} = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\begin{aligned} & - \left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\mp 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle - \\ & \left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle + \\ & 2 \left\langle \left| \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \end{aligned} \right] \quad (4.26-b)$$

et finalement :

$$(T_{fi})_{4,\pm\pm} = \left\langle \psi_{f4\pm} (S = 1/2, M_S = \pm 1/2) \left| \mathcal{V} \right| \psi_{i+} (S = 1/2, M_S = 1/2) \right\rangle \quad (4.27-a)$$

En remplaçant les fonctions d'onde finales et initiale par les relations (3.28) et (3.33), nous avons :

$$(T_{fi})_{4,\pm\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\mp 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle - \\ & \left\langle \left| \chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \end{aligned} \right] \quad (4.27-b)$$

Etant donné que les fonctions d'onde qui constituent l'état final s'écrivent comme combinaison linéaire des déterminants de Slater définis dans l'annexe C1, nous donnons ici les résultats pour chaque déterminant : (voir annexe F)

Pour le déterminant de Slater donné par la relation (C.1), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{+1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{+1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ & = \frac{1}{6} \left[-2 \mathfrak{J}(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 2 \mathfrak{G}(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.2), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{-1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[2\mathfrak{I}(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.3), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{+1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[2\mathfrak{I}(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 6f(\vec{k}_s, \vec{k}_e) - 6g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.4), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{-1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{+1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[-2\mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 2G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 6f(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.5), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{+1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{+1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[-2\mathfrak{I}(5, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 2G(5, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 6g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.32)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.6), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{-1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[2\mathfrak{I}(6, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(6, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.33)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.7), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{+1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[2\mathfrak{I}(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.34)$$

Pour le déterminant de *Slater* donné par la relation (C.8), nous avons :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{-1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{+1/2}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{+1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{+1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{6} \left[-2\mathfrak{I}(8, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 2G(8, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \end{aligned} \quad (4.35)$$

où $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ sont les amplitudes de diffusion directe et d'échange définies au troisième chapitre pour le potentiel électrostatique sans la partie du potentiel de *Breit*; elles sont données par les relations (3.41) et (3.42). Egalement $\mathfrak{I}(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $H(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ désignent respectivement les amplitudes de diffusion directe, d'échange et de capture du même processus pour le potentiel de *Breit*, elles sont définies par l'écriture matricielle suivante :

$$\begin{aligned} \mathfrak{I}(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \mathfrak{I} \left(\begin{matrix} m_s, & m_e, & m_a \\ m_{inc}, & m_{a1}, & m_{a2} \end{matrix} ; \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) \\ &= \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \end{aligned} \quad (4.36)$$

L'écriture matricielle $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} m_s, & m_e, & m_a \\ m_{inc}, & m_{a1}, & m_{a2} \end{pmatrix}$ désigne les différents états de spin individuels de l'état final ($m_f = \pm 1/2$) et de l'état initial ($m_i = \pm 1/2$) du système à trois électrons

relativistes 0,1,2 avant et après la collision. Ce terme exprime l'amplitude de diffusion directe, où l'indice de l'électron incident (\vec{k}_i, \vec{r}_0) est le même que celui de l'électron diffusé (\vec{k}_s, \vec{r}_0) ,

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) &= G \left(\begin{matrix} m_s, & m_e, & m_a \\ m_{inc} & m_{a1} & m_{a2} \end{matrix}, \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) \\
 &= \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_1) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_0) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_2) \middle| \mathcal{V} \middle| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle
 \end{aligned}
 \tag{4.37}$$

qui désigne l'amplitude de diffusion d'échange où l'indice de l'électron incident (\vec{k}_i, \vec{r}_0) est le même que celui de l'électron éjecté (\vec{k}_e, \vec{r}_0) . Notons que cet élément de matrice est donné à l'aide de la relation de *Peterkop* selon :

$$G(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \mathfrak{I}(\mathbf{M}, \vec{k}_e, \vec{k}_s)
 \tag{4.38}$$

Et finalement nous définissons le terme dit de capture électronique où l'indice de l'électron incident (\vec{k}_i, \vec{r}_0) est attribué à l'électron atomique restant dans la couche K après la collision. Pour les mêmes raisons citées au troisième chapitre nous négligeons dans nos calculs ce terme de capture, terme faible comparé aux amplitudes de diffusion directe et d'échange, par :

$$\begin{aligned}
 H(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) &= H \left(\begin{matrix} m_s, & m_e, & m_a \\ m_{inc}, & m_{a1}, & m_{a2} \end{matrix}, \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) \\
 &= \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_1) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_2) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_0) \middle| \mathcal{V} \middle| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle
 \end{aligned}
 \tag{4.39}$$

Finalement, en combinant tous ces résultats nous trouvons l'amplitude de transition correspondant à chacun des états finals.

Pour l'état final ψ_{if}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{1,++} = \frac{1}{3} \left[-\mathfrak{I}(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right]
 \tag{4.40}$$

Pour l'état final ψ_{2f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{1,-+} = \frac{1}{3} \left[\mathfrak{I}(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (4.41)$$

Pour l'état final ψ_{3f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{2,++} = \frac{1}{3\sqrt{3}} \left[\mathfrak{I}(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - \mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - \mathfrak{I}(5, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(5, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (4.42)$$

Pour l'état final ψ_{4f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{2,-+} = \frac{1}{3\sqrt{3}} \left[\mathfrak{I}(6, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(6, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - \mathfrak{I}(8, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(8, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + \mathfrak{I}(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (4.43)$$

Pour l'état final ψ_{5f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{3,++} = \frac{1}{3\sqrt{6}} \left[-\mathfrak{I}(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + \mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2\mathfrak{I}(5, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 2G_4(5, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 9g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (4.44)$$

Pour l'état final ψ_{6f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{3,-+} = \frac{1}{3\sqrt{6}} \left[\mathfrak{I}(8, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(8, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - \mathfrak{I}(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 2\mathfrak{I}(6, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(6, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (4.45)$$

Pour l'état final ψ_{7f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{4,++} = \frac{1}{3\sqrt{2}} \left[\mathfrak{I}(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(3, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + \mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 6f(\vec{k}_s, \vec{k}_e) - 3g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (4.46)$$

Pour l'état final ψ_{8f}^- , nous avons :

$$(T_{fi})_{4,-+} = \frac{1}{3\sqrt{2}} \left[\begin{array}{l} -\mathfrak{I}(\mathbf{8}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(\mathbf{8}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - \\ \mathfrak{I}(\mathbf{7}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + G(\mathbf{7}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \end{array} \right] \quad (4.47)$$

b- Présentation du calcul

Nous gardons la même description du problème avec notre modèle d'ondes planes à trois électrons relativistes qui introduit la corrélation dans l'état initial à l'aide du deuxième électron atomique de la couche K. Notons que la seule modification introduite dans cette partie porte sur le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible dans la voie d'entrée avant la collision, voir (*El Messaoudi A et al (1997)*).

Pour calculer l'amplitude de diffusion directe $F(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ relative au processus nous le décomposons en somme de trois termes selon l'équation suivante :

$$F(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = F_1(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + F_2(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + F_3(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \quad (4.48)$$

$F_1(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ désigne l'amplitude de diffusion directe contenant le potentiel électrostatique seul, donnée par :

$$F_1(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{m_e}(z_f, \vec{r}_2) \right| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \left| \chi_{m_{nc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{e1}}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{e2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (4.49)$$

$F_2(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ désigne l'amplitude de diffusion directe contenant la partie de l'interaction de Breit entre l'électron incident et l'électron atomique 1 donnée par :

$$F_2(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{m_e}(z_f, \vec{r}_2) \right| -\frac{1}{2r_{01}} (\bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_1 + \frac{(\bar{\alpha}_0 \vec{r}_{01})(\bar{\alpha}_1 \vec{r}_{01})}{r_{01}^2}) \left| \chi_{m_{nc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{e1}}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{e2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (4.50)$$

et finalement $F_3(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ désigne également l'amplitude de diffusion directe de la partie de Breit entre l'électron incident et l'électron atomique 2 donnée par :

$$F_3(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_2) \left| -\frac{1}{2r_{02}}(\bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_2 + \frac{(\bar{\alpha}_0 \vec{r}_{02})(\bar{\alpha}_2 \vec{r}_{02})}{r_{02}^2}) \right. \right. \\ \left. \left. \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (4.51)$$

Pour le calcul de $F_1(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ nous remarquons que d'après l'étude faite au troisième chapitre nous avons :

$$F_1 \left(\begin{matrix} m_s, & m_e, & m_a \\ m_{inc}, & m_{a1}, & m_{a2} \end{matrix}, \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) = \delta_{m_s, m_{inc}} \delta_{m_e, m_{a1}} \delta_{m_a, m_{a2}} \quad (4.52)$$

et dans le cas contraire elle est donnée par l'équation (3.55).

D'après l'équation (4.36), nous avons :

$$F_2 \left(\begin{matrix} m_s, & m_e, & m_a \\ m_{inc}, & m_{a1}, & m_{a2} \end{matrix}, \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| -\frac{1}{2r_{01}}(\bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_1 + \frac{(\bar{\alpha}_0 \vec{r}_{01})(\bar{\alpha}_1 \vec{r}_{01})}{r_{01}^2}) \right. \right. \\ \left. \left. \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \delta_{m_a, m_{a2}} \quad (4.53)$$

et finalement, d'après l'équation (4.36), nous avons :

$$F_3(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_2) \left| -\frac{1}{2r_{02}}(\bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_2 + \frac{(\bar{\alpha}_0 \vec{r}_{02})(\bar{\alpha}_2 \vec{r}_{02})}{r_{02}^2}) \right. \right. \\ \left. \left. \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \right. \\ \left. \left\langle \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \right. \quad (4.54)$$

Pour $F_3(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ la même règle de sélection n'intervient pas.

La forme générale de tous les éléments de matrice pour le potentiel $B(0,1)$ désignant l'interaction de *Breit* entre l'électron incident et l'électron atomique 1 de la couche K est donnée par les deux équations suivantes :

$$M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| B(0,1) \middle| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \\ \left\langle 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_2) \middle| 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (4.55-a)$$

$$M_2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_1) \middle| B(0,1) \middle| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \\ \left\langle \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_2) \middle| 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (4.55-b)$$

Et pour le potentiel $B(0,2)$ désignant l'interaction de *Breit* entre l'électron incident 0 et le deuxième électron atomique 2 de la couche K; nous avons également les deux équations suivantes :

$$M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_2) \middle| B(0,2) \middle| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \\ \left\langle 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_1) \middle| 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (4.56-a)$$

$$M_2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi_{m_s}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s_{m_a}(z_f, \vec{r}_2) \middle| B(0,2) \middle| \chi_{m_{inc}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{a2}}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle \\ \left\langle \chi_{m_e}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| 1s_{m_{a1}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (4.56-b)$$

En détaillant les calculs (voir annexe G), nous allons ramener toutes ces expressions à la forme intégrale générale $I(\vec{q}, \alpha, \beta, n)$ donnée par l'équation (3.56). Nous avons finalement deux

types de résultats pour ces amplitudes de diffusion directe $F(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e)$ donnés par les deux relations suivantes :

$$F(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = A_i I(\vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + B_i I(\vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \quad (4.57)$$

et :

$$F(\mathbf{M}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = C_i I(\vec{k}_t, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 0) + D_i I(\vec{k}_t, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 1) \quad (4.58)$$

Le vecteur \vec{k} exprime la différence suivante $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_e$, $\vec{k}_t = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ désigne le vecteur transfert et \vec{k}_e désigne le vecteur d'onde de l'électron éjecté. Les paramètres γ, γ_e, z_f et z_e sont définis au deuxième chapitre, et finalement A_i, B_i, C_i et D_i désignent des constantes de calcul.

De même pour les amplitudes de diffusion d'échange $G_i(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ sont données par les mêmes équations en utilisant la relation de *Peterkop* (3.43).

4-4 Résultats et discussions

Nous présentons dans ce paragraphe les résultats que nous avons obtenu pour la section efficace triplement différentielle relativiste en introduisant l'interaction de *Breit* correspondant aux mêmes situations physiques représentées au troisième chapitre dans des géométries coplanaires asymétriques et symétriques. Pour étudier l'effet de l'introduction de ces corrections relativistes nous comparons les résultats de toutes ces situations avec nos premiers résultats du même modèle, mais sans l'effet de l'interaction de *Breit*. Ainsi nous faisons une comparaison avec tous les résultats de la littérature pour conclure tous les changements sur la section efficace différentielle triple (SED_T) d'ionisation causés par l'introduction de l'interaction de *Breit*.

a- Cinématiques asymétriques

Nous représentons la distribution angulaire de la SED_T d'ionisation (e,2e) de la couche K calculée en première approximation de *Born* correspondant aux mêmes situations représentées au troisième chapitre dans une géométrie asymétrique coplanaire.

La figure (4.1) représente la SED_T de la couche K de l'atome d'or (Au) en fonction de l'angle d'éjection θ_e . Les conditions physiques sont : l'énergie incidente est fixée à $E_0 = 500 \text{ keV}$, l'énergie diffusée à $E_s = 319 \text{ keV}$ et celle d'éjection à $E_e = 100 \text{ keV}$, l'angle de diffusion est fixé à $\theta_s = -15^\circ$. La comparaison avec les résultats de nos premiers calculs montre bien la translation du pic binaire et de celui de recul par l'effet de l'introduction des interactions magnétique électron-électron et de retard. En comparant aussi avec le modèle d'ondes planes relativistes hydrogénéoïde rPWBA (travaux de *Keller S* et *Whelan C T* (1994-b)), et avec les mesures expérimentales; nous remarquons une nette amélioration du modèle rPWBA. En effet à l'aide de notre modèle d'ondes planes à trois électrons relativistes corrigé par l'introduction des corrections relativistes de *Breit*, nous sommes arrivés à reproduire la même structure de la

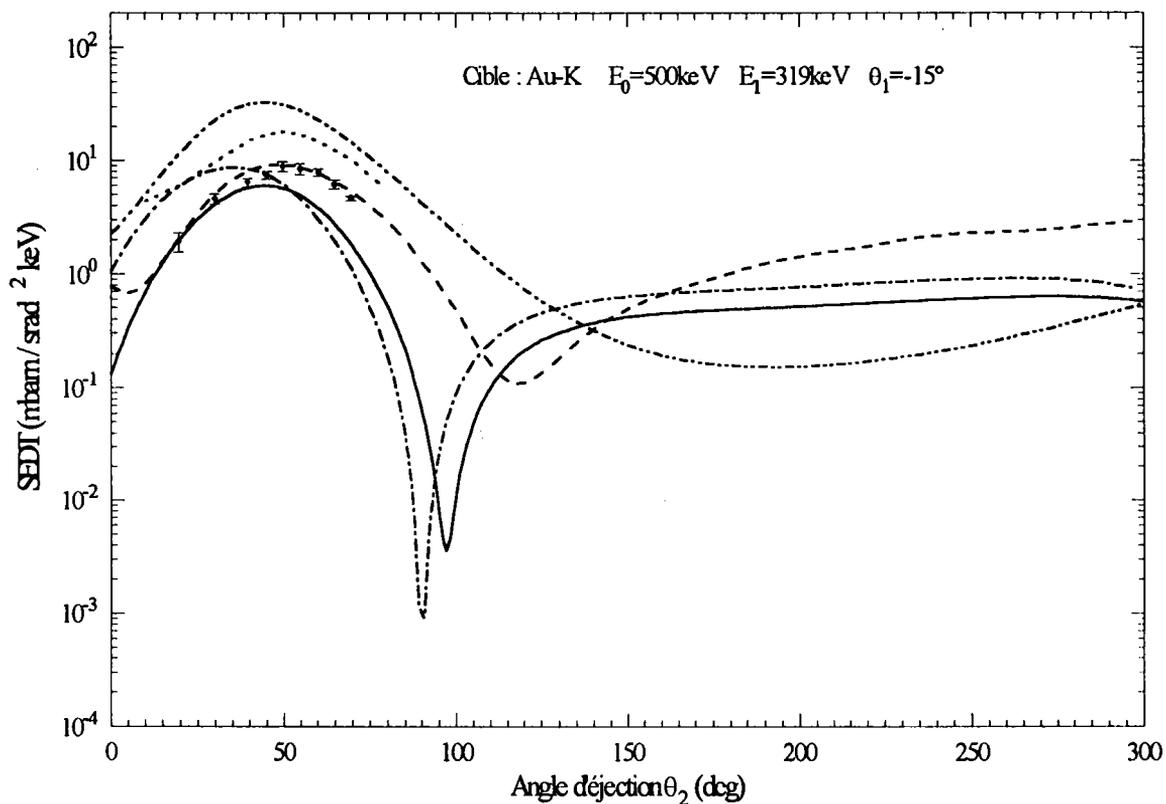


Figure 4.2 La SEDT d'ionisation de l'atome d'or (Au) en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats avec ou sans l'introduction de l'effet de l'interaction de *Breit* et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique que pour la figure (4.1). désigne les résultats de calcul de *Jakubassa-Amundsen* (1989 et 1992), .. - .. - - - représente les résultats de calcul de *Walters* et al (1992) et - - - - - représente les résultats du modèle rDWBA calcul de *Keller* et al (1994).

La figure (4.2) montre une comparaison de la même situation physique de la section efficace triplement différentielle relativiste (SEDT) en terme de l'angle d'éjection de l'ionisation de la couche K de l'atome d'or (Au), entre les résultats de nos calculs avec l'introduction des effets relativistes de *Breit* et les résultats des autres modèles théoriques décrits précédemment, tels que les résultats des calculs utilisant des ondes coulombiennes semi-relativistes pour décrire tous les électrons non liés (travaux de *Jakubassa-amundsen* (1989) et (1992)). Les résultats

des calculs de *Walters H R J* et al (1992) introduisant l'effet du changement de spin et utilisant une onde coulombienne semi-relativiste pour décrire l'électron éjecté et deux ondes planes relativistes pour décrire l'électron incident et le diffusé. Finalement avec le modèle rDWBA utilisant des ondes distordues relativistes pour décrire les voies d'entrée et de sortie de la collision en utilisant le propagateur photonique total (travaux de *Ast H* et al (1994), *Keller S* et al (1994-b) et *Whelan C T* et al (1995)). Nous remarquons d'après ces comparaisons que seul le dernier modèle a été capable de reproduire nettement la structure expérimentale de la SEDT.

Notons aussi la réussite de notre modèle qui en bon accord avec les résultats expérimentaux, donnant une approche simplifiée au problème en utilisant des ondes planes relativistes pour décrire l'état physique de tous les électrons non liés, en introduisant d'une part la corrélation dans l'état initial à l'aide des deux électrons atomiques de la couche K et la contribution du potentiel électron-noyau, et d'autre part en incluant les corrections relativistes à l'aide des interactions magnétiques entre l'électron incident et les deux électrons atomiques et ceux de retard entre le même système des trois électrons. A l'aide de cette description nous sommes arrivés à reproduire les deux structures binaire et de recul contrairement aux autres modèles cités où on remarque l'absence de la région de recul. Nous remarquons une différence à vérifier, c'est celle qui existe dans la direction de la région d'éjection interdite. Nous constatons que tant dans nos premiers résultats de la précédente partie, tant dans nos résultats qui introduisent l'interaction de *Breit* cette région est située vers une direction d'éjection $\theta_e = 100^\circ$. Expérimentalement elle est vers une direction d'éjection $\theta_e = 70^\circ$ et finalement pour le modèle rDWBA vers $\theta_e = 115^\circ$. Comme conclusion nous notons d'une part la réussite de la description du problème à l'aide du modèle d'ondes planes mais à trois particules relativistes, et d'autre part les changements sur la SEDT d'ionisation à très haute énergie apportés par l'introduction des corrections relativistes, résultat que nous allons confirmer en analysant les résultats des autres situations physiques sur les atomes d'argent et de cuivre.

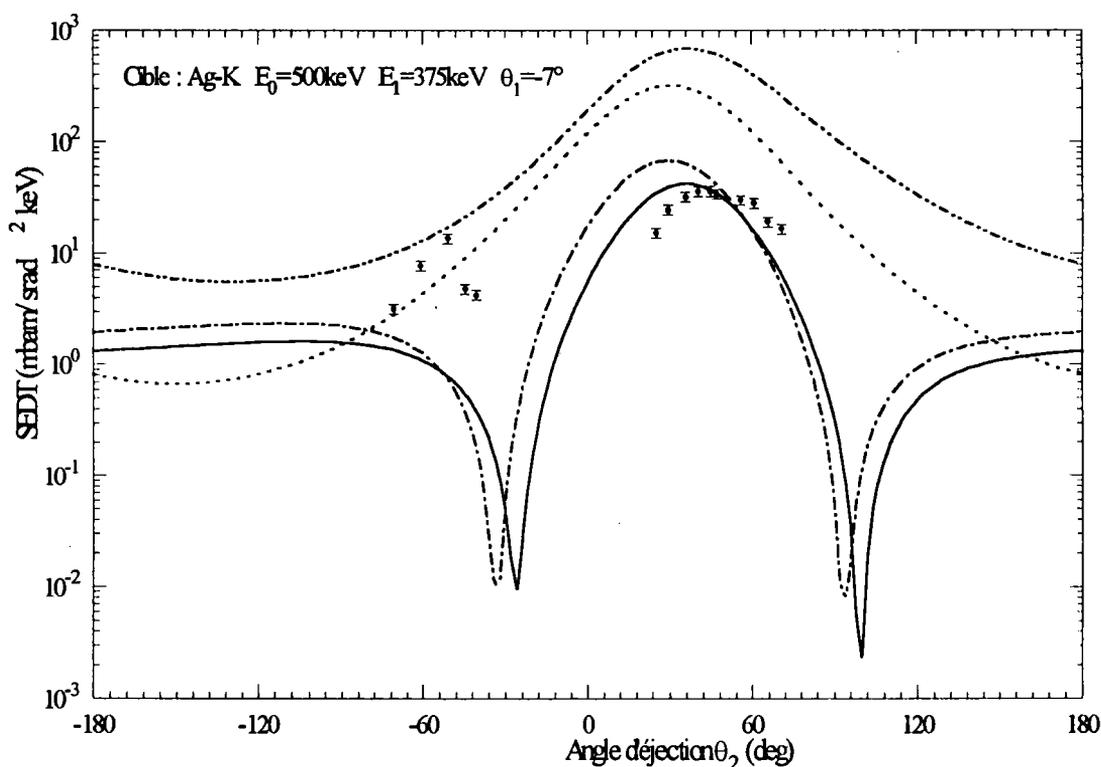


Figure 4.3 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. ——— désigne nos résultats en introduisant l'effet de l'interaction de Breit, - - - - nos premiers résultats sans l'effet de Breit, I les mesures expérimentales de Bonfert et al (1991). et · - · - · - · - · désignent respectivement les résultats avec et sans orthogonalisation du modèle rPWBA de Keller and Whelan (1994).

La figure (4.3) représente de même la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome d'argent (Ag) en fonction de l'angle d'éjection θ_e , dans une géométrie asymétrique coplanaire dans les conditions physiques suivantes : énergie incidente est fixée à $E_0 = 500 \text{ keV}$, l'énergie diffusée est fixée à $E_s = 375 \text{ keV}$ et celle éjectée est fixée à $E_e = 100 \text{ keV}$, l'angle de diffusion est fixé à $\theta_s = -7^\circ$. Nous faisons les mêmes comparaisons que pour la figure (4.1) et nous notons la translation des pics binaire et de recul par rapport à nos anciens résultats, nous notons aussi la nette amélioration de la description des électrons non liés à l'aide des ondes planes relativistes.

La figure (4.5) représente la SEDT en fonction de l'angle d'éjection θ_e dans une situation asymétrique coplanaire de l'ionisation simple de la couche K de l'atome d'argent dans les mêmes conditions énergétiques que pour la situation représentée dans les figures (4.3) et (4.4). L'angle de diffusion est fixé à $\theta_s = -15^\circ$, nous faisons les mêmes comparaisons que pour les autres figures et nous arrivons aux mêmes conclusions, un très bon accord avec les mesures expérimentales dans cette situation où on remarque seulement l'existence du pic binaire, étant donné que le vecteur d'onde $|\vec{k}_{rec}|$ est faible.

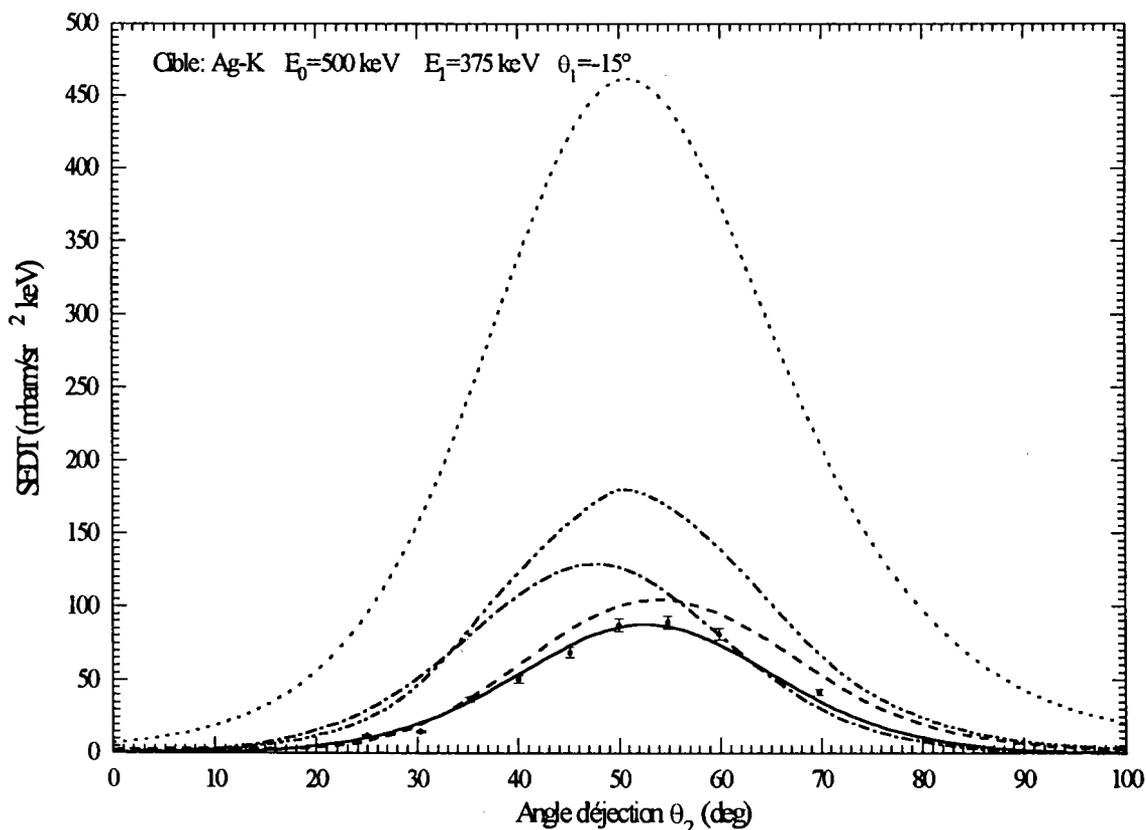


FIG 4.5 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats avec et sans l'interaction de Breit et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique à la figure (4.4). · · · · · résultats de Walters et al (1992). résultats de calcul du modèle rPWBA de Keller and Whelan (1994) et - - - - résultats de calcul du modèle rDWBA de Keller et al (1994).

La figure (4.6) représente toujours la distribution angulaire de la SEDT de la couche K de l'atome d'argent en fonction de l'angle d'éjection θ_e , calculée dans les conditions physiques suivantes : énergie incidente $E_0 = 300 \text{ keV}$, énergie diffusée $E_s = 200 \text{ keV}$ et celle d'éjection $E_e = 74,5 \text{ keV}$, l'angle de diffusion est fixé à $\theta_s = -10^\circ$. A l'aide toujours des mêmes comparaisons nous remarquons la présence des deux structures binaire et celle de recul dans les résultats de nos calculs qui sont translatées par l'effet de l'introduction des interactions relativistes magnétiques électron-électron et ceux de retard de *Breit*, signalons que ce dernier pic est absent dans le modèle d'ondes planes à deux électrons actifs rPWBA (travaux de *Keller S* et *Whelan C T* (1994-b)).

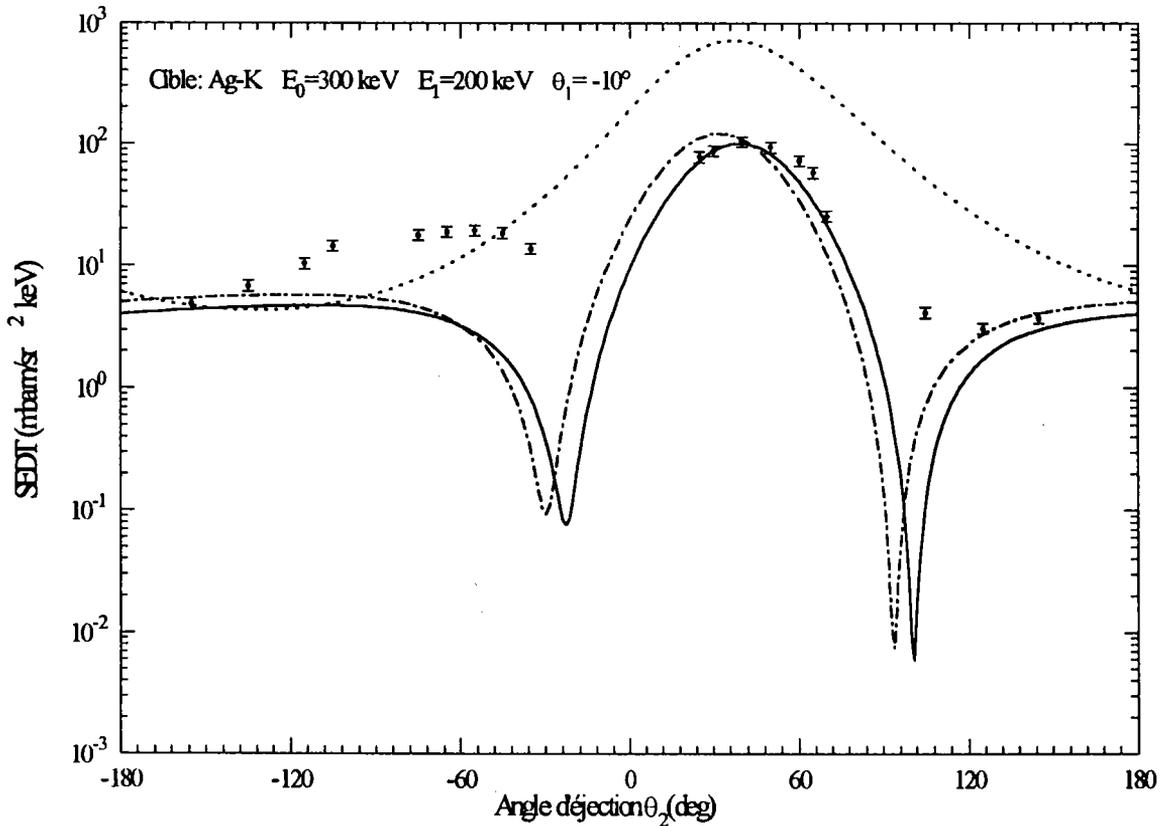


FIG 4.6 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats avec et sans l'interaction de *Breit* et les résultats expérimentaux de *Prinz et al* (1995) sont représentés d'une façon identique aux autres figures et désigne les résultats de calcul du modèle rPWBA de *Keller and Whelan* (1994).

b- Cinématiques symétriques

Nous reprenons également pour la situation symétrique coplanaire les mêmes cas de figures représentées dans la partie résultats du troisième chapitre pour la même géométrie. Rappelons que cette cinématique coplanaire symétrique représente la distribution angulaire de la SEDT d'ionisation de la couche K tel que les deux électrons émergents soient détectés dans deux directions symétriques de part et d'autre de la direction d'incidence ($|\theta_e| = |\theta_s| = |\theta|$) et à énergie égale $E_s = E_e$.

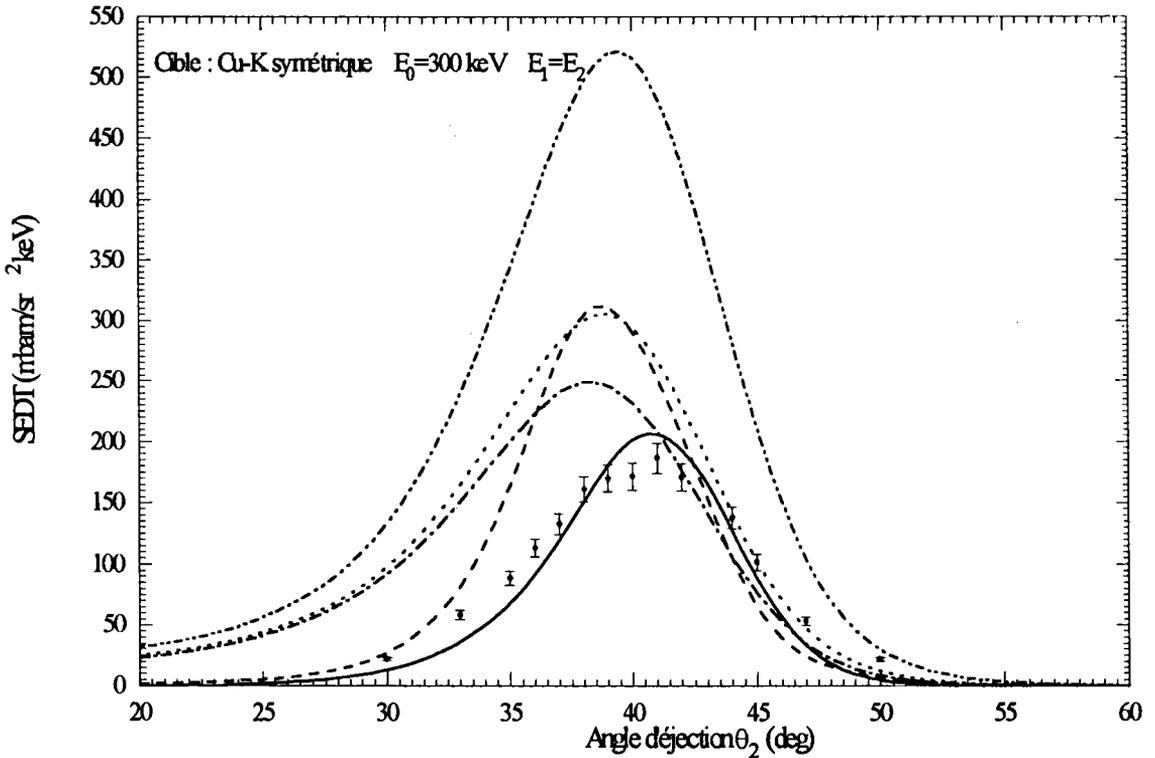


FIG 4.7 La SEDT d'ionisation de l'atome Cu en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats avec et sans l'interaction de *Breit* et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique aux autres figures. " - " - " - " et désignent respectivement résultats sans et avec orthogonalisation de calcul du modèle rPWBA de *Keller and Whelan* (1994) et - - - résultats de *Jakubassa-Amundsen* (1992).

La figure (4.7), montre la SEDT d'ionisation de la couche K de l'atome de cuivre (Cu) dans une géométrie coplanaire symétrique avec une énergie incidente $E_0 = 300 \text{ keV}$. Nous comparons les résultats obtenus par cette étude en introduisant le potentiel de *Breit* avec nos anciens résultats sans l'introduction de ce potentiel. En comparant également avec les mesures expérimentales, et avec le modèle rPWBA d'une part et d'autre part avec les calculs de *Jakubassa-Amundsen*, nous remarquons en premier la translation du pic binaire par rapport à nos anciens résultats ce qui confirme tous les changements sur la SEDT d'ionisation par l'introduction des corrections relativistes. Deuxièmement la comparaison avec les résultats expérimentaux et les autres calculs théoriques montre d'une façon nette la réussite de notre modèle à reproduire cette situation physique.

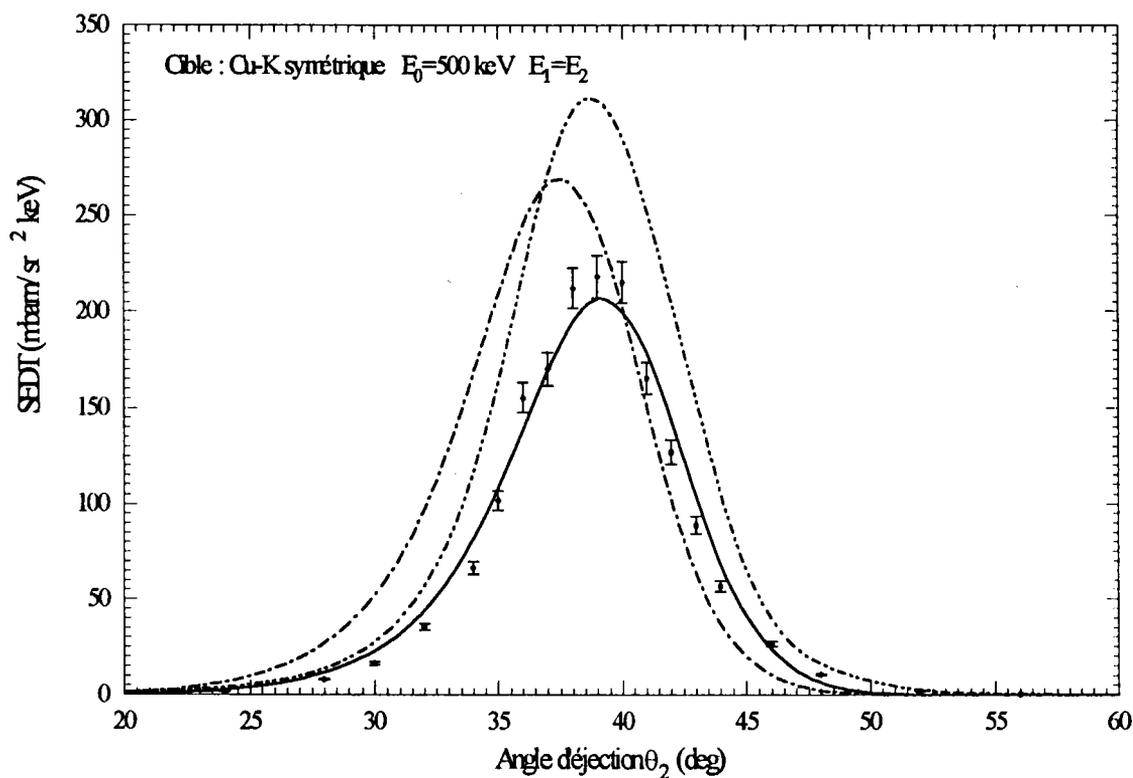


FIG 4.8 La SEDT d'ionisation de l'atome Cu en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique aux autres figures et \cdots - \cdots - résultats de calcul du modèle rPWBA de *Keller and Whelan* (1994).

La figure (4.8) représente la même situation physique sur l'atome de cuivre mais avec une énergie incidente $E_0 = 500 \text{ keV}$. Nous faisons les mêmes comparaisons que pour la figure (4.7), nous constatons exactement les mêmes conclusions et les mêmes interprétations pour cette énergie d'incidence. En conclusion un très bon accord avec l'expérience dans le cas d'une cinématique symétrique pour l'atome de cuivre.

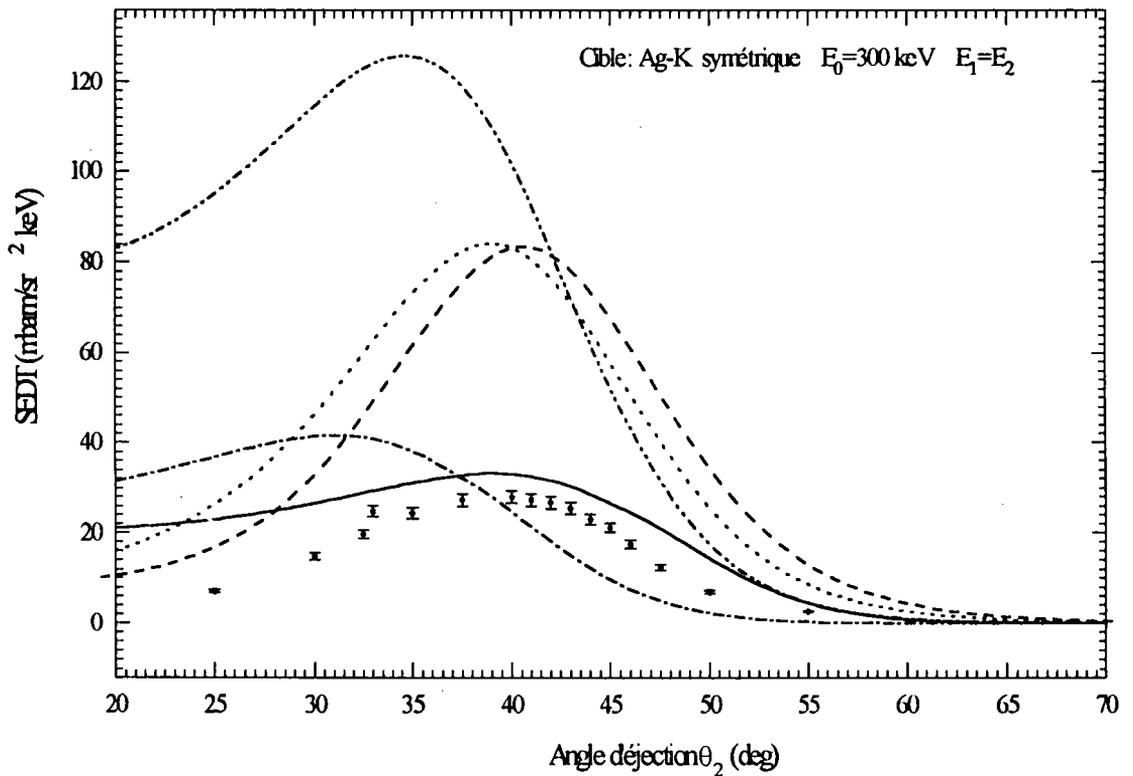


FIG 4.9 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Nos résultats avec et sans l'interaction de *Breit* et les résultats expérimentaux sont représentés d'une façon identique aux autres figures .. - - - - résultats du modèle rPWBA de *Keller and Whelan* (1994),résultats de *Walters et al* (1992) et - - - résultats de *Jakubassa-Amundsen* (1992).

Dans la figure (4.9), nous représentons aussi la distribution angulaire de la SEDT de l'ionisation simple de la couche K de l'atome d'argent dans une géométrie coplanaire symétrique avec une énergie incidente $E_0 = 300 \text{ keV}$. Nous notons que les résultats de ces calculs respectent exactement les mêmes interprétations physiques que pour les figures (4.7) et (4.8) sur l'atome de cuivre, c'est-à-dire nous signalons toujours d'une part la translation angulaire du pic binaire par rapport aux premiers résultats. La différence à signaler avec les mesures expérimentales est dans la région qui correspond aux faibles angles d'éjection où nous comptons introduire dans nos prochains travaux la corrélation entre les deux électrons sortants dans le continuum pour améliorer la SEDT dans cette région d'éjection (travaux de Keller S et al (1996-b)).

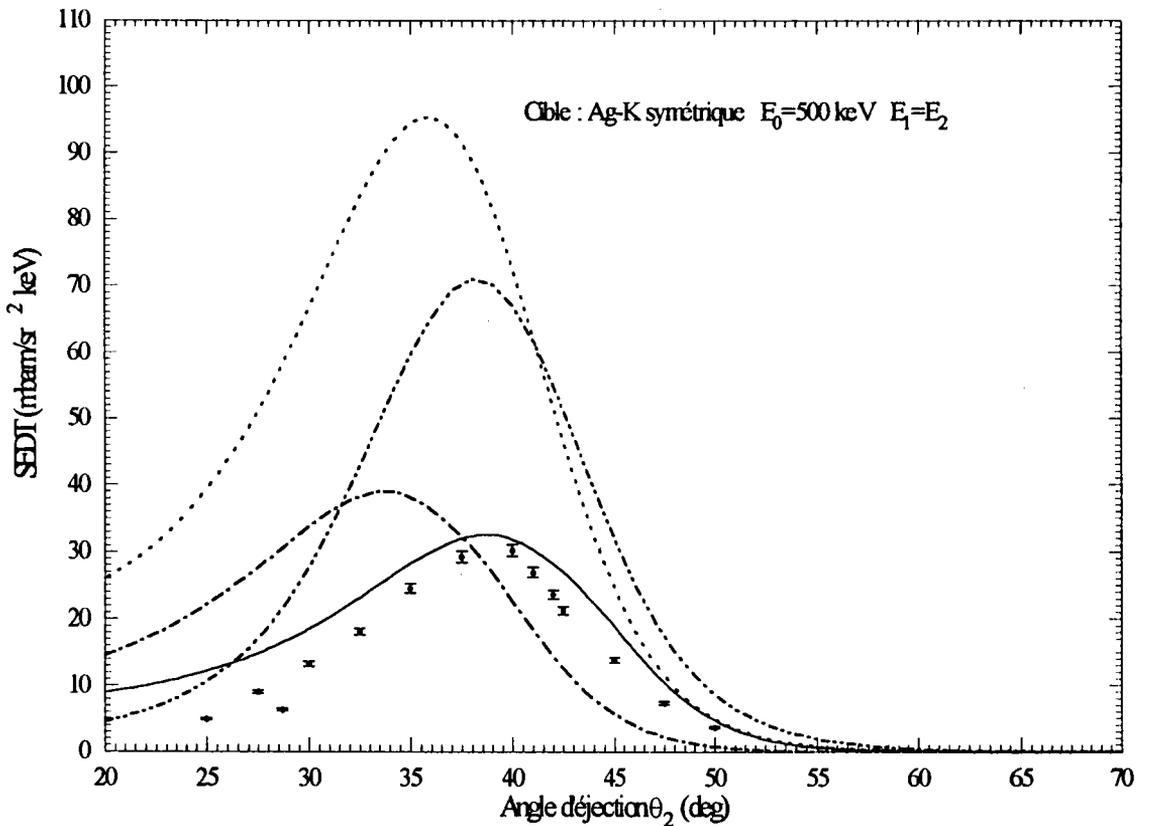


FIG 4.10 La SEDT d'ionisation de l'atome Ag en fonction de l'angle d'éjection dans les conditions cinématiques notées sur la figure. Tous les résultats sont représentés d'une façon semblable à la figure (4.9).

Dans la figure (4.10), nous représentons aussi la distribution angulaire de la SEDT de l'ionisation simple de la couche K de l'atome d'argent dans une géométrie coplanaire symétrique, avec une énergie incidente $E_0 = 500 \text{ keV}$. Nous notons exactement les mêmes conclusions que pour la figure (4.9).

Ces résultats sur la situation symétrique coplanaire montrent nettement la réussite de nos calculs à reproduire la structure de la section efficace triplement différentielle (SEDT) en décrivant le problème d'une façon simple avec un modèle d'ondes planes à trois électrons relativistes introduisant d'une part la corrélation dans l'état initial à l'aide des deux électrons atomiques de la couche K et la contribution de l'interaction électron-noyau, et d'autre part en introduisant les effets des corrections relativistes de *Breit*.

Nous constatons toujours la difficulté rencontrée pour trouver des résultats concernant l'atome d'or dans la cinématique coplanaire symétrique, identique à la difficulté rencontrée dans le modèle rDWBA concernant l'atome de cuivre dans la même cinématique.

4-5 Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons fait un bref rappel théorique sur l'origine de l'interaction de *Breit* introduisant les corrections relativistes et qui découle de la théorie des perturbations relativiste. Ces dernières se traduisent par l'interaction magnétique électron-électron entre l'électron projectile et les deux électrons atomiques de la couche K et, par l'interaction de retard entre le même système de trois électrons. Nous avons supposé que les conditions d'introduction de ces interactions sont vérifiées, c'est-à-dire en considérant que le transfert d'énergie entre les deux électrons est nul et, que les fonctions d'onde représentant les deux électrons sont solutions de l'hamiltonien local de *Dirac*.

Nous avons représenté la SEDT d'ionisation de la couche K des atomes de cuivre, d'argent et d'or dans toutes les situations physiques étudiées au troisième chapitre et nous parvenons aux conclusions suivantes :

- Nous avons montré l'importance des corrections relativistes de *Breit* sur la SEDT d'ionisation en translatant le maximum binaire dans toutes les situations étudiées précédemment et en gardant toujours la même structure de la SEDT, c'est-à-dire en faisant apparaître la structure de recul dans les situations qui correspondent à la cinématique asymétriques, structure absente dans le modèle rPWBA et dans les autres modèles théoriques à part le modèle rDWBA
- Le bon accord avec l'expérience de nos résultats sur les situations symétriques concernant les atomes de cuivre et d'argent à des énergies incidentes (300 et 500 keV) confirment les conclusions de notre étude.

Publication II :

The Breit interaction in relativistic K shell ionisation of heavy atoms by electron impact

The Breit interaction in relativistic K-shell ionization of heavy atoms by electron impact

A El Messaoudi, J Bouchet and B Joulakian†

Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Institut de Physique, 1 Bld Arago, Technopôle 2000, 57078 Metz Cedex 3, France

Received 5 June 1997

Abstract. The Breit interaction between the incident and atomic K-shell electrons is introduced in the calculation of the triple differential cross section of the K-shell ionization of heavy atoms by very energetic electrons (~ 300 keV). As the total spin is not conserved, all possible spin states of the three-electron system in the initial and final states are taken into account. The results obtained by a Dirac plane wave description of the continuum electrons and a relativistic helium-like bound state wavefunction, show a net improvement with respect to our recent calculations employing the same description without the Breit interaction.

1. Introduction

It is now well known that very energetic electrons of energy values approaching hundreds of keV can penetrate in very thin metallic layers ($\sim 50 \mu\text{g cm}^{-2}$) and eject, in a monocollisional process, one of the K-shell electrons of heavy elements such as copper, silver and gold. These types of experiments have been successfully performed by the Tübingen group (Schüle and Nakel 1982, Ruoff and Nakel 1987, Bonfert *et al* 1991). This is the outcome of a long period of development in both (e, 2e) experiments, begun by Ehrhardt *et al* (1969) and Amaldi *et al* (1969) on lighter targets, and theoretical relativistic electron–atom elastic and inelastic scattering studies begun by Bethe and Fermi (1932), by Møller (1932) and pursued by Fano (1956) and Ford and Mullin (1958).

The success of the Tübingen experiment has raised a new theoretical interest in the subject, as it permits, in the absence of a full relativistic scattering multi-electron theory, to verify directly the different approximations one is obliged to perform in the relativistic treatment of the electronic structure of the targets and projectiles. Many theoretical models based on relativistic propagator theory have been proposed. Fuss *et al* (1982) and Bell (1989) developed a theoretical model which uses plane waves to represent all unbound electrons in an impulse approximation (PWIA) procedure. Cavalli and Avaldi (1994) calculated the triple differential cross section in the semiclassical impulse approximation. Other procedures use simple or sophisticated relativistic wavefunctions in the description of the primary or secondary electrons, as the series of calculations by Keller and Whelan (1994) using a plane-wave Born approximation (rPWBA), or those of Das and Konar (1974) who employed a semirelativistic Sommerfeld–Maue function for one of the outgoing electrons. Jakubassa-Amundsen (1989, 1992) studied the influence of different approximate semirelativistic scattered and bound state electron wavefunctions, in this approximation all

† E-mail address: joulak@ipc.univ-metz.fr

unbound electrons are described by non-relativistic Coulomb waves multiplied by the Dirac plane-wave spinor. Walters *et al* (1992) have shown the importance of the introduction of spin-flip. Only the calculations of Ast *et al* (1994) and Keller *et al* (1994), using the relativistic distorted wave Born approximation (rDWBA) for the determination of the TDCS in coplanar asymmetric geometry, and those of Whelan *et al* (1995) using the same method on coplanar symmetric geometry for gold and silver at impact energies of 500 and 300 keV, reproduce well some of the existing experimental results.

In all these works the electronic structure of the heavy target is assimilated to one K-shell electron and the influence of the nuclear potential is taken into account only in the rDWBA procedure. Joulakian and El Messaoudi (1997) have recently presented an approach, where the incident electron is considered to be in the field of the nucleus and the two K-shell electrons, whose state is described by a Dirac helium-like solution. In this paper we introduce into the perturbing potential 'seen' by the incoming electron, the Breit interaction (see Carse and Walker 1973, Walker 1974, 1975), which takes into account the retardation effect and magnetic interactions between the incoming electron and two K-shell electrons. This, as it is explained below, will permit spin-flip in our three-electron system, in contrast to our first calculation, where only electrostatic interactions were considered.

2. Theory

In a first Born treatment of the ionization problem, the triple differential cross section (TDCS) for a relativistic (e, 2e) process is given by:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_s} = (2\pi)^4 k_i^{-1} k_s k_e E_s E_e \frac{E_i}{16c^6} \sum_{\eta=1}^8 \sum_{\nu=1}^2 |T_{\eta\nu}|^2 \quad (1)$$

Here E_i , E_s and E_e represent the relativistic energy values of the incident, scattered and ejected electrons respectively. \vec{k}_i , \vec{k}_s and \vec{k}_e are the respective wavevectors. Ω_s and Ω_e are the solid angles of the scattered and ejected electrons respectively. The equation

$$T_{\eta\nu} = \langle \Psi_{\eta}^- | V(r_0, r_{01}, r_{02}) | \Psi_{\nu} \rangle \quad (2)$$

represents the transition matrix element, between the two possible initial (ν) and eight final (η) states defined below. The potential seen by the incoming electron is given by:

$$V(r_0, r_{01}, r_{02}) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + B(0, 1) + B(0, 2) \quad (3)$$

where $B(i, j)$ represents the relativistic part of the electron-electron interaction that we will represent here by the Breit operator:

$$B(i, j) = -\frac{1}{2r_{ij}} (\vec{\alpha}_i \cdot \vec{\alpha}_j) + \frac{(\vec{\alpha}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{\alpha}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \quad (4)$$

in which the first term represents the magnetic interaction, and the second term designates the retardation effect (see Grant 1970).

The initial state will be given for the two possible spin states by the Slater determinants:

$$\Psi_{i\pm}(S = \frac{1}{2}; M_s = \pm\frac{1}{2}) = |\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(Z_i) 1s_{-1/2}(Z_i)| \quad (5)$$

where the incident electron is given by the Dirac plane wave $\chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ for the spin up and $\chi_{-1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ for the spin down. The two bound K-shell electrons are represented by a product of optimized Darwin wavefunctions $1s_{1/2}(Z_i)$ and $1s_{-1/2}(Z_i)$ for the spin up and

spin down respectively. Z_i represents a variational parameter as explained in Joulakian and El Messaoudi (1997).

As the total spin is not conserved, we will have the following possible wavefunctions in the final state:

$$\Psi_{1f1}^-(S = \frac{1}{2}; M_S = \pm \frac{1}{2}) = |\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)| \tag{6}$$

$$\Psi_{2f1}^-(S = \frac{3}{2}; M_S = \pm \frac{1}{2}) = \frac{1}{\sqrt{3}}\{|\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)| + |\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)| + |\chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)|\}. \tag{7}$$

For the states of total spin ($S = \frac{1}{2}; M_S = \pm \frac{1}{2}$), two combinations should be considered (see Mott and Massey 1971 or Schulz 1973):

$$\Psi_{3f1}^-(S = \frac{1}{2}; M_S = \pm \frac{1}{2}) = \frac{1}{\sqrt{6}}\{-|\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\mp 1/2}(Z_f)| - |\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)| + 2|\chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)|\} \tag{8}$$

which combines the spin of the scattered electron with the triplet of the atomic electrons, and

$$\Psi_{4f1}^-(S = \frac{1}{2}; M_S = \pm \frac{1}{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{|\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\mp 1/2}(Z_f)| - |\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}_s)\chi_{\mp 1/2}(\vec{k}_e)1s_{\pm 1/2}(Z_f)|\} \tag{9}$$

which combines the spin of the scattered electron with the singlet of the atomic electrons. Now the matrix elements that we can meet are of three types that we define in the following way. First the direct elements given by:

$$f \begin{pmatrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{pmatrix} (\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi_{m_m}(\vec{k}_s, \vec{r}_0)\chi_{m_{i1}}(\vec{k}_e, \vec{r}_1)1s_{m_{i2}}(Z_f, \vec{r}_2) | \times V | \chi_{m_{i0}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)1s_{m_{i1}}(Z_i, \vec{r}_1)1s_{m_{i2}}(Z_i, \vec{r}_2) \rangle \tag{10}$$

where the index of the incident electron (\vec{k}_i, \vec{r}_0) is the same as that of the scattered electron (\vec{k}_s, \vec{r}_0). Next the exchange term given by:

$$g \begin{pmatrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{pmatrix} (\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi_{m_m}(\vec{k}_s, \vec{r}_1)\chi_{m_{i1}}(\vec{k}_e, \vec{r}_0)1s_{m_{i2}}(Z_f, \vec{r}_2) | \times V | \chi_{m_{i0}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)1s_{m_{i1}}(Z_i, \vec{r}_1)1s_{m_{i2}}(Z_i, \vec{r}_2) \rangle \tag{11}$$

where the index of the incoming electron (\vec{k}_i, \vec{r}_0) is the same as that of the ejected electron (\vec{k}_e, \vec{r}_0). This matrix element can be determined by the following property:

$$g \begin{pmatrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{pmatrix} (\vec{k}_s, \vec{k}_e) = f \begin{pmatrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{pmatrix} (\vec{k}_e, \vec{k}_s). \tag{12}$$

Finally we have the capture term:

$$h \begin{pmatrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{pmatrix} (\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi_{m_{i0}}(\vec{k}_s, \vec{r}_1)\chi_{m_{i1}}(\vec{k}_e, \vec{r}_2)1s_{m_{i2}}(Z_f, \vec{r}_0) | \times V | \chi_{m_{i0}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)1s_{m_{i1}}(Z_i, \vec{r}_1)1s_{m_{i2}}(Z_i, \vec{r}_2) \rangle \tag{13}$$

where the index of the incident electron (\vec{k}_i, \vec{r}_0) is attributed to the remaining atomic electron $1s_{m_{i2}}(Z_f, \vec{r}_0)$. The numerical values of this term are very small in comparison with the other two, so it has been neglected in our present calculations:

$$\begin{pmatrix} m_{f0}, & m_{f1}, & m_{f2} \\ m_{i0}, & m_{i1}, & m_{i2} \end{pmatrix}$$

designate the individual final ($m_f = \pm \frac{1}{2}$) and initial ($m_i = \pm \frac{1}{2}$) spin states of the three electrons (0, 1 and 2). Each matrix element constituted of three terms concerning the electrostatic part of the potential and the two Breit terms, has particular selection rules that we can mention here. Now the electrostatic part of the direct element f (equation (10)):

$$f1 \left(\begin{matrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{matrix}, \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) = \langle \chi_{m_{f0}}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_{f1}}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{i2}}(Z_f, \vec{r}_2) | \times \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{m_{i0}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{i1}}(Z_i, \vec{r}_1) 1s_{m_{i2}}(Z_i, \vec{r}_2) \rangle = 0 \quad (14)$$

if $m_{f0} \neq m_{i0}$ or $m_{f1} \neq m_{i1}$ or $m_{f2} \neq m_{i2}$. We have also the relativistic part of the potential in the direct term:

$$f2 \left(\begin{matrix} m_{f0}, m_{f1}, m_{f2} \\ m_{i0}, m_{i1}, m_{i2} \end{matrix}, \vec{k}_s, \vec{k}_e \right) = \left\langle \chi_{m_{f0}}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_{f1}}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s_{m_{i2}}(Z_f, \vec{r}_2) \times \left| -\frac{1}{2r_{01}} \left(\vec{\alpha}_0 \cdot \vec{\alpha}_1 + \frac{(\vec{\alpha}_0 \cdot \vec{r}_{01})(\vec{\alpha}_1 \cdot \vec{r}_{01})}{r_{01}^2} \right) \right| \times \chi_{m_{i0}}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_{i1}}(Z_i, \vec{r}_1) 1s_{m_{i2}}(Z_i, \vec{r}_2) \right\rangle = 0 \quad (15)$$

in the cases $m_{f2} \neq m_{i2}$. A similar rule does not exist for the term $B(0, 2)$.

The substitution of the different $\chi_{\pm 1/2}(\vec{k}, \vec{r})$ and $1s_{1/2}$ in equation (2) with the adequate wavevectors and parameters is straightforward. All the matrix elements can be expressed in terms of the following basic integral:

$$I(\vec{q}, \alpha, \beta, n) = \int r^\beta \exp[-(i\vec{q}\vec{r} - \alpha r)] (\cos \theta)^n d\vec{r} \quad (16)$$

with β being a non-integer, which we can determine analytically.

3. Results

In what follows we present our results concerning gold, silver and copper targets. The general observation that one can make on our new results given in figures 1-6, which represent the variation of the TDCS in terms of the ejection angle, is that the introduction of the Breit operator, as described above, translates, as expected, the curves corresponding to our past results towards the experimental values. This shows the importance of the retardation and the magnetic interaction in the ionization process. Now let us consider in a more particular way the results for gold presented in figure 1 corresponding to a coplanar asymmetric geometry at an impact energy of 500 keV. The scattered outgoing electron having an energy value of $E_1 = 319$ keV and the ejected one an energy value of $E_2 = 100$ keV. The scattering angle is fixed to -15° . In this case only the results of the relativistic distorted-wave Born approximation (rDWBA) which use a better description of the incoming and emerging electrons are in good agreement with the experimental results. Our results, which should be compared only with other plane wave calculations, are the closest approaching to the experimental values and they are the only ones which produce the recoil structure, which must be attributed to the nuclear term in the perturbing potential equation (3). It would be interesting to verify experimentally the absence or the rarity of event counts around the forbidden region that we obtain around 100° . It should be noted here that the last experimental point around 70° shows a tendency of what seems to be a decrease.

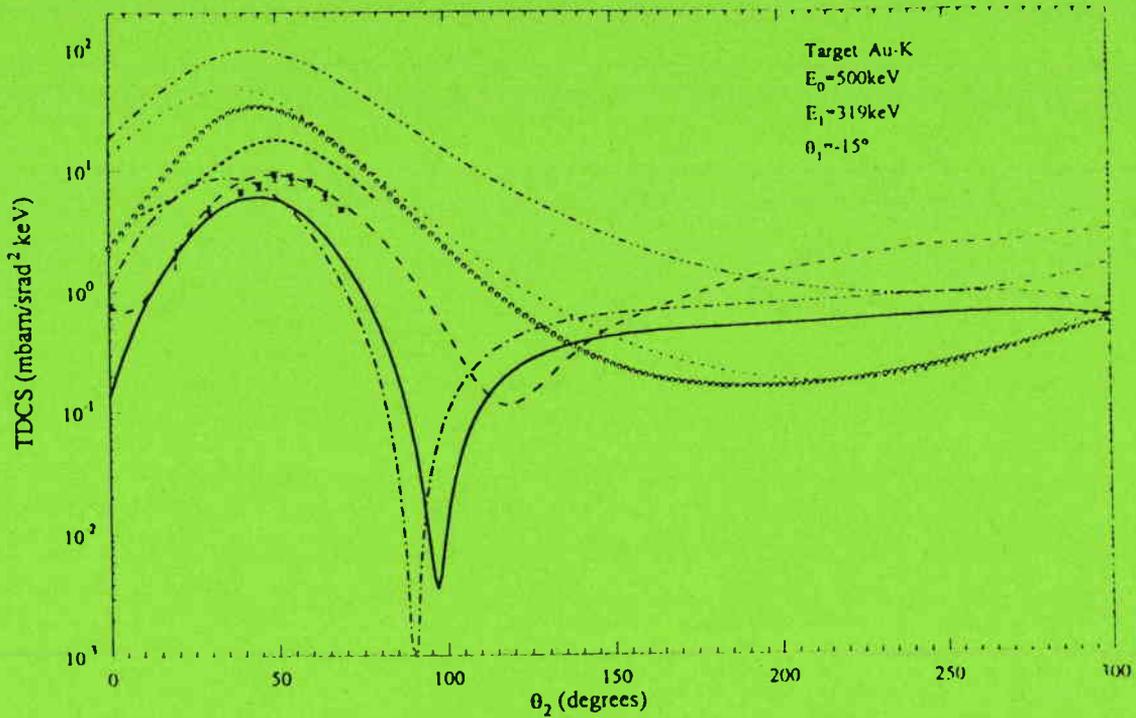


Figure 1. The TDCS for the K-shell ionization of gold by electron impact in terms of the ejection angle. The scattering angle is fixed to -15° with respect to the direction of incidence $E_i = 500$ keV, $E_s = 319$ keV, $E_e = 100$ keV. —, present results; —, past results (Joulakian and El Messaoudi 1997). Full circles with error bars give the experimental data of Bonfert *et al* (1991). - - - represents rPWBA results of Keller *et al* (1994). \circ give rPWBA results with spin-flip of Walters *et al* (1992). - · - · -, rPWBA results with full photon propagator; · · · · ·, rPWBA results with pure Coulomb interaction both given by Keller and Whelan (1994), short dashes represent Coulomb-Born results of Jakubassa-Amundsen (1989)

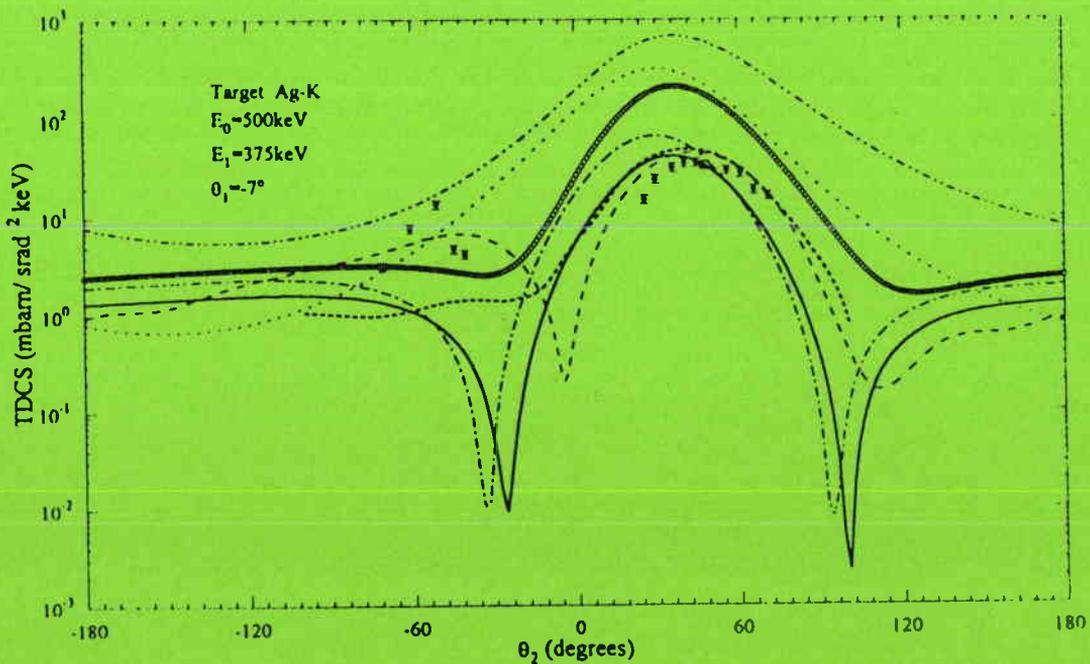


Figure 2. Same as in figure 1, but for silver with $E_e = 375$ keV and a scattering angle of -7°

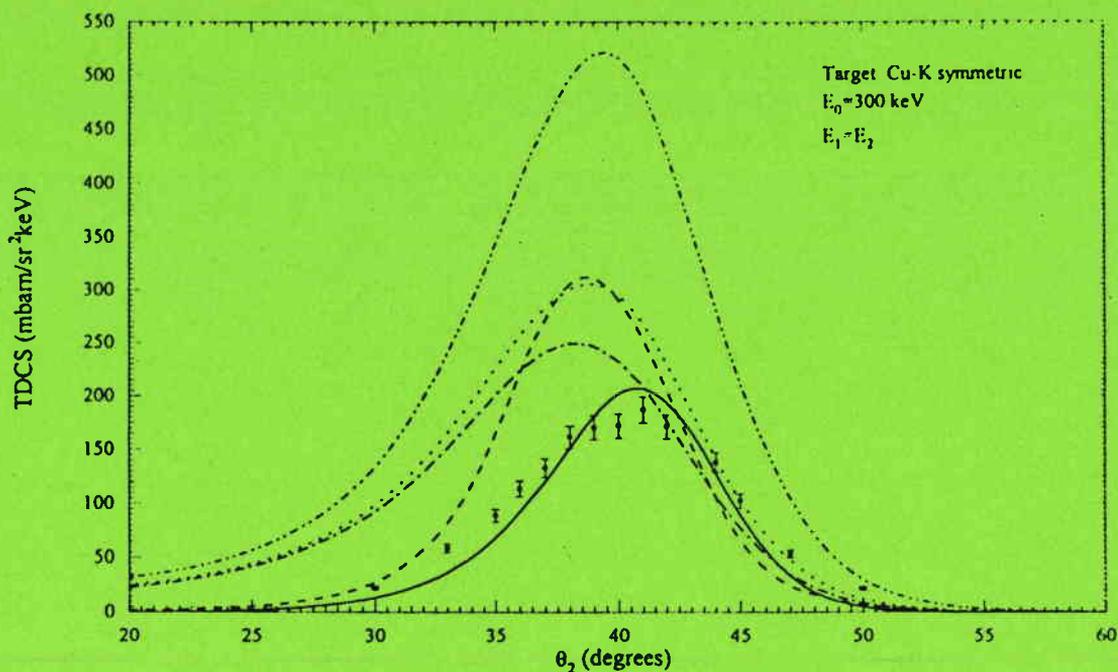


Figure 3. The TDCS of the K-shell ionization of copper at 300 keV impact energy in coplanar symmetric geometry ($|\theta_1| = |\theta_2| = \theta$) plotted against the detection direction of one of the outgoing electrons. Full circles with error bars give the experimental data of Bonfert *et al* (1991); - - -, Coulomb-Born (Jakubassa-Amundsen 1992). The two rPWBA results are given by the same types of lines as in figure 1. The present results are given by the full curve and - · - gives our past results.

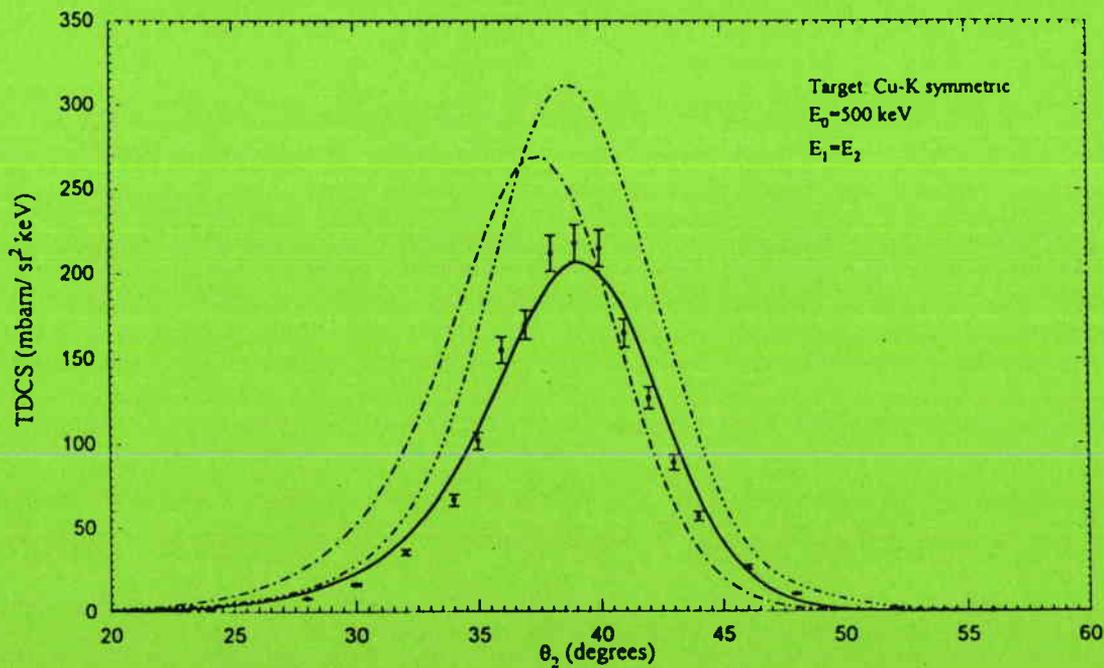


Figure 4. Same as in figure 3, but with the energy of the incident electron fixed to 500 keV.

The same observations can be made on the results corresponding to a silver target in figure 2, where we have, as in figure 1, the variation in coplanar asymmetric geometry at the same impact energy; the scattered and electron energy values being 375 keV and 100 keV respectively and the scattering angle being equal to -7° . Now in this case we have some

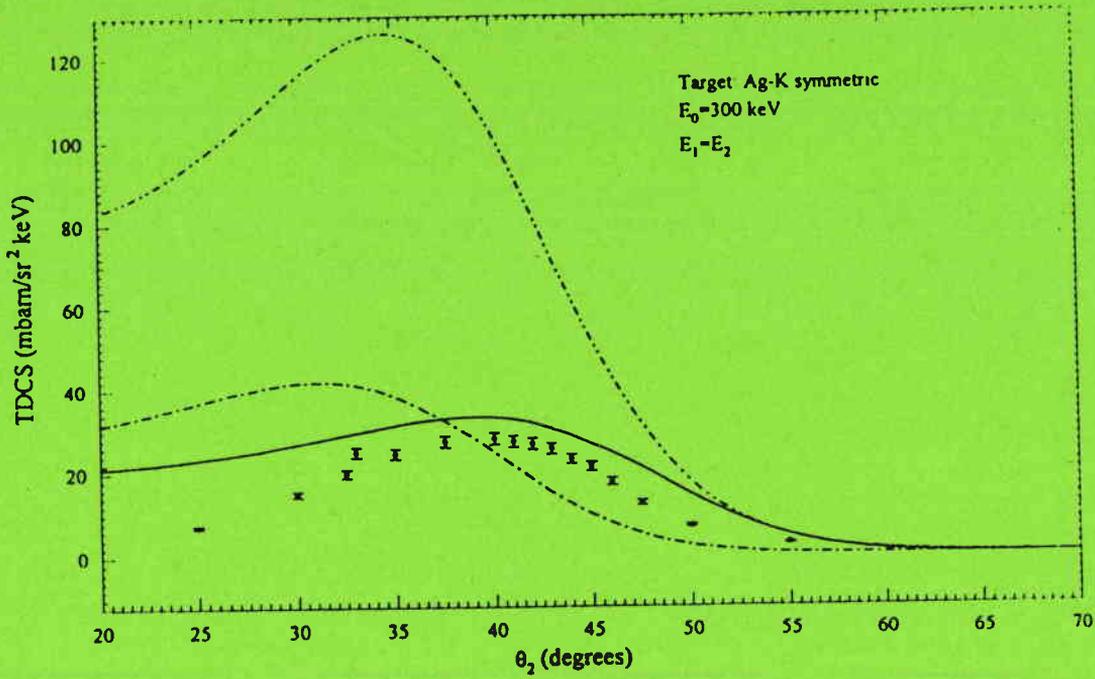


Figure 5. Same as in figure 3, but for a silver target.

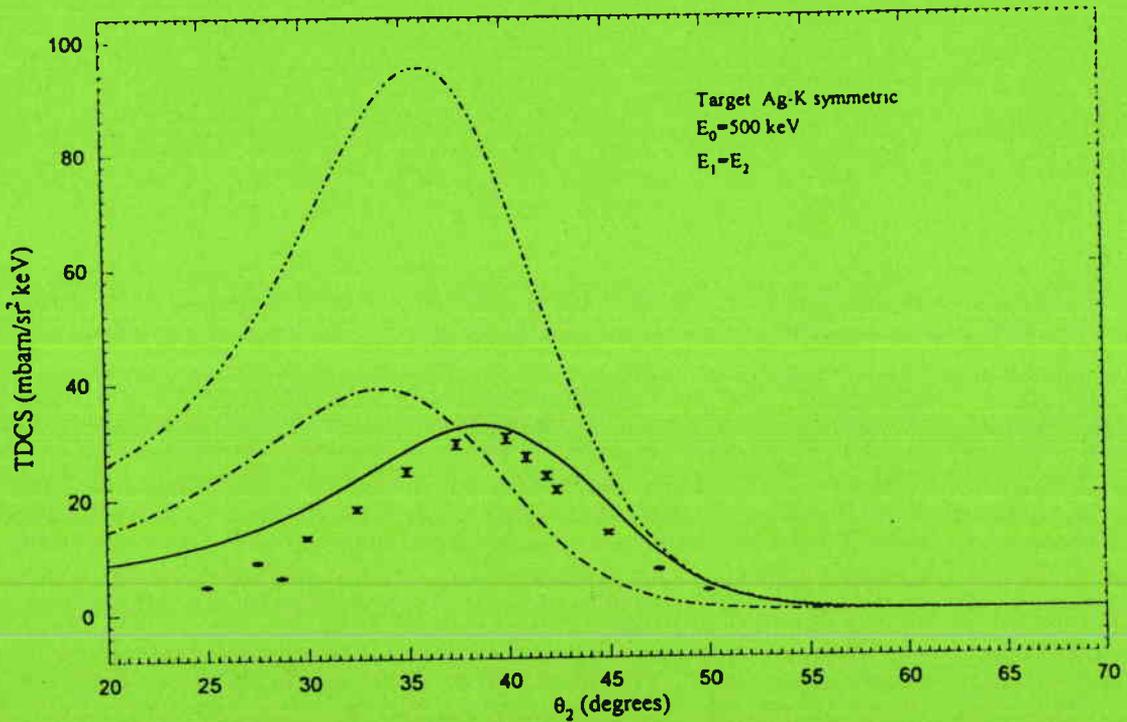


Figure 6. Same as in figure 5, but for a silver target.

experimental points around -40° which are separated from the binary region by a forbidden region which exists only in the results of Keller *et al* (1994) (presented by broken curves in our results). It is interesting to see that all methods fail to approach these points. Now the question is: Do these points constitute the beginning of a large recoil lobe or just a small front lobe around the direction of -60° ? Other experimental points are necessary to answer this question. In the first eventuality the non-relativistic image of a binary and recoil lobe would be respected. In the second, the lobe around -60° should have a quantum relativistic

origin as this direction (i.e. -60°) corresponds to a forward ejection direction, perpendicular to the momentum transfer, which, in the non-relativistic case, is an unfavourable ejection direction.

Concerning the case of coplanar symmetric geometry, we consider in figures 3 and 4 the variation of the triple differential cross section of the ionization of copper by 300 and 500 keV electrons respectively. Here, the two emerging electrons are detected in two symmetric directions with respect to the incidence direction ($|\theta_2| = |\theta_1| = \theta$). In the absence of rDWBA results we compare our results with those of rPWBA, and the experimental data. We remark that in these two cases the improvement is much more evident and the agreement with the experimental results is much more satisfactory.

In figures 5 and 6, we consider in symmetric geometry the ionization of a silver target at the same impact energy values. Here the improvement with respect to the results obtained by rPWBA with the full photon propagator is very obvious as well as the translation of the maximum with respect to our first calculations, although the agreement with the experimental results is not as good as in the case of a copper target (figures 3 and 4), especially in the small angle region where the introduction of the correlation between the two emerging electrons is absolutely necessary as shown by Keller *et al* (1996).

4. Conclusion

We have introduced the Breit interaction in a procedure employing a three-electron model in the determination of the TDCS of the K-shell ionization of heavy targets using a helium-like relativistic bound state wavefunction. The results show a net improvement with respect to those obtained without the Breit interaction. The major advantage of this method is in the possibility of applying a many-electron description in the relativistic treatment of the ionization of heavy atoms. This work opens the way for a future application of this procedure in calculations in which we intend to apply Sommerfeld–Maue continuum wavefunctions instead of the actual plane waves.

References

- Amaldi U Jr, Egidi A, Marconero R and Pizzella G 1969 *Rev. Sci. Instrum.* **40** 1001–4
 Ast H, Keller S, Whelan C T, Walters H R J and Dreizler R M 1994 *Phys. Rev. A* **50** R1–3
 Bell F 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 287–97
 Bethe H A and Fermi E 1932 *Z. Phys.* **77** 269
 Bethe H A and Salpeter E E 1957 *Quantum Mechanics of One and Two-Electron Atoms* 1st edn (Berlin: Springer)
 Bonfert J, Graf H and Nakel W 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 1423–34
 Breit G 1932 *Phys. Rev.* **39** 616–24
 Carse G D and Walker D W 1973 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6** 2529–43
 Cavalli A and Avaldi L 1994 *Nuovo Cimento D* **16** 1–4
 Das J N and Konar A N 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 2417–20
 Ehrhardt H, Schulz M, Tekaat T and Willmann K 1969 *Phys. Rev. Lett.* **22** 89–92
 Fano U 1956 *Phys. Rev.* **102** 385
 Ford G W and Mullin C J 1958 *Phys. Rev.* **110** 520–5
 Fuss I, Mitroy J and Spicer B M 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** 3321–31
 Grant I P 1970 *Adv. Phys.* **19** 747–811
 Jakubassa-Amundsen D H 1989 *Z. Phys. D* **11** 305–13
 ——— 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1297–305
 Joulakian B and El Messaoudi A 1997 *Z. Phys. D* **39** 85–93
 Keller S, Joulakian B, Ast H and Hanssen J 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 2855–68
 Keller S and Whelan C T 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** L771–6
 Keller S, Whelan C T, Ast H, Walters H R J and Dreizler R M 1994 *Phys. Rev. A* **50** 3865–77

- Moller C 1931 *Z. Phys.* **70** 786
—1932 *Ann. Phys., Lpz.* **14** 531–85
Mott N F and Massey H S W 1971 *The Theory of Atomic Collisions* 3rd edn (Oxford: Clarendon)
Ruoff H and Nakel W 1987 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 2299
Schüle E and Nakel W 1982 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15** L639–41
Schulz M 1973 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6** 2580–99
Walker D W 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7** 97–116
—1975 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **8** 760–9
Walters H R J, Ast H, Whelan C T, Dreizler R M, Graf H, Schöter C D, Bonfert J and Nakel W 1992 *Z. Phys. D* **23** 353–7
Whelan C T, Ast H, Keller S, Walters H R J and Dreizler R M 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28** L33–9

Conclusion générale

Motivé par la réussite des expériences réalisées par le groupe de Tübingen (*Nakel W* et collaborateurs) sur les sections efficaces différentielles absolues de la couche K des atomes lourds, et par l'absence d'une théorie complète expliquant ces résultats, nous avons développé dans ce travail une procédure relativiste basée sur le développement de *Born* pour définir la matrice de diffusion S et la matrice de transition T ainsi que pour la détermination de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation simple de la couche K des atomes lourds par impact d'électrons très énergétiques (300 , 500 keV).

Nous avons présenté un modèle à trois électrons relativistes qui peuvent être décrit par des fonctions de base obtenues par la résolution de l'hamiltonien de *Dirac* à trois électrons. Nous avons utilisé une fonction d'onde variationnelle type héliumoïde pour décrire le coeur de la cible. Nous avons également utilisé des ondes planes relativistes pour décrire tous les électrons non liés.

Nous avons montré pour la première fois l'importance de l'introduction de la corrélation dans l'état initial à l'aide du deuxième électron de la couche K et l'importance de l'introduction de l'interaction avec le noyau, qui est absente dans les traitements basés sur l'électrodynamique quantique. Nous avons également montré l'importance d'introduire toutes les possibilités d'occupation dans l'état final à cause de la non conservation du spin total du système. Nous avons amélioré le comportement de la section efficace différentielle triple dans les régions de

Conclusion générale

faibles angles d'éjection et dans les situations symétriques coplanaires par rapport aux modèles donnant à la cible une structure monoélectronique et, nous avons montré pour la première fois l'importance des effets des interactions relativistes de *Breit* sur la section efficace différentielle triple de la simple ionisation de la couche K des atomes lourds.

Les résultats satisfaisants que nous avons obtenus à l'aide de notre modèle d'ondes planes à trois électrons relativistes, nous incitent à envisager d'étendre nos calculs en appliquant le même modèle en utilisant des ondes coulombiennes relativistes pour décrire les électrons non liés, d'introduire la corrélation entre les deux électrons sortants dans le continuum (*Keller S et al (1996-b)*), ainsi qu'en utilisant des électrons incidents polarisés (travaux de *Tenzer R et Grün N (1994)*, *Prinz H-Th et al (1995)*, *Jakubassa-Amundsen (1995 et 1996)*, *Keller S et al (1996-c)*, *Besch K H et al (1997)*), et également à étudier le problème d'ionisation de la couche L des atomes lourds (travaux de *Kull T et al (1997)*).

ANNEXES

Annexe A

Forme intégrale du propagateur relativiste pour une particule libre

Rappelons que nous avons donné au premier chapitre deux expressions intégrales représentant le propagateur de *Green* relativiste pour une particule libre $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$, la première désigne la propagation en avant d'une particule libre, expression qui inclue seulement les fréquences positives donnée par :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} e^{-iE(t' - t)} \frac{E\gamma_0 - \vec{p}\vec{\gamma} + m_0}{2E} \quad t' > t \quad (\text{A.1})$$

La seconde est pour la propagation en arrière, expression qui inclue seulement les fréquences négatives donnée par :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} e^{iE(t' - t)} \frac{-E\gamma_0 + \vec{p}\vec{\gamma} + m_0}{2E} \quad t' < t \quad (\text{A.2})$$

Le but de cette annexe est de démontrer ces deux expressions (A.1) et (A.2).

Nous partons de l'équation (1.63) donnant la transformée de *Fourier* du propagateur libre relativiste; rappelons que cette équation est donnée par :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{-i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} \tilde{G}_F^0(p) \quad (\text{A.3})$$

Nous rappelons aussi que $\tilde{G}_F^0(p)$ est donnée par l'équation suivante :

$$\tilde{G}_F^0(p) = \frac{1}{\vec{p} - m_0} = \frac{\vec{p} + m_0}{p^2 - m_0^2} \quad \text{pour } p^2 \neq m_0^2 \quad (\text{A.4})$$

Nous rappelons aussi que le gradient $\tilde{\nabla}$ est défini au premier chapitre par la relation (1.60).

Pour démontrer les deux expressions (A.1) et (A.2), nous allons intégrer la transformée de *Fourier* de $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ donnée par les deux équations (A.3) et (A.4) sur le plan complexe p_0 , où p_0 est le point de singularité donné par :

$$p_0 = \pm\sqrt{p^2 + m_0^2} = \pm E \tag{A.5}$$

Une condition nécessaire de cette théorie, c'est que l'onde se propageant de \vec{r} vers le futur en avant concerne seulement l'énergie positive de l'électron et sera représentée par une fonction d'onde de fréquence positive, et dans le cas contraire c'est-à-dire pour une énergie négative, nous aurons une fonction d'onde de fréquence négative.

L'intégrale de la transformée de *Fourier* de $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ se fait dans le plan complexe p_0 donné par la figure suivante :

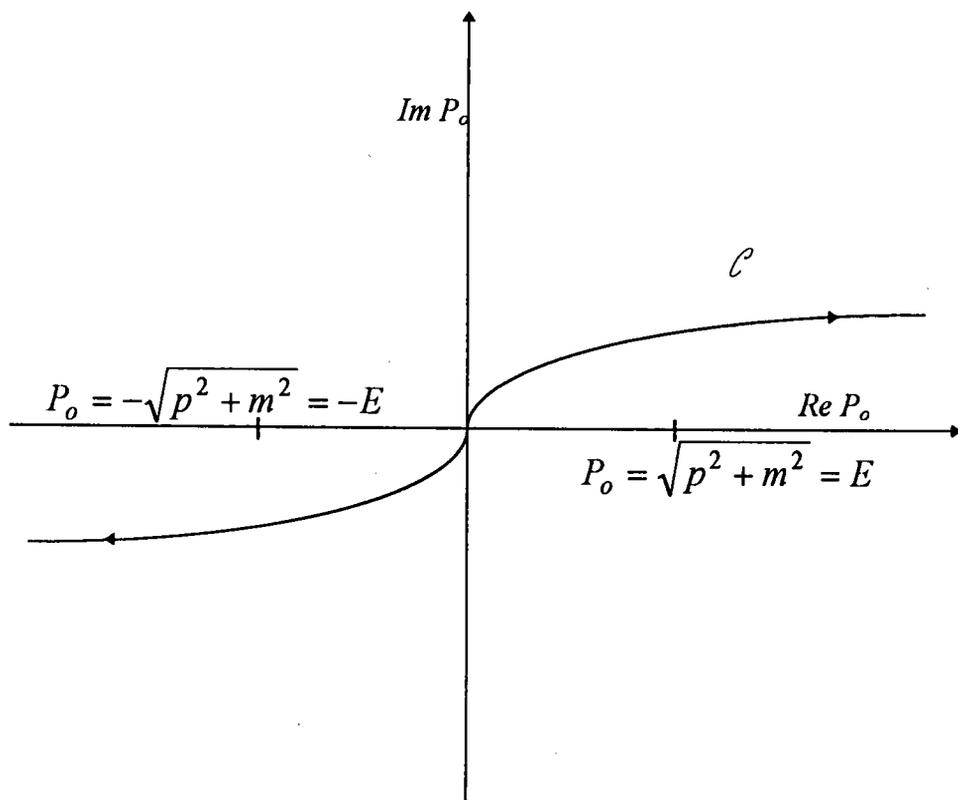


Figure A.1 : Schéma représentant l'intégrale de la transformée de *Fourier* du propagateur de *Green* relativiste $\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r})$ dans le plan complexe p_0

Pour $t' > t$, le contour C est fermé dans la partie du plan complexe p_0 contenant seulement le pôle de fréquence positive $p_0 = \sqrt{p^2 + m_0^2} = +E$, En intégrant alors l'expression (A.3) et en remplaçant $\tilde{G}_F^0(p)$ par l'expression (A.4), nous aurons :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r})} \int_C \frac{d p_0}{2\pi} \frac{e^{-i p_0(t' - t)}}{p^2 - m_0^2} (\vec{p} + m_0) \quad (\text{A.6})$$

En utilisant l'expression du gradient $\tilde{\nabla}$ donnée par l'équation (1.60), nous avons :

$$\vec{p} + m_0 = E \gamma_0 - \vec{p} \vec{\gamma} + m_0 \quad (\text{A.7})$$

En substituant la relation (A.7) dans l'équation (A.6) et en intégrant sur le contour C , nous obtenons :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r}) - iE(t' - t)} \frac{E\gamma_0 - \vec{p}\vec{\gamma} + m_0}{2E} \quad (\text{A.8})$$

Ainsi, nous avons obtenu l'équation (A.1) désignant l'expression intégrale du propagateur relativiste pour une particule libre pour $t' > t$.

De même pour $t' < t$, le contour C est fermé dans la partie du plan complexe p_0 contenant seulement le pôle de fréquence négative $p_0 = -\sqrt{p^2 + m_0^2} = -E$, en intégrant l'expression (A.3) et en suivant les mêmes étapes de calcul que pour $t' > t$, nous trouvons aussi :

$$\tilde{G}_F^0(\vec{r}' - \vec{r}) = -i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} e^{i\vec{p}(\vec{r}' - \vec{r}) + iE(t' - t)} \frac{-E\gamma_0 - \vec{p}\vec{\gamma} + m_0}{2E} \quad (\text{A.9})$$

Nous avons donc aussi retrouvé l'équation (A.2) donnant la forme intégrale du propagateur relativiste pour une particule libre pour $t' < t$.

Annexe B

B1 Calcul de M_1

M_1 est définie par :

$$M_1 = \langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid \frac{z - z_e}{r_1} \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B.1})$$

Du fait que cet élément de matrice n'est pas couplé la relation (B.1) devient :

$$M_1 = \langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \mid \frac{z - z_e}{r_1} \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B.2})$$

Du fait que $1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2)$ est normé, nous avons : $\langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle = 1$, dans ce cas l'expression de M_1 devient :

$$M_1 = \langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \mid \frac{z - z_e}{r_1} \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{B.3})$$

Nous définissons les constantes suivantes, que l'on utilisera dans toute la partie des annexes.

$$\Xi_e = \sqrt{\frac{1 - \varepsilon_e}{1 + \varepsilon_e}} \quad \text{et} \quad \Xi = \sqrt{\frac{1 - \varepsilon}{1 + \varepsilon}} \quad (\text{B.4-a})$$

$$A_i = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{E_i + E_0}{2E_i}} \quad A_s = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{E_s + E_0}{2E_s}} \quad \text{et} \quad A_e = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sqrt{\frac{E_e + E_0}{2E_e}} \quad (\text{B.4-b})$$

En remplaçant les fonctions d'onde par leurs expressions la relation (B.3) devient :

$$M_1 = \int \left[\begin{array}{ccc} Y_0^{0*}(\Omega_1) & 0 & -\frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^{0*}(\Omega_1) \\ & & -i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{1*}(\Omega_1) \end{array} \right] g(z_e, r_1) \frac{z-z_e}{r_1} \left[\begin{array}{c} Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^1(\Omega_1) \end{array} \right] g(z_e, r_1) d\bar{r}_1 \quad (\text{B.5})$$

En effectuant le produit des deux spineurs dans l'expression de M_1 , la relation (B.5) devient :

$$M_1 = \int g^2(z_e, r_1) \frac{z-z_e}{r_1} r_1^2 dr_1 \left[\int Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) d\Omega_1 + \frac{1}{3} \Xi_e^2 \int Y_1^{0*}(\Omega_1) Y_1^0(\Omega_1) d\Omega_1 + \frac{2}{3} \Xi_e^2 \int Y_1^{1*}(\Omega_1) Y_1^1(\Omega_1) d\Omega_1 \right] \quad (\text{B.6})$$

En utilisant la condition de normalisation des harmoniques sphériques, M_1 devient :

$$M_1 = \int g^2(z_e, r_1) \frac{z-z_e}{r_1} r_1^2 dr_1 [1 + \Xi_e^2] \quad (\text{B.7})$$

En remplaçant la fonction radiale $g(z_e, r_1)$ par son expression nous avons :

$$M_1 = \frac{2}{1 + \Xi_e} N^2(z_e) (z - z_e) \int e^{-2z_e r_1} r_1^{2\gamma_e - 1} dr_1 \quad (\text{B.8})$$

tel que : le paramètre γ_e est défini au deuxième chapitre par la relation (2.43-a) en remplaçant la charge z par la charge effective z_e .

En utilisant la forme intégrale suivante (voir ref 1 et 49) :

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^{\beta-1} dr = \frac{\Gamma(\beta)}{(\alpha)^\beta} \quad (\text{B.9-a})$$

nous obtenons finalement :

$$M_1 = 2z_e (z - z_e) \frac{\Gamma(2\gamma_e)}{\Gamma(2\gamma_e + 1)} \quad (\text{B.9-b})$$

Du fait que la fonction gamma possède la propriété suivante :

$$\Gamma(x + 1) = x \Gamma(x) \quad (\text{B.10})$$

Nous trouvons finalement que M_1 est donnée par :

$$M_1 = \frac{2z_e (z - z_e)}{2\gamma_e} \quad (\text{B.11})$$

B2 Calcul de M_2

M_2 est définie par :

$$M_2 = \langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid \frac{1}{r_{12}} \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B.12})$$

En premier lieu nous remplaçons la fonction $1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1)$ par sa valeur pour obtenir :

$$\langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid \int \left[\begin{array}{ccc} Y_0^{0*}(\Omega_1) & 0 & -\frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^{0*}(\Omega_1) \\ 0 & & -i\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{1*}(\Omega_1) \end{array} \right] \frac{1}{r_{12}} \left[\begin{array}{c} Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ i\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^1(\Omega_1) \end{array} \right] g^2(z_e, r_1) d\vec{r}_1 \mid 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B.13})$$

En effectuant le produit nous aurons l'expression suivante :

$$M_2 = \langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid \int g^2(z_e, r_1) \frac{1}{r_{12}} Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) d\vec{r}_1 + \frac{1}{3} \Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) \frac{1}{r_{12}} Y_1^{0*}(\Omega_1) Y_1^0(\Omega_1) d\vec{r}_1 + \frac{2}{3} \Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) \frac{1}{r_{12}} Y_1^{1*}(\Omega_1) Y_1^1(\Omega_1) d\vec{r}_1 \mid 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B.14})$$

Pour simplification nous posons :

$$A = \int g^2(z_e, r_1) \frac{1}{r_{12}} Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) d\vec{r}_1 \quad (\text{B.15})$$

$$B = \frac{1}{3} \Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) \frac{1}{r_{12}} Y_1^{0*}(\Omega_1) Y_1^0(\Omega_1) d\vec{r}_1 \quad (\text{B.16})$$

$$C = \frac{2}{3} \Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) \frac{1}{r_{12}} Y_1^{1*}(\Omega_1) Y_1^1(\Omega_1) d\vec{r}_1 \quad (\text{B.17})$$

De ce fait la relation (B.14) devient :

$$M_2 = \langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \mid A + B + C \mid 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{B.18})$$

En remplaçant la fonction $1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2)$ par son expression nous obtenons :

$$M_2 = \int \left[\begin{array}{cccc} 0 & -Y_0^{0*}(\Omega_2) & -i\sqrt{\frac{2}{3}}\Xi_e Y_1^{-1*}(\Omega_2) & -\frac{i}{\sqrt{3}}\Xi_e Y_1^{0*}(\Omega_2) \end{array} \right] (A+B+C) \left[\begin{array}{c} 0 \\ -Y_0^0(\Omega_2) \\ i\sqrt{\frac{2}{3}}\Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_2) \\ \frac{i}{\sqrt{3}}\Xi_e Y_1^0(\Omega_2) \end{array} \right] g^2(z_e, r_2) d\bar{r}_2 \quad (\text{B.19})$$

En effectuant le produit des deux fonctions d'onde atomiques la relation (B.19) devient :

$$M_2 = I_1 + I_2 + I_3 \quad (\text{B.20})$$

Avec les quantités I_1, I_2, I_3 désignent les formes intégrales suivantes :

$$I_1 = \int Y_0^{0*}(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) (A+B+C) g^2(z_e, r_2) d\bar{r}_2 \quad (\text{B.21})$$

$$I_2 = \frac{1}{3}\Xi_e^2 \int Y_1^{0*}(\Omega_2) Y_1^0(\Omega_2) (A+B+C) g^2(z_e, r_2) d\bar{r}_2 \quad (\text{B.22})$$

$$I_3 = \frac{2}{3}\Xi_e^2 \int Y_1^{-1*}(\Omega_2) Y_1^{-1}(\Omega_2) (A+B+C) g^2(z_e, r_2) d\bar{r}_2 \quad (\text{B.23})$$

Maintenant en remplaçant les quantités intégrales A, B et C par les relations (B.15), (B.16) et (B.17); les formes intégrales I_1, I_2 et I_3 se décomposent de la manière suivante :

$$I_1 = J_1 + J_2 + J_3 \quad (\text{B.24})$$

avec J_1, J_2 et J_3 désignent les formes intégrales suivantes :

$$J_1 = \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) Y_0^{0*}(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.25})$$

$$J_2 = \frac{1}{3}\Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_0^{0*}(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) Y_1^{0*}(\Omega_1) Y_1^0(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.26})$$

$$J_3 = \frac{2}{3}\Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_0^{0*}(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) Y_1^{1*}(\Omega_1) Y_1^1(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.27})$$

$$\text{De même pour } I_2 = J_4 + J_5 + J_6 \quad (\text{B.28})$$

Et on définit les quantités J_4, J_5 et J_6 par les formes intégrales suivantes :

$$J_4 = \frac{1}{3} \Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_1^{0*}(\Omega_2) Y_1^0(\Omega_2) Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.29})$$

$$J_5 = \frac{1}{9} \Xi_e^4 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_1^{0*}(\Omega_2) Y_1^0(\Omega_2) Y_1^{0*}(\Omega_1) Y_1^0(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.30})$$

$$J_6 = \frac{2}{9} \Xi_e^4 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_1^{0*}(\Omega_2) Y_1^0(\Omega_2) Y_1^{1*}(\Omega_1) Y_1^1(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.31})$$

$$\text{Finalement } I_3 = J_7 + J_8 + J_9 \quad (\text{B.32})$$

Et nous définissons J_7, J_8 et J_9 par les équations suivantes :

$$J_7 = \frac{2}{3} \Xi_e^2 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_1^{-1*}(\Omega_2) Y_1^{-1}(\Omega_2) Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.33})$$

$$J_8 = \frac{2}{9} \Xi_e^4 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_1^{-1*}(\Omega_2) Y_1^{-1}(\Omega_2) Y_1^{0*}(\Omega_1) Y_1^0(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.34})$$

$$J_9 = \frac{4}{9} \Xi_e^4 \int g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_1^{-1*}(\Omega_2) Y_1^{-1}(\Omega_2) Y_1^{1*}(\Omega_1) Y_1^1(\Omega_1) \frac{1}{r_{12}} d\bar{r}_1 d\bar{r}_2 \quad (\text{B.35})$$

Pour calculer les intégrales J_i nous décomposons le potentiel $\frac{1}{r_{12}}$ selon la forme harmonique sphérique suivante :

$$\frac{1}{r_{12}} = 4\pi \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \frac{1}{(2l+1)} Y_l^m(\Omega_1) Y_l^{m*}(\Omega_2) \quad (\text{B.36})$$

En insérant la relation (B.36) dans l'expression de J_i nous obtenons :

$$J_i = 4\pi \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \int d\bar{r}_1 \int d\bar{r}_2 g^2(z_e, r_1) g^2(z_e, r_2) Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) Y_0^{0*}(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^m(\Omega_1) Y_l^{m*}(\Omega_2) \frac{1}{(2l+1)} \quad (\text{B.37})$$

En remplaçant les fonctions radiales $g^2(z_e, r_1)$ et $g^2(z_e, r_2)$ par leurs expressions. En remarque que seul les termes nuls de l et de m qui contribue dans cette sommation, la relation (B.37) devient :

$$J_1 = 4\pi N^4(z_e) \int e^{-2z_e r_1} r_1^{2\gamma_e} dr_1 \int e^{-2z_e r_2} \frac{r_2^{2\gamma_e}}{r_2} dr_2 \int Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) d\Omega_1$$

$$\int Y_0^{0*}(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) d\Omega_2$$

(B.38)

En utilisant les règles de calcul des coefficients de *Clebsch-Gordan* nous aurons :

$$J_1 = N^4(z_e) \left[\int r_1^{2\gamma_e} e^{-2z_e r_1} dr_1 \left[\int_0^{r_1} dr_2 e^{-2z_e r_2} \frac{r_2^{2\gamma_e}}{r_1} + \int_{r_1}^{+\infty} dr_2 e^{-2z_e r_2} \frac{r_2^{2\gamma_e}}{r_2} \right] \right]$$

(B.39-a)

En utilisant les deux formes intégrales suivantes (voir ref 1 et 49) :

$$\int_0^a r^{\alpha-1} e^{-\beta r} dr = \beta^{-\alpha} \tilde{\gamma}(\alpha, \beta a)$$

(B.39-b)

$$\int_a^{+\infty} r^{\alpha-1} e^{-\beta r} dr = \beta^{-\alpha} \Gamma(\alpha, \beta a)$$

(B.39-c)

$\tilde{\gamma}(a, x)$ et $\Gamma(a, x)$ désignent la fonction gamma incomplète (voir ref 1 et 49)

nous obtenons alors :

$$J_1 = N^4(z_e) \left[\int r_1^{2\gamma_e} e^{-2z_e r_1} dr_1 \left[\frac{1}{r_1} (2z_e)^{-(2\gamma_e+1)} \tilde{\gamma}(2\gamma_e+1, 2z_e r_1) + (2z_e)^{-2\gamma_e} \Gamma(2\gamma_e, 2z_e r_1) \right] \right]$$

(B.40)

En séparant cette forme intégrale nous obtenons l'expression suivante : (voir ref 1 et 49)

$$J_1 = N^4(z_e) \left[\begin{aligned} & (2z_e)^{-(2\gamma_e+1)} \int_0^{+\infty} r_1^{2\gamma_e-1} e^{-2z_e r_1} \tilde{\gamma}(2\gamma_e+1, 2z_e r_1) dr_1 + \\ & (2z_e)^{-2\gamma_e} \int_0^{+\infty} r_1^{2\gamma_e} e^{-2z_e r_1} \Gamma(2\gamma_e, 2z_e r_1) dr_1 \end{aligned} \right]$$

(B.41)

En utilisant les deux formes intégrales de la fonction incomplète gamma

$$J_1 = \frac{N^4(z_e)}{2} \left[\frac{\Gamma(4\gamma_e+1)}{(2\gamma_e+1)(4z_e)^{4\gamma_e+1}} {}_2F_1(1, 4\gamma_e+1, 2\gamma_e+2, 1/2) \right]$$

(B.42)

En remplaçant la constante $N(z_e)$ par son expression nous obtenons finalement :

$$J_1 = (2z_e)^{4\gamma_e+2} \left[\frac{1+\varepsilon_e}{2\Gamma(2\gamma_e+1)} \right]^2 \frac{1}{2} \frac{\Gamma(4\gamma_e+1)}{(2\gamma_e+1)(4z_e)^{4\gamma_e+1}} {}_2F_1(1, 4\gamma_e+1, 2\gamma_e+2, 1/2) \quad (\text{B.43})$$

Pour le calcul de la forme intégrale J_2 nous suivons les mêmes étapes que pour J_1 et nous obtenons l'expression suivante :

$$J_2 = \frac{1-\varepsilon_e}{3} \frac{1}{1+\varepsilon_e} N^4(z_e) 4\pi \int e^{-2z_1 r_1} r_1^{2\gamma_e} dr_1 \int e^{-2z_2 r_2} \frac{r_2^{2\gamma_e}}{r_2} dr_2 \int Y_0^{0*}(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) Y_0^0(\Omega_1) d\Omega_1 \int Y_1^{0*}(\Omega_2) Y_1^0(\Omega_2) Y_0^0(\Omega_2) d\Omega_2 \quad (\text{B.44})$$

En utilisant les règles de calcul des coefficients de *Clebsch-Gordan* nous trouvons

$$J_2 = \frac{2}{3} \frac{1}{4} (2z_e)^{4\gamma_e+2} \left[\frac{1-\varepsilon_e}{\Gamma(2\gamma_e+1)} \right] \left[\frac{1+\varepsilon_e}{\Gamma(2\gamma_e+1)} \right] \left[\frac{\Gamma(4\gamma_e+1)}{(2\gamma_e+1)(4z_e)^{4\gamma_e+1}} \right] {}_2F_1(1, 4\gamma_e+1, 2\gamma_e+2, 1/2) \quad (\text{B.45})$$

D'après le calcul de ces deux termes nous précisons que la procédure de calcul est la même pour toutes les formes intégrales J_i et le résultat est de la forme suivante :

$$J_i = C_i(z_e, \varepsilon_e, \gamma_e) {}_2F_1(1, 4\gamma_e+1, 2\gamma_e+2, 1/2) \quad (\text{B.46})$$

où $C_i(z_e, \varepsilon_e, \gamma_e)$ est une constante de calcul.

Maintenant la dernière étape qui reste est de sommer tous les termes J_i pour trouver l'expression finale de M_2 qui s'écrit comme suit :

$$M_2 = 2z_e \frac{1}{2^{4\gamma_e}} \frac{\Gamma(4\gamma_e+1)}{[\Gamma(2\gamma_e+1)]^2} {}_2F_1(1, 4\gamma_e+1, 2\gamma_e+2, 1/2) \quad (\text{B.47})$$

Annexe C

C1 Construction des fonctions d'onde finales

En partant de toutes les combinaisons possibles de spin du système des trois électrons, nous pouvons définir les différents états de spin suivants :

$$\phi_{1f}^- = \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \quad (C.1)$$

$$\phi_{2f}^- = \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \quad (C.2)$$

$$\phi_{3f}^- = \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \quad (C.3)$$

$$\phi_{4f}^- = \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \quad (C.4)$$

$$\phi_{5f}^- = \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \quad (C.5)$$

$$\phi_{6f}^- = \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \quad (C.6)$$

$$\phi_{7f}^- = \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \quad (C.7)$$

$$\phi_{8f}^- = \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \quad (C.8)$$

Comme toutes ces fonctions d'onde ne sont pas des vecteurs propres de l'opérateur \hat{S}^2 , nous allons construire des fonctions d'onde qui s'écrivent comme combinaisons de ces dernières afin d'exiger cette condition. Pour cela nous considérons les deux relations suivantes :

$$\hat{S}^2 | S, M_S \rangle = S(S+1) | S, M_S \rangle \quad (C.9)$$

$$\hat{S}_z | S, M_S \rangle = M_S | S, M_S \rangle \quad (C.10)$$

Nous rappelons aussi la relation suivante pour l'opérateur \hat{S}^2 :

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_z + \hat{S}_z^2 \quad (C.11)$$

$$\text{avec } \hat{S}_\pm | S, M_s \rangle = \sqrt{S(S+1) - M_s(M_s \pm 1)} | S, M_s \pm 1 \rangle \quad (\text{C.12})$$

En appliquant l'opérateur \hat{S}^2 sur la fonction d'onde ϕ_{1f}^- nous aurons :

$$\hat{S}^2 \phi_{1f}^- = \hat{S}_- \hat{S}_+ \phi_{1f}^- + \hat{S}_z \phi_{1f}^- + \hat{S}_z^2 \phi_{1f}^- \quad (\text{C.13})$$

En appliquant les relations (C.10) et (C.12) nous obtenons :

$$\hat{S}^2 \phi_{1f}^- = 0 + \frac{3}{2} \phi_{1f}^- + \frac{9}{4} \phi_{1f}^- \quad (\text{C.14})$$

$$\text{donc } \hat{S}^2 \phi_{1f}^- = \frac{15}{4} \phi_{1f}^- = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) \phi_{1f}^- \quad (\text{C.15})$$

Nous remarquons que ϕ_{1f}^- est une fonction propre de l'opérateur \hat{S}^2 pour la valeur propre $S = \frac{3}{2}$; donc la fonction ϕ_{1f}^- respecte la condition (C.9).

Le même calcul montre que nous avons également ϕ_{2f}^- est un état propre de \hat{S}^2 avec la valeur propre $S = \frac{3}{2}$.

Pour la fonction ϕ_{3f}^- , nous avons :

$$\hat{S}^2 \phi_{3f}^- = \hat{S}_- \hat{S}_+ \phi_{3f}^- + \hat{S}_z \phi_{3f}^- + \hat{S}_z^2 \phi_{3f}^- \quad (\text{C.16})$$

le même calcul montre que :

$$\hat{S}^2 \phi_{3f}^- = \frac{7}{4} \phi_{3f}^- + \phi_{4f}^- + \phi_{6f}^- \quad (\text{C.17})$$

Il va nous falloir combiner ϕ_{3f}^- , ϕ_{4f}^- et ϕ_{6f}^- pour obtenir une fonction propre de \hat{S}^2 .

De même le calcul de $\hat{S}^2 \phi_{4f}^-$ et de $\hat{S}^2 \phi_{6f}^-$ donne :

$$\hat{S}^2 \phi_{4f}^- = \frac{7}{4} \phi_{4f}^- + \phi_{3f}^- + \phi_{6f}^- \quad (\text{C.18})$$

$$\hat{S}^2 \phi_{6f}^- = \frac{7}{4} \phi_{6f}^- + \phi_{4f}^- + \phi_{3f}^- \quad (\text{C.19})$$

Nous obtenons ainsi la matrice suivante dont nous allons pouvoir calculer les valeurs propres puis les vecteurs propres :

$$\hat{S}^2 \begin{bmatrix} \phi_{3f}^- \\ \phi_{4f}^- \\ \phi_{6f}^- \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 7/4 & 1 & 1 \\ 1 & 7/4 & 1 \\ 1 & 1 & 7/4 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{3f}^- \\ \phi_{4f}^- \\ \phi_{6f}^- \end{bmatrix} \quad (\text{C.20})$$

Les valeurs propres de cette matrice sont $\frac{15}{4}, \frac{3}{4}$ et $\frac{3}{4}$, nous calculons maintenant le vecteur

propre associé à la valeur propre $\frac{15}{4}$ ($S = 3/2$), il est donné par l'équation suivante :

$$\begin{pmatrix} 7/4 & 1 & 1 \\ 1 & 7/4 & 1 \\ 1 & 1 & 7/4 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \frac{15}{4} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \quad (\text{C.21})$$

où a, b et c sont les facteurs recherchés

A partir de l'équation (C.21), nous obtenons le système suivant de trois équations à trois inconnues :

$$\begin{cases} 2a\phi_{3f}^- = b\phi_{4f}^- + c\phi_{6f}^- \\ 2b\phi_{4f}^- = a\phi_{3f}^- + c\phi_{6f}^- \\ 2c\phi_{6f}^- = b\phi_{4f}^- + a\phi_{3f}^- \end{cases} \quad (\text{C.22})$$

d'où $a = b = c$ et en déduit le vecteur propre suivant : $\frac{1}{\sqrt{3}} [\phi_{3f}^- + \phi_{4f}^- + \phi_{6f}^-]$ où $\frac{1}{\sqrt{3}}$ est un facteur de normalisation.

De même le vecteur propre associé à la valeur propre $\frac{3}{4}$ est donné par l'équation suivante :

$$\begin{pmatrix} 7/4 & 1 & 1 \\ 1 & 7/4 & 1 \\ 1 & 1 & 7/4 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \frac{3}{4} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} \quad (\text{C.23})$$

à partir de ce système nous obtenons une unique équation donnée par : $a = -b = -c$ à laquelle nous associons deux vecteurs propres tel que le premier est donné pour :

$$a = 1, b = 1 \text{ et } c = 0 \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{3f}^- - \phi_{4f}^-] \quad (\text{C.24})$$

Le second est donné pour :

$$a = -1, b = -1 \text{ et } c = 2 \quad \frac{1}{\sqrt{6}} [-\phi_{3f}^- - \phi_{4f}^- + 2\phi_{6f}^-] \quad (\text{C.25})$$

En calculant aussi $S^2 \phi_{5f}^-$, $S^2 \phi_{7f}^-$ et $S^2 \phi_{8f}^-$, les résultats sont identiques; ce qui nous donne finalement les huit vecteurs propres suivants désignant les états finaux possibles pour le système à trois particules :

$$\psi_{1f}^- = \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \quad (\text{C.26})$$

$$\psi_{2f}^- = \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \quad (\text{C.27})$$

$$\psi_{3f}^- = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| + \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| + \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \right] \quad (\text{C.28})$$

$$\psi_{4f}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| - \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \right] \quad (\text{C.29})$$

$$\psi_{5f}^- = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[- \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| - \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| + 2 \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \right] \quad (\text{C.30})$$

$$\psi_{6f}^- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| - \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \right] \quad (\text{C.31})$$

$$\psi_{7f}^- = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| - \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| + 2 \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \right] \quad (\text{C.32})$$

$$\psi_{8f}^- = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| + \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| + \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \right] \quad (\text{C.33})$$

C2 Expression des déterminants de Slater en fonction des amplitudes directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$, d'échange $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et de capture $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

Nous commençons par le calcul du déterminant :

$$\left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle,$$

Pour cela nous représentons tous les résultats dans les trois tableaux ci-dessous, où dans la première ligne se trouvent les différentes fonctions d'onde initiales provenant du déterminant de Slater. Le premier chiffre correspond à l'électron incident et ceux entre les crochets aux deux électrons atomiques. Le chiffre avec la barre indique un spin down et celui sans la barre un spin up, et dans la première colonne se trouvent les fonctions d'onde finales où les deux chiffres entre les crochets correspondent respectivement à l'électron diffusé et à l'électron éjecté et le dernier étant l'électron atomique.

ψ_f^- / ψ_i	$1 [2 \bar{3}]$	$-1 [3 \bar{2}]$	$-2 [1 \bar{3}]$	$3 [1 \bar{2}]$	$2 [3 \bar{1}]$	$-3 [2 \bar{1}]$
$[1 2] \bar{3}$	$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$-g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0	0
$-[1 3] \bar{2}$	0	$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$-g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0
$-[2 1] \bar{3}$	$-g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0	0
$[3 1] \bar{2}$	0	$-g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0
$[2 3] \bar{1}$	0	0	0	0	$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	$-g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$
$-[3 2] \bar{1}$	0	0	0	0	$-g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

Tableau C2.1: tableau donnant la contribution du terme $\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) | V | \chi_{1/2}(\vec{k}_o) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \rangle$ en fonction des amplitudes de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

D'après ce tableau nous avons donc le résultat suivant :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{-1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[6 f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - 6 g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \right] = f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \end{aligned} \tag{C.34}$$

Nous calculons maintenant pour le déterminant suivant :

$\left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle$, les résultats sont donnés dans le tableau (C2.2) ci-dessous en adoptant le même principe de notation que le premier tableau :

ψ_j^- / ψ_i	1 [2 $\bar{3}$]	-1 [3 $\bar{2}$]	-2 [1 $\bar{3}$]	3 [1 $\bar{2}$]	2 [3 $\bar{1}$]	-3 [2 $\bar{1}$]
[1 $\bar{2}$] 3	0	$-f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0
-[1 $\bar{3}$] 2	$-f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0	0
-[2 $\bar{1}$] 3	0	0	0	0	$-f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$
[3 $\bar{1}$] 2	0	0	0	0	$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	$-f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$
[2 $\bar{3}$] 1	$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$-f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0	0
-[3 $\bar{2}$] 1	0	$h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$-f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0

Tableau C2.2: tableau donnant la contribution du terme $\left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \left| V \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right\rangle$ en fonction des amplitudes de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

Nous avons finalement :

$$\begin{aligned} & \left\langle \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_1) \chi_{-1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[6 h(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - 6 f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \right] = h(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \end{aligned} \tag{C.35}$$

Annexe C

Calcul pour le déterminant suivant :

$\left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle$, de même que avant les résultats sont regroupés dans le tableau (C2.3) ci-dessous :

ψ_f^- / ψ_i	$1 [2 \bar{3}]$	$-1 [3 \bar{2}]$	$-2 [1 \bar{3}]$	$3 [1 \bar{2}]$	$2 [3 \bar{1}]$	$-3 [2 \bar{1}]$
$[1 \bar{2}] 3$	0	0	0	0	$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	$-h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$
$-[1 \bar{3}] 2$	0	0	0	0	$-h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$
$-[2 \bar{1}] 3$	0	$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$-h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0
$[3 \bar{1}] 2$	$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$-h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0	0
$[2 \bar{3}] 1$	0	$-h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0
$-[3 \bar{2}] 1$	$-h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	$g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$	0	0	0

tableau C2.3: tableau donnant la contribution du terme $\left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle$ en fonction des amplitudes de diffusion $g(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$ et $h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

nous avons alors :

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \left| \chi_{-1/2}(\vec{k}_1) \chi_{1/2}(\vec{k}_2) 1s_{1/2}(z) \right| \left| V \right| \left| \chi_{1/2}(\vec{k}_i) 1s_{1/2}(z_e) 1s_{-1/2}(z_e) \right| \right\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[6 g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - 6 h(\vec{k}_1, \vec{k}_2) \right] = g(\vec{k}_1, \vec{k}_2) - h(\vec{k}_1, \vec{k}_2)
 \end{aligned} \tag{C.36}$$

Annexe D

D1 Calcul des différents éléments de matrice donnant l'expression de l'amplitude de diffusion directe $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$

a- Calcul de $\langle \chi_{1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \mid 1s_{1/2}(z, \vec{r}) \rangle$

En remplaçant l'onde plane relativiste par son expression ainsi que la fonction d'onde atomique, nous obtenons :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \mid 1s_{1/2}(z, \vec{r}) \rangle = A_2 \int \left[\begin{array}{ccc} 1 & 0 & \frac{ck_z}{E + E_0} \frac{c(k_x - ik_y)}{E + E_0} \\ Y_0^0(\theta, \varphi) & & \\ 0 & & \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\theta, \varphi) & & \\ i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^1(\theta, \varphi) & & \end{array} \right] e^{-i\vec{k}\vec{r}} g(z, r) d\vec{r} \quad (D.1)$$

La constante A_2 est définie dans l'annexe B par la relation (B.4-b).

d'après l'expression de l'harmonique sphérique $Y_1^1(\theta_1, \varphi_1)$ nous avons l'apparition d'une intégrale contenant l'angle φ , mais étant donné que l'intégrale $\int_0^{2\pi} e^{i\varphi} d\varphi$ est nulle, nous aurons donc aucune contribution du terme avec la composante contenant $Y_1^1(\theta_1, \varphi_1)$, le reste des termes qui contribuent nous donnent :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \mid 1s_{1/2}(z, \vec{r}) \rangle = A_2 \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} g(z, r) d\vec{r} + \frac{i}{\sqrt{3}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \Xi_e \frac{ck_z}{E + E_0} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}} g(z, r) \cos(\theta) d\vec{r} \right] \quad (D.2)$$

En remplaçant la fonction d'onde radiale $g(z, r)$ par son expression, nous aurons :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}, \vec{r}) | 1s_{1/2}(z, \vec{r}) \rangle = c_2 \left[\int e^{-i\vec{k}\vec{r}-zr} r^{\gamma_e-1} d\vec{r} + i \Xi_e \frac{ck_z}{E+E_0} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}-zr} r^{\gamma_e-1} \cos(\theta) d\vec{r} \right] \quad (D.3)$$

La constante c_2 est donnée par l'expression suivante :

$$c_2 = A_2 \frac{1}{2\sqrt{\pi}} N(z_e) \quad (D.4)$$

Pour simplifier ces expressions nous considérons la forme intégrale définie par :

$$I(\vec{q}, \alpha, \beta, n) = \int r^\beta e^{-i\vec{q}\vec{r}-\alpha r} (\cos(\theta))^n d\vec{r} \quad (D.5)$$

intégrale que nous calculons par la suite en détail dans l'annexe E.

Donc en utilisant cette intégrale la relation (D.3) se ramène à la relation suivante :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}, \vec{r}) | 1s_{1/2}(z, \vec{r}) \rangle = c_2 \left[I(\vec{k}, z, \gamma_e - 1, 0) + c_3 I(\vec{k}, z, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (D.6)$$

La constante c_3 est donnée par :

$$c_3 = i \Xi_e \frac{ck_z}{E+E_0} \quad (D.7)$$

b- Calcul de $\langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle$

Pour calculer ce produit scalaire, nous remplaçons les deux états $1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2)$ et $1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2)$ par leurs expressions de *Dirac*, nous écrivons alors :

$$\langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle = \int \begin{bmatrix} 0 & -Y_0^{0*}(\Omega_2) & -i\sqrt{\frac{2}{3}}\Xi Y_1^{-1*}(\Omega_2) & -\frac{i}{\sqrt{3}}\Xi Y_1^{0*}(\Omega_2) \\ 0 & -Y_0^0(\Omega_2) & i\sqrt{\frac{2}{3}}\Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_2) & \frac{i}{\sqrt{3}}\Xi_e Y_1^0(\Omega_2) \end{bmatrix} g(z, r_2) g(z_e, r_2) r_2^2 dr_2 \quad (D.8)$$

En effectuant le produit de ces deux spineurs, nous obtenons le résultats suivant :

$$\langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle = [1 + \Xi \Xi_e] \int g(z, r_2) g(z_e, r_2) r_2^2 dr_2 \quad (D.9)$$

En remplaçant les fonctions radiales par leurs expressions, nous avons :

$$\langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle = c \int e^{-(z+z_e)r_2} r_2^{\gamma+\gamma_e} dr_2 \quad (D.10)$$

En utilisant la forme intégrale de la fonction gamma définie dans l'annexe B par la relation (B.9-a), nous trouvons finalement :

$$\langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle = c \frac{\Gamma(\gamma + \gamma_e + 1)}{(z + z_e)^{\gamma + \gamma_e + 1}} \quad (D.11)$$

La constante c est donnée par :

$$c = N(z)N(z_e)[1 + \Xi \Xi_e] \quad (D.12)$$

c- Calcul de $\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}) \left| -\frac{z}{r} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}) \rangle$

Nous remplaçons d'une façon similaire les fonctions d'onde par leurs expressions pour obtenir l'expression intégrale suivante :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}) \left| -\frac{z}{r} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}) \rangle = A_1 A_i \int \left[\begin{array}{ccc} 1 & 0 & \frac{c k_{1z}}{E_1 + E_0} \end{array} \right] \left(-\frac{z}{r} \right) \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{c k_{iz}}{E_i + E_0} \end{array} \right] e^{i\vec{k}_1 \vec{r}} e^{-i\vec{k}_i \vec{r}} d\vec{r} \quad (D.13)$$

Les constantes A_i et A_1 sont définies dans l'annexe B par la relation (B.4-b)

En effectuant le produit des deux spineurs nous obtenons :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \left| -\frac{z}{r} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}) \rangle = -z A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{1z} k_{iz}}{(E_1 + E_0)(E_i + E_0)} \right] \int \frac{e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_i) \vec{r}}}{r} d\vec{r} \quad (D.14)$$

En posant le transfert d'impulsion $\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_i$ et en utilisant l'intégrale de *Bethe* donnée par :

$$\int \frac{e^{-i\vec{k} \vec{r}}}{r} d\vec{r} = \frac{4\pi}{k^2} \quad (D.15)$$

nous obtenons finalement que :

$$\langle \chi_1(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \left| -\frac{z}{r_0} \right| \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \rangle = -c_4 \frac{z}{k^2} \quad (D.16)$$

La constante c_4 est donnée par :

$$c_4 = (4\pi) A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{1z} k_{iz}}{(E_1 + E_0)(E_i + E_0)} \right] \quad (D.17)$$

d- Calcul de $\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \mid \frac{1}{r_{01}} \mid \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle$

Nous remplaçons en premier lieu $\chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0)$ et $\chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1)$ par leurs expressions pour obtenir :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \mid A_i A_1 \int \left[\begin{array}{ccc} 1 & 0 & \frac{ck_{1z}}{E_1 + E_0} \\ 0 & \frac{ck_{1z}}{E_1 + E_0} & \frac{c(k_{1x} - ik_{1y})}{E_1 + E_0} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} 1 \\ 0 \\ \frac{ck_{1z}}{E_1 + E_0} \\ 0 \end{array} \right] \frac{1}{r_{01}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} d\vec{r}_0 \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (D.18)$$

En effectuant le produit des deux spineurs, la relation (D.18) devient :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \mid A_i A_1 \left[\int e^{i\vec{k} \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{r_{01}} + \frac{c^2 k_{1z} k_{1z}}{(E_1 + E_0)(E_i + E_0)} \int e^{i\vec{k} \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{r_{01}} \right] \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (D.19)$$

Après simplification de la relation (D.19), nous aurons :

$$\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \mid A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{1z} k_{1z}}{(E_1 + E_0)(E_i + E_0)} \right] \int e^{i\vec{k} \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{r_{01}} \mid 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (D.20)$$

Pour calculer l'intégrale $\int e^{i\vec{k} \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{r_{01}}$ nous considérons le changement suivant : $\vec{r} = \vec{r}_0 - \vec{r}_1$, et

cette intégrale devient :

$$\int e^{i\vec{k}(\vec{r} + \vec{r}_1)} \frac{d\vec{r}}{r} = e^{i\vec{k} \vec{r}_1} \int e^{i\vec{k} \vec{r}} \frac{d\vec{r}}{r} \quad (D.21)$$

Nous remarquons que nous avons ramené cette intégrale à la forme intégrale de *Bethe* connue donnée par la relation (D.15), nous aurons donc :

$$\int e^{i\vec{k} \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{r_{01}} = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k} \vec{r}_1} \quad (D.22)$$

Maintenant en remplaçant encore les fonctions d'onde par leurs expressions, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle = \frac{4\pi}{k^2} A_i A_1 A_2 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \\ \left[\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k})\vec{r}_1} g(z_e) d\vec{r}_1 + \frac{i}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \Xi_e \frac{ck_{2z}}{(E_2 + E_0)} \int e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k})\vec{r}_1} \cos(\theta) g(z_e) d\vec{r}_1 \right] \end{aligned} \quad (D.23)$$

En remplaçant la fonction radiale $g(z_e)$ par sa valeur, la relation (D.23) devient :

$$\frac{c_5}{k^2} \left[\int e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k})\vec{r}_1 - z_e r_1} r_1^{\gamma_e - 1} d\vec{r}_1 + c_3 \int e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k})\vec{r}_1 - z_e r_1} r_1^{\gamma_e - 1} \cos(\theta) d\vec{r}_1 \right] \quad (D.24)$$

et nous trouvons finalement que :

$$\begin{aligned} \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle = \frac{c_5}{k^2} \\ \left[I(\vec{k}_2 - \vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + c_3 I(\vec{k}_2 - \vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \end{aligned} \quad (D.25)$$

Les constantes c_5 et c_3 sont données par :

$$c_5 = 2\sqrt{\pi} A_i A_1 A_2 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] N(z_e) \quad (D.26-a)$$

$$c_3 = i \Xi_e \frac{ck_{2z}}{E_2 + E_0} \quad (D.26-b)$$

$$e\text{- Calcul de } \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle$$

Nous utilisons les mêmes étapes de calcul utilisées pour le calcul de l'élément de matrice avec le potentiel $1/r_{01}$, nous aurons donc :

$$\begin{aligned} \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle &= \langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) | A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \\ &\quad \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \end{aligned} \quad (D.27)$$

A l'aide du remplacement des deux fonctions d'onde atomiques par leurs expressions, la relation (D.27) devient :

$$A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \frac{4\pi}{k^2} N(z) N(z_e) \left[\begin{aligned} &\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{k}\vec{r}_2 - z r_2 - z_2 r_2} r_2^{\gamma + \gamma_e - 2} d\vec{r}_2 + \\ &\Xi \Xi_e \left[\frac{1}{4\pi} \int e^{i\vec{k}\vec{r}_2 - z r_2 - z_2 r_2} r_2^{\gamma + \gamma_e - 2} (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) d\vec{r}_2 \right] \end{aligned} \right] \quad (D.28)$$

Finalement après toutes les simplifications possibles la relation (D.28) devient :

$$A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \frac{1}{k^2} N(z) N(z_e) [1 + \Xi \Xi_e] \left[\int e^{i\vec{k}\vec{r}_2 - z r_2 - z_2 r_2} r_2^{\gamma + \gamma_e - 2} d\vec{r}_2 \right] \quad (D.29)$$

Finalement :

$$\left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle = \frac{c_6}{k^2} I(\vec{k}, z + z_e, \gamma + \gamma_e - 3, 0) \quad (D.30)$$

avec :

$$c_6 = A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] [1 + \Xi \Xi_e] N(z) N(z_e) \quad (D.31)$$

D2 Orthogonalisation de Schmidt pour les états ψ_f et ψ_i

Nous écrivons l'amplitude de diffusion directe donnée par la relation (3.49) dans le chapitre 3 sous la forme suivante :

$$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (D.32)$$

$$\text{où } \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 1s_{1/2}(\vec{r}_1) 1s_{-1/2}(\vec{r}_2) \quad (D.33)$$

$$\text{et } \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(\vec{r}_2) \quad (D.34)$$

Maintenant nous allons orthogonaliser la fonction d'onde représentant l'état final et celle représentant l'état initial, ceci est équivalent à orthogonaliser les fonctions $\varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et $\varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. Nous écrivons alors $\varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sous la forme orthogonale suivante :

$$\left\langle \varphi_{ort}^- \left| = \left\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) - \left\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right| \right. \quad (D.35)$$

Nous commençons par vérifier que : $\left\langle \varphi_{ort}^- \left| \varphi_i \right\rangle = 0$

nous avons :

$$\left\langle \varphi_{ort}^- \left| \varphi_i \right\rangle = \left\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle - \left\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \left\langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \right. \quad (D.36)$$

La condition de normalisation exige que $\left\langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle = 1$, il est clair donc que :

$$\left\langle \varphi_{ort}^- \left| \varphi_i \right\rangle = 0 \quad (D.37)$$

Finalement les deux fonctions d'onde orthogonales représentants respectivement l'état final et l'état initial sont données par :

$$\psi_i^+ = \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (D.38)$$

$$\psi_f^- = \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \varphi_{ort}^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (D.39)$$

En remplaçant $\varphi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ par $\varphi_{ort}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ dans l'équation (D.32) donnant l'amplitude de diffusion $f(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$, nous obtenons :

$$f(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \left\langle \chi_{1/2}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \varphi_{ort}^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \chi_{1/2}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (D.40)$$

Le développement de la relation (D.40) nécessite d'une part l'utilisation des éléments de matrice calculés précédemment, ainsi que l'intégrale de *Bethe* donnée par la relation (D.19), et d'autre part en utilisant le fait que :

$$\left\langle \varphi_{ort}^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -2 \left| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \right. = 0 \quad (D.41)$$

Il est alors facile de ramener la relation (D.40) à la relation suivante :

$$f_{on}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = D \left[\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle - \langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle Z(\vec{k}) \right] \quad (D.42)$$

où D est une constante de calcul que l'on donnera par la suite; et $Z(\vec{k})$ désigne la charge effective donnée par la relation suivante :

$$Z(\vec{k}) = \langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (D.43)$$

En développant cette expression nous obtenons :

$$Z(\vec{k}) = \frac{A}{k^2} \langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (D.44)$$

La constante A est donnée par :

$$A = (4\pi) A_i A_1 \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \quad (D.45)$$

Donc les éléments de matrice qu'il reste à calculer sont, $\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$ et $\langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$.

Nous avons donc :

$$\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \langle \chi_{1/2}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) | 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \langle 1s_{-1/2}(z, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (D.46)$$

En utilisant les résultats du premier paragraphe, nous aurons :

$$\langle \varphi_f^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = C_1 \frac{\Gamma(\gamma + \gamma_e + 1)}{(z + z_e)^{\gamma + \gamma_e + 1}} \left[I(\vec{k}_2, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_2 I(\vec{k}_2, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (D.47)$$

Les constantes C_1 et C_2 sont données par :

$$C_1 = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} N(z) N^2(z_e) A_2 [1 + \Xi \Xi_e] \quad (D.48)$$

$$\text{et } C_2 = i \Xi_e \frac{c k_{2z}}{E_2 + E_0} \quad (D.49)$$

Le deuxième élément de matrice donne :

$$\langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle \quad (D.50)$$

en utilisant la condition de normalisation suivante : $\langle 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) | 1s_{-1/2}(z_e, \vec{r}_2) \rangle = 1$, la relation (D.50) devient :

$$\langle 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | 1s_{1/2}(z_e, \vec{r}_1) \rangle = \int \left[Y_0^{0*}(\Omega_1) \quad 0 \quad \frac{-i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^{0*}(\Omega_1) \quad -i\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{1*}(\Omega_1) \right] e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \begin{bmatrix} Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \\ \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ i\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^1(\Omega_1) \end{bmatrix} g^2(z_e, r_1) d\vec{r}_1 \quad (D.51)$$

En effectuant le produit scalaire des composantes des deux spineurs nous obtenons :

$$\langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \frac{2}{1+\varepsilon_e} N^2(z_e) \frac{\Gamma(2\gamma_e)}{k} \text{Im} \left[\frac{1}{(2z_e - ik)^{2\gamma_e}} \right] \quad (D.52)$$

On trouve le même résultat pour $\langle \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\vec{r}_2} | \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$

Finalement la charge $Z(\vec{k})$ est donnée par :

$$Z(\vec{k}) = \frac{C_3}{k^2} I(\vec{k}, 2z_e, 2\gamma_e - 2, 0) \quad (D.53)$$

La constante C_3 est donnée par :

$$C_3 = \frac{2N^2(z_e)}{(2\pi)^2(1+\varepsilon_e)} \sqrt{\frac{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)}{E_i E_1}} \left[1 + \frac{c^2 k_{iz} k_{1z}}{(E_i + E_0)(E_1 + E_0)} \right] \quad (D.54)$$

La constante D est donnée par :

$$D = C_1 C_3 \frac{\Gamma(\gamma + \gamma_e + 1)}{(z + z_e)^{\gamma + \gamma_e + 1}} \quad (D.55)$$

Nous avons donc calculé tous les termes figurant dans l'expression de $f_{out}(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$.

Annexe E

Calcul de l'intégrale $I(\bar{q}, \alpha, \beta, n)$

Nous remarquons que tous les résultats trouvés sont en fonction des deux formes intégrales suivantes : $I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0)$ et $I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1)$ que nous calculons en détail dans cette annexe.

a- Calcul de $I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0)$

L'expression intégrale $I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0)$ est donnée par :

$$I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0) = \int r^\beta e^{-i\bar{q}r - \alpha r} d\bar{r} \quad (\text{E.1})$$

Nous remplaçons : $\bar{q}\bar{r} = qr \cos(\theta)$ et : $d\bar{r} = r^2 \sin(\theta) dr d\varphi d\theta$ nous obtenons :

$$I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0) = \int r^\beta e^{-iqr \cos(\theta) - \alpha r} r^2 \sin(\theta) dr d\varphi d\theta \quad (\text{E.2})$$

En posant $\sin(\theta) d\theta = d(-\cos(\theta))$ la relation (E.2) devient :

$$\begin{aligned} I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0) &= \int r^\beta e^{-iqr \cos(\theta) - \alpha r} r^2 d(-\cos(\theta)) dr d\varphi \\ &= -2\pi \int_0^{+\infty} r^{\beta+2} e^{-\alpha r} dr \int_1^{-1} e^{iqr \cos(\theta)} d(\cos(\theta)) \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

A l'aide d'une part du changement de variable suivant $x = \cos(\theta)$, et d'autre part d'une intégration par partie de la partie intégrale entre 1 et -1 la relation (E.3) nous donne :

$$I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0) = \frac{4\pi}{q} \text{Im} \left[\int_0^{+\infty} r^{\beta+1} e^{-\alpha r} e^{iqr} dr \right] \quad (\text{E.4})$$

En utilisant la forme intégrale de la fonction gamma donnée dans l'annexe B par la relation (B.9-a), nous trouvons finalement :

$$I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0) = \frac{4\pi}{q} \text{Im} \left[\frac{\Gamma(\beta+2)}{(\alpha - iq)^{\beta+2}} \right] \quad (\text{E.5})$$

b- Calcul de $I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1)$

L'expression intégrale de $I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1)$ est donnée par :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = \int r^\beta e^{-i\bar{q}r - \alpha r} \cos(\theta) d\bar{r} \quad (E.6)$$

les mêmes étapes de calcul que l'intégrale $I_0(\bar{q}, \alpha, \beta, 0)$, c'est-à-dire : en remplaçant

$$\bar{q}\bar{r} = qr \cos(\theta) \text{ et } : d\bar{r} = r^2 \sin(\theta) dr d\varphi d\theta$$

ramène la relation (E.6) à l'expression suivante :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = \int r^\beta e^{-iqr \cos(\theta) - \alpha r} r^2 \cos(\theta) d(-\cos(\theta)) dr d\varphi \quad (E.7)$$

En posant le changement $x = \cos(\theta)$ nous aurons :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = 2\pi \int_0^{+\infty} r^{\beta+2} e^{-\alpha r} dr \int_1^{-1} e^{-iqr x} x dx \quad (E.8)$$

nous faisons une double intégration par partie de la quantité :

$$J = \int_{-1}^{+1} e^{-iqr x} x dx = \left[\frac{e^{iqr x}}{iqr} x \right]_{-1}^{+1} - \int \frac{e^{iqr x}}{iqr} dx \quad (E.9)$$

nous obtenons donc :

$$J = \frac{2 \cos(qr)}{iqr} + \frac{2i \sin(qr)}{q^2 r^2} \quad (E.10)$$

nous remplaçons dans l'expression de $I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1)$ pour obtenir l'expression intégrale suivante :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = 2\pi \int r^{\beta+2} e^{-\alpha r} \left[\frac{2 \cos(qr)}{iqr} + \frac{2i \sin(qr)}{q^2 r^2} \right] \quad (E.11)$$

En remplaçant les expressions de $\cos(qr)$ et $\sin(qr)$ par leurs formes de partie réelle et partie imaginaire la relation (E.11) devient :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = 4\pi \left[\frac{1}{iq} \operatorname{Re} \left[\int_0^{+\infty} r^{\beta+1} e^{-(\alpha-iq)r} dr \right] + \frac{i}{q^2} \operatorname{Im} \left[\int_0^{+\infty} r^\beta e^{-(\alpha-iq)r} dr \right] \right] \quad (E.12)$$

Donc en utilisant toujours la forme intégrale de la fonction gamma donnée par la relation (B.9-a), l'intégrale $I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1)$ devient :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = 4\pi \left[\frac{1}{iq} \operatorname{Re} \left[\frac{\Gamma(\beta+2)}{(\alpha-iq)^{\beta+2}} \right] + \frac{i}{q^2} \operatorname{Im} \left[\frac{\Gamma(\beta+1)}{(\alpha-iq)^{\beta+1}} \right] \right] \quad (\text{E.13})$$

Nous obtenons ainsi la forme finale de l'intégrale $I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1)$ donnée par l'expression suivante :

$$I_1(\bar{q}, \alpha, \beta, 1) = \frac{4\pi i}{q} \left[\operatorname{Re} \left[\frac{\Gamma(\beta+2)}{(\alpha-iq)^{\beta+2}} \right] - \frac{1}{q} \operatorname{Im} \left[\frac{\Gamma(\beta+1)}{(\alpha-iq)^{\beta+1}} \right] \right] \quad (\text{E.14})$$

Annexe F

Expression de l'amplitude de transition T_{fi} en fonction des amplitudes directes $F_i(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et d'échanges $G_i(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

Tous les résultats sont regroupés dans les tableaux ci-dessous. Il est évident de voir que nous avons les mêmes résultats pour les potentiels $B(0, 1)$ et $B(0, 2)$, nous donnons donc dans les tableaux seulement les résultats pour $B(0, 1)$ désignant l'interaction de *Breit* entre l'électron incident et le premier électron atomique de la couche K. Nous signalons que nous adoptons les mêmes notations pour les tableaux utilisées dans l'annexe C.

Pour le déterminant de *Slater* donné par l'équation (C.1), les résultats sont donnés dans le tableau (F.1) ci-dessous :

ψ_f^- / ψ_i	1 [2 $\bar{3}$]	-1 [3 $\bar{2}$]	-2 [1 $\bar{3}$]	2 [3 $\bar{1}$]	3 [1 $\bar{2}$]	-3 [2 $\bar{1}$]
[1 2] 3	0	$-\mathfrak{I}_1(1, s, e)$	0	$G_1(1, s, e)$	0	0
-[1 3] 2	$-\mathfrak{I}_2(1, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(1, s, e)$	0	0	0	0
-[2 1] 3	0	$G_1(1, s, e)$	0	$-\mathfrak{I}_1(1, s, e)$	0	0
[2 3] 1	0	0	$-\mathfrak{I}_2(1, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(1, s, e)$	0	0
[3 1] 2	$G_2(1, s, e)$	$-G_3(1, s, e)$	0	0	0	0
-[3 2] 1	0	0	$G_2(1, s, e)$	$-G_3(1, s, e)$	0	0

Tableau F.1 donnant la contribution de l'état donné par (C.1) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s(z_f, \vec{r}_2) \right| \right\rangle \mathcal{V} \left\| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2 \mathfrak{I}(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2 G(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] = \frac{2}{3} \left[\mathfrak{I}(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (\text{F.1})$$

avec :

$$\mathfrak{I}(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -\mathfrak{I}_1(1, s, e) - \mathfrak{I}_2(1, s, e) + \mathfrak{I}_3(1, s, e) \quad (\text{F.2-a})$$

$$G(1, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -G_1(1, s, e) - G_2(1, s, e) + G_3(1, s, e) \quad (\text{F.2-b})$$

Nous signalons que la relation de *Peterkop* est vérifiée pour chaque amplitude d'échange $G_\mu(1, s, e)$ avec $(\mu = 1, 2, 3)$ et il lui correspond l'amplitude de diffusion directe $F_\mu(1, s, e)$ selon la relation :

$$G_\mu(1, s, e) = F_\mu(1, e, s) \quad (\text{F.3})$$

La matrice **1** désigne la configuration de spin suivante : $\mathbf{1} = \begin{pmatrix} + & + & + \\ + & + & - \end{pmatrix}$

Pour la suite, nous écrivons la fonction d'onde représentant un état de spin down avec une barre, et celle représentant un état de spin up sans la barre.

Pour simplifier l'écriture des équations nous définissons les produits scalaires suivant :

$$L(z_f, z_e) = \left\langle 1s_{\pm 1/2}(z_f, \vec{r}) \left| 1s_{\pm 1/2}(z_e, \vec{r}) \right. \right\rangle \quad (\text{F.4-a})$$

$$L_1(\vec{k}, z) = \left\langle \chi_{+1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \left| 1s_{+1/2}(z, \vec{r}) \right. \right\rangle \quad (\text{F.4-b})$$

$$L_2(\vec{k}, z) = \left\langle \chi_{+1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \left| 1s_{-1/2}(z, \vec{r}) \right. \right\rangle \quad (\text{F.4-c})$$

$$L_3(\vec{k}, z) = \left\langle \chi_{-1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \left| 1s_{+1/2}(z, \vec{r}) \right. \right\rangle \neq L_2(\vec{k}, z) \quad (\text{F.4-d})$$

$$L_4(\vec{k}, z) = \left\langle \chi_{-1/2}(\vec{k}, \vec{r}) \left| 1s_{-1/2}(z, \vec{r}) \right. \right\rangle \neq L_1(\vec{k}, z) \quad (\text{F.4-e})$$

Les expressions des amplitudes $\mathfrak{I}_i(s, e)$ sont données par les équations suivantes :

$$\mathfrak{I}_1(1, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_e, z_f) \quad (\text{F.5-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(1, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_2(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.5-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(1, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_1(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.5-c})$$

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.2), les résultats sont donnés dans le tableau (F.2) ci-dessous :

ψ_f^- / ψ_i	$1 [2 \bar{3}]$	$-1 [3 \bar{2}]$	$-2 [1 \bar{3}]$	$2 [3 \bar{1}]$	$3 [1 \bar{2}]$	$-3 [2 \bar{1}]$
$[\bar{1} \bar{2}] \bar{3}$	$\mathfrak{I}_1(2, s, e)$	0	$-G_1(2, s, e)$	0	0	0
$-\bar{1} \bar{3} \bar{2}$	$-\mathfrak{I}_2(2, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(2, s, e)$	0	0	0	0
$-\bar{2} \bar{1} \bar{3}$	$-G_1(2, s, e)$	0	$\mathfrak{I}_1(2, s, e)$	0	0	0
$[\bar{2} \bar{3}] \bar{1}$	0	0	$-\mathfrak{I}_2(2, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(2, s, e)$	0	0
$[\bar{3} \bar{1}] \bar{2}$	$G_2(2, s, e)$	$-G_3(2, s, e)$	0	0	0	0
$-\bar{3} \bar{2} \bar{1}$	0	0	$G_2(2, s, e)$	$-G_3(2, s, e)$	0	0

Tableau F.2 donnant la contribution de l'état donné par (C.2) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau, nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{\chi}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \bar{1}s(z_f, \vec{r}_2) \right| \mathcal{V} \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2 \mathfrak{I}(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2 G(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] = \frac{2}{3} \left[\mathfrak{I}(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (\text{F.6})$$

$$\mathfrak{I}(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \mathfrak{I}_1(2, s, e) - \mathfrak{I}_2(2, s, e) + \mathfrak{I}_3(2, s, e) \quad (\text{F.7-a})$$

$$G(2, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = G_1(2, s, e) - G_2(2, s, e) + G_3(2, s, e) \quad (\text{F.7-b})$$

et la matrice $\mathbf{2}$ désigne la configuration de spin suivante : $\mathbf{2} = \begin{pmatrix} - & - & - \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(2, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{\chi}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (\text{F.8-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(2, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_4(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.8-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(2, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_3(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.8-c})$$

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.3), les résultats sont donnés dans le tableau (F.3) ci-dessous :

ψ_f^- / ψ_i	1 [2 3]	-1 [3 2]	-2 [1 3]	2 [3 1]	3 [1 2]	-3 [2 1]
[1 2] 3	$\mathfrak{I}_1(3, s, e) + f(s, e)$	0	$-G_1(3, s, e) - g(s, e)$	0	0	0
-[1 3] 2	$-\mathfrak{I}_2(3, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(3, s, e) + f(s, e)$	0	0	$-g(s, e)$	0
-[2 1] 3	$-G_1(3, s, e) - g(s, e)$	0	$\mathfrak{I}_1(3, s, e) + f(s, e)$	0	0	0
[2 3] 1	0	0	$-\mathfrak{I}_2(3, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(3, s, e) + f(s, e)$	0	$-g(s, e)$
[3 1] 2	$G_2(3, s, e)$	$-G_3(3, s, e) - g(s, e)$	0	0	$f(s, e)$	0
-[3 2] 1	0	0	$G_2(3, s, e)$	$-G_3(3, s, e) - g(s, e)$	0	$f(s, e)$

Tableau F.3 donnant la contribution de l'état donné par (C.3) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau, nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \overline{1s}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle = \frac{2}{3} \quad (F.9)$$

$$\left[\mathfrak{I}(\mathfrak{3}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(\mathfrak{3}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 3f(\vec{k}_s, \vec{k}_e) - 3g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right]$$

$$\mathfrak{I}(\mathfrak{3}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = \mathfrak{I}_1(3, s, e) - \mathfrak{I}_2(3, s, e) + \mathfrak{I}_3(3, s, e) + 3f(s, e) \quad (F.10-a)$$

$$G(\mathfrak{3}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = G_1(3, s, e) - G_2(3, s, e) + G_3(3, s, e) - 3g(s, e) \quad (F.10-b)$$

et la matrice $\mathfrak{3}$ désigne la configuration de spin suivante : $\mathfrak{3} = \begin{pmatrix} + & + & - \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(\mathfrak{3}, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (F.11-a)$$

$$\mathfrak{I}_2(\mathfrak{3}, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_2(\vec{k}_e, z_e) \quad (F.11-b)$$

$$\mathfrak{I}_3(\mathfrak{3}, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_1(\vec{k}_e, z_e) \quad (F.11-c)$$

Annexe f

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.4), les résultats sont donnés dans le tableau (F.4) ci-dessous :

ψ_j / ψ_i	1 [2 $\bar{3}$]	-1 [3 $\bar{2}$]	-2 [1 $\bar{3}$]	2 [3 $\bar{1}$]	3 [1 $\bar{2}$]	-3 [2 $\bar{1}$]
[1 $\bar{2}$] 3	0	$-\mathfrak{I}_1(4, s, e)$ $-f(s, e)$	0	$G_1(4, s, e)$	0	0
-[1 $\bar{3}$] 2	$-\mathfrak{I}_2(4, s, e)$ $-f(s, e)$	$\mathfrak{I}_3(4, s, e)$	0	0	0	0
-[2 $\bar{1}$] 3	0	$G_1(4, s, e)$	0	$-\mathfrak{I}_1(4, s, e)$ $-f(s, e)$	0	0
[2 $\bar{3}$] 1	0	0	$-\mathfrak{I}_2(4, s, e)$ $-f(s, e)$	$\mathfrak{I}_3(4, s, e)$	0	0
[3 $\bar{1}$] 2	$G_2(4, s, e)$	$-G_3(4, s, e)$	0	0	0	$-f(s, e)$
-[3 $\bar{2}$] 1	0	0	$G_2(4, s, e)$	$-G_3(4, s, e)$	$-f(s, e)$	0

Tableau F.4 donnant la contribution de l'état donné par (C.4) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau, nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{\chi}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s(z_f, \vec{r}_2) \right| \mathcal{V} \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \bar{1s}(z_e, \vec{r}_2) \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$\left[2\mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 6f(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] = \frac{2}{3} \left[\mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 3f(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (\text{F.12})$$

$$\mathfrak{I}(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -\mathfrak{I}_1(4, s, e) - \mathfrak{I}_2(4, s, e) + \mathfrak{I}_3(4, s, e) \quad (\text{F.13-a})$$

$$G(4, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -G_1(4, s, e) - G_2(4, s, e) + G_3(4, s, e) \quad (\text{F.13-b})$$

et la matrice $\mathbf{4}$ désigne la configuration de spin suivante : $\mathbf{4} = \begin{pmatrix} + & - & + \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(4, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{\chi}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| B(0, 1) \middle| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (\text{F.14-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(4, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \middle| B(0, 1) \middle| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_4(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.14-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(4, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \middle| B(0, 1) \middle| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_3(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.14-c})$$

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.5), les résultats sont donnés dans le tableau (F.5) ci-dessous :

ψ_j^- / ψ_i	1 [2 $\bar{3}$]	-1 [3 $\bar{2}$]	-2 [1 $\bar{3}$]	2 [3 $\bar{1}$]	3 [1 $\bar{2}$]	-3 [2 $\bar{1}$]
[$\bar{1}$ 2] 3	0	$-\mathfrak{I}_1(\mathfrak{S}, s, e)$	0	$G_1(\mathfrak{S}, s, e) + g(s, e)$	0	0
-[$\bar{1}$ 3] 2	$-\mathfrak{I}_2(\mathfrak{S}, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(\mathfrak{S}, s, e)$	0	0	0	$g(s, e)$
-[$\bar{2}$ 1] 3	0	$G_1(\mathfrak{S}, s, e) + g(s, e)$	0	$-\mathfrak{I}_1(\mathfrak{S}, s, e)$	0	0
[$\bar{2}$ 3] 1	0	0	$-\mathfrak{I}_2(\mathfrak{S}, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(\mathfrak{S}, s, e)$	$g(s, e)$	0
[$\bar{3}$ 1] 2	$G_2(\mathfrak{S}, s, e) + g(s, e)$	$-G_3(\mathfrak{S}, s, e)$	0	0	0	0
-[$\bar{3}$ 2] 1	0	0	$G_2(\mathfrak{S}, s, e) + g(s, e)$	$-G_3(\mathfrak{S}, s, e)$	0	0

Tableau F.5 donnant la contribution de l'état donné par (C.5) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau, nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \text{Is}(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \text{Is}(z_e, \vec{r}_1) \overline{\text{Is}}(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2\mathfrak{I}(\mathfrak{S}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2G(\mathfrak{S}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 6g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] = \frac{2}{3} \left[\mathfrak{I}(\mathfrak{S}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(\mathfrak{S}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) + 3g(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (\text{F.15})$$

$$\mathfrak{I}(\mathfrak{S}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -\mathfrak{I}_1(\mathfrak{S}, s, e) - \mathfrak{I}_2(\mathfrak{S}, s, e) + \mathfrak{I}_3(\mathfrak{S}, s, e) \quad (\text{F.16-a})$$

$$G(\mathfrak{S}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -G_1(\mathfrak{S}, s, e) - G_2(\mathfrak{S}, s, e) + G_3(\mathfrak{S}, s, e) \quad (\text{F.16-b})$$

et la matrice \mathfrak{S} désigne la configuration de spin suivante : $\mathfrak{S} = \begin{pmatrix} - & + & + \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(\mathfrak{S}, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \overline{\chi}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \text{Is}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (\text{F.17-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(\mathfrak{S}, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \overline{\text{Is}}(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \text{Is}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_4(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.17-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(\mathfrak{S}, s, e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \overline{\text{Is}}(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(z_e, \vec{r}_0) \overline{\text{Is}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_3(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.17-c})$$

Annexe \mathcal{F}

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.6), les résultats sont donnés dans le tableau (F.6) ci-dessous :

ψ_f^- / ψ_i	1 [2 $\bar{3}$]	-1 [3 $\bar{2}$]	-2 [1 $\bar{3}$]	2 [3 $\bar{1}$]	3 [1 $\bar{2}$]	-3 [2 $\bar{1}$]
[$\bar{1}$ $\bar{2}$] 3	0	$-\mathfrak{I}_1(\mathbf{6}, s, e)$	0	$G_1(\mathbf{6}, s, e)$	0	0
$-\bar{[1 \bar{3}]}$ 2	$-\mathfrak{I}_2(\mathbf{6}, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(\mathbf{6}, s, e)$	0	0	0	0
$-\bar{[2 \bar{1}]}$ 3	0	$G_1(\mathbf{6}, s, e)$	0	$-\mathfrak{I}_1(\mathbf{6}, s, e)$	0	0
[$\bar{2}$ $\bar{3}$] 1	0	0	$-\mathfrak{I}_2(\mathbf{6}, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(\mathbf{6}, s, e)$	0	0
[$\bar{3}$ $\bar{1}$] 2	$G_2(\mathbf{6}, s, e)$	$-G_3(\mathbf{6}, s, e)$	0	0	0	0
$-\bar{[3 \bar{2}]}$ 1	0	0	$G_2(\mathbf{6}, s, e)$	$-G_3(\mathbf{6}, s, e)$	0	0

Tableau F.6 donnant la contribution de l'état donné par (C.6) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau, nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{\chi}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) 1s(z_e, \vec{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2 \mathfrak{I}(\mathbf{6}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2 G(\mathbf{6}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] = \frac{2}{3} \left[\mathfrak{I}(\mathbf{6}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(\mathbf{6}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (\text{F.18})$$

$$\mathfrak{I}(\mathbf{6}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -\mathfrak{I}_1(\mathbf{6}, s, e) - \mathfrak{I}_2(\mathbf{6}, s, e) + \mathfrak{I}_3(\mathbf{6}, s, e) \quad (\text{F.19-a})$$

$$G(\mathbf{6}, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -G_1(\mathbf{6}, s, e) - G_2(\mathbf{6}, s, e) + G_3(\mathbf{6}, s, e) \quad (\text{F.19-b})$$

et la matrice $\mathbf{6}$ désigne la configuration de spin suivante : $\mathbf{6} = \begin{pmatrix} - & - & + \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(\mathbf{6}, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (\text{F.20-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(\mathbf{6}, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_2(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.20-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(\mathbf{6}, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_1(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.20-c})$$

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.7), les résultats sont donnés dans le tableau (F.7) ci-dessous :

ψ_f / ψ_i	1 [2 $\bar{3}$]	-1 [3 $\bar{2}$]	-2 [1 $\bar{3}$]	2 [3 $\bar{1}$]	3 [1 $\bar{2}$]	-3 [2 $\bar{1}$]
[$\bar{1}$ 2] $\bar{3}$	$\mathfrak{I}_1(7, s, e)$	0	$-G_1(7, s, e)$	0	0	0
-[$\bar{1}$ 3] $\bar{2}$	$-\mathfrak{I}_2(7, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(s, e)$	0	0	0	
-[$\bar{2}$ 1] $\bar{3}$	$-G_1(7, s, e)$	0	$\mathfrak{I}_1(7, s, e)$	0	0	0
[$\bar{2}$ 3] $\bar{1}$	0	0	$-\mathfrak{I}_2(7, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(s, e)$	0	0
[$\bar{3}$ 1] $\bar{2}$	$G_2(7, s, e)$	$-G_3(7, s, e)$	0	0	0	0
-[$\bar{3}$ 2] $\bar{1}$	0	0	$G_1^2(s, e)$	$-G_3(7, s, e)$	0	0

Tableau F.7 donnant la contribution de l'état donné par (C.7) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $G(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$, $f(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et $g(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$.

D'après ce tableau nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \bar{1}s(z_f, \vec{r}_2) \right| \left| \mathbf{V} \right| \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_2) \right| \right\rangle = \frac{2}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2 \mathfrak{I}(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - 2 G(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] = \frac{2}{3} \left[\mathfrak{I}(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) - G(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) \right] \quad (\text{F.21})$$

avec :

$$\mathfrak{I}(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -\mathfrak{I}_1(7, s, e) - \mathfrak{I}_2(7, s, e) + \mathfrak{I}_3(7, s, e) \quad (\text{F.22-a})$$

$$G(7, \vec{k}_s, \vec{k}_e) = -G_1(7, s, e) - G_2(7, s, e) + G_3(7, s, e) \quad (\text{F.22-b})$$

et la matrice $\mathbf{7}$ désigne la configuration de spin suivante : $\mathbf{7} = \begin{pmatrix} - & + & - \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(7, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (\text{F.23-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(7, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_2(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.23-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(7, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_f, \vec{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle L_1(\vec{k}_e, z_e) \quad (\text{F.23-c})$$

Annexe f

Pour le déterminant de Slater donné par l'équation (C.8), les résultats sont donnés dans le tableau (F.8) ci-dessous :

ψ_f / ψ_i	$1 [2 \bar{3}]$	$-1 [3 \bar{2}]$	$-2 [1 \bar{3}]$	$2 [3 \bar{1}]$	$3 [1 \bar{2}]$	$-3 [2 \bar{1}]$
$[1 \bar{2}] \bar{3}$	$\mathfrak{I}_1(\mathbf{8}, s, e)$	0	$-G_1(\mathbf{8}, s, e)$	0	0	0
$-[1 \bar{3}] \bar{2}$	$-\mathfrak{I}_2(\mathbf{8}, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(\mathbf{8}, s, e)$	0	0	0	
$-[2 \bar{1}] \bar{3}$	$-G_1(\mathbf{8}, s, e)$	0	$\mathfrak{I}_1(\mathbf{8}, s, e)$	0	0	0
$[2 \bar{3}] \bar{1}$	0	0	$-\mathfrak{I}_2(\mathbf{8}, s, e)$	$\mathfrak{I}_3(\mathbf{8}, s, e)$	0	0
$[3 \bar{1}] \bar{2}$	$G_2(\mathbf{8}, s, e)$	$-G_3(\mathbf{8}, s, e)$	0	0	0	0
$-[3 \bar{2}] \bar{1}$	0	0	$G_2(\mathbf{8}, s, e)$	$-G_3(\mathbf{8}, s, e)$	0	0

Tableau F.8 donnant la contribution de l'état donné par (C.8) en fonction des amplitudes de diffusion $\mathfrak{I}(\bar{k}_s, \bar{k}_e)$, $G(\bar{k}_s, \bar{k}_e)$, $f(\bar{k}_s, \bar{k}_e)$ et $g(\bar{k}_s, \bar{k}_e)$.

D'après ce tableau nous avons le résultat suivant :

$$\left\langle \left| \chi(\bar{k}_s, \bar{r}_0) \bar{\chi}(\bar{k}_e, \bar{r}_1) \bar{1}s(z_f, \bar{r}_2) \right| \left| \mathcal{V} \right| \left| \chi(\bar{k}_i, \bar{r}_0) 1s(z_e, \bar{r}_1) \bar{1}s(z_e, \bar{r}_2) \right| \right\rangle$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[2 \mathfrak{I}(\mathbf{8}, \bar{k}_s, \bar{k}_e) - 2 G(\mathbf{8}, \bar{k}_s, \bar{k}_e) \right] = \frac{1}{3} \left[\mathfrak{I}(\mathbf{8}, \bar{k}_s, \bar{k}_e) - G(\mathbf{8}, \bar{k}_s, \bar{k}_e) \right] \quad (\text{F.24})$$

avec :

$$\mathfrak{I}(\mathbf{8}, \bar{k}_s, \bar{k}_e) = -\mathfrak{I}_1(\mathbf{8}, s, e) - \mathfrak{I}_2(\mathbf{8}, s, e) + \mathfrak{I}_3(\mathbf{8}, s, e) \quad (\text{F.25-a})$$

$$G(\mathbf{8}, \bar{k}_s, \bar{k}_e) = -G_1(\mathbf{8}, s, e) - G_2(\mathbf{8}, s, e) + G_3(\mathbf{8}, s, e) \quad (\text{F.25-b})$$

et la matrice $\mathbf{8}$ désigne la configuration de spin suivante : $\mathbf{8} = \begin{pmatrix} + & - & - \\ + & + & - \end{pmatrix}$

$$\mathfrak{I}_1(\mathbf{8}, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\bar{k}_s, \bar{r}_0) \bar{\chi}(\bar{k}_e, \bar{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\bar{k}_i, \bar{r}_0) \bar{1}s(z_e, \bar{r}_1) \right\rangle L(z_f, z_e) \quad (\text{F.26-a})$$

$$\mathfrak{I}_2(\mathbf{8}, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\bar{k}_s, \bar{r}_0) 1s(z_f, \bar{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\bar{k}_i, \bar{r}_0) 1s(z_e, \bar{r}_1) \right\rangle L_4(\bar{k}_e, z_e) \quad (\text{F.26-b})$$

$$\mathfrak{I}_3(\mathbf{8}, s, e) = \left\langle \bar{\chi}(\bar{k}_s, \bar{r}_0) 1s(z_f, \bar{r}_1) \left| B(0, 1) \right| \chi(\bar{k}_i, \bar{r}_0) \bar{1}s(z_e, \bar{r}_1) \right\rangle L_3(\bar{k}_e, z_e) \quad (\text{F.26-c})$$

Annexe G

Expression des amplitudes de diffusion directe $F_i(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ en fonction de la forme intégrale générale $I(\vec{q}, \alpha, \beta, n)$

Nous allons calculer deux types différents d'éléments de matrice qui s'écrivent de la manière suivante :

$$M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | B(0, 1) | \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_s, \vec{r}_1) \rangle \quad (G.1)$$

$$M_2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) | B(0, 1) | \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_s, \vec{r}_1) \rangle \quad (G.2)$$

F.1 Calcul de l'élément de matrice $M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

L'élément de matrice $M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ est défini par :

$$M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | B(0, 1) | \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_s, \vec{r}_1) \rangle \quad (G.3)$$

D'après l'expression de l'interaction de *Breit*, nous décomposons l'amplitude de diffusion $M_1(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ en deux parties, la première contenant la partie d'interaction magnétique électron-électron, que nous appelons amplitude magnétique et que l'on note par $M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ et la seconde contenant la partie de retard et que l'on note par $M_1^r(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

a- Calcul de l'amplitude magnétique $M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

L'amplitude de diffusion magnétique $M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ est donnée par la relation suivante :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | -\frac{1}{2r_{01}} \bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_1 | \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_s, \vec{r}_1) \rangle \quad (G.4)$$

Notons que le produit des deux matrices de *Dirac* est donné par la sommation suivante :

$$\bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_1 = \sum_{i=x,y,z} \alpha_{0i} \alpha_{1i} \quad (G.5)$$

Pour calculer l'amplitude $M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ nous commençons par appliquer la relation (G.5) sur l'état $|\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle$, nous aurons alors :

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_1 |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle &= \alpha_{0x} \alpha_{1x} |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle + \\ \alpha_{0y} \alpha_{1y} |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle &+ \alpha_{0z} \alpha_{1z} |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle \end{aligned} \quad (G.6)$$

Nous avons donc :

$$\alpha_{0x} \alpha_{1x} |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle = A_i \begin{bmatrix} 0 \\ ck_{iz} \\ E_i + E_0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \begin{bmatrix} \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ i\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.7-a)$$

La constante A_i est définie dans l'annexe B par la relation (B.4-b).

$$\alpha_{0y} \alpha_{1y} |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle = A_i \begin{bmatrix} 0 \\ ick_{iz} \\ E_i + E_0 \\ 0 \\ i \end{bmatrix} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ -\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.7-b)$$

La constante Ξ_e est définie dans l'annexe B par la relation (B.4-a).

$$\alpha_{0z} \alpha_{1z} |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle = A_i \begin{bmatrix} ck_{iz} \\ E_i + E_0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \begin{bmatrix} i\sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ 0 \\ Y_0^0(\Omega_1) \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.7-c)$$

Pour obtenir finalement :

$$\bar{\alpha}_0 \bar{\alpha}_1 |\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}s(z_e, \vec{r}_1)\rangle = |\tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \bar{1}\bar{s}(z_e, \vec{r}_1)\rangle \quad (G.8)$$

Les fonctions d'onde $\tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ et $\bar{1}\bar{s}(z_e, \vec{r}_1)$ sont données par les expressions suivantes :

$$\tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) = A_i \begin{bmatrix} \frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} \\ (1+i) \frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} \\ 1 \\ 1+i \end{bmatrix} e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \quad (\text{G.9-a})$$

$$\overline{1S}(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} \Xi_e \left[\frac{(1+i)}{\sqrt{3}} Y_1^0(\Omega_1) + i \sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^{-1}(\Omega_1) \right] \\ \Xi_e \left[(i-1) \sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^{-1}(\Omega_1) - \frac{i}{\sqrt{3}} Y_1^0(\Omega_1) \right] \\ (i-1) Y_0^0(\Omega_1) \\ Y_0^0(\Omega_1) \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (\text{G.9-b})$$

En utilisant ces relations l'amplitude magnétique devient alors :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \mid -\frac{1}{2r_{01}} \mid \tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1S}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{G.10})$$

Pour effectuer ce calcul nous commençons en premier lieu par remplacer les fonctions d'onde $\chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0)$ et $\tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ par leurs expressions, nous obtenons ainsi :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \mid A_i A_s \int e^{-i\vec{k}_i \vec{r}_0} d\vec{r}_0 \left[1 \quad 0 \quad \frac{ck_{sz}}{E_s + E_0} \quad \frac{c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \right] \begin{bmatrix} \frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} \\ (1+i) \frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} \\ 1 \\ 1+i \end{bmatrix} \left[-\frac{1}{2r_{01}} \right] e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \mid \overline{1S}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{G.11})$$

La constante A_s est définie dans l'annexe B par la relation (B.4-b).

En effectuant le produit des deux spineurs, cette relation devient :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \mid A_i A_s \left[\frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{ck_{sz}}{E_s + E_0} + \frac{(1+i)c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \right] \left[-\frac{1}{2} \right] \int e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \frac{d\vec{r}_0}{r_{01}} \mid \overline{1S}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{G.12})$$

où $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ désigne le vecteur transfert, en utilisant l'intégrale de *Bethe* nous avons :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{A}{k^2} \langle \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \mid e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \mid \overline{1\tilde{s}}(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{G.13})$$

A est une constante de calcul intermédiaire donnée par la relation suivante :

$$A = -\frac{(4\pi)}{2} A_i A_s \left[\frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{ck_{sz}}{E_s + E_0} + \frac{(1+i)c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \right] \quad (\text{G.14})$$

En remplaçant les fonctions d'onde $\chi_{+1/2}(\vec{k}_e, \vec{r}_1)$ et $\overline{1\tilde{s}}_{-1/2}(z_e, \vec{r}_1)$ par leurs expressions nous obtenons la relation suivante :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = B \left[\frac{(1+i)\Xi_e \int e^{-i(\vec{k}_e - \vec{k})\vec{r}_1} \cos(\theta) g(z_e, r_1) d\vec{r}_1 + \left[\frac{(i-1)ck_{ez}}{E_e + E_0} + \frac{c(k_{ex} - ik_{ey})}{E_e + E_0} \right]}{\int e^{-i(\vec{k}_e - \vec{k})\vec{r}_1} g(z_e, r_1) d\vec{r}_1} \right] \quad (\text{G.15})$$

En remplaçant aussi la fonction radiale par sa valeur, nous aurons :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{C_1}{k^2} \left[C_2 \int e^{-i(\vec{k}_e - \vec{k})\vec{r}_1 - z_e r_1} r_1^{\gamma_e - 1} d\vec{r}_1 + C_3 \int e^{-i(\vec{k}_e - \vec{k})\vec{r}_1 - z_e r_1} r_1^{\gamma_e - 1} \cos(\theta) d\vec{r}_1 \right] \quad (\text{G.16})$$

et en utilisant la forme intégrale générale $I(\vec{q}, \alpha, \beta, n)$ définie dans l'annexe E, l'amplitude magnétique s'écrit :

$$M_1^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{C_1}{k^2} \left[C_2 I(\vec{k}_e - \vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\vec{k}_e - \vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (\text{G.17})$$

Les constantes C_1 , C_2 et C_3 sont données par les relations suivantes :

$$C_1 = -\sqrt{\pi} N(z_e) A_i A_s A_e \left[\frac{ck_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{ck_{sz}}{E_s + E_0} + \frac{(1+i)c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \right] \quad (\text{G.18-a})$$

$$C_2 = \frac{(i-1)ck_{ez}}{E_e + E_0} + \frac{c(k_{ex} - ik_{ey})}{E_e + E_0} \quad \text{et} \quad C_3 = (1+i)\Xi_e \quad (\text{G.18-b})$$

b- Calcul de l'amplitude de retard $M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

L'amplitude de diffusion de retard $M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ est donnée par la relation suivante :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| -\frac{1}{2r_{01}} \frac{(\vec{\alpha}_0 \vec{r}_{01})(\vec{\alpha}_1 \vec{r}_{01})}{r_{01}^2} \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.19)$$

D'après la transformation de *Bethe* nous avons :

$$\frac{1}{r_{01}} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2} e^{i\vec{q}\vec{r}_{01}} \quad (G.20)$$

Donc en insérant cette relation dans le potentiel de retard de *Breit*, cette partie d'interaction devient :

$$B^R(0, 1) = -\frac{1}{4\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^2} e^{i\vec{q}\vec{r}_{01}} \frac{(\vec{\alpha}_0 \vec{q})(\vec{\alpha}_1 \vec{q})}{q^2} \quad (G.21)$$

nous avons également la double sommation suivante :

$$(\vec{\alpha}_0 \vec{q})(\vec{\alpha}_1 \vec{q}) = \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} (\alpha_{0i} q_i)(\alpha_{1j} q_j) \quad (G.22)$$

les deux relations (G.21) et (G.22), nous donne :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| -\frac{1}{4\pi^2} \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} \int \frac{d\vec{q}}{q^4} e^{i\vec{q}\vec{r}_{01}} (\alpha_{0i} q_i)(\alpha_{1j} q_j) \right| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.23)$$

En faisant le calcul avec le premier terme de la sommation $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1x} q_x)$, nous commençons par l'appliquer sur l'état $\left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle$, nous obtenons ainsi :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| -\frac{1}{4\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^4} e^{i\vec{q}\vec{r}_{01}} \left| \tilde{\chi}_x(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{1s}_x(z_e, \vec{r}_1) \right. \right. \right\rangle \quad (G.24)$$

Les deux états $\tilde{\chi}_x(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ et $\overline{1s}_x(z_e, \vec{r}_1)$ sont donnés par les deux relations suivantes :

$$\tilde{\chi}_x(\vec{k}_i, \vec{r}_0) = A_i \begin{bmatrix} q_x \\ c k_{iz} \\ E_i + E_0 \\ 0 \\ q_x \end{bmatrix} e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \quad (G.25-a)$$

$$\overline{\mathcal{L}}_x(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} q_x \frac{i}{\sqrt{3}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_e}{1+\varepsilon_e}} Y_1^0(\Omega_1) \\ q_x i \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{1-\varepsilon_e}{1+\varepsilon_e}} Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -q_x Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (\text{G.25-b})$$

Nous obtenons donc la relation suivante :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \langle \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | -\frac{1}{4\pi^2} A_i A_s \frac{c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \iint \frac{d\vec{q}}{q^4} d\vec{r}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}_0} e^{i\vec{q}\vec{r}_0} q_x | \overline{\mathcal{L}}_x(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{G.26})$$

En utilisant l'expression suivante :

$$H(\vec{r}_0) = \iint \frac{d\vec{q}}{q^4} d\vec{r}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}_0} e^{i\vec{q}\vec{r}_0} q_x \quad (\text{G.27})$$

La relation (G.26) devient :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = A \langle \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | H(\vec{r}_0) | \overline{\mathcal{L}}_x(z_e, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{G.28})$$

A est une constante de calcul intermédiaire donnée par :

$$A = -\frac{1}{4\pi^2} A_i A_s \frac{c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \quad (\text{G.29})$$

Nous remplaçons de même les fonctions d'onde $\chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1)$ et $\overline{\mathcal{L}}_x(z_e, \vec{r}_1)$ pour obtenir :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = AA_e \int d\vec{r}_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{ck_{ez}}{E_e + E_0} & \frac{c(k_{ex} - ik_{ey})}{E_e + E_0} \end{bmatrix} H(\vec{r}_0) e^{-i\vec{k}\vec{r}_1} \begin{bmatrix} q_x \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ q_x i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -q_x Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (\text{G.30})$$

En effectuant le produit des deux spineurs, nous aurons :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = B \left[i \Xi_e \int e^{-i\vec{k}\vec{r}_1} H(\vec{r}_0) q_x \cos(\theta) g(z_e, r_1) d\vec{r}_1 - \frac{ck_{ez}}{E_e + E_0} \int e^{-i\vec{k}\vec{r}_1} H(\vec{r}_0) q_x g(z_e, r_1) d\vec{r}_1 \right] \quad (\text{G.31})$$

La constante B est donnée par l'expression suivante :

$$B = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} A_e A \quad (\text{G.32})$$

En substituant $H(\vec{r}_0)$ par la relation (G.27) dans l'expression (G.31), l'amplitude recherchée devient :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = B \left[\begin{aligned} & i \Xi_e \int d\vec{q} d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 g(z_e, r_1) e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{01}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \frac{q_x^2}{q^4} \cos(\theta) - \frac{c k_{ez}}{E_e + E_0} \\ & \int d\vec{q} d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 g(z_e, r_1) e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{01}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \frac{q_x^2}{q^4} \end{aligned} \right] \quad (\text{G.33})$$

Nous définissons la forme intégrale suivante par :

$$J(q) = \int d\vec{q} d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 g(z_e, r_1) e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{01}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \frac{q_x^2}{q^4} \cos(\theta) \quad (\text{G.34})$$

Nous commençons par remplacer la distance interatomique par la forme $|\vec{r}_{01}| = |\vec{r}_0 - \vec{r}_1|$, nous pouvons alors ramener l'expression (G.34) à l'intégrale suivante :

$$J(q) = \int d\vec{r}_1 e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} g(z_e, r_1) \cos(\theta) \int d\vec{r}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_0} \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \frac{q_x^2}{q^4} \quad (\text{G.35})$$

En utilisant la fonction $\delta(\vec{r})$ de Dirac, la deuxième intégrale est donnée par :

$$\delta(\vec{q} + \vec{k}) = \int d\vec{r}_0 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_0} \quad (\text{G.36})$$

En remplaçant par cette relation, l'intégrale $J(q)$ devient :

$$J(q) = \int d\vec{r}_1 e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} g(z_e, r_1) \cos(\theta) \int d\vec{q} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_1} \frac{q_x^2}{q^4} \delta(\vec{q} + \vec{k}) \quad (\text{G.37})$$

D'après une propriété de la fonction $\delta(\vec{r})$ de Dirac l'intégrale $J(q)$ se réduit à :

$$J(\vec{k}) = \int d\vec{r}_1 \cos(\theta) g(z_e, r_1) e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \frac{k_x^2}{k^4} \quad (\text{G.38})$$

finalement en remplaçant dans l'expression de l'amplitude de diffusion $M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ par l'intégrale $J(\vec{k})$, et en utilisant l'expression de la fonction radiale $g(z_e, r_1)$, nous aurons :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = C \frac{k_x^2}{k^4} \left[i \Xi_e N(z_e) \int e^{-i(\vec{k}_e - \vec{k}) \cdot \vec{r}_1 - z_e r_1} r_1^{\gamma_e - 1} \cos(\theta) d\vec{r}_1 - \frac{c k_{ez}}{E_e + E_0} \int e^{-i(\vec{k}_e - \vec{k}) \cdot \vec{r}_1 - z_e r_1} r_1^{\gamma_e - 1} d\vec{r}_1 \right] \quad (\text{G.39})$$

Annexe G

En conclusion, en utilisant le premier terme de la sommation $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1x} q_x)$, nous avons ramené l'amplitude de diffusion de retard à la forme intégrale générale définie avant, qui s'écrit comme suit :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = C_1 \frac{k_x^2}{k^4} \left[C_2 I(\vec{k}_e - \vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\vec{k}_e - \vec{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (\text{G.40})$$

Les constantes C_1 , C_2 et C_3 sont données par les équations suivantes :

$$C_1 = -\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{(4\pi)^2} N(z_e) A_i A_s A_e \frac{c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \quad (\text{G.41-a})$$

$$C_2 = -\frac{ck_{ez}}{E_s + E_0} \quad \text{et} \quad C_3 = i\Xi_e \quad (\text{G.41-b})$$

En appliquant maintenant le deuxième terme de la sommation, $(\alpha_{0y} q_y)(\alpha_{1y} q_y)$ sur l'état

$\left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{\text{Is}}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle$ nous obtenons :

$$M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| -\frac{1}{4\pi^2} \int \frac{d\vec{q}}{q^4} e^{i\vec{q}\vec{r}_0} \left| \tilde{\chi}_y(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \overline{\text{Is}}_y(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \right. \right\rangle \quad (\text{G.42})$$

de sorte que les états $\tilde{\chi}_y(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ et $\overline{\text{Is}}_y(z_e, \vec{r}_1)$ sont données par les relations suivantes :

$$\tilde{\chi}_y(\vec{k}_i, \vec{r}_0) = A_i \begin{bmatrix} 0 \\ i c k_{iz} \\ q_y \frac{E_i + E_0}{E_i + E_0} \\ 0 \\ i q_y \end{bmatrix} e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \quad (\text{G.43-a})$$

$$\overline{\text{Is}}_y(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} q_y \frac{1}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ -q_y \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ i q_y Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (\text{G.43-b})$$

En suivant les mêmes étapes de calcul que pour le premier terme de la sommation, nous obtenons comme résultat pour $M_1^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$:

Annexe G

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = C_1 \frac{k_y^2}{k^4} \left[C_2 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (G.44)$$

Les constantes C_1 , C_2 et C_3 sont données par les relations (G.41-a) et (G.41-b).

Pour le terme $(\alpha_{0z} q_z)(\alpha_{1z} q_z)$, en suivant les mêmes étapes avec les expressions suivantes pour les deux fonctions d'ondes $\tilde{\chi}_z(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1s}_z(z_e, \bar{r}_1)$:

$$\tilde{\chi}_z(\bar{k}_i, \bar{r}_0) = A_i \begin{bmatrix} \frac{q_z c k_{iz}}{E_i + E_0} \\ 0 \\ q_z \\ 0 \end{bmatrix} e^{i \bar{k}_i \bar{r}_0} \quad (G.45-a)$$

$$\overline{1s}_z(z_e, \bar{r}_1) = \begin{bmatrix} q_z i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -q_z \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ 0 \\ q_z Y_0^0(\Omega_1) \end{bmatrix} g(z_e, \bar{r}_1) \quad (G.45-b)$$

nous aurons finalement :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = C_4 \frac{k_z^2}{k^4} I(\bar{k} - \bar{k}_e, z_e, \gamma_e - 1, 0) \quad (G.46)$$

La constante C_4 est donnée par l'expression suivante :

$$C_4 = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} N(z_e) A_i A_s A_e \frac{c(k_{ex} - i k_{ey})}{E_e + E_0} \left[\frac{c k_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{c k_{sz}}{E_s + E_0} \right] \quad (G.47)$$

Pour le terme $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1y} q_y)$, nous utilisons les deux relations (G.25-a) et (G.43-b)

comme fonctions d'onde pour les deux états $\tilde{\chi}_x(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1s}_y(z_e, \bar{r}_1)$ et nous obtenons :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = -i C_1 \frac{k_x k_y}{k^4} \left[C_2 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (G.48)$$

Les constantes C_1 , C_2 et C_3 sont données par les équations (G.41-a) et (G.41-b).

Pour le terme $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1z} q_z)$, en utilisant les deux relations (G.25-a) et (G.45-b) comme fonctions d'onde des deux états $\tilde{\chi}_x(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1s}_z(z_e, \bar{r}_1)$ nous avons :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = C_5 \frac{k_x k_z}{k^4} I(\bar{k} - \bar{k}_e, z_e, \gamma_e - 1, 0) \quad (G.49)$$

La constante C_5 est donnée par :

Annexe G

$$C_5 = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} N(z_e) A_i A_s A_e \frac{c^2 (k_{ex} - i k_{ey})(k_{sx} - i k_{sy})}{(E_e + E_0)(E_s + E_0)} \quad (\text{G.50})$$

Pour $(\alpha_{0y} q_y)(\alpha_{1x} q_x)$, en combinant les deux relations (G.43-a) et (G.25-b) comme fonctions d'onde pour les deux états $\tilde{\chi}_y(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1\tilde{s}}_x(z_e, \bar{r}_1)$ nous obtenons finalement :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = i C_1 \frac{k_x k_y}{k^4} \left[C_2 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (\text{G.51})$$

Les constantes C_1, C_2 et C_3 sont données par les relations (G.41-a) et (G.41-b).

Pour le terme $(\alpha_{0y} q_y)(\alpha_{1z} q_z)$, en utilisant les deux équations (G.43-a) et (G.45-b) comme fonctions d'onde pour les deux états $\tilde{\chi}_y(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1\tilde{s}}_z(z_e, \bar{r}_1)$, nous aurons comme résultat :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = i C_5 \frac{k_y k_z}{k^4} I(\bar{k} - \bar{k}_e, z_e, \gamma_e - 1, 0) \quad (\text{G.52})$$

La constante C_5 est donnée par la relation (G.50).

Pour le terme $(\alpha_{0z} q_z)(\alpha_{1x} q_x)$, les mêmes étapes de calcul en utilisant les relations (G.45-a) et (G.25-b) comme fonctions d'onde pour les états $\tilde{\chi}_z(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1\tilde{s}}_x(z_e, \bar{r}_1)$, nous donnent :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = C_6 \frac{k_z k_x}{k^4} \left[C_2 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (\text{G.53})$$

Les constantes C_2 et C_3 sont données par la relation (G.41-b) et la constante C_6 par

$$C_6 = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} N(z_e) A_i A_s A_e \left[\frac{c k_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{c k_{sz}}{E_s + E_0} \right] \quad (\text{G.54})$$

Pour le terme $(\alpha_{0z} q_z)(\alpha_{1y} q_y)$, en utilisant les relations (G.45-a) et (G.43-b) comme fonctions d'onde pour les deux états $\tilde{\chi}_z(\bar{k}_i, \bar{r}_0)$ et $\overline{1\tilde{s}}_y(z_e, \bar{r}_1)$, nous avons :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = -i C_6 \frac{k_z k_y}{k^4} \left[C_2 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_3 I(\bar{k}_e - \bar{k}, z_e, \gamma_e - 1, 1) \right] \quad (\text{G.55})$$

Les constantes C_2 et C_3 sont données par (F.41-b) et la constante C_6 est donnée par (G.54).
Finalement l'amplitude de diffusion de retard globale est donnée par la relation suivante :

$$M_1^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) = \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} M_{1(i,j)}^R(\bar{k}_s, \bar{k}_e) \quad (\text{G.56})$$

F.2- Calcul de l'élément de matrice $M_2(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

L'élément de matrice $M_2(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ est défini par :

$$M_2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \mid B(0, 1) \mid \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.57)$$

Nous allons suivre les mêmes notations que dans le premier paragraphe.

a- Calcul de l'amplitude magnétique $M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

L'amplitude de diffusion magnétique $M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ est donnée par :

$$M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \mid -\frac{1}{2r_{01}} \vec{\alpha}_0 \vec{\alpha}_1 \mid \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.58)$$

En utilisant le produit des deux matrices de Dirac donné par la relation (G.5), et en suivant les mêmes étapes de calcul que avant, nous avons :

$$M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s(z_f, \vec{r}_1) \mid -\frac{1}{2r_{01}} \mid \tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1\tilde{s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.59)$$

L'état $\tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ est donné par la relation (G.9-a) et l'état $1\tilde{s}(z_e, \vec{r}_1)$ est donné par :

$$1\tilde{s}(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} \Xi_e \left[\frac{i}{\sqrt{3}} Y_1^0(\Omega_1) + (i+1) \sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^{-1}(\Omega_1) \right] \\ \Xi_e \left[\frac{(i-1)}{\sqrt{3}} Y_1^0(\Omega_1) - i \sqrt{\frac{2}{3}} Y_1^{-1}(\Omega_1) \right] \\ Y_0^0(\Omega_1) \\ (i+1) Y_0^0(\Omega_1) \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.60)$$

En faisant le produit des deux fonctions d'onde $\chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0)$ et $\tilde{\chi}(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$ nous obtenons :

$$M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{A}{k^2} \left\langle 1s(z_f, \vec{r}_1) \mid e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \mid 1\tilde{s}(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.61)$$

A est la constante de calcul donnée par la relation (G.14).

En remplaçant les fonctions d'onde $1s(z_f, \vec{r}_1)$ et $1\tilde{s}(z_e, \vec{r}_1)$, et les fonctions radiales par leurs expressions nous obtenons :

$$M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{A}{k^2} N(z_e) N(z_f) \frac{1}{4\pi} i(\Xi_e - \Xi) \int e^{-i\vec{k}\vec{r}_1 - (z_f + z_e)r_1} r_1^{(\gamma + \gamma_e + 1) - 1} \cos(\theta) dr_1 \quad (\text{G.62})$$

Cette relation se ramène à l'expression finale suivante :

$$M_2^m(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{C}{k^2} I(\vec{k}, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 1) \quad (\text{G.63})$$

La constante C est donnée à l'aide de l'équation suivante :

$$C = -\frac{1}{2} A_i A_s \left[\frac{c k_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{c k_{sz}}{E_s + E_0} + \frac{(1+i)c(k_{sx} - i k_{sy})}{E_s + E_0} \right] N(z_f) N(z_e) i(\Xi_e - \Xi) \quad (\text{G.64})$$

b- Calcul de l'amplitude de retard $M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$

L'amplitude de diffusion de retard $M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$ est donnée par :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) |s(z_f, \vec{r}_1) \right| - \frac{1}{2r_{01}} \frac{(\vec{\alpha}_0 \vec{r}_{01})(\vec{\alpha}_1 \vec{r}_{01})}{r_{01}^2} \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) |s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.65)$$

En suivant les mêmes étapes de calcul que précédemment nous obtenons l'équation suivante :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle \chi(\vec{k}_s, \vec{r}_0) |s(z_f, \vec{r}_1) \right| - \frac{1}{4\pi^2} \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} \int \frac{d\vec{q}}{q^4} e^{i\vec{q}\vec{r}_{01}} (\alpha_{0i} q_i) (\alpha_{1j} q_j) \left| \chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0) |s(z_e, \vec{r}_1) \right\rangle \quad (G.66)$$

Nous commençons par le premier terme de la sommation $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1x} q_x)$, en appliquant ce terme sur l'état $|\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$ nous obtenons l'état $|\tilde{\chi}_x(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$ donné par l'équation (G.25-a) et en l'appliquant sur l'état $|s(z_e, \vec{r}_1)\rangle$ nous obtenons la fonction d'onde $|1\tilde{s}_x(z_e, \vec{r}_1)\rangle$ donnée par :

$$1\tilde{s}_x(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} q_x i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{+1}(\Omega_1) \\ q_x \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ 0 \\ q_x Y_0^0(\Omega_1) \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.67)$$

En remplaçant aussi les fonctions d'onde par leurs expressions, nous obtenons :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \left\langle |s(z_f, \vec{r}_1) \right| - \frac{1}{4\pi^2} A_r A_s \frac{c(k_{sx} - ik_{sy})}{E_s + E_0} \iint \frac{d\vec{q}}{q^4} d\vec{r}_0 e^{i\vec{k}\vec{r}_0} e^{i\vec{q}\vec{r}_{01}} q_x |1\tilde{s}_x(z_e, \vec{r}_1)\rangle \quad (G.68)$$

En suivant d'une part les mêmes étapes de calcul que précédemment et en utilisant d'autre part l'orthogonalité des harmoniques sphériques, nous avons :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = 0 \quad (G.69)$$

Pour le terme $(\alpha_{0y} q_y)(\alpha_{1y} q_y)$, en l'appliquant sur les deux états $|\chi(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$ et $|s(z_e, \vec{r}_1)\rangle$, nous obtenons respectivement les deux états $|\tilde{\chi}_y(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$ donné par la relation (F.43-a) et $|1\tilde{s}_y(z_e, \vec{r}_1)\rangle$ donné par la relation suivante :

$$1\tilde{s}_y(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} q_y \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ -q_y \frac{1}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ 0 \\ i q_y Y_0^0(\Omega_1) \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.70)$$

Il est clair de voir que, à cause de l'orthogonalité des harmoniques sphériques, l'amplitude de diffusion pour ce terme est nulle.

Pour le terme $(\alpha_{0z} q_z)(\alpha_{1z} q_z)$, le même raisonnement avec l'état $|\tilde{\chi}_z(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$, donné par la relation (F.46-a) et l'état $|1\tilde{s}_z(z_e, \vec{r}_1)\rangle$ donné par la relation suivante :

$$1\tilde{s}_z(z_e, \vec{r}_1) = \begin{bmatrix} q_z \frac{i}{\sqrt{3}} \Xi_e Y_1^0(\Omega_1) \\ -q_z i \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_e Y_1^{-1}(\Omega_1) \\ q_z Y_0^0(\Omega_1) \\ 0 \end{bmatrix} g(z_e, r_1) \quad (G.71)$$

En suivant les mêmes étapes de calcul que avant nous trouvons le résultat suivant :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = C_1 \frac{k_z^2}{k^4} I(\vec{k}, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 1) \quad (G.72)$$

La constante C_1 est donnée par la relation suivante :

$$C_1 = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} N(z_f) N(z_e) A_i A_s i(\Xi_e - \Xi) \left[\frac{c k_{iz}}{E_i + E_0} + \frac{c k_{sz}}{E_s + E_0} \right] \quad (G.73)$$

Pour le terme $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1y} q_y)$, il est clair de voir que, pour les mêmes raisons qui précède, le résultat est nul pour ce terme.

Pour le terme $(\alpha_{0x} q_x)(\alpha_{1z} q_z)$, en combinant les deux relations (G.25-a) et (G.71) comme fonctions d'onde respectivement pour les deux états $|\tilde{\chi}_x(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$ et $|1\tilde{s}_z(z_e, \vec{r}_1)\rangle$, nous aurons le résultat suivant :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = C_2 \frac{k_x k_z}{k^4} I(\vec{k}, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 1) \quad (G.74)$$

La constante C est donnée par la relation suivante :

$$C_2 = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{4\pi} N(z_f) N(z_e) A_i A_s i(\Xi_e - \Xi) \frac{c(k_{sx} - i k_{sy})}{E_s + E_0} \quad (G.75)$$

Annexe G

Pour le terme $(\alpha_{0y} q_y)(\alpha_{1x} q_x)$, il est clair de voir aussi que, pour les mêmes raisons son résultat est nul.

Pour le terme $(\alpha_{0y} q_y)(\alpha_{1z} q_z)$, en combinant les deux relations (G.43-a) et (G.71) comme fonctions d'onde respectivement pour les deux états $|\tilde{\chi}_y(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\rangle$ et $|1\tilde{s}_z(z_e, \vec{r}_1)\rangle$, nous aurons le résultat suivant :

$$M_2^R(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = i C_2 \frac{k_y k_z}{k^4} I(\vec{k}, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 1) \quad (\text{G.76})$$

La constante C_2 est donnée par la relation (G.75).

Pour les termes $(\alpha_{0z} q_z)(\alpha_{1x} q_x)$ et $(\alpha_{0z} q_z)(\alpha_{1y} q_y)$, il est clair de voir pour les mêmes raisons que précédemment, nous avons également un résultat nul pour ces termes.

Finalement L'amplitude de diffusion de retard globale est donnée par la relation (G.65).

Après avoir calculer ces deux différents types d'éléments de matrice, il est clair que nous avons comme résultat final pour tous les éléments de matrice exposés dans l'annexe F les deux équations suivantes :

$$\langle \chi_{m_{f_0}}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_{m_{f_1}}(\vec{k}_e, \vec{r}_1) | B(0, 1) | \chi_{m_0}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_1}(z_e, \vec{r}_1) \rangle = C_1 I(\vec{k} - \vec{k}_e, z_e, \gamma_e - 1, 0) + C_2 I(\vec{k} - \vec{k}_e, z_e, \gamma_e - 1, 0) \quad (\text{G.77})$$

$$\langle \chi_{m_{f_0}}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) 1s_{m_{f_1}}(z_f, \vec{r}_1) | B(0, 1) | \chi_{m_0}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) 1s_{m_1}(z_e, \vec{r}_1) \rangle = C_1 I(\vec{k}, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 0) + C_2 I(\vec{k}, z_f + z_e, \gamma + \gamma_e + 1, 0) \quad (\text{G.78})$$

Ainsi nous avons le même résultat pour le potentiel (0,2) donnant l'interaction de *Breit* entre l'électron incident et le deuxième électron atomique de la couche K.

Références

Références

- 1- Abramowitz M and Stegun I A, *Handbook of Mathematical Functions*, (New York : Dover, 1972).
- 2- Acheson L K, *Phys. Rev.* **82**, 488, (1951).
- 3- Aitchison I J R, *Relativistic Quantum Mechanics*, (Departement of theoretical physics university of Oxford 1972).
- 4- Amaldi U, Egidi A, Marconero R and Pizella G, *Rev. Sci. Instrum.* **40**, 1001-4, (1969).
- 5- Ancarani L U, Keller S, Ast H, Whelan C T, Walters H R J and Dreizler R M, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 609-623, (1998).
- 6- Anholt R, *Phys. Rev. A.* **19**, 1004, (1979).
- 7- Arthurs A M and Moiseiwitsch B L, *Proc. R. Soc. A.* **247**, 550-556, (1958).
- 8- Ast H, Keller S, Whelan C T, Walters H R J and Dreizler R M, *Phys. Rev. A.* **50**, R1-R5, (1994).
- 9- Ast H, Whelan C T, Keller S, Rasch J, Walters H R J and Dreizler R M, Selected to pics in electron physics, Proc. Peter Farago. Symp. Ed. D M.Campbell H. Klein. proppen (New.York.Plenum 1995).
- 10- Ast H, Keller S, Dreizler R M, Whelan C T, Ancarani L U and Walters H R J, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29**, L585-L590, (1996).
- 11- Bell F, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 287-297, (1989).
- 12- Bertha Swirles, Phd, University of Manchester, Vol. C. L. II A (1935), communicated by D.R Hartree.
- 13- Besch K H, Sauter M and Nakel W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30**, L73-L75, (1997).

Références

- 14- Bethe H A, *Ann. Phys. Lpz.* **5**, 325-400, (1930).
- 15- Bethe H A and Fermi E, *Z. Phys.* **77**, 296-306, (1932).
- 16- Bethe H A and Salpeter E E, *Quantum Mechanics of One and Two Electron Systems*, (First edition, Springer-Verlag, 1957), Berlin-Göttingen-Heidelberg.
- 17- Bjorken J D and Drell S D, *Relativistic Quantum Mechanics*, Mc. Grawhill, (1964).
- 18- Bohr N, *Phil. Mag.* **25**, 10, (1913).
- 19- Bohr N, *Phil. Mag.* **30**, 581, (1915).
- 20- Bonfert J, Graf H and Nakel W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 1423-1434, (1991).
- 21- Born M, *Z. Physik.* **38**, 803, (1926).
- 22- Breit G, *Phys. Rev.* **34**, 553, (1929).
- 23- Breit G, *Phys. Rev.* **36**, 383, (1930).
- 24- Breit G, *Phys. Rev.* **39**, 616-624, (1932).
- 25- Brown G E, *Phil. Mag.* **43**, 467-471, (1952).
- 26- Carse G D and Walker D W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **6**, 2529-2543, (1973).
- 27- Cary Y Yang and Sohrab R, *Phys. Rev. A.* **12**, 362-369, (1975).
- 28- Cavalli A and Avaldi L, *Nuovo. Cimento. D.* **16**, 1-14, (1994).
- 29- Cooper John W and Kolbenstvedt, *Phys. Rev. A.* **5**, 677-687, (1972).
- 30- Dal Cappello C and Le Rouzo H, *Phys. Rev. A.* **43**, 1395-1404, (1991).
- 31- Darwin C G, *Proc. Roy. Soc. Lon, Ser. A.* **118**, 654 (1928).
- 32- Das J N, *Il. Nuovo. Cimento.* **12B**, 197-203, (1972-a).
- 33- Das J N, *Ann. Phys. Lpz.* **28**, 6-14, (1972-b).
- 34- Das J N, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **7**, 923-927, (1974).
- 35- Das J N and Konar A N, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **7**, 2417-2420, (1974-a).
- 36- Das J N and Konar A N, *Nuovo. Cim.* **21A**, 289-296, (1974-b).
- 37- Davidovic D M and Moiseiwitsch B L, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **8**, 947-958, (1975).
- 38- Davidovic D M, Moiseiwitsch B L and Norrington P H, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **11**, 847-864, (1978).
- 39- Dirac P A M, *Proc. R. Soc. London.* **117**, 610, (1926).

Références

- 40- Dreizler R M, Ast H, Keller S, Whelan C T, Ancarani L U and Walters H R J, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30**, L77-L80, (1997).
- 41- Ehrhardt H, Schulz M, Tekaas T and Willmann K, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 89-92, (1969).
- 42- El Messaoudi A, Bouchet J and Joulakian B, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30**, 4623-4631, (1997).
- 43- Fano U, *Phys. Rev.* **102**, 385, (1956).
- 44- Feynmann R P, *Phys. Rev.* **76**, 749-769, (1949).
- 45- Ford G W and Mullin C J, *Phys. Rev.* **110**, 520-525, (1958).
- 46- Fuss I, Mitroy J and Spicer B M, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **15**, 3321-3331, (1982).
- 47- Glassgold A E and Ialongo G, *Phys. Rev.* **175**, 151-159, (1968).
- 48- Goldman S P, *Phys. Rev. A.* **37**, 16-37, (1988).
- 49- Gradshteyn I S and Ryzhik I M, *Table of Integrals Series and Products*, Academic Press, (New York, 1980).
- 50- Grant I P, *Proc. R. Soc. London, Ser. A.* **262**, 555, (1961).
- 51- Grant I P, *Proc. R. London, Ser. A.* **86**, 523, (1965).
- 52- Grant I P, *Adv. Phys.* **19**, 747-811, (1970).
- 53- Heisenberg W, *Z. Naturforsch.* **1**, 608, (1946).
- 54- Hughes A L and McMillan J H, *Res. Rev.* **39**, 585, (1932).
- 55- Ionescu and Eichler J, *Phys. Rev. A.* **48**, 1176-1184, (1993).
- 56- Jakubassa-Amundsen D H, *Z. Phys. D.* **11**, 305-313, (1989).
- 57- Jakubassa-Amundsen D H, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 1297-1305, (1992).
- 58- Jakubassa-Amundsen D H, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 259-273, (1995).
- 59- Jakubassa-Amundsen D H, *Phys. Rev. A.* **53**, 2359-2366, (1996).
- 60- Joulakian B and Dal Cappello C, *Phys. Rev. A.* **47**, 3788-3795, (1993).
- 61- Joulakain B and El Messaoudi A, *Z. Phys. D.* **39**, 85-93, (1997).
- 62- Keller S, Whelan C T, Ast H, Walters H R J and Dreizler R M, *Phys. Rev. A.* **50**, 3865-3877, (1994-a).
- 63- Keller S and Whelan C T, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **27**, L771-L776, (1994-b).
- 64- Keller S, Dreizler R M, Ancarani L U, Walters H R J, Ast H and Whelan C T, *Z. Phys. D.* **37**, 191-196, (1996-a).

Références

- 65- Keller S, Joulakian B, Ast H and Hanssen J, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 2855-2863, (1996-b).
- 66- Keller S, Dreizler R M, Ast H, Whelan C T and Walters H R J, *Phys. Rev. A.* **53**, 2295-2302, (1996-c).
- 67- Kim Y K, *Phys. Rev.* **154**, 17, (1967).
- 68- Komma M, *Nucl. Instrum. Meth.* **154**, 271, (1978).
- 69- Komma M and Nakel W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **12**, 1587, (1979).
- 70- Komma M and Nakel W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **15**, 1433-1441, (1982).
- 71- Komma M and Ruoff H, *Nucl. Instrum. Meth.* **186**, 669, (1981).
- 72- Kull T, Nakel W and Schröter C D, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30**, L815-L818, (1997).
- 73- Landau L et Lifchitz E, *Théorie Quantique Relativiste*, première partie, édition Mir Mouscou, (1972).
- 74- Langmuir J J and Jones T, *Phys. Rev.* **31**, 357, (1928).
- 75- Li-Scholz A, Collé R, Preiss I L and Scholzw, *Phys. Rev. A.* **7**, 1957-1965, (1973).
- 76- Louis K and Acheson J R, *Phys. Rev.* **82**, 488-494, (1951).
- 77- Maler K et al, *Z. Phys. A.* **326**, 527-529, (1987).
- 78- Malli Gwzari and Oreg J, *J. of Chemical. Phys.* **63**, 830-841, (1975).
- 79- Mann J B and Johnson W R, *Phys. Rev. A.* **4**, 41-50, (1971).
- 80- Marht et al, *Z. Phys. A.* **326**, 527-529, (1987).
- 81- Massey H S W and Mohr C B O, *Proc. R. Soc. A.* **140**, 613-636, (1933).
- 82- Mergel E, Geisenhofer E and Nakel W, *Rev. Sci. Instrum.* **62**, 2381, (1991).
- 83- Messiah Albert, *Mécanique quantique*, Tome 2, Dunod, (1964).
- 84- Middleman L M, Ford R L and Hofstadter R, *Phys. Rev. A.* **2**, 1429-1443, (1970).
- 85- Missoni G, Dick C E, Placious R C and Motz J W, *Phys. Rev. A.* **2**, 2309, (1970).
- 86- Moller C, *Z. Phys.* **70**, 786, (1931).
- 87- Moller C, *Ann. Phys. Lpz.* **14**, 531-585, (1932).
- 88- Moiseiwitsch B L, *Adv. At. Mol. Phys.* **16**, 281, (1980).
- 89- Moiseiwitsch B L and Norrington P H, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **12**, L283-L286, (1979).

Références

- 90- Moores D L and Pindzola M S, *Phys. Rev. A.* **41**, 3603, (1990-a).
- 91- Moores D L and Pindzola M S, *Phys. Rev. A.* **42**, 5384, (1990-b).
- 92- Mott N F and Massey H S W, *The Theory of Atomic collisions*, third edition Oxford at the Clarendon press, (1965).
- 93- Pindzola M S and Buie M J, *Phys. Rev. A.* **37**, 3232, (1988).
- 94- Pindzola M S, Moore D L and Griffin D C, *Phys. Rev. A.* **40**, 4941, (1989).
- 95- Pindzola M S, *Phys. Rev. A.* **45**, 4530, (1992).
- 96- Pterkop R K, *Op. Spectr.* **13**, 87-89, (1962).
- 97- Popov Y V and Kuzmina N M, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 1215, (1993).
- 98- Prinz H-Th, Besch K H and Nakel W, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 243-245, (1995).
- 99- Prinz H-Th and Keller S, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29**, L651-L655, (1996).
- 100- Quarles C A and Faulk J D, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 859-863, (1973).
- 101- Rester D H and Dance W E, *Phys. Rev.* **152**, 1, (1966).
- 102- Rose M E, *Relativistic Electron Theory*, John Wiley and Sons. Inc, (1961).
- 103- Rudberg E, *Proc. Roy. Soc. London. A.* **129**, 628, (1930).
- 104- Ruoff H and Nakel W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20**, 2299-2306, (1987).
- 105- Ruoff H, Schüle E, Bonfert J, Graf H and Nakel W, *Rev. Sci. Instrum.* **60**, 17-26, (1989).
- 106- Schiff Leonard I, *Quantum Mechanics*, Mc. Grawhill, third edition, (1968).
- 107- Schröter C D, Prinz H-Th, Keuler N and Nakel W, (*e,2e*) and related Processes ed, Whelan C T, Walters H R J, Lahmam-Bennani A and Ehrhardt H, (Kluwer : Dordrecht, 1993) p 403-408.
- 108- Schröter C D, Bömeke C and Nakel W, *Conf. Report, Energiereiche Atomare Stöße*, (Riezlern, Austria) ed, C Düsterhöft et al, (Darmstadt : G S I 1994) p 38.
- 109- Schulz M, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **6**, 2580-2599, (1973).
- 110- Schüle E and Nakel W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **15**, L639-L641, (1982).
- 111- Stahl A, Bonfert J, Graf H and Nakel W, *Proc. 9th Workshop, Energiereiche Atomare Stöße, Oberstdorf*, (1988).
- 112- Tenzer R and Grün N, *Phys. Rev. Lett. A.* **194**, 300-303, (1994).
- 113- Walker D W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **7**, 97-116, (1974).

Références

- 114- Walker D W, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **8**, 760-769, (1975).
- 115- Walters H R J, Ast H, Whelan C T, Dreizler R M, Graf H, Schröter C D, Bonfert J and Nakel W, *Z. Phys. D.* **23**, 353-357, (1992).
- 116- Watson G N, *Theory of Bessel Functions*, (MacMillan company, New.York) revised edition p.128, (1946).
- 117- Whelan C T, Allan R J, Walters H R J and Zhang X, (*e,2e*) and Related Processes, edited by Whelan C T, Walters H R J, Lahmam-Bennani A and Erhardt H (Kluwer, Dordrecht, 1993).
- 118- Whelan C T, Ast H, Keller S, Walters H R J and Dreizler R M, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L33-L39, (1995).
- 119- Whelan C T, Ast H, Walters H R J, Keller S and Dreizler R M, *Phys. Rev. A.* **53**, 3262-3270, (1996).
- 120- Whelan C T, Walters H R J and Dreizler R M, *J. Phys.* **46**, 241, (1993).
- 121- Yennie D R, Ravenhall D G and Wilson R N, *Phys. Rev.* **95**, 500-512, (1954).
- 122- Zhang X, Whelan C T and Walters H R J, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **23**, L509, (1990).
- 123- Zhang X, Whelan C T, Walters H R J, Allan R J, Bickert P, Hink W and Schönberger S, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 4325, (1992).

Résumé : L'ionisation de la couche K des atomes lourds nécessite des électrons incidents très énergétiques (300, 500 keV). Plusieurs méthodes basées sur la théorie électrodynamique quantique relativiste, dans lesquelles la cible est considérée comme un système monoélectronique ont été proposées dans le passé.

Nous avons développé dans ce travail une procédure perturbative basée sur le développement de *Born* de premier ordre, dans laquelle la présence du deuxième électron de la couche K est prise en compte. Ainsi la fonction d'onde de l'état initial est construite par une combinaison appropriée de déterminants de *Slater* à trois électrons, constitués d'une solution héliumoiide et une onde plane relativiste. A cause de la non conservation du spin total dans la théorie relativiste, nous avons également construit des fonctions d'onde représentant l'état final du système des trois électrons (le diffusé, l'éjecté et l'atomique) en considérant toutes les possibilités du spin total. Nous présentons des résultats concernant la variation de la section efficace différentielle en terme de l'angle d'éjection, de l'ionisation de l'or (**Au**), de l'argent (**Ag**) et du cuivre (**Cu**). Nous avons montré, que l'introduction de la corrélation initiale et de l'interaction électron noyau, améliorent les résultats dans les régions de faibles angles d'éjection et dans les situations symétriques où l'énergie de l'électron diffusé est égale à celle de l'électron éjecté.

Un des avantages de notre procédure est la possibilité d'introduire l'interaction électron-électron relativiste, que nous introduisons sous forme de potentiel de *Breit* qui tient compte des effets de retard et des interactions magnétiques entre l'électron incident et les deux électrons atomiques de la couche K. Nous avons obtenu dans des situations cinématiques variées une nette amélioration de la section efficace différentielle par rapport aux résultats existants, surtout dans la situation symétrique.

Mots clefs : Equation de Dirac - Spin- Simple ionisation des Atomes lourds - (e,2e) relativiste- Ionisation des couches K - Interaction de Breit - Helium relativiste.

Abstract : The relativistic (e,2e) experiments on the inner-shells of high-Z atoms performed in the last years have stimulated theoreticians to provide an acceptable model to explain the ionisation mechanisms by very energetic electrons (300, 500 keV). Many theoretical models based on relativistic propagator and the quantum electrodynamic have been proposed. In this work we have developed a three particle model for the determination of the triple differential cross section of the K-shell ionisation of heavy atoms. We have introduced the effect of the correlation between the two K shell electrons and the effect of the nuclear term in the perturbation potential.

To describe the three electrons in the initial state, we have constructed the three electron wave function by the appropriate combination of Slater determinants constituted by product of the relativistic helium-like wave function and the relativistic plane wave.

As the total spin is not conserved in the relativistic theory, all possible spin states are considered in the description of the final state here we have used all combinations of the products of the three Dirac wave functions describing the scattered, ejected and the remaining bound 1s electron. The results obtained by our procedure for some heavy targets as gold (**Au**), silver (**Ag**) and copper (**Cu**) in coplanar asymmetric and symmetric geometry show the importance of initial bound state electron correlation and the importance of the electron-nucleus interaction.

One of the major advantages of our procedure is the possibility of introducing the relativistic electron-electron interaction, which we have introduced that it gives us in the form of the Breit interaction, which takes account the retardation effect and magnetic interactions between the incoming electron and two K-shell electrons. This improves the results in many kinematic situations specially in the symmetric geometry.