



## 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](mailto: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.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php)

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

6143632



SIM3 99/20

~~990395~~

UNIVERSITÉ DE METZ  
INSTITUT DE PHYSIQUE ELECTRONIQUE ET DE CHIMIE

# THESE DE DOCTORAT

PRESENTEE PAR

**Saïd *EL GHAZOUANI***

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE METZ

**IONISATION DOUBLE DU MAGNESIUM PAR IMPACT  
ELECTRONIQUE : DETERMINATION DES SECTIONS  
EFFICACES DIFFERENTIELLES ET DES SECTION  
EFFICACES TOTALES**

Date de soutenance : 05 Juillet 1999

**Devant la commission d'examen :**

Monsieur P. DEFRANCE, Professeur à l'Université Catholique de Louvain, Belgique

Rapporteur

Monsieur J. LANGLOIS, Professeur à l'Université de Brest

Rapporteur

Monsieur C. LE SECH, Professeur à l'Université de Paris - Sud

Examineur

Monsieur C. DAL CAPPELLO, Professeur à l'Université de METZ

Directeur de thèse

Monsieur P. A. HERVIEUX, Maître de conférences à l'Université de METZ

Codirecteur de thèse

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 304495 7

## **REMERCIEMENTS**

*Ce travail a été effectué au laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions de l'Université de Metz. J'adresse mes remerciements à C. Dal Cappello professeur à l'université de Metz et à P. A. Hervieux Maître de conférences à l'Université de Metz, pour les encouragements, la confiance, les orientations ainsi que leurs remarques sur la rédaction de ce mémoire.*

*Mes remerciement vont également à P. Defrance, Professeur à l'Université catholique de Louvain, ainsi qu'à J. Langlois, Professeur à l'université de Brest, qui se sont intéressés à mon travail et ont bien voulu accepter d'être rapporteur.*

*Je remercie également C. le Sech, Professeur à l'université de Paris-sud, qui a accepté de faire partie du jury de cette thèse.*

*Je suis reconnaissant à B. Najjari docteur de l'Université de Metz, ainsi qu'à M. Madjet A. T. E. R à l'Université de Metz, pour leur encouragements.*

*A mes amis du laboratoire F. Boudali, A. Motassim, M. Grin, P. Weck . B. Zarour, H. Benali.*

*Je remercie également la secrétaire, M. Geot, pour sa disponibilité et sa gentillesse ainsi que P. Senot pour l'assistance technique qu'il a apporté durant ce travail.*

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	13990505
Cote	S/M3 99/20
Loc	Magasin

# SOMMAIRE

## INTRODUCTION

### Chapitre1 ELEMENTS DE THEORIE DES COLLISIONS

1.1	Introduction	5
1.1.1	Approximation de Born	5
1.1.2	Section efficace	6
1.1.3	Section efficace multiplement différentielle de la double ionisation	8
1.2.	Décomposition en ondes partielles	9
1.2.1	Cas où le potentiel est purement coulombien	11
1.2.2	Cas du potentiel coulombien modifié par une interaction de courte portée	14
1.3	Détermination de la fonction d'onde radiale	15
1.4	Détermination du déphasage	18
1.5	Calcul du potentiel de distorsion	19
1.5.1	Potentiel de Hartree – Fock	19
1.5.2	Pseudo potentiel de Bachelet, Hamann et Schülter	20
1.6	Conclusions	22

### Chapitre2 ETUDES DES ETATS LIES ET DU CONTINUUM DES SYSTEMES A DEUX ELECTRONS

2.1	Introduction	23
2.1.1	Antisymétrisation de fonction d'ondes d'un système à deux électrons	23
2.1.2	Etat fondamental de la cible	24
2.1.3.	Importance des corrélation électroniques dans la cible	25
2.2	Description du double continuum	26
2.2.1	Modèle de Brauner-Briggs-Klar (BBK)	27
2.2.2	Modèle à deux ondes coulombiennes	28
2.2.3	Modèle à deux ondes distordues	29
2.3	Corrélation dans la voie finale	31
2.4	Résultats pour la voie finale	31
2.4.1	Potentiel de distorsion	31
2.4.1-a	Potentiel de Hartree – Fock	31
2.4.1-b	Potentiel de Bachelet, Hamann et Schlüter	32
2.4.2	Fonctions radiales des électrons éjectés et déphasages	32

2.4.3 Déphasage	35
2.4.3-a Comparaison avec les calculs de Robaux à $l=0$ pour différentes énergies	35
2.4.3-b Comparaison avec les calculs de Kobeisi pour une énergie de 100 eV et pour différentes valeurs de $l$ .	36
2.4.3-c Déphasages introduit par le potentiel de distorsion de Hartree – Fock	36
2.4.3-d Déphasages obtenus avec le potentiel de BHS	37
2.5 Conclusions	37

### **Chapitre3 SPECTROSCOPIE ELECTRONIQUE APPLIQUEE A LA DOUBLE IONISATION DU MAGNESIUM**

3.1 Introduction	38
3.2 Sections efficace quintuplement différentielle	39
3.3 Sections efficace quadruplement différentielle	42
3.4 Résultats	42
3.5 Conclusions	56

### **Chapitre4 PROCESSUS DE LA DOUBLE IONISATION APPLIQUE A L'ATOME DE MAGNESIUM**

4 Introduction	57
4.1 Section efficace multiplement différentielle	58
4.1-1 Description de l'électron incident dans l'état initial et final par une onde plane	58
4.1-2 Description de l'électron incident dans l'état initial et final par une onde coulombienne	66
4.2 Sections efficaces intégrodifférentielle	68
4.2-1 Section efficace sept fois différentielle	68
4.2-2 Sections efficaces simplement différentielle	68
4.3 Résultats et discussion	70
4.3-1 La double photoionisation et la limite dipolaire	70
4.3-2 Interprétation des expériences (e,3e)	72
4.3-3 Résultats sur les sections efficaces quadruplement différentielles	78
4.3-4 Résultats sur les sections efficaces doublement et simplement différentielle	82
4.3-5 Résultats du Modèle 4CW appliqué à l'atome de magnésium neutre	87
4.5 Conclusions	88

**CONCLUSION** 89

**REFERENCES** 90

**ANNEXE A**

93

**ANNEXE B**

96

**ANNEXE C**

100

# INTRODUCTION

Le problème fondamental de la double ionisation des atomes ou des molécules par impact de photons ou de particules chargées est encore un processus mal connu de nos jours. Ce problème se heurte principalement à la difficulté de décrire correctement le double continuum constitué par les deux électrons éjectés. Les premiers travaux théoriques menés par Geltman [Gel56] ont consisté à décrire les deux électrons éjectés par des ondes coulombiennes et à imposer à ces mêmes électrons de sortir dans des directions opposées. Cette dernière hypothèse permettait de tenir compte, d'une manière arbitraire, de la répulsion électronique s'exerçant continuellement entre ces électrons éjectés. En effet, si l'on néglige la répulsion électronique, les sections efficaces différentielles sont maximales lorsque les électrons sont éjectés dans la même direction que l'on tienne compte ou pas de la corrélation initiale de la cible. Ce dernier résultat, établi par Le Rouzo et Dal Cappello [Rou91] dans le cas de la double photoionisation et par Dal Cappello et Le Rouzo [Cap91] dans le cas de la double ionisation par impact électronique a montré l'importance du choix de la fonction d'onde décrivant le double continuum.

Signalons qu'auparavant Tweed avait déjà proposé l'utilisation de charges effectives qui prenaient en compte la répulsion électronique dans la voie finale ([Twe72], [Twe73]) mais le calcul n'avait pas été mené à terme.

Un apport décisif fut l'application du modèle BBK [Bra89] au processus de la double ionisation des atomes. Ce modèle, appliqué préalablement aux collisions ionisantes de type  $(e, 2e)$  (détection en coïncidence des électrons - diffusé et éjecté-), fut utilisé par Joulakian et Dal Cappello [Jou93] pour étudier la double ionisation de l'hélium par impact électronique. La même application au cas de la double photoionisation avait montré le bon accord qualitatif théorie - expérience et d'autre part la supériorité de ce modèle par rapport aux modèles utilisant des charges effectives.

L'avantage du modèle BBK est de décrire le double continuum des deux électrons éjectés dans le champ coulombien du noyau par une fonction d'onde dont la limite asymptotique est exacte. Malheureusement, ce modèle se prête mal à un développement en ondes partielles

([Alt83] et [Pet82]). Dal Cappello et al. [Cap93] ont montré cependant, que l'utilisation d'un modèle BBK approché (description de chaque électron éjecté par une onde coulombienne et d'un facteur dit 'de Gamow' tenant compte de la répulsion électronique ) donnait, dans certaines situations cinématiques, également un bon accord qualitatif avec l'expérience (double photoionisation de l'hélium en particulier).

Une autre difficulté de l'étude de la double ionisation est la détermination du mécanisme. Carlson et Krause [Car65] ont proposé trois mécanismes possibles : un mécanisme en une étape noté shake-off, et deux mécanismes en deux étapes notés two – step 1 et two – step 2.

Le premier mécanisme considéré par Byron et Joachain [Byr67] et par Tweed [Twe73] est celui du shake – off. Il consiste à considérer une seule interaction entre l'électron incident et l'un des électrons de la cible qui conduit à une éjection de ce même électron. Puis, un second électron de la cible peut être éjecté à cause du brusque changement de potentiel auquel il est soumis. Le mécanisme two – step 2 peut être décrit par une double interaction entre l'électron incident et la cible qui aboutit à l'éjection de deux électrons. Le mécanisme two – step 1 résulte d'une première interaction entre l'électron incident et la cible suivie d'une deuxième interaction entre l'électron éjecté et un autre électron de la cible qui sera lui aussi éjecté. Dans ce travail on considère uniquement le mécanisme shake – off qui est considéré par de nombreux auteurs [Gui82] et [Elm96] comme étant le plus probable particulièrement lorsque l'énergie incidente est de l'ordre du KeV.

Le choix de l'étude du magnésium (deux électrons 3s et un cœur de 10 électrons  $1s^2 2s^2 2p^6$ ) comme cible s'explique d'une part, par l'importance de la corrélation électronique de ces deux électrons 3s, et d'autre part par la possibilité d'étudier les effets de l'ion doublement chargé dans l'état final. Le Magnésium constitue donc une étape intermédiaire entre celle de l'étude de la double ionisation de l'hélium (où l'interaction potentielle ion – électron est représenté simplement par  $-Z/r$ ) est celle de l'étude de la double ionisation des gaz rares ( où l'interaction potentielle sur chaque électron éjecté n'est plus assimilable à un terme de type  $-Z/r$  et où de plus la couche électronique de ce même ion est une couche ouverte  $np^4$ ).

Ce choix de l'atome de magnésium comme cible a aussi été motivé par les expériences réalisées par le groupe du Pr. Coplan [For98] qui a pu très récemment détecter les trois électrons de la voie finale en coïncidence (expériences notées (e, 3e)) après avoir réalisé des expériences (e, 3-1 e) où seuls les deux électrons éjectés sont détectés en coïncidences.

L'étude menée dans ce mémoire est basée sur la première approximation de Born. Cette approximation est effectivement justifiée lorsque la vitesse de l'électron incident est supérieure à la vitesse des électrons de la cible (qui seront par la suite éjectés). Nous avons

tenu compte de la corrélation dans l'état initial (utilisation des fonctions d'ondes d'interaction de configurations de J. Langlois) et de l'action de l'ion doublement chargé sur les deux électrons éjectés. Nous utilisons aussi le facteur de Gamow pour tenir compte de la répulsion électronique entre les électrons éjectés.

Ce modèle sera utilisé pour calculer des sections efficaces multiplement différentielles (expériences (e, 3e)) et des sections efficaces moins différentielles.

Dans le premier chapitre, après quelques rappels concernant la théorie des collisions atomiques, nous donnons l'expression de la section efficace multiplement différentielle pour les collisions (e, 3e) dans le cadre de l'approximation de Born au premier ordre des perturbations. La méthode du développement en ondes partielles ainsi que le potentiel de distorsion utilisé pour modéliser la présence l'ion résiduel seront ensuite présentés.

Dans le deuxième chapitre nous présentons les fonctions d'ondes que nous utiliserons pour obtenir une description de l'état initial et de l'état final de la cible. L'effet des énergies et du potentiel de distorsion sur les fonctions d'ondes décrivant les deux électrons dans le continuum seront également étudiés.

Le but du troisième chapitre est d'étudier l'effet de la corrélation électronique dans l'état initial dans le cas de la double ionisation de l'atome de magnésium. Cette étude sera faite dans une cinématique particulière, dans laquelle l'électron incident et un des deux électrons éjectés sont rapides, le second électron éjecté étant lent. L'électron sortant avec une énergie faible sera décrit soit par une fonction d'onde coulombienne, soit par une fonction d'onde distordue. Nous présenterons les sections efficaces quintuplement différentielles (e, 3 e) et les sections efficaces quadruplement différentielles correspondantes aux expériences (e, 3-1 e). Cette étude pourrait motiver de prochaines expériences de la part du groupe du Pr COPLAN.

Dans le dernier chapitre, nous comparerons nos calculs de la double photoionisation de l'atome de magnésium avec ceux de S. Ceraulo [Cer94]. Le but de cette étude est de tester notre potentiel de distorsion et de vérifier notre code de calcul dans la limite dipolaire. Dans une deuxième étape nous présenterons un calcul dans le cadre de l'approximation de Born au premier ordre des perturbations de la section efficace multiplement différentielle de la double ionisation de magnésium par impact d'électrons. Ce dernier calcul sera comparé aux récents résultats des expériences de El Marji et al. Puis nous présenterons nos calculs des sections efficaces après intégration sur toutes les directions des deux électrons éjectés (4DCS), les sections efficaces doublement différentielles (2DCS) qui correspondent à un calcul de l'intégrale de la 4DCS sur toutes les directions de l'électron collisionnel, et finalement la section efficace simplement différentielle (DCS) qui résultera de l'intégration de la 2DCS sur

les énergies de l'un des deux électrons éjectés. Dans une troisième étape de ce chapitre, les sections efficaces de double ionisation, basées sur la description de l'électron incident dans l'état initial et final par une onde coulombienne seront présentées; ce calcul pourra être appliqué par exemple à l'étude de la double ionisation des cibles chargées qui fait l'objet des expériences du Pr. Defrance.

# CHAPITRE 1

## Eléments de la théorie des collisions

### 1.1 INTRODUCTION

Cette partie constitue un rappel des notions élémentaires de théorie des collisions appliquée au problème étudié dans cette thèse : la double ionisation par impact électronique.

Après avoir rappelé l'approximation de Born utilisée pour calculer la section efficace, nous présenterons la méthode de développement en ondes partielles qui est essentielle pour étudier les effets de distorsion. Dans la suite toutes les expressions mathématiques seront données en unités atomiques ( $e = 1$ ,  $m_e = 1$ , le rayon de Bohr  $a_0 = 1$  et  $\hbar = 1$ ).

#### 1.1 –1 Approximation de Born

La difficulté dans le calcul de l'élément de matrice associé à l'opérateur de diffusion  $T$  vient du fait que la répulsion électrostatique empêche de trouver une solution exacte. Ceci nécessite l'utilisation d'approximations. L'approximation de Born fournit une approche basée sur la théorie des perturbations, permettant de résoudre par itération les problèmes de diffusion. La formulation de Born conduit à un développement de  $T$  [Hda94]:

$$T = V + VGV + \dots, \quad (1.1)$$

où  $V$  est le potentiel d'interaction entre les deux sous-systèmes (électrons incident et la cible), qui pourra être considéré comme une perturbation à haute énergie incidente et  $G$  l'opérateur de Green.

Dans l'approximation de Born, l'électron incident et l'atome cible sont traités comme deux sous-systèmes indépendant aussi bien avant qu'après l'interaction.

Cette approximation n'est valable que pour des électrons incidents suffisamment rapides par rapport à la vitesse des électrons de la cible [Bor26].

La première approximation de Born permet de ne retenir que le premier terme de l'équation (1.1), c'est - à - dire:

$$T = V = \frac{Z}{r} - \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|}, \quad (1.2)$$

où:

$|\vec{r} - \vec{r}_j|$  est la distance entre l'électron incident, représenté par le vecteur position  $\vec{r}$  et un électron de la cible, représenté par le vecteur position  $\vec{r}_j$ ,  $r$  est la distance entre l'électron incident et le noyau,  $Z$  est le numéro atomique de l'atome cible (charge du noyau) et  $N_e$  le nombre d'électrons de la cible.

### 1.1-2 Section efficace

Considérons un flux  $F$  de particules incidentes, de même énergie et homogène qui rentrent en collision avec une cible gazeuse composée de  $N_t$  particules identiques. On considère que la pression du gaz est suffisamment faible pour avoir un seul choc par particule. La section efficace totale est définie par [Gol67]:

$$\sigma = \frac{N}{F N_t}, \quad (1.3)$$

où  $N$  est le nombre de particules diffusées par unité de temps.

La section efficace totale est reliée à la probabilité de transition par unité de temps, par la relation [Gol67, Joa75]:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{fi}}{F}, \quad (1.4)$$

où  $P_{fi}$  désigne la probabilité de transition de l'état initial vers l'état final ;  $P_{fi}$  est reliée à la matrice de transition  $T$  ( pour plus de détails que cela voir [Gol67], [Joa83], [Naj97]) par la relation suivante (règle d'or de Fermi):

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4}{p_i} \delta(E_s - E_i) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_s) |T_{fi}|^2 F, \quad (1.5)$$

où  $E_i$  est l'énergie de l'électron incident,  $E_s$  l'énergie de l'électron diffusé,  $p_i$  est l'impulsion de la particule incidente,  $p_s$  est l'impulsion de la particule diffusée et  $F$  le flux de la particule incidente.

En tenant compte de la dégénérescence sur l'orientation [Gol67] de la particule diffusée la section efficace devient:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4}{p_i} \int d\vec{p}_s \delta(E_s - E_i) \delta(\vec{p}_i - \vec{p}_s) |T_{fi}|^2 \quad (1.6)$$

La section efficace différentielle est associée à la probabilité de trouver des particules d'impulsion  $p_s$  diffusées, dans un angle solide  $d\Omega_s$ , et compte tenu de  $d\vec{p}_s = p_s^2 dp_s d\Omega_s$ , la section efficace différentielle par unité d'angle solide de la particule diffusée s'écrit:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4}{p_i} \int p_s^2 dp_s \delta(-\frac{p_i^2}{2} - \epsilon_c^i + \frac{p_s^2}{2} + \epsilon_c^s) |T_{fi}|^2, \quad (1.7)$$

avec:

$$E_i = \frac{p_i^2}{2} + \epsilon_c^i \quad \text{et} \quad E_s = \frac{p_s^2}{2} + \epsilon_c^s$$

$\epsilon_c^i, \epsilon_c^s$  l'énergie totale de la cible dans l'état initial et final, respectivement,  $\frac{p_i^2}{2}$  et  $\frac{p_s^2}{2}$  les énergies cinétiques de l'électron incident et diffusé, respectivement.

Dans le cas de la double ionisation, une des sections efficaces différentielles qui caractérise ce phénomène est la section efficace cinq fois différentielle dans une géométrie coplanaire, et huit fois différentielle dans le cas d'une géométrie non coplanaire.

### 1.1-3 Section efficace multiplement différentielle de la double ionisation

La section efficace quintuplement différentielle (ou huit fois différentielle dans le cas d'une géométrie non coplanaire) est une fonction de tous les paramètres cinétiques de la collision, c'est - à - dire de  $E_i, E_1, E_2$  ou  $E_s$  et des angles  $\theta_1, \theta_2, \theta_s$  ainsi que des angles  $\phi_1, \phi_2$ , et  $\phi_s$ . Les indices  $i, 1, 2$ , et  $s$  se réfèrent respectivement à l'électron projectile, au premier éjecté, au deuxième éjecté et à l'électron diffusé au cours du choc ionisant.

Le transfert d'impulsion est défini par  $\vec{k} = \vec{p}_i - \vec{p}_s$ , où  $\vec{p}_i$  et  $\vec{p}_s$  sont les impulsions des électrons incident et diffusé, respectivement. Il dépend de l'énergie incidente, de l'énergie de l'électron diffusé ainsi que de l'angle de diffusion.

Dans le cadre de la première approximation de Born la section efficace cinq fois différentielle s'écrit:

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s dE_1 dE_2} = \frac{(2\pi)^4 p_1 p_2 p_s}{p_i} |T_{fi}|^2. \quad (1.8)$$

L'élément de matrice  $T_{fi}$  pour un atome ayant  $N_e$  électrons est tel que:

$$T_{fi} = \langle \psi_f(1, \dots, N_e) | -\frac{Z}{r} + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} | \psi_i(1, \dots, N_e) \rangle, \quad (1.9)$$

ou  $\vec{r}_j$  est la position du  $j^{\text{ème}}$  électron.

En pratique, cette section efficace est mesurée en détectant en triple coïncidence les trois électrons sortants.

Les fonctions d'onde  $\psi_i$  et  $\psi_f$  sont telles que:

$$\psi_i = \Phi_0(\text{électron incident}) \phi_i(\text{cible}), \quad (1.10)$$

$$\psi_f = \Phi_s(\text{électron diffusé}) \phi_f(\text{ion}, 1, 2), \quad (1.11)$$

$\Phi_s$ (électron diffusé) et  $\Phi_0$ (électron incident) seront décrites soit par des ondes planes pour les atomes neutres soit par des ondes coulombiennes dans le cas des cibles ioniques.

## 1.2 DECOMPOSITION EN ONDES PARTIELLES

Dans cette section, nous nous proposons d'étudier l'équation de Schrödinger d'une particule de masse  $m$  dans un potentiel central  $V(r)$ .

Dans le cas où le potentiel est purement coulombien, les problèmes de l'ionisation peuvent être traités par une méthode analytique. En revanche, dans le cas où une interaction dite à courte portée s'ajoute au potentiel coulombien ou dans le cas de l'utilisation d'un potentiel modèle, l'utilisation de la méthode des ondes partielles est essentielle.

Si  $\vec{P}$  est l'impulsion de la particule et  $\vec{r}$  son vecteur position, le hamiltonien est:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(r), \quad (1.12)$$

et l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit dans un système de coordonnées sphériques sous la forme:

$$\left\{ \left[ \frac{1}{2r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{2r^2} \right] + E - V(r) \right\} \psi(\vec{p}, \vec{r}) = 0. \quad (1.13)$$

Dans le cas d'un potentiel central ( $V(\vec{r}) = V(r)$ ), les opérateurs  $H$ ,  $L^2$  et  $L_z$  commutent (Coh77). Nous pouvons chercher des fonctions propres communes à ces trois opérateurs. La solution générale de l'équation de Schrödinger (1.13) s'écrit comme une combinaison d'ondes partielles correspondant à des valeurs données des nombres quantiques  $l$  et  $m$  :

$$\psi(\vec{p}, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-1)^m r^{-1} R_l(p, r) Y_l^m(\hat{p}) Y_l^{-m}(\hat{r}). \quad (1.14)$$

Les états propres de l'opérateur moment cinétique étant connus et quantifiés:

$$L^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi). \quad (1.15)$$

L'écriture des solutions de (1.13) dans le système des coordonnées polaires permet de séparer les parties radiales et angulaires, en introduisant (1.14) dans (1.13) et en utilisant (1.15), nous obtenons l'équation satisfaite par la fonction radiale  $R_l(p, r)$ :

$$\left[ \frac{1}{2r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] R_l(p, r) + ER_l(p, r) - V(r)R_l(p, r) = 0. \quad (1.16)$$

En posant  $U_l(p, r) = r R_l(p, r)$  avec les présentes notations l'équation (1.16) s'écrit:

$$\left[ \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + E - \frac{l(l+1)}{2r^2} - V(r) \right] U_l(p, r) = 0. \quad (1.17)$$

Pour que  $\psi(p, r)$  soit acceptable comme fonction propre, on ne retiendra que les solutions (1.17) ayant un sens physique c'est - à - dire celles qui sont régulières à l'origine. Sous cette condition la seule famille de solution retenues se comporte ([Coh77], P791), [Land74]) comme:

$$U_l(p, r) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} \alpha r^{l+1} \forall l, \quad (1.18)$$

et de ce fait s'annule à l'origine:

$$U_l(0) = 0. \quad (1.19)$$

En résumé, on résoudra l'équation de Schrödinger réduite pour des potentiels dont les solutions s'annulent à l'origine.

Dans le traitement théorique des phénomènes de collisions (double ionisation qui fait l'objet de ce travail), par la méthode des ondes partielles on rencontre le problème de l'intégration de l'équation de Schrödinger avec un potentiel central purement coulombien et le cas où le potentiel coulombien est modifié par un potentiel de rayon limité.

### 1.2.1 Cas où le potentiel est purement coulombien

L'énergie potentielle due à l'interaction de type coulombienne entre deux particules de charges opposées  $Z_1$  et  $Z_2$  séparées par une distance  $r$  est donnée par:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r}. \quad (1.20)$$

L'équation de Schrödinger lors d'une collision entre un électron et un noyau de charge  $Z$  sera donnée par l'équation:

$$\left[ \frac{1}{2r^2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{2r^2} + E - \frac{Z}{r} \right] \psi(\vec{p}, \vec{r}) = 0. \quad (1.21)$$

Le développement en ondes partielles de la solution de l'équation (1.21) s'écrit comme:

$$\psi(\vec{p}, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{F_l(p, r)}{r} P_l(\cos(\theta)), \quad (1.22)$$

l'argument des polynômes de Legendre est écrit ici sous la forme  $\cos\theta = \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{pr}$ . Nous pouvons

faire intervenir les angles caractérisant les directions des vecteurs dans un repère donné à l'aide du théorème d'addition des harmoniques sphériques [Coh77] en effet:

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l (-1)^m Y_l^{-m}(\hat{p}) Y_l^m(\hat{r}). \quad (1.23)$$

L'équation que vérifie  $F_l(p, r)$  est obtenue en portant (1.22) dans (1.21), ainsi on aboutit à:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + p^2 - \frac{2\eta p}{r} \right] F_l(p, r) = 0, \quad (1.24)$$

où  $\eta = -\frac{Z}{p}$  est le paramètre de Sommerfeld.

Si on pose :

$$F_1(p, r) = e^{ipr} (pr)^{(l+1)} f_1(p, r), \quad (1.25)$$

et  $\rho = pr$ , nous définissons la fonction  $f_\rho$  qui vérifie l'équation de Kummer-Laplace [Joa83]:

$$\rho \frac{d^2 f_1}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho) \frac{df_1}{d\rho} - (l + 1 + i\eta) f_1 = 0. \quad (1.26)$$

En choisissons  $\alpha = -2ip$ , la solution de l'équation (1.24) régulière à l'origine ( $r = 0$ ) est donnée par:

$$f_1 = C_{11} F_1(1 + 1 + i\eta; 2l + 2; -2ipr), \quad (1.27)$$

et la fonction coulombienne sphérique régulière à l'origine est obtenue en substituant (1.27) dans (1.25) ce qui donne:

$$F_1(k, r) = C_1 e^{ipr} (pr)^{l+1} {}_1F_1(1 + 1 + i\eta; 2l + 2; -2ipr), \quad (1.28)$$

où:

$$C_1 = \frac{2^l e^{-\frac{\pi\eta}{2}} |\Gamma(1 + i\eta)|}{(2l + 1)!}. \quad (1.29)$$

La fonction coulombienne  $\psi_c$  décrivant l'électron est proportionnelle à  $\psi$  solution de l'équation de Schrödinger (1.21), en coordonnées paraboliques donnée par Mott et Massey ([Mot65]):

$$\begin{aligned} \psi_c(\vec{p}, \vec{r}) &= (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \Gamma(1 + i\eta) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(pr + \vec{p}\cdot\vec{r})) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} C_l e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} p^{l+1} r^l {}_1F_1(1 + 1 + i\eta, 2l + 2, -2ipr) P_l(\cos\theta) \end{aligned}, \quad (1.30)$$

où les fonctions  $\Gamma$  et  ${}_1F_1$  désignent respectivement la fonction gamma et la fonction hypergéométrique confluyente.

Les nouveaux coefficients  $C'_1$  sont obtenus en utilisant les propriétés d'orthogonalisation des polynômes de Legendre et égalant les deux termes de (1.30), on trouve:

$$C'_1 = (2\pi)^{-3/2} p^{-1} (2l+1) i^l \exp(i\sigma_1(p)) C_1, \quad (1.31)$$

$$\psi_c = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} (pr)^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\sigma_1(p)} (2l+1) i^l F_1(p,r) P_l(\cos\theta), \quad (1.32)$$

où  $F_1(p,r)$  est donnée par l'équation (1.28). Pour  $\eta \sim 0$  le développement de l'équation (1.32) devient celui d'une onde plane donné par:

$$\psi_c = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(p,r) P_l(\cos\theta), \quad (1.33)$$

où  $j_l(p,r)$  est la fonction de Bessel sphérique.

On peut aussi obtenir la fonction coulombienne sphérique irrégulière  $G_1$  en cherchant les solutions de l'équation (1.24) qui sont irrégulières à l'origine.

Les comportements asymptotiques de  $G_1$  et  $F_1$  sont donnés par:

$$F_1(p,r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \sin\left(pr - \frac{l\pi}{2} - \gamma \log(2pr) + \sigma_1\right), \quad (1.34)$$

$$G_1(p,r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \cos\left(pr - \frac{l\pi}{2} - \gamma \log(2pr) + \sigma_1\right). \quad (1.35)$$

La présence du potentiel à longue portée est traduite par le terme  $\log(2kr)$ ,  $\sigma_1$  est le déphasage coulombien qui est donné par:

$$\sigma_1 = \arg \Gamma(1 + 1 + i\eta). \quad (1.36)$$

### 1.2.2 Cas du potentiel coulombien modifié par une interaction de courte portée

Contrairement au cas du potentiel coulombien où les solutions exactes de l'équation de Schrödinger sont connues, dans le cas d'un potentiel coulombien modifié par un potentiel de portée limitée, l'équation de Schrödinger ne possède pas en général des solutions analytiques. Toute tentative de résolution numérique de l'équation de Schrödinger par quelque méthode que se soit fournira des solutions approchées.

Considérons la situation où un potentiel à courte portée  $V_{cp}(r)$  est ajouté au champ coulombien  $V_c(r)$  ( $V_T(r) = V_c(r) + V_{cp}(r)$  = potentiel de distorsion), le développement de la solution de l'équation de Schrödinger s'écrit comme:

$$\psi(\vec{p}, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{X_l(p, r)}{r} P_l(\cos(\theta)). \quad (1.37)$$

En portant (1.37) dans (1.16), on trouve l'équation radiale [Joa83]:

$$\left[ \frac{d^2}{2dr^2} + E - V_T(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] X_l(p, r) = 0, \quad (1.38)$$

avec:

$$X_l(p, r) \sim r^{l+1}, \text{ au voisinage de l'origine} \quad (1.39)$$

et  $V_T(r)$  représente le potentiel coulombien modifié par l'addition du potentiel à courte portée ( $V_{cp}$ ) dû à l'effet de la distribution électronique dans l'ion sur les deux électrons sortant dans le cas de la double ionisation.

Aux grandes distances, le potentiel coulombien domine le potentiel de distorsion ( $V_{cp}(r)$ ) et la barrière centrifuge ( $l(l+1)/2r^2$ ), tandis que l'interaction totale intervient aux petits  $r$ . Aux grandes distances la fonction  $X_l(p, r)$  s'écrit comme combinaison linéaire des fonctions coulombiennes régulière et irrégulière:

$$X_1(p, r) \rightarrow H_1^{(-)}(p, r) + e^{2i\Delta_1} H_1^{(+)}(p, r), r \rightarrow \infty, \quad (1.40)$$

avec:

$$\Delta_1 = \sigma_1 + \delta_1 \quad (1.41)$$

$$H_1^{(\pm)}(p, r) = e^{(\mp i\sigma_1)} \{F_1 + iG_1\}, \quad (1.42)$$

où la quantité  $\delta_1$  additionnée au déphasage coulombien pur  $\sigma_1$ , est due au potentiel de distorsion en présence du potentiel coulombien  $V_c(r)$ . Il est très important de signaler que le déphasage  $\delta_1$  n'est pas le même que celui obtenu en présence uniquement du potentiel de portée limitée  $V_{cp}(r)$ .

En substituant (1.40) et (1.41) dans (1.42) on trouve:

$$X_1(p, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\propto} 2e^{i\delta_1} (\cos(\delta_1)F_1(p, r) + \sin(\delta_1)G_1(p, r)). \quad (1.43)$$

Comme notre étude concernera l'étude des effets de distorsion dans la double ionisation par impact électronique, la détermination des fonctions radiales  $X_1(p, r)$ , est faite en intégrant numériquement l'équation de Schrödinger (1.38). Dans le paragraphe suivant nous présentons la méthode numérique que nous utiliserons pour effectuer cette intégration.

### 1.3. Détermination de la fonction d'onde radiale

La partie radiale, solution de l'équation (1.38) est déterminée numériquement en utilisant la méthode de Fox-Godwin décrite plus loin [Sch90]. L'intégration commence à un point  $r > 0$  où  $y$  obéit à la condition (1.39), et on progresse vers  $r = r_{limite}$ , où  $r_{limite}$  est la distance à partir de laquelle le potentiel de distorsion s'annule, et la partie radiale solution de (1.35) prend la forme asymptotique (1.43). Trois étapes sont conventionnellement considérées:

- i) Le choix judicieux de  $r \sim 0$
- ii) L'intégration de (1.38) jusqu'à  $r_{limite}$

iii) La bonne détermination de  $r_{\text{limite}}$

La méthode numérique que nous avons utilisée consiste à écrire l'équation (1.38) sous la forme suivante:

$$X''(r) + W(r)X(r) = 0, \quad (1.44)$$

où:

$$W(r) = 2(E - V(r)) - \frac{l(l+1)}{2r^2}. \quad (1.45)$$

Pour le traitement numérique de (1.44), on remplace  $X''(r)$  par la définition de la dérivée seconde de  $X(r)$  donnée par:

$$X''(r) = \frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + O(h^2), \quad (1.46)$$

avec le terme d'erreur:

$$O(h^2) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(r) + \dots \quad (1.47)$$

En négligeons le terme d'erreur  $O(h^2)$  et en substituant (1.46) dans (1.44), l'équation (1.44) devient:

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + w(r)X(r) = 0, \quad (1.48)$$

ou

$$X(r+h) = 2X(r) - X(r-h) - h^2 w(r)X(r). \quad (1.49)$$

Comme  $X(r)$  se comporte à l'origine comme  $r^{l+1}$ , par exemple,

$$X(0) = 0, \quad (1.50)$$

et

$$X(h) = 1. \quad (1.51)$$

En utilisant (1.49) on peut déterminer  $X(2h)$  à partir de  $X(0)$  et  $X(h)$ , et  $X(3h)$  à partir de  $X(2h)$  et  $X(h)$ , ainsi on obtient  $X(r)$  sur une grille linéaire avec un pas  $h$ . L'équation (1.49) peut être améliorée si on considère le terme d'erreur  $O(h^2)$ :

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} = X''(r) + \frac{h^2}{12} X^{(4)}(r) + O(h^4). \quad (1.52)$$

Si nous utilisons (1.52) pour remplacer  $X''(r)$  dans (1.44), le terme de correction apparaît dans l'expression:

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{X^2(r)} + X(r)w(r) = \frac{h^2}{12} X^{(4)}(r) + O(h^4). \quad (1.53)$$

Il existe des méthodes pour faire disparaître le terme de correction d'ordre  $h^2$  sans éliminer la définition de la dérivée seconde, par exemple, la méthode appelée Fox-Goodwin, Numerov, ou la méthode Cowell [Ald66].

L'astuce de la méthode est d'appliquer à (1.44) l'opérateur:

$$1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}, \quad (1.54)$$

ainsi nous obtenons:

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}\right) X''(r) = -w(r)X(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2} (w(r)X(r)). \quad (1.55)$$

en remplaçant le deuxième terme de (1.52) par son expression donnée par (1.55) on obtient:

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + O(h^4) + w(r)X(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}(w(r)X(r)) = 0. \quad (1.56)$$

En négligeant les termes de correction d'ordre supérieur ou égal à quatre, et en remplaçant la dérivée seconde de  $(w(r)X(r))$  dans (1.56) par l'expression donnée par (1.46) dont le terme de correction  $O(h^2)$  a été négligé, nous obtenons l'expression de la fonction radiale [Sch90]:

$$X(r+h) = \frac{2X(r) - X(r-h) - \left(\frac{h^2}{12}\right)(10W(r)X(r) + W(r+h)X(r-h))}{1 + \left(\frac{h^2}{12}\right)W(r+h)}. \quad (1.57)$$

Le comportement de  $X(r)$  au voisinage de l'origine (1.39) permet de déduire les deux premières valeurs de  $X(r)$  sur un intervalle  $[0, r_{\text{limite}}]$  partagé en un nombre de points (noté IB). et par itération on détermine  $X(r)$  sur tout l'intervalle.

Les fonctions radiales données par (1.57) ne sont pas normalisées, pour cela on calcule le coefficient de proportionnalité entre la forme asymptotique de la fonction (1.57) donnée par l'équation (1.43) et la fonction numérique pour des grandes valeurs de  $r$ :

$$X_{\text{Num}}(r) = AX_{\text{asym}}(r), \forall r \rightarrow \infty \quad (1.58)$$

on obtient les fonctions radiales normalisées:

$$X_{\text{Num}}^{\text{Norm}} = \frac{1}{A} X_{\text{Num}}. \quad (1.59)$$

#### 1.4 Détermination du déphasage

La détermination du déphasage  $\delta_l(E)$  (lié au potentiel de distorsion  $V_{\text{cp}}(r)$ ), à l'énergie et au moment angulaire  $l$ , se fait numériquement après avoir intégré l'équation de Schrödinger.

Le comportement asymptotique de  $X(r)$  permet d'écrire :

$$X(r) \rightarrow 2e^{i\delta_l} (\cos(\delta_l)F_l(p,r) + \sin(\delta_l)G_l(p,r), r \rightarrow \infty \quad (1.60)$$

$$X(r-h) \rightarrow 2e^{i\delta_1} (\cos(\delta_1)F_1(p, r-h) + \sin(\delta_1)G_1(p, r-h)), (r-h) \rightarrow \infty \quad (1.61)$$

où  $h = r_{\text{limite}}/IB$ , et  $IB$  le nombre de points de l'intervalle. Le rapport des deux équations (1.60) et (1.61) permet d'obtenir le déphasage:

$$\text{tg}\delta_1 = \frac{F_1(p, b-h)X(b) - F_1(p, b)X(b-h)}{G_1(p, b-h)X(b) - G_1(p, b)X(b-h)}. \quad (1.62)$$

## 1.5 Calcul du potentiel de distorsion.

### 1.5.1 Potentiel de Hartree-Fock

Le potentiel  $V_T(r)$  dit de Hartree-Fock que nous avons appelé potentiel de distorsion est défini comme étant la valeur moyenne de l'interaction électrostatique entre l'électron éjecté et l'ion résiduel.

Soit  $r_e$  le module du vecteur position de l'électron éjecté.

On peut écrire  $V_T(r)$  sous la forme ([Her92], [Sza92]):

$$V_T(\vec{r}_e) = \int \rho(\vec{r}_1) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_e|} d\vec{r}_1 - \int \rho(\vec{r}_1) \frac{Z}{r_e} d\vec{r}_1, \quad (1.63)$$

avec:

$$\int \rho(\vec{r}_1) \frac{Z}{r_e} d\vec{r}_1 = \frac{Z_n}{r_e}, \quad (1.64)$$

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_e|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l (-1)^m Y_l^m(\hat{r}_1) Y_l^{-m}(\hat{r}_e) \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}}, \quad (1.65)$$

$$\rho(\vec{r}_1) = \sum_i |\Psi_i(\vec{r}_1)|^2, \quad (1.66)$$

(1.66) représente la densité électronique des orbitales occupées.

Dans le cadre de l'approximation de la moyenne sphérique (prise en compte que des termes monopolaires), (1.66) devient:

$$\rho(\vec{r}_1) = \sum_i |R_{n_i, l_i}(r_1) Y_l^m(\hat{r}_1)|^2 \approx \sum_i |R_{n_i, l_i}(r_1) Y_0^0(\hat{r}_1)|^2 = \rho(r_1). \quad (1.67)$$

En portant (1.64) et (1.65) dans (1.67) on obtient:

$$V_T(r_e) = -\frac{Z_n}{r_e} + \sum_{i=1}^{N_e} J_i(r_e), \quad (1.68)$$

où  $N_e$  est le nombre d'électrons de l'ion est  $Z_n$  la charge nucléaire

$$J_i(r_e) = \frac{1}{r_e} \int_0^{r_e} |\Phi_i(r_1)|^2 dr_1 + \int_{r_e}^{\infty} \frac{|\Phi_i(r_1)|^2}{r_1} dr_1, \quad (1.69)$$

où  $\Phi_i(r_1)$  représente l'orbitale du  $i^{\text{ème}}$  électron calculée dans l'approximation de Hartree-Fock.

On peut écrire  $V_T(r)$  comme la somme d'un potentiel créé par la charge ionique et d'un potentiel à courte portée qui est dû à l'effet de l'ion sur l'électron éjecté:

$$V_T(r_e) = -\frac{Z}{r_e} + V_{cp}(r_e), \quad (1.70)$$

Avec:

$$V_{cp}(r_e) = -\frac{N_e}{r_e} + \sum_{i=1}^{N_e} J_i(r_e). \quad (1.71)$$

### 1.5.2 pseudo potentiel de Bachelet, Hamann et Schülter (BHS)

Le modèle de potentiel de Bachelet, Hamann et Schülter dit BHS est défini par:

$$V_{bhs} = V_{\text{coeur}}(r) + \sum_{l=0}^{\infty} \Delta_l^{\text{ion}}(r) |1\rangle\langle 1|, \quad (1.72)$$

avec:

$$V_{\text{coeur}}(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{i=1}^2 C_i^{\text{coeur}} \operatorname{erf}\left[\sqrt{\alpha_i^{\text{coeur}}(r)}\right], \quad (1.73)$$

$$\Delta V_1^{\text{ion}}(r) = \sum_{i=1}^3 \left[ A_i(l) + r^2 A_{i+3}(l) \right] \exp\left[-\alpha_i(l)r^2\right]. \quad (1.74)$$

Pour chaque atome, la partie locale  $V_{\text{core}}(r)$  est caractérisée par la valence  $Z$  et des coefficients tabulés [Bhs82]  $\alpha_i^{\text{coeur}}(l)$  et  $C_i^{\text{coeur}}(r)$  ( $i = 1$  à  $3$ ) et  $A_i(l)$  ( $i = 1$  à  $6$ ). Ces derniers sont calculés à partir des constantes  $C_i(l)$  données dans le tableau IV de la référence [Bhs82] par la relation suivante :

$$C_i(l) = -\sum_{p=1}^6 A_p(l) Q_{ip} \Rightarrow A_i(l) = -\sum_{p=1}^6 C_p(l) Q_{ip}^{-1}, \quad (1.75)$$

où les quantités  $Q_{ip}$  sont définies par les relations suivantes:

$$Q_{ip} = \begin{cases} 0 & \text{si } i > p \\ \sqrt{S_{ip} - \sum_{k=1}^{i-1} Q_{kp}} & \text{si } i = p \\ \frac{S_{ip} - \sum_{k=1}^{i-1} Q_{ki} Q_{kp}}{Q_{ii}} & \text{si } i < p \end{cases} \quad (1.76)$$

Les  $S_{ip}$  sont des intégrales de recouvrement de type:

$$S_{ip} = \int_0^{+\infty} r^2 \Phi_i(r) \Phi_p(r) dr, \quad (1.77)$$

avec:

$$\Phi_i(r) \begin{cases} \exp[-\alpha_i r^2] & \text{si } i \leq 3 \\ r^2 \exp[-\alpha_i r^2] & \text{si } i > 3 \end{cases} \quad (1.78)$$

Le potentiel donné par l'expression (1.72) simule l'effet du cœur des atomes à plusieurs électrons. Plus loin nous comparerons les fonctions d'onde déterminées en utilisant une fois le potentiel BHS (1.72) et une autre fois notre potentiel donné par l'expression (1.70).

## 1.6 CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons rappelé l'approximation de Born, qui permet de simplifier l'élément de matrice de transition  $T$ , la méthode de calcul des fonctions radiales solutions de l'équation de Schrödinger avec un potentiel coulombien et auquel on additionne un potentiel à courte portée dans un deuxième cas. Enfin nous avons donné les expressions du potentiel de distorsion et des déphasages, qui sont essentiels pour déterminer l'élément de matrice de transition  $T$  dans le cas où nous considérons les effets de distorsion.

# CHAPITRE 2

## Etude des états liés et du continuum des systèmes atomiques à deux électrons

### 2.1 Introduction

L'étude des systèmes atomiques à deux électrons constitue l'objectif de ce mémoire, avec des structures d'états liés dans lesquelles nous introduisons les effets de corrélation (radiales et/ou angulaires) des deux électrons dans l'état fondamental. D'autre part, nous étudions l'effet de distorsion quand les électrons seront dans le continuum. Tout d'abord nous allons aborder brièvement l'antisymétrisation des fonctions d'ondes susceptibles de décrire les systèmes à deux électrons.

#### 2.1.1 Antisymétrisation de fonction d'ondes d'un système à deux électrons.

L'équation de Schrödinger associée au mouvement de deux électrons s'écrit:

$$\left[ \frac{\Delta_1}{2} + \frac{\Delta_2}{2} + E + Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) - \frac{1}{r_{12}} \right] R(r_1, r_2) = 0. \quad (2.1)$$

On peut définir deux fonctions d'onde pour un atome à deux électrons:

$$\phi_i(r_1, r_2) = R(r_1, r_2) \pm R(r_2, r_1). \quad (2.2)$$

Ces fonctions d'ondes soit conservent leur signe soit changent de signe à la suite d'une permutation des coordonnées des deux électrons, c'est - à - dire que les fonctions d'ondes associées sont symétriques dans le premier cas ou antisymétriques dans le second.

Pour une description complète des systèmes à deux électrons nous devons tenir compte des spins de ces derniers.

Dans l'approximation non relativiste on peut écrire la fonction totale comme étant le produit de deux fonctions:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2) = \phi_i(r_1, r_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (2.3)$$

pour les états triplets (2.3) s'écrit:

$$\Psi_T(\xi_1, \xi_2) = [R(r_1, r_2) - R(r_2, r_1)]\chi_T(\sigma_1, \sigma_2), \quad (2.4)$$

et

$$\Psi_S(\xi_1, \xi_2) = [R(r_1, r_2) + R(r_2, r_1)]\chi_S(\sigma_1, \sigma_2). \quad (2.5)$$

pour les états singulet.

Dans la suite on va porter notre intérêt sur la partie orbitale en ignorant toute composante de spin pour des raisons de simplifications.

### 2.1.2 Etat fondamental de la cible

Pour représenter l'état fondamental d'un système atomique à deux électrons, il faut résoudre l'équation :

$$H\phi = E\phi, \quad (2.6)$$

avec

$$H = p_1 + p_2 + V_{en} + V_{ee}, \quad (2.7)$$

$p_i$  est l'opérateur énergie cinétique du  $i^{\text{ème}}$  électron et s'écrit, en unités atomiques:

$$p_i = -\frac{1}{2}\Delta_i, \quad (2.8)$$

$V_{en}$  désigne l'énergie potentiel électron - noyau:

$$V_{en} = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2}, \quad (2.9)$$

$V_{ee}$  est l'énergie d'interaction des deux électrons.

$$V_{ee} = \frac{1}{r_{12}}, \quad (2.10)$$

$Z$  désigne le nombre de protons dans le noyau,  $r_1$  et  $r_2$  désignent respectivement les distances de l'électron (1) et de l'électron (2) par rapport au noyau de l'atome, alors que  $r_{12}$  indique la distance qui sépare les deux électrons.

L'interaction mutuelle entre les deux électrons  $V_{ee}$  présente dans l'expression de l'hamiltonien ne permet pas de séparer les mouvements et il n'existe pas de solutions analytiques. Cependant la construction des fonctions propres  $R(r_1, r_2)$  et des énergies propres  $E$  correspondantes peut être réalisée à l'aide des méthodes d'approximations comme la méthode des perturbations, la méthode variationnelle de Ritz et parfois la combinaison simultanée des ces méthodes. Pour les systèmes auxquels on s'intéresse (les atomes à deux électrons de valence), leur structure peut être déterminée en résolvant (2.6), par la méthode d'interaction de configuration (voir annexe C).

### 2.1.3. Importance des corrélations électroniques dans la cible

Un de nos objectifs de l'étude de la double ionisation de l'atome Mg est de mettre en évidence l'importance des corrélations inter-électroniques, d'où la nécessité de les définir d'une manière précise.

Le type de corrélations qui intervient de la manière la plus fondamentale dans les collisions qui nous concernent est celle qui existe entre les électrons de la cible, généralement appelée la corrélation structurelle. L'importance de la corrélation dans l'état initial avait été précédemment établie par Byron et Joachain (1967) [Byr67], puis par Smirnov et al (1978) [Smi78].

Il s'agit des interactions coulombiennes qui existent entre les électrons de la cible, exprimées par des potentiels de la forme  $1/r_{ij}$ , qui rendent impossible la détermination exacte des solutions de l'équation de Schrödinger pour tout atome possédant au moins deux électrons. La description de la structure de ces atomes nécessitent des approximations qui produisent des solutions approchées tenant compte de ces termes  $1/r_{ij}$

Une fonction d'onde non corrélée se limiterait dans le cas du Magnésium à un produit de deux fonctions d'onde radiales 3s et de la fonction de spin. Cependant l'énergie de corrélation est définie comme étant la différence entre l'énergie de l'état fondamental d'un atome (ou d'une molécule) calculée avec une fonction d'onde dite <<corrélée>> et l'énergie calculée avec une fonction de type Hartree-Fock. Ce critère de l'énergie de corrélation ne juge que très partiellement de la qualité globale d'une fonction d'onde.

Dans ce travail nous utiliserons une fonction d'onde Hartree-Fock de Clementi et Roetti [Clem74] (voir annexe C). Cette fonction ne contient aucune corrélation radiale et angulaire par définition. Dans le but de tenir compte des effets de corrélations radiales et/ou angulaires dans l'état initial, nous utiliserons des fonctions corrélées de type interaction de configurations. Ces fonctions d'onde sont calculées par Langlois [Lang], Sanchez [San] et par Burgess [Bur97]. Ces fonctions d'ondes s'écrivent sous la forme suivante (voir annexe C):

$$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{l,m} \alpha_{n,n'}^{l,l'} \frac{(-1)^{(l-m)}}{\sqrt{2l+1}} \sqrt{\frac{1}{2}} \left[ R_{nl}(r_1) Y_l^m(\hat{r}_1) R_{n'l'}(r_2) Y_l^{-m}(\hat{r}_2) + (1 \Leftrightarrow 2) \right], \quad (2.12)$$

où les coefficients  $\alpha_{n,n'}^{l,l'}$  sont les coefficients de la combinaison linéaire du produit des orbitales monoélectroniques.

Après avoir décrit l'état initial de la cible, nous allons nous intéresser à la description de l'état final du système constitué de deux électrons dans un double continuum en présence de l'ion résiduel.

## 2.2 Description du double continuum.

Au cours d'un processus de collision, la cible de Magnésium dans son état fondamental décrit par l'une des fonctions de Langlois citée ci-dessus, se trouve ionisée par impact d'électrons. En première approximation nous allons assimiler le potentiel de l'ion  $Mg^{2+}$  à un potentiel coulombien, puis le potentiel de l'ion  $Mg^{2+}$  sera décrit par un potentiel coulombien modifié par un potentiel à courte portée qui est dû à l'effet de l'ion résiduel sur l'électron éjecté. L'étude de la dynamique des particules chargées en mouvement dans un continuum est l'une des questions fondamentales non résolues en physiques atomique. En l'absence d'interaction post-

collisionnelle, les fonctions d'ondes des deux électrons éjectés seront dans une première étape deux ondes coulombiennes pures et dans le deuxième cas deux ondes distordues.

Le problème majeur de la description de l'état final réside dans la prise en compte de la répulsion coulombienne entre les électrons sortants. Brauner, Briggs et Klar [Bra89] ont alors proposé une fonction d'onde très élaborée satisfaisant exactement l'équation de Schrödinger dans la région asymptotique.

### 2.2.1 Modèle de Brauner-Briggs-Klar (BBK)

Le modèle BBK est l'un des modèles les plus appropriés pour décrire le double continuum d'énergie. La fonction BBK est de la forme suivante :

$$\psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} C(-\alpha_1, \vec{p}_1, \vec{r}_1) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_2} C(-\alpha_2, \vec{p}_2, \vec{r}_2) C(\alpha_{12}, \vec{p}_{12}, \vec{r}_{12}), \quad (2.13)$$

où le facteur de Coulomb est défini par:

$$C(\alpha, \vec{k}, \vec{r}) = \Gamma(1 - i\alpha) {}_1F_1(i\alpha, 1, i(\vec{p}\vec{r} + \vec{p}\cdot\vec{r})), \quad (2.14)$$

où  $\Gamma$  et  ${}_1F_1(a, b, z)$  sont respectivement les fonctions gamma et hypergéométrique confluyente.

$$\alpha_1 = \frac{Z}{p_i}, \quad \alpha_{12} = \frac{1}{2p_{ij}}, \quad (2.15)$$

$$\vec{p}_{ij} = \frac{1}{2}(\vec{p}_i - \vec{p}_j), \quad (2.16)$$

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad (2.17)$$

avec  $i=1$  et  $j=2$  dans notre cas.

L'utilisation de cette fonction donne lieu à des calculs longs et ne se prête pas facilement au développement en ondes partielles du fait de la présence de la troisième hypergéométrique

confluente dont l'argument fait intervenir  $r_{12}$ . Plusieurs auteurs ont utilisé des traitements simplifiés de l'interaction post-collisionnelle : Franz et al [Fra91] ont remplacé la fonction hypergéométrique confluente tenant compte de la répulsion des deux électrons par son comportement asymptotique, Dal Cappello et Joulakian [Dal92] ont normalisé les section efficace par le facteur de Gamow, ce qui a été utilisé aussi par Whelan et al [whe94] puis Nicolas et al [Nic96]. C'est cette dernière procédure que nous utiliserons ici.

Le facteur de Gamow qui apparaît suffisant pour expliquer la forte corrélation angulaire dans l'état final [Hda94] peut s'écrire formellement par:

$$N_{ee} = \frac{2\pi}{|\vec{p}_2 - \vec{p}_1|} (e^{\frac{2\pi}{|\vec{p}_2 - \vec{p}_1|}} - 1) = \Gamma(1 - \alpha_{12})\Gamma(1 + \alpha_{12}). \quad (2.18)$$

### 2.2.2 Modèle à deux ondes coulombiennes

Dans la mesure où nous décrivons l'interaction post collisionnelle entre les deux électrons éjectés par le seul facteur de Gamow, et si nous négligeons les effets de distorsion, les fonctions d'ondes associées aux deux électrons éjectés sont des fonctions purement coulombiennes.

Nous représentons les électrons éjectés de vecteurs d'onde  $\vec{p}_1$  et  $\vec{p}_2$  par un simple produit de deux fonctions d'onde décrivant respectivement leur mouvement individuel:

$$\psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2), \quad (2.19)$$

les deux fonctions d'ondes coulombiennes  $\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)$  et  $\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2)$  développées en ondes partielles s'écrivent:

$$\begin{aligned} \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) = & \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} (-1)^{m_1} (i)^{l_1} e^{i\sigma_{l_1}(p_1)} \frac{F_{l_1}(p_1, r_1)}{p_1 r_1}, \\ & \times Y_{l_1}^{m_1}(\hat{r}_1) Y_{l_1}^{-m_1}(\hat{p}_1) \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) = & \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (-1)^{m_2} (i)^{l_2} e^{i\sigma_{l_2}(p_2)} \frac{F_{l_2}(p_2, r_2)}{p_2 r_2} , \\ & \times Y_{l_2}^{m_2}(\hat{r}_2) Y_{l_2}^{-m_2}(\hat{p}_2) \end{aligned} \quad (2.21)$$

la fonction d'onde (2.19) satisfait exactement l'équation de Schrödinger non perturbée:

$$\left[ -\Delta_1 - \Delta_2 - 2Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) - 2E_f \right] \psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \quad (2.22)$$

où  $E_f$  est l'énergie totale des deux électrons du continuum, c'est - à - dire, en unités atomiques:

$$E_f = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2}. \quad (2.23)$$

Dans ces expressions,  $\eta_i = -Z/p_i$ ,  $i = 1, 2$ .  $Z$  représente la charge de l'ion résiduel agissant sur les électrons éjectés (et diffusé). Dans la première partie de ce travail l'électron diffusé sera décrit par une onde plane  $\varphi_0(\vec{p}_s, \vec{r}_0)$  dans la limite où sa vitesse est très grande comparée à celle des électrons éjectés, dans une autre partie de ce travail nous le décrirons par une onde coulombienne.

La fonction d'onde totale des trois électrons dans la voie finale peut être écrite, en tenant compte de l'échange entre les deux électrons éjectés, par

$$\begin{aligned} \psi_f^-(r_1, r_2) = & \varphi_0(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \times \right. \\ & \left. \left[ \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) + (-1)^S \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_2) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_1) \right] \right\} \end{aligned} \quad (2.24)$$

$S$  est le spin total des deux électrons ; dans notre cas on se limite aux états singulets c'est à dire  $S=0$ .

### 2.2.3 Modèle à deux ondes distordues

Si nous considérons les effets de distorsion dus à l'ion résiduel, les fonctions d'onde associées aux deux électrons éjectés est un produit de deux fonctions d'ondes distordues, solutions de l'équation de Schrödinger avec un potentiel coulombien modifié par un potentiel de courte portée:

$$\Psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2), \quad (2.25)$$

les deux fonctions d'ondes développées en ondes partielles s'écrivent:

$$\begin{aligned} \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) = & \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} (-1)^{m_1} (i)^{l_1} e^{i\Delta_{l_1}(\vec{p}_1)} \frac{X_{l_1}(\vec{p}_1, \vec{r}_1)}{p_1 r_1}, \quad (2.26) \\ & \times Y_{l_1}^{m_1}(\hat{r}_1) Y_{l_1}^{-m_1}(\hat{p}_1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) = & \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l_2=0}^{\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (-1)^{m_2} (i)^{l_2} e^{i\Delta_{l_2}(\vec{p}_2)} \frac{X_{l_2}(\vec{p}_2, \vec{r}_2)}{p_2 r_2} \quad (2.27) \\ & Y_{l_2}^{m_2}(\hat{r}_2) Y_{l_2}^{-m_2}(\hat{p}_2) \end{aligned}$$

où  $\Delta_1 = \sigma_1 + \delta_1$ ,  $\delta_1$  désigne le déphasage introduit par le potentiel de distorsion et  $\sigma_1$  est le déphasage coulombien. La fonction d'onde décrivant les deux électrons éjectés vérifie l'équation de Schrödinger:

$$[-\Delta_1 - \Delta_2 + V_T - 2E_f] \Psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0, \quad (2.28)$$

où  $V_T$  désigne le potentiel le potentiel coulombien modifié par le potentiel de courte portée dû à l'effet de l'ion résiduel.

La fonction d'onde totale décrivant les électrons éjectés et diffusé s'écrit:

$$\begin{aligned} \Psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \varphi_0(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \times \right. \\ & \left. [\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) + (-1)^S \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_2)\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_1)] \right\} \quad (2.29) \end{aligned}$$

où  $\varphi_0(\vec{p}_s, \vec{r}_0)$  est la fonction d'onde qui décrit l'électron diffusé.

Les déphasages  $\delta_l$  introduit par le potentiel de distorsion ainsi que les fonctions radiales solutions de l'équation de Schrödinger sont déterminés numériquement par la méthode de Fox-Godwin (Chapitre 1).

### 2.3 Corrélations dans la voie finale

A haute énergie incidente ( $E_i > 1\text{KeV}$ ) on peut considérer que les électrons incident et diffusé sont très rapides et que l'interaction de l'électron diffusé avec les électrons de la cible est négligeable. De même si les deux électrons éjectés ont une énergie très différente, leur interaction peut être aussi négligée en première approche. Ce n'est évidemment plus le cas lorsque ces deux électrons éjectés ont la même énergie. Il est alors essentiel de tenir compte de la répulsion électrostatique entre les deux électrons ( par l'intermédiaire du facteur de Gamow ou par le modèle BBK) afin d'éviter que l'événement principal soit la sortie simultanée de ces deux électrons dans une même direction.

### 2.4 Résultats pour la voie finale

Dans cette partie nous présenterons le comportement des fonctions d'ondes radiales décrivant les deux électrons éjectés, le potentiel de distorsion et également les déphasages.

#### 2.4.1 Potentiel de distorsion

##### 2.4.1-a Potentiel de Hartree - Fock

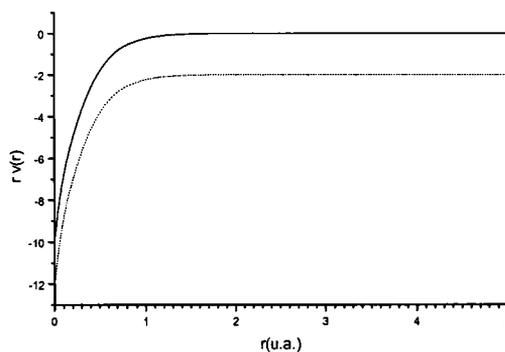


Figure 2.1.a: ... Produit de  $r$  avec le potentiel moyen sphérique de Hartree donné par l'expression (1.70) en fonction de  $r$ , — Produit de  $r$  avec le potentiel à courte de portée  $V_{cp}(r)$  défini par l'expression (1.71) en fonction de  $r$ , pour l'ion  $Mg^{2+}$ . La distance  $r_{limite}$  est telle que  $V_{cp}(r_{limite}) = 0$

Sur la figure (2.1) nous avons représenté le produit du potentiel  $V^{H.F.}(r)$  donné par l'expression (1.70) avec  $r$  et le produit de  $r$  avec le potentiel à courte portée  $V_{cp}(r)$ , en fonction de  $r$  pour l'ion

$Mg^{2+}$  ( $Z_n = 12$ ,  $Né = 10$ ,  $Z = 2$ ). A l'origine,  $rV_{cp}(r) = -Né$  et donc  $V^{H.F}(r) = -Z_n/r$ . Pour  $r > r_{limite}$ ,  $r V_{cp}(r) = 0$  et donc  $V^{H.F}(r) = -Z/r$ .

#### 2.4.1.2-b Potentiel de Bachelet, Hamann et Schlüter (BHS)

Ce potentiel est non-local et ses paramètres sont indépendants de l'énergie [Bhs82]. Il a été déterminé par référence à une seule configuration électronique. Chaque atome est caractérisé par plusieurs types de paramètres tabulés par les auteurs ( tableau IV de la référence [Bhs82] ). La partie locale est décrite au moyens de quatre coefficients  $\alpha_i^{core}$  et  $C_i^{core}$  ( $i=1,2$ ) tels que  $C_1^{core} + C_2^{core} = 1$ . La partie non-locale s'exprime en fonction de paramètres  $\alpha_i(l)$  ( $i = 1$  à  $3$ ), tels que  $\alpha_{i+3}(l) = \alpha_i(l)$  et  $C_j(l)$  ( $j = 1$  à  $6$ ). Ces derniers sont reliés aux  $A_i(l)$  intervenant dans l'expression du potentiel ( chapitre 1 équation (1.75)).

La figure 2.1.b représente  $\Delta V_1^{ion}(r)$  (1.73) en fonction de  $r$ .

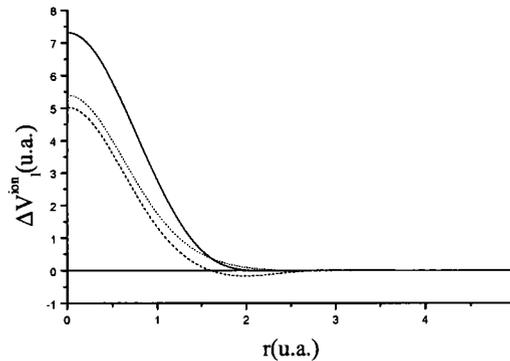


Figure 2.1.b :  $\Delta V_1^{ion}(r)$  donné par l'expression (1.74) en fonction de  $r$ , pour l'ion  $Mg^{++}$ ,  
(-----)  $l=0$ , (.....)  $l=1$ , (- - -)  $l=2$

#### 2.4.2 Fonctions radiales des électrons éjectés et déphasages.

Nous présentons pour les ondes partielles 0,1 les courbes des fonctions radiales  $X(l, pr)$  solutions de l'équation (1.38)) que nous comparons dans le cas où nous négligeons les effets de distorsion avec le cas où nous les considérons. Nous nous limitons aux énergies correspondant aux cinématiques étudiées :  $E_1 = E_2 = 5eV$  et  $E_1 = E_2 = 55eV$ .

L'examen de ces courbes montre bien que pour les grands moments angulaires les fonctions d'ondes radiales tendent vers les fonctions coulombiennes. Aux grandes énergies les fonctions

d'ondes radiales  $X(l, pr)$  oscillent très fortement, ce qui demande plus d'ondes partielles pour la convergence d'intégrales incluant ces fonctions.

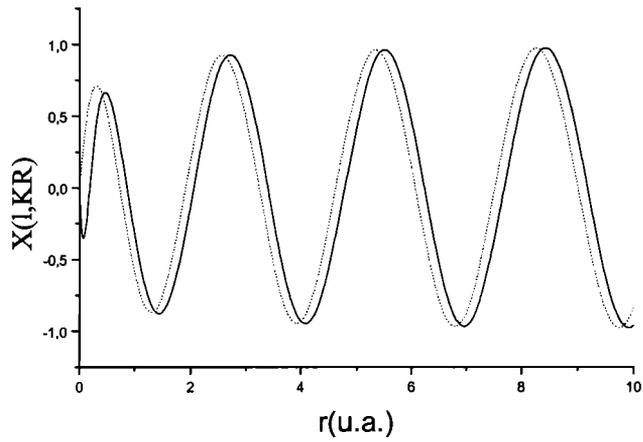


Figure 2.2: comparaison entre la fonction distordue (—) et la fonction coulombienne (...) représentant un électron éjecté d'énergie 5 eV, pour  $l=0$

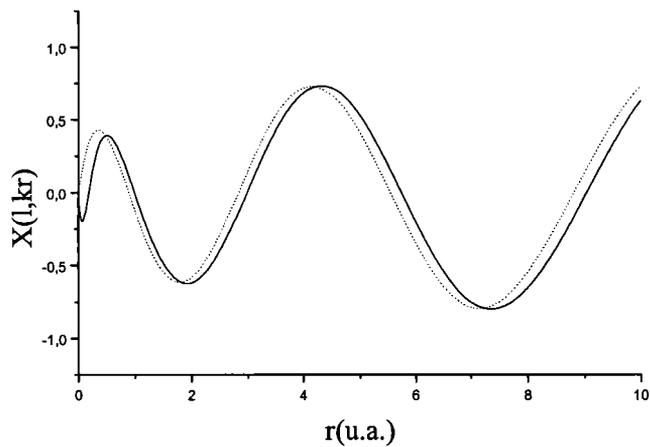


Figure 2.3: comparaison entre la fonction distordue (—) et la fonction coulombienne (...) représentant un électron éjecté d'énergie 55 eV, pour  $l=0$

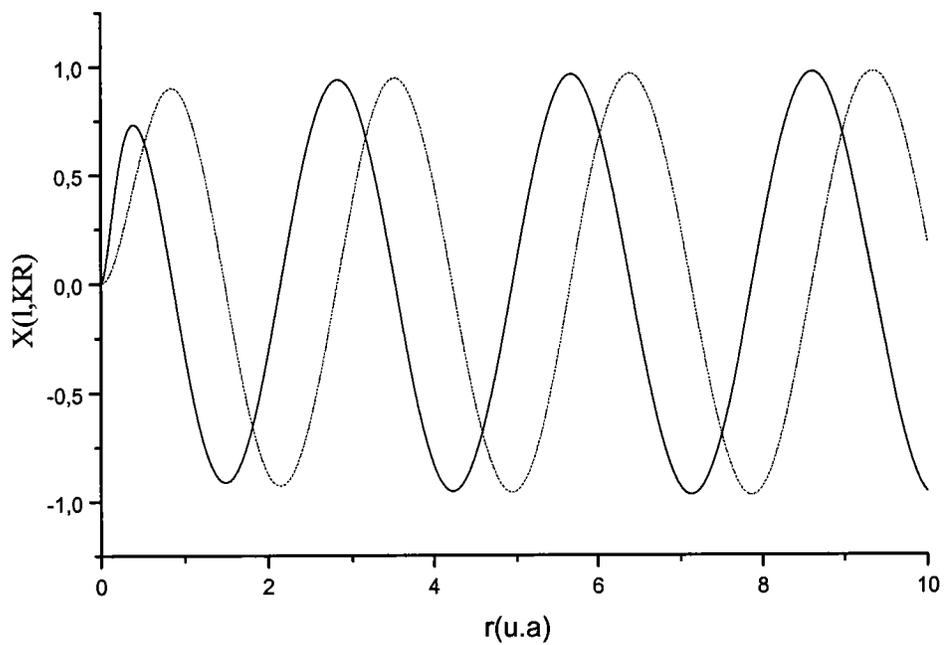


Figure 2.4: comparaison entre la fonction distordue (—) et la fonction coulombienne (....) représentant un électron éjecté d'énergie 55 eV, pour  $l=1$

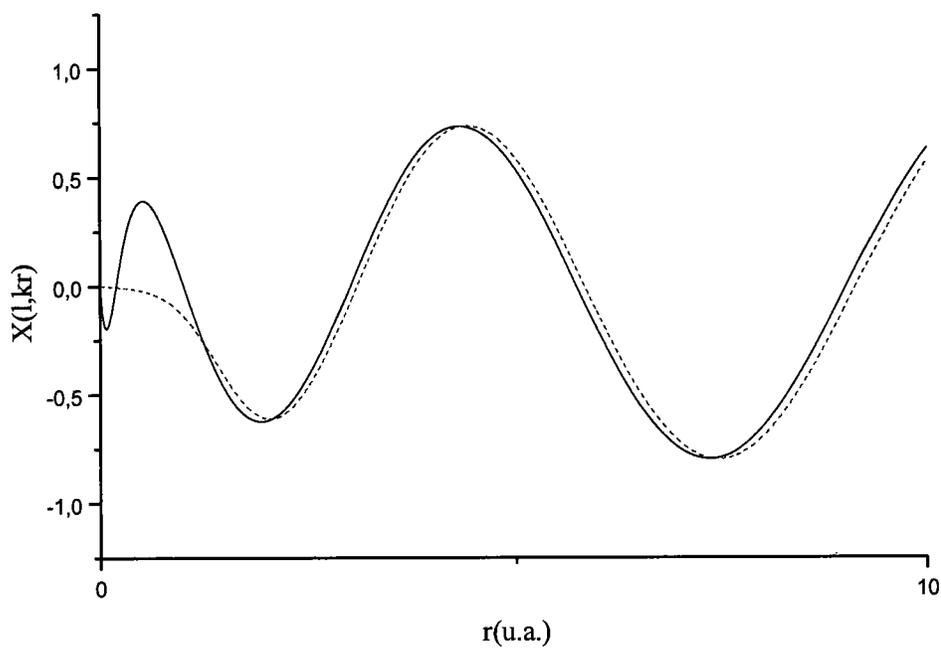


Figure 2.5: comparaison entre la fonction distordue calculée avec le potentiel de HARTREE(—) et la fonction distordue (....)calculée avec le potentiel de BHS représentant un électron éjecté d'énergie 5 eV, pour  $l=0$

### 2.4.3 Déphasage.

Dans cette partie nous présenterons les déphasages non coulombiens c'est-à-dire dûs au potentiel de distorsion résultant de l'effet de l'ion  $Mg^{2+}$  sur les deux électrons éjectés. Afin de vérifier nos calculs nous avons comparé nos résultats avec ceux de Robaux [Com] pour l'hélium et avec les calculs de Kobeissi [Kob91] pour le potentiel:

$$v_{cp}(r)=250(r^{-12}-r^{-6}) \quad (2.30)$$

#### 2.4 3-a.Comparaison avec les calculs de Robaux à $l=0$ pour différentes énergies

Energie (R)	Déphasages Calculé par Robaux [Com]	nos calculs
0	0.5	0.42914
1	0.41943	0.420030
2	0.40487	.40544
5	0.37813	0.37868
8	0.36154	0.36208
10	0.35286	0.35338

Ce tableau montre le bon accord de nos calculs avec ceux de Robaux .

**2.4.3-b.Comparaison avec les calculs de Kobeissi pour une énergie de 100 eV et pour différentes valeurs de l**

L	Calculé par Kobeissi	nos calculs
0	-0.431004	-0.430987
10	0.3778998	0.3778981
20	0.4659593	0.4659443
30	0.0566386	0.0566529
40	0.0135788	0.0135929
50	0.0044943	0.0045070

D'après ces comparaisons , nos résultats sont en accord avec ceux calculés par Robaux et Kobeissi pour différents potentiels.

Afin d'interpréter facilement les courbes de fonctions radiales nous présentons les déphasages correspondant.

**2.4.3-c.Déphasages introduit par le potentiel de distorsion de Hartree-Fock**

L	Déphasage pour E=5eV	Déphasage pour E=55eV
0	-0.204566	-0.362552
1	-1.412995	1.557005
2	0.044789	0.173477
3	0.000146	0.020934
4	0.000190	0.002898
5	0.000148	0.000459
6	0.000139	0.000118
7	0.000133	0.000069
8	0.000125	0.000060
9	0.000121	0.000057
10	0.000114	0.000055

**2.4.3-d.Déphasages obtenus avec le potentiel de BHS**

L	Déphasage pour E=5eV	Déphasage pour E=55eV
0	-0.307729	-0.780965
1	-1.325547	1.082537
2	-0.243281	-0.91703
3	-0.014837	-.263451
4	-0.000523	-0.008360
5	0.000405	0.008237
6	0.000055	-0.006565
7	-0.000021	-0.003972
8	-0.000031	0.000081
9	-0.000025	0.00095
10	-0.000032	0.00058

L'examen de ce dernier tableau nous montre que le déphasage dû au potentiel de distorsion diminue avec le moment angulaire. Cela est dû au fait que lorsque le moment angulaire est grand, la probabilité de présence près du noyau (où l'énergie potentielle est importante) est faible.

## 2.5 Conclusion.

Nous avons présenté dans ce chapitre les fonctions d'ondes initiales et finales utilisées pour décrire l'ionisation double du magnésium.

# CHAPITRE 3

## Spectroscopie électronique appliquée à la double ionisation du magnésium

### 3.1 INTRODUCTION

La corrélation des électrons de la cible jouent un rôle important dans la double ionisation. Dans le but d'une étude directe de ces corrélations, Popov et al [Pop96] ont récemment proposé une nouvelle situation expérimentale (EMS) où le mécanisme SO est le plus important [Twe92]. Le mécanisme SO, qui est supposé prépondérant à haute énergie incidente, consiste à décrire la double ionisation comme un processus en une étape. L'électron incident entre en collision avec l'un des électrons de la cible et l'éjecte. Un deuxième électron de la cible est alors éjecté suite à la variation brutale du potentiel électrostatique. Dans ce nouveau type de spectroscopie l'électron incident et un des deux éjectés sont rapides, le second éjecté ayant une vitesse faible. Cette étude a été appliquée à l'atome de l'hélium [Pop96], et dans ce chapitre nous étendrons cette étude à l'atome de magnésium. Dans l'étude réalisée par Popov et al l'électron éjecté lent est décrit par une onde coulombienne, tandis que dans la présente étude, ce dernier sera décrit soit par une fonction d'onde coulombienne soit par une fonction d'onde distordue. Pour étudier les effets de corrélation dans la cible nous allons utiliser plusieurs fonctions d'ondes incluant les corrélations radiales et/ou angulaires.

$$T_{fi} = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \langle \varphi_f^{(-)}(\vec{p}_2, \vec{r}_2) | e^{i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}_1} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (3.9)$$

avec:

$$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda R_\lambda(r_1) R_2(r_2) Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat{r}_1) Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{r}_2) \quad (3.10)$$

$$\vec{\Delta} = \vec{k} - \vec{p}_1. \quad (3.11)$$

Le développement de  $\varphi_f(\vec{p}_2, \vec{r}_2)$  et  $e^{i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}_1}$  en ondes partielles est donné par :

$$\varphi_f(\vec{p}_2, \vec{r}_2) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} (-1)^m (i)^l e^{-i\delta_1} \frac{F_1(p_2, r_2)}{p_2 r_2} Y_l^{-m}(\hat{p}_2) Y_l^m(\hat{r}_2), \quad (3.12)$$

$$e^{i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}_1} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l (-1)^m j_l(\Delta r_1) Y_l^{-m}(\hat{\Delta}) Y_l^m(\hat{r}_1). \quad (3.13)$$

Dans le cas où l'électron éjecté serait décrit par une onde coulombienne, c'est -à - dire qu'il se déplace dans un champ coulombien ( $-Z/r$ ), l'expression du déphasage coulombien est donnée analytiquement par :

$$\delta_1 = \arg \Gamma(1 + 1 + i\eta). \quad (3.14)$$

et la fonction radiale est donnée par (voir chapitre 2) :

$$F_1(p_2, r_2) = \frac{1}{2(2l+1)!} |\Gamma(1 + 1 + i\eta)| e^{\frac{-\eta\pi}{2}} (2p_2 r_2)^{(l+1)} e^{-ip_2 r_2} {}_1F_1(1 + 1 - i\eta + 2 + 2ip_2 r_2), \quad (3.15)$$

avec  $\eta = -2/p_2$  est le paramètre de Sommerfeld.

# CHAPITRE 3

## Spectroscopie électronique appliquée à la double ionisation du magnésium

### 3.1 INTRODUCTION

La corrélation des électrons de la cible jouent un rôle important dans la double ionisation. Dans le but d'une étude directe de ces corrélations, Popov et al [Pop96] ont récemment proposé une nouvelle situation expérimentale (EMS) où le mécanisme SO est le plus important [Twe92]. Le mécanisme SO, qui est supposé prépondérant à haute énergie incidente, consiste à décrire la double ionisation comme un processus en une étape. L'électron incident entre en collision avec l'un des électrons de la cible et l'éjecte. Un deuxième électron de la cible est alors éjecté suite à la variation brutale du potentiel électrostatique. Dans ce nouveau type de spectroscopie l'électron incident et un des deux éjectés sont rapides, le second éjecté ayant une vitesse faible. Cette étude a été appliquée à l'atome de l'hélium [Pop96], et dans ce chapitre nous étendrons cette étude à l'atome de magnésium. Dans l'étude réalisée par Popov et al l'électron éjecté lent est décrit par une onde coulombienne, tandis que dans la présente étude, ce dernier sera décrit soit par une fonction d'onde coulombienne soit par une fonction d'onde distordue. Pour étudier les effets de corrélation dans la cible nous allons utiliser plusieurs fonctions d'ondes incluant les corrélations radiales et/ou angulaires.

### 3.2 SECTION EFFICACE QUINTUPLEMENT DIFFERENTIELLE

Dans cette étude, les quantités de mouvement de l'électron incident, diffusé, premier éjecté (rapide) et le deuxième éjecté (lent) seront notées respectivement  $\vec{p}_i, \vec{p}_s, \vec{p}_1$  et, le moment de transfert est  $\vec{k}$ . Les énergies de l'incident, diffusé, premier éjecté et le deuxième éjecté seront notées respectivement  $E_i, E_s, E_1$  et  $E_2$ .

Le principe de conservation d'énergie et de la quantité de mouvement donne les relations suivantes :

$$E_i + \xi_i^A = E_s + E_1 + E_2 + \xi_i^{A++} \quad (3.1)$$

$$\vec{p}_i = \vec{p}_s + \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{k}_{ion} \quad (3.2)$$

où  $\vec{k}_{ion}$  représente la quantité de mouvement de l'ion supposé au repos dans l'état initial.

La différence  $I^{++} = \xi_i^A - \xi_i^{A++}$  représente l'énergie de double ionisation de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ) ( $I^{++} = 22.7$  eV).

Dans le cadre de la première approximation de Born, la section efficace quintuplement différentielle est donnée formellement par :

$$\frac{d^5\sigma}{dE_s dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s} = \frac{4p_s p_1 p_2 C(y) f(x)}{p_i k^4} |T_{fi}|^2, \quad (3.3)$$

Les indices i, 1, 2 et s se réfèrent respectivement à l'électron incident, à l'électron éjecté rapide, à l'électron éjecté lent et au diffusé.

$C(y)$  représente l'effet d'échange entre l'électron diffusé et l'électron éjecté rapide donné par la formule de Mott [Pop96]:

$$C(Y) = 1 + y^2 - y^2 \cos(2x \log(y)), \quad (3.4)$$

avec :

$$x = \frac{1}{|\vec{p}_s - \vec{p}_1|} \text{ et } y = \frac{|\vec{p}_i - \vec{p}_1|}{|\vec{p}_i - \vec{p}_s|}. \quad (3.5)$$

Le terme  $f(x) = \frac{2\pi x}{e^{2\pi x} - 1}$  est le facteur de Gamow [Cap95] qui tient compte de la répulsion électronique entre les deux électrons éjectés .

L'amplitude de transition  $T_{fi}$  est donné par :

$$T_{fi} = \langle \psi_f^{(-)} | -N + \sum_{n=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_n} | \phi_i \rangle, \quad (3.6)$$

où  $\phi_i$  est la fonction d'onde décrivant la cible dans l'état initial et  $\psi_f^{(-)}$  décrit les deux électrons dans le continuum.  $\vec{r}_n$  représente la distance entre le  $n^{\text{ième}}$  électron et le noyau et  $N$  le nombre total des électrons de la cible dans l'état initial

En utilisant l'approximation du cœur gelé c'est - à - dire que la fonction d'onde de l'ion est la même que celle des électrons de la cible dans l'état initial, le problème des  $N$  - électrons de la cible se réduit à un problème de deux électrons actifs de la cible. L'élément de matrice  $T_{fi}$  devient :

$$T_{fi} = \langle \psi_f^{(-)} | -2 + \sum_{n=1}^2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_n} | \phi_i \rangle. \quad (3.7)$$

La description de l'électron éjecté rapide par une onde plane permet d'écrire :

$$\psi_f^{(-)}(\vec{p}_1, \vec{r}_1; \vec{p}_2, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p}_s \cdot \vec{r}_0} \varphi_f^{(-)}(\vec{p}_2, \vec{r}_2) \quad (3.8)$$

Pour réaliser la cinématique proposée par Popov et al où l'électron diffusé et un électron éjecté ont des énergies approximativement égales, on considère un moment de transfert ayant une grande valeur. En portant l'équation (3.8) dans (3.7) l'élément de matrice  $T_{fi}$  devient :

$$T_{\vec{r}_1} = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \langle \varphi_f^{(-)}(\vec{p}_2, \vec{r}_2) | e^{i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}_1} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (3.9)$$

avec:

$$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda R_\lambda(r_1) R_2(r_2) Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat{r}_1) Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{r}_2) \quad (3.10)$$

$$\vec{\Delta} = \vec{k} - \vec{p}_1. \quad (3.11)$$

Le développement de  $\varphi_f(\vec{p}_2, \vec{r}_2)$  et  $e^{i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}_1}$  en ondes partielles est donné par :

$$\varphi_f(\vec{p}_2, \vec{r}_2) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} (-1)^m (i)^l e^{-i\delta_1} \frac{F_1(p_2, r_2)}{p_2 r_2} Y_l^{-m}(\hat{p}_2) Y_l^m(\hat{r}_2), \quad (3.12)$$

$$e^{i\vec{\Delta} \cdot \vec{r}_1} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l (-1)^m j_l(\Delta r_1) Y_l^{-m}(\hat{\Delta}) Y_l^m(\hat{r}_1). \quad (3.13)$$

Dans le cas où l'électron éjecté serait décrit par une onde coulombienne, c'est -à - dire qu'il se déplace dans un champ coulombien  $(-Z/r)$ , l'expression du déphasage coulombien est donnée analytiquement par :

$$\delta_1 = \arg \Gamma(1 + 1 + i\eta). \quad (3.14)$$

et la fonction radiale est donnée par (voir chapitre 2) :

$$F_1(p_2, r_2) = \frac{1}{2(2l+1)!} |\Gamma(1 + 1 + i\eta)| e^{\frac{-\eta\pi}{2}} (2p_2 r)^{(l+1)} e^{-ip_2 r} {}_1F_1(1 + 1 - i\eta + 2 + 2ip_2 r), \quad (3.15)$$

avec  $\eta = -2/p_2$  est le paramètre de Sommerfeld.

Après simplification  $T_{fi}$  s'écrit sous la forme suivante :

$$T_{fi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi^2}} \sum_{\lambda}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_{\lambda}=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda} (2\lambda + 1) e^{i\sigma_{\lambda}(p_2)} I_{\lambda}(p_2, \Delta) P_{\lambda}(\cos \alpha) \quad (3.16)$$

avec :

$$\cos(\alpha) = \frac{\bar{\Delta} \cdot \bar{p}_2}{\Delta p_2}$$

$$I_{\lambda}(p_2, \Delta) = \int_0^{\infty} r_1^2 R_{\lambda}(r_1) j_1(\Delta r_1) dr_1 \int_0^{\infty} r_2 R_{\lambda}(r_2) \frac{F_1(p_2 r_2)}{p_2} dr_2 \quad (3.17)$$

L'atome de magnésium est composé d'un cœur de configuration électronique  $1s^2 2s^2 2p^6$  et de deux électrons de valence.

Dans le but d'introduire les effets de distorsion, la fonction d'onde radiale sera déterminée numériquement par la résolution de l'équation de Schrödinger (voir chapitre 2). Dans ce cas, le déphasage est donné par la somme du déphasage coulombien (1.36) et du déphasage dû à l'ion résiduel  $Mg^{2+}$  (équation (1.62)).

### 3.3 section efficace quadruplement différentielle

L'intégration de la section efficace quintuplement différentielle sur l'angle solide de l'électron éjecté lent permet d'obtenir la section efficace quatre fois différentielle correspondante aux expériences dites  $(e, (3-1)e)$ . Ces expériences consistent à détecter l'électron diffusé et l'électron éjecté rapide en coïncidence, ce qui permet d'obtenir un nombre d'événements plus important que dans le cas des  $(e, 3e)$ .

$$\frac{d^4 \sigma}{dE_1 dE_2 d\Omega_1 d\Omega_s} = \frac{4p_s p_1 p_2}{p_i q^4} f(x) c(y) \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \alpha_{\lambda}^2 (2\lambda + 1) |I_{\lambda}(p_2, \Delta)|^2. \quad (3.18)$$

### 3.4 RESULTATS

Dans ce chapitre, on s'est limité à l'étude de l'atome de magnésium dans une géométrie coplanaire symétrique. Les sections efficaces quintuplement et quadruplement différentielles (SEDQ et SED4) sont fonctions des angles, en particulier l'angle  $\theta_1$  entre l'électron incident et l'électron éjecté rapide. De plus, la SEDQ est une fonction de l'angle  $\theta_2$  entre l'électron incident et l'électron éjecté lent. Dans le but d'examiner l'importance des corrélations radiales

et angulaires, différentes fonctions d'ondes ont été considérées dans cette étude: (a) la fonction d'onde Hartree – Fock de Clementi et Roetti [Cle74] qui ne contient ni corrélation radiale ni corrélation angulaire; (b) la fonction d'onde construite par interaction de configurations de Langlois [Lan] qui inclut des corrélations radiales par addition du terme  $4s^2$  à la fonction d'onde de Hartree-Fock modifiée (voir annexe c); (c) la fonction d'onde d'interaction de configuration de Sanchez [San] qui inclut des corrélations radiales et angulaires (voir annexe c). Nous considérerons le cas où  $E_s = E_1 = 500$  eV et  $E_2 = 25$  eV, 10 eV, 1 eV qui pourrait être l'objet de prochaines études expérimentales de la part du groupe du Pr. COPLAN.

La SEDQ présentée sur la figure 1-a est calculée en utilisant la fonction d'onde (a) pour décrire l'état initial de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ). Pour mettre en évidence l'effet de distorsion, l'électron éjecté lent sera décrit par une onde distordue (figures :1-a-2, 1-b-2, 1-c-2, 2-a-2, 2-b-2, 2-c-2, 3-a-2, 3-b-2, 3-c-2) et par une onde coulombienne (figures : 1-a-1, 1-b-1, 1-c-1, 2-a-1, 2-b-1, 2-c-1, 3-a-1, 3-b-1, 3-c-1). Comme dans le cas de l'atome d'hélium [Pop96], la SEDQ présente un maximum pour un angle  $\theta_1 = \theta_s = \theta$  au voisinage de  $45^\circ$ . Nous observons également que le maximum est obtenu pour  $E_2 = 10$  eV (Fig. 1b). Dans le cas où nous considérons la fonction d'onde (b) qui inclut uniquement des corrélations radiales, beaucoup de différences apparaissent : la SEDQ augmente et présente un maximum pour une énergie  $E_2 = 1$  eV (Fig. 2-a). la structure présente trois pics différents où deux sont dus à la configuration  $3s4s$  (corrélation radiale) et le pic principale est du à la configuration  $3s^2$ , dans le cas de l'hélium nous observons une structure à deux pics [Pop96]. Si nous considérons une fonction d'onde plus corrélée pour décrire l'état initial des différences importantes apparaissent : la structure de la SEDQ change considérablement Fig. 3-c. La même allure est obtenue dans le cas de l'hélium si on utilise une fonction d'onde incluant des corrélations radiales et angulaires [Pop96]. De plus, la SEDQ augmente et la structure présente un deuxième pic, le maximum est obtenu également pour  $E_2 = 1$  eV. On peut conclure que la SEDQ est très sensible aux effets de corrélations.

La comparaison des SEDQ calculées avec une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent (figures 1-a-1, 1-b-1, 1-c-1, 2-a-1, 2-b-1, 2-c-1, 3-a-1, 3-b-1, 3-c-1), et ceux obtenus en décrivant l'électron éjecté lent avec une fonction d'onde distordue (1-a-2, 1-b-2, 1-c-2, 2-a-2, 2-b-2, 2-c-2, 3-a-2, 3-b-2, 3-c-2), montre que l'effet de distorsion est très important sur la SEDQ.

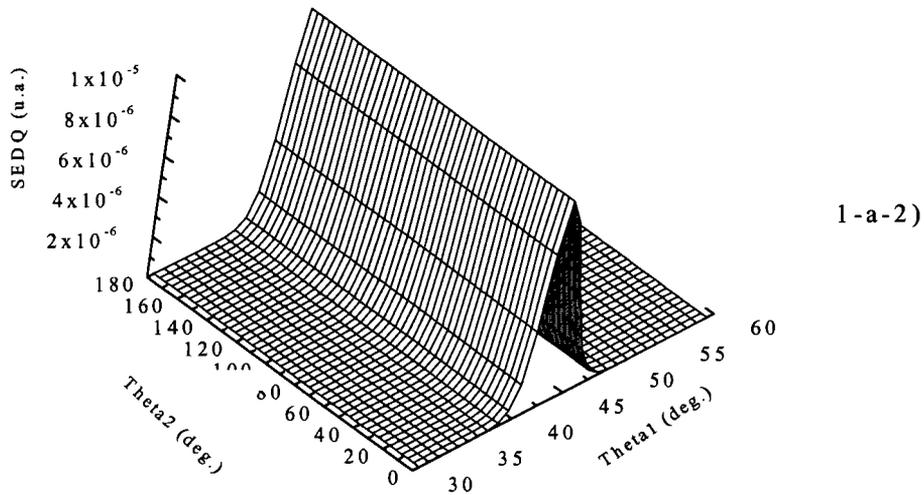
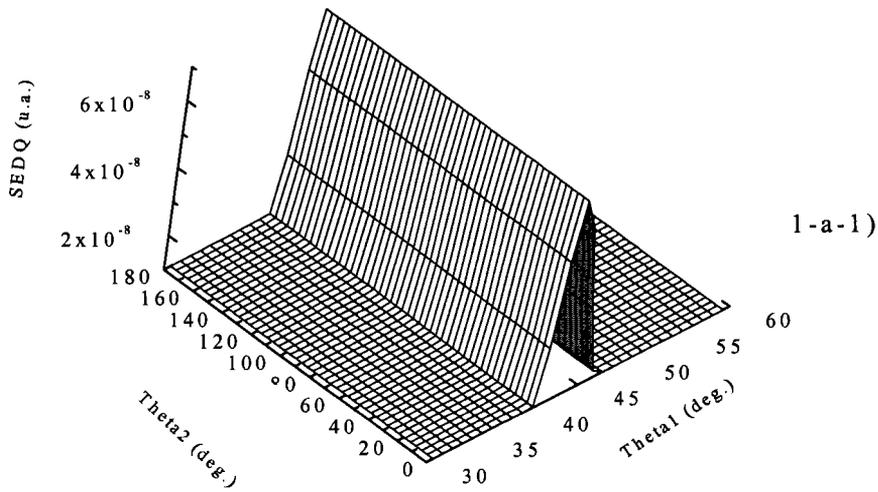


Figure 1-a

FIG. 1-a.: La SEDQ (Section efficace différentielle quintuple en unité atomique) pour le processus de la double ionisation par impact électronique ( $e, 3e$ ) de l'atome de magnésium dans une géométrie coplanaire symétrique (EMS).  $E_1 = E_2 = 500$  eV,  $\theta_1 = \theta_s = \theta$ , la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Clementi et Roetti (fonction (a) dans le texte). 1.a-1)  $E_2 = 1$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent, 1.a-2)  $E_2 = 1$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent

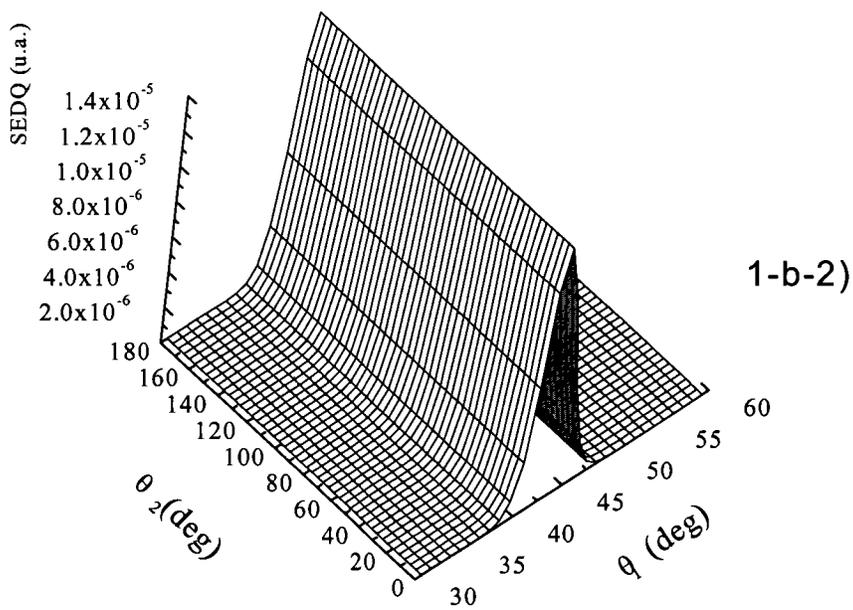
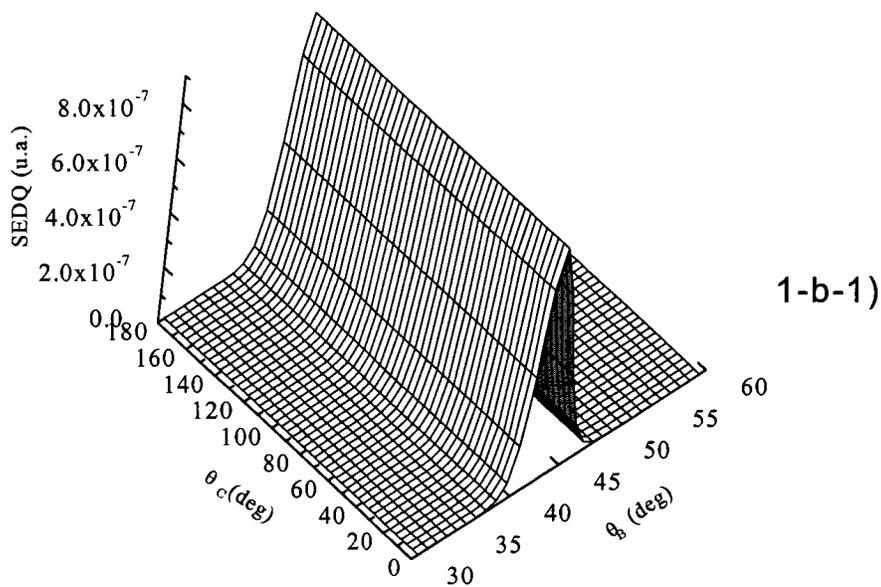


Figure 1-b

Figure 1-b: Mêmes conditions que la figure 1-a  
 1-b-1)  $E_2 = 10$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent,  
 1-b-2)  $E_2 = 10$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent

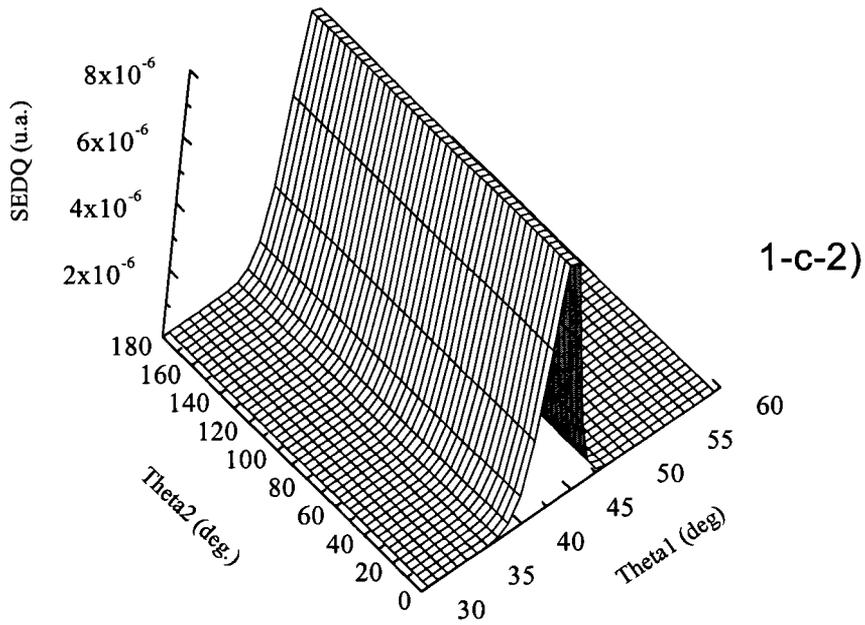
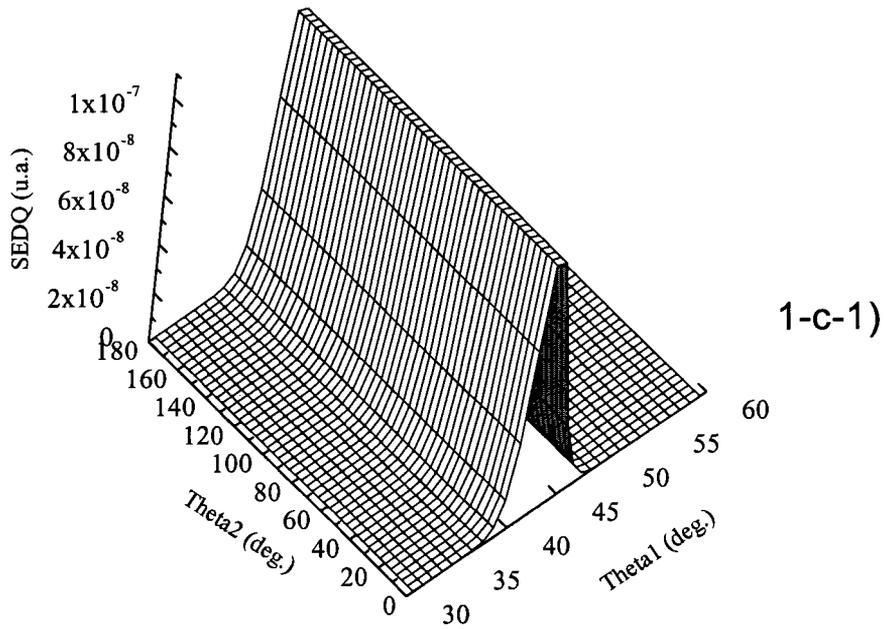


Figure 1-c

Figure 1-c: Mêmes conditions que la figure 1-a  
 1-c-1)  $E_2 = 25$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent,  
 1-c-2)  $E_2 = 25$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

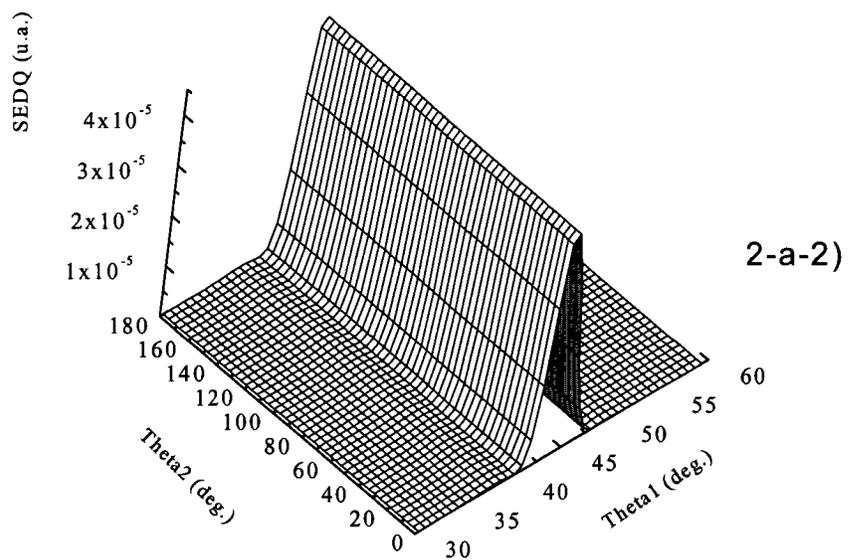
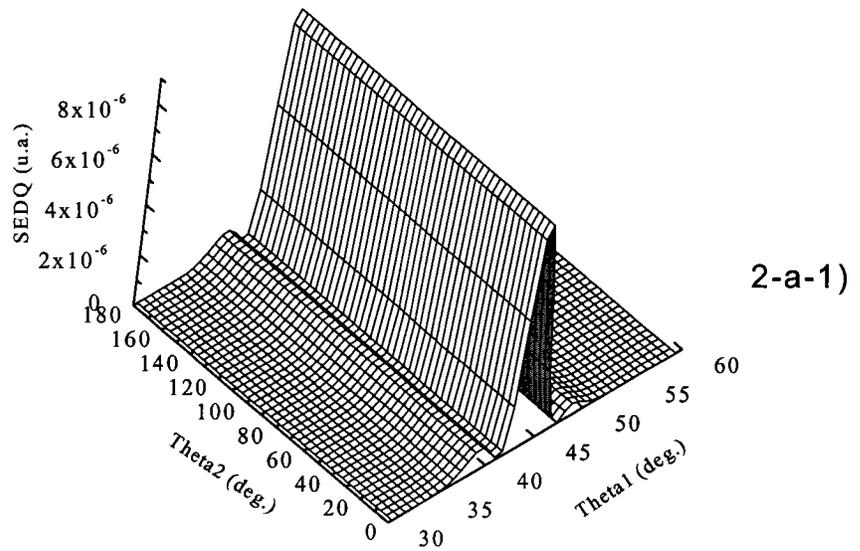


Figure 2-a

FIG. 2-a. Mêmes conditions que la figure 1-a mais la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Langlois qui inclut uniquement des corrélations radiales (fonction (b) dans le texte). 2-a-1)  $E_2 = 1$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent, 2-a-2)  $E_2 = 1$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

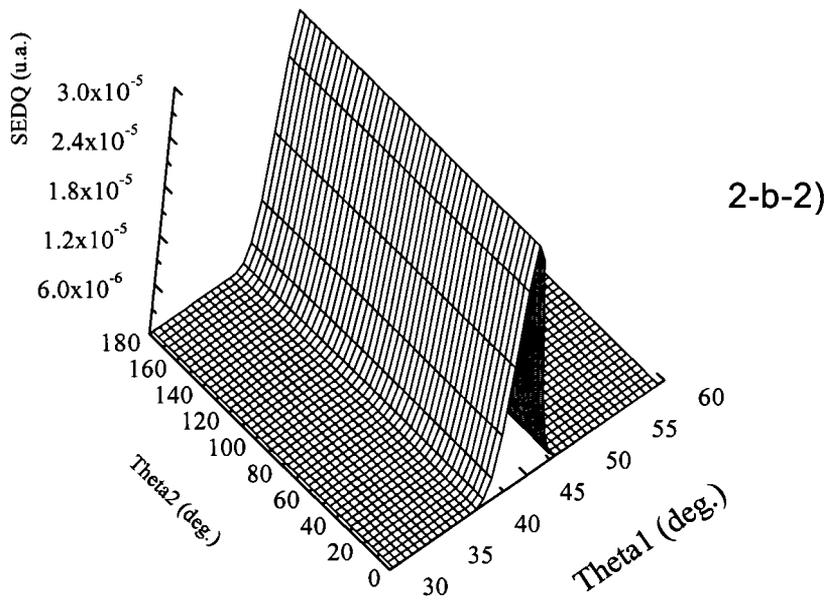
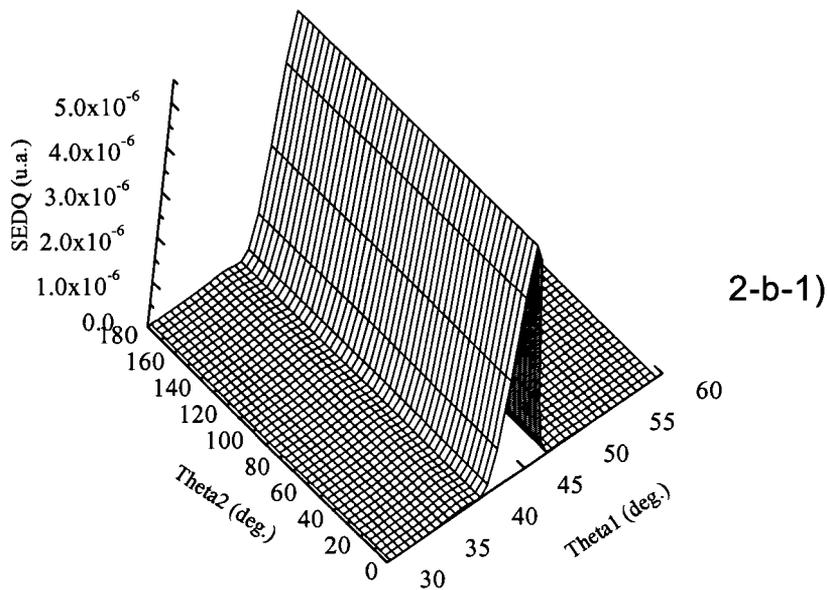


Figure 2-b

FIG. 2-b. Mêmes conditions que la figure 1-a mais la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Langlois qui inclut uniquement des corrélations radiales (fonction (b) dans le texte). 2-b-1)  $E_2 = 10$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent, 2-b-2)  $E_2 = 10$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

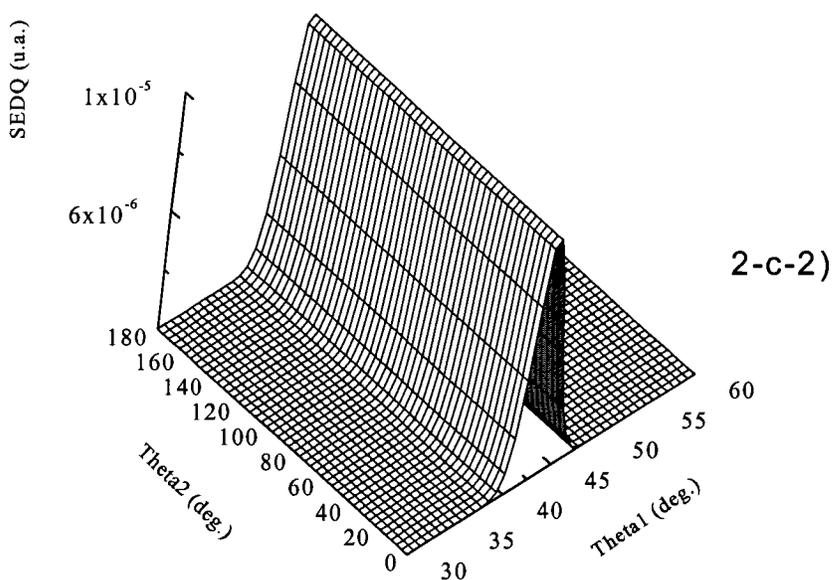
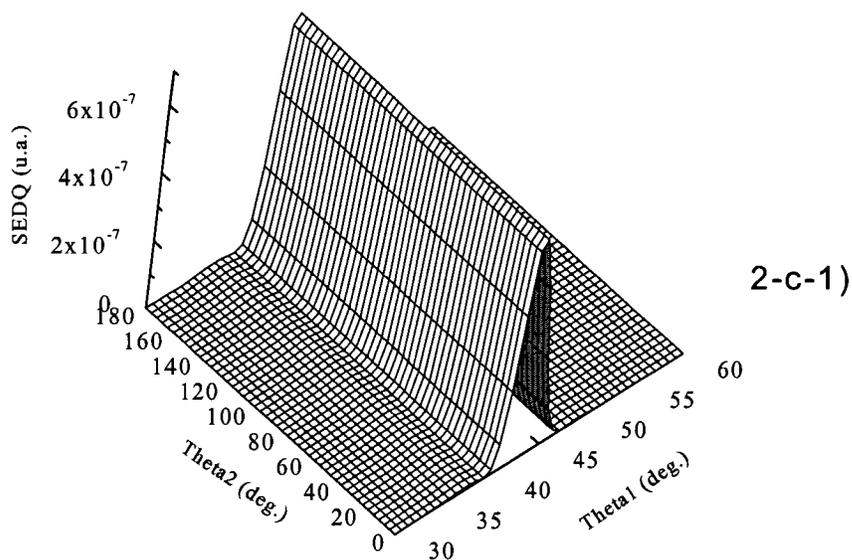


Figure 2-c

FIG. 2-c. Mêmes conditions que la figure 1-a mais la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Langlois qui inclut uniquement des corrélations radiales (fonction (b) dans le texte). 2-c-1)  $E_2 = 25$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent, 2-c-2)  $E_2 = 25$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

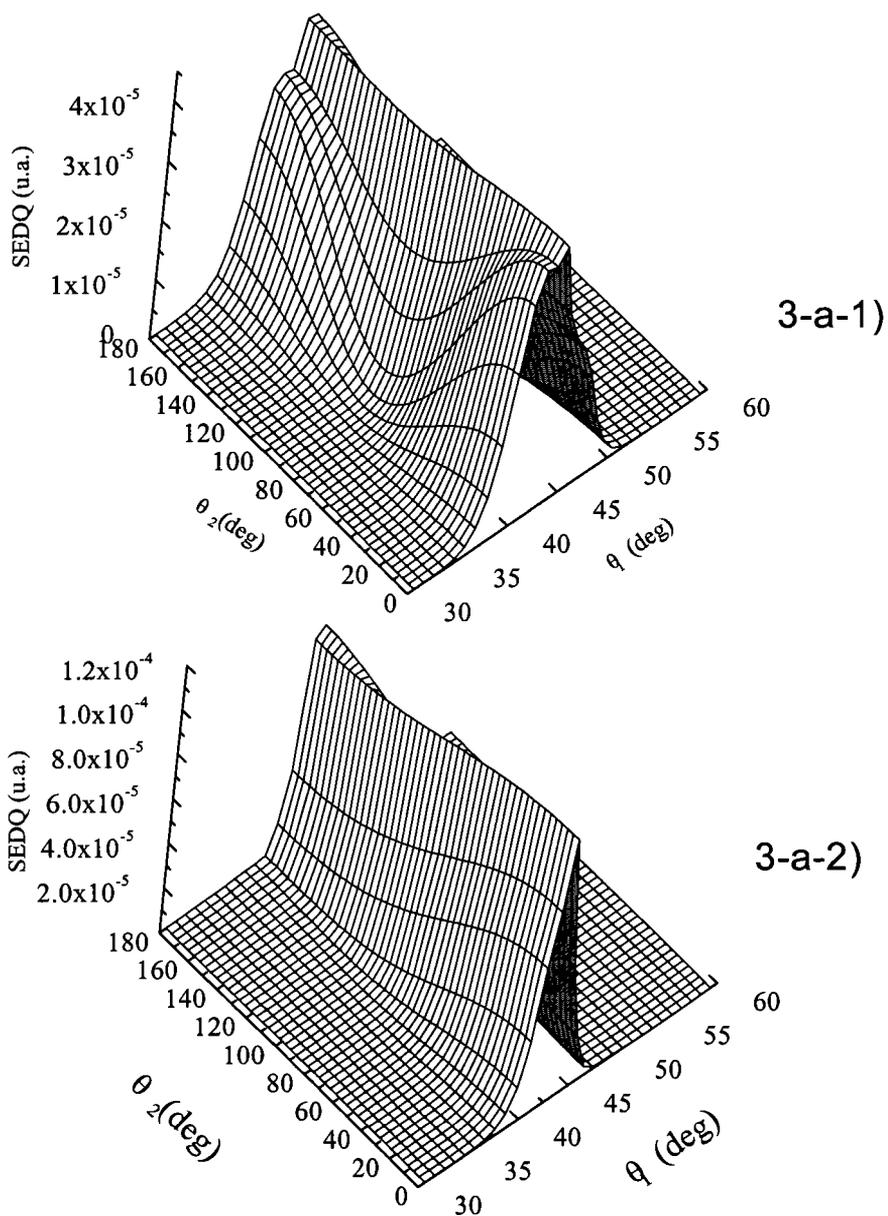


Figure 3-a

FIG. 3-a. Mêmes conditions que la figure 1-a mais la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Sanchez qui inclut les corrélations radiales et angulaires (fonction (c) dans le texte).

3-a-1)  $E_2 = 1$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent,

3-a-2)  $E_2 = 1$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

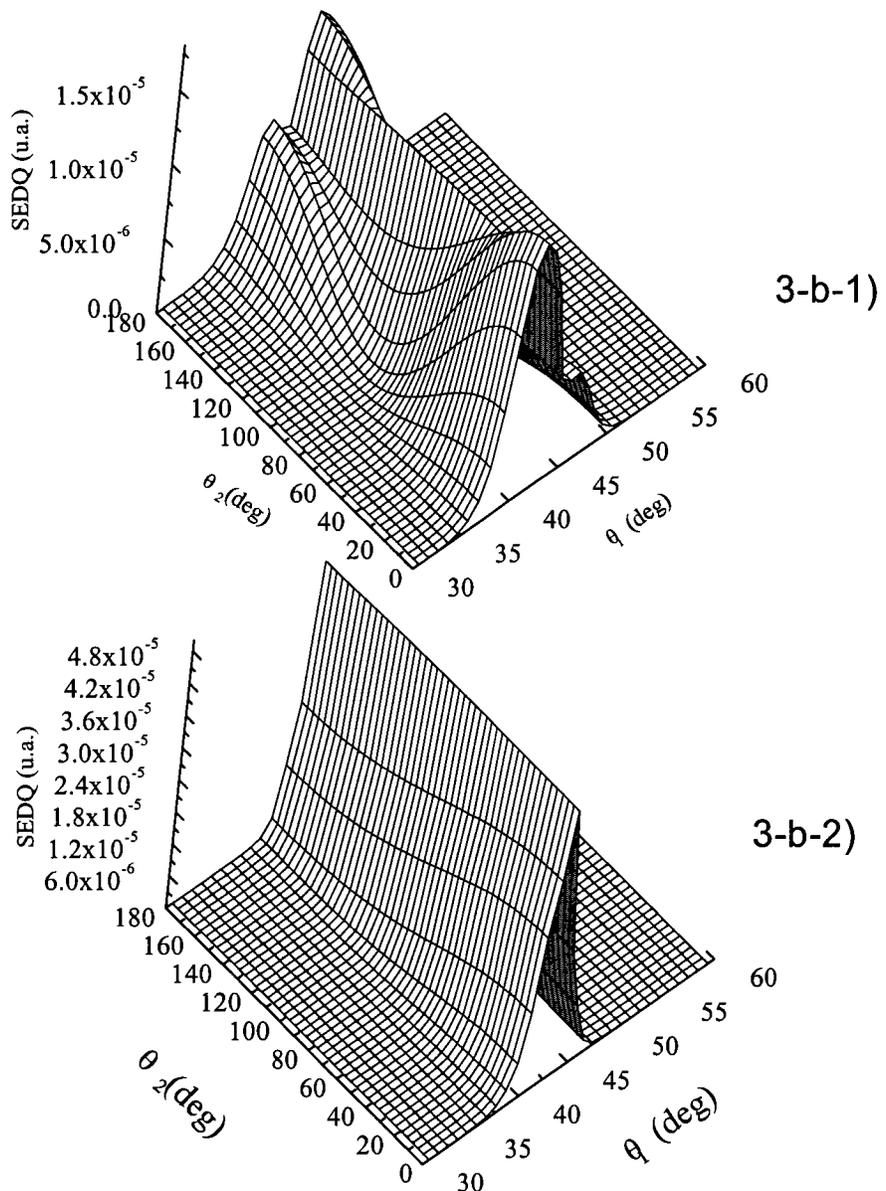


Figure 3-b

FIG. 3-b Mêmes conditions que la figure 1-a mais la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Sanchez qui inclut les corrélations radiales et angulaires (fonction (c) dans le texte).

3-b-1)  $E_2 = 10$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent,

3-b-2)  $E_2 = 10$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

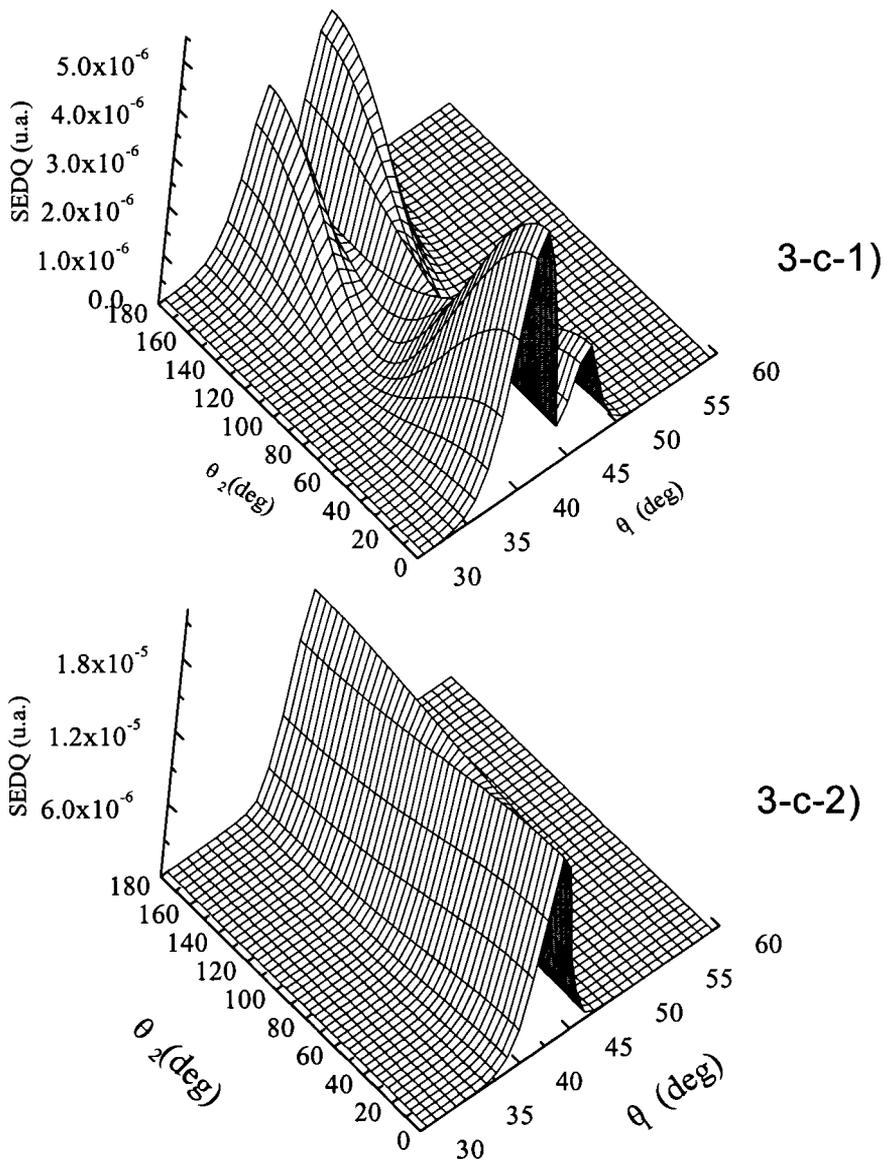


Figure 3-c

FIG. 3-c. Mêmes conditions que la figure 1-a mais la fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Sanchez qui inclut les corrélations radiales et angulaires (fonction (c) dans le texte).

3-c-1)  $E_2 = 25$  eV et une fonction d'onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté lent,

3-c-2)  $E_2 = 25$  eV et une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

Vu la difficulté détecter les trois électrons sortant (mesurer la SEDQ qui correspond aux expériences (e, 3e)), nous allons étudier le cas correspondant aux expériences (e, (3-1)e). La section efficace quatre fois différentielle correspondant à ce dernier type d'expériences, est une fonction de l'angle entre l'électron diffusé et l'électron éjecté rapide qui sont détectés par coïncidence (comme dans les expériences (e, 2e)).

L'électron éjecté à faible énergie n'est pas détecté et son énergie est déterminée à l'aide du principe de conservation de l'énergie (voir équation (3.1)). Nous allons examiner quatre autres fonctions d'ondes : (a) et (c) sont inchangés, (b') est la fonction d'onde de Langlois [Lan] qui inclut les corrélations radiales et angulaires en ajoutant les termes  $4s^2$ ,  $4p^2$ ,  $4d^2$ ,  $3p^2$  et  $3d^2$  à la  $3s^2$  fonction de Hartree-Fock modifiée et (d) est la fonction d'onde construite et utilisée récemment par Burgess et al [Bur] pour étudier l'excitation des atomes par impact électronique. Cette fonction d'onde inclut des corrélations angulaires ( $3p^2$ ,  $3d^2$ ) avec des paramètres légèrement différents de ceux de la fonction de Langlois ( $n=3$ ) (voir annexe c).

Toutes les figures sont présentées pour  $E_1 = E_s = 500$  eV. Dans chaque cas, nous avons utilisé une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron éjecté lent.

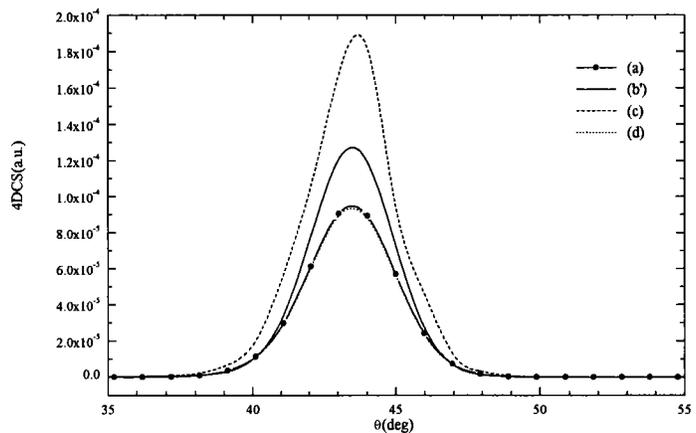


FIG. 4 La section efficace quatre fois différentielle de la double ionisation par impact électronique (e, (3-1)e) de l'atome de magnésium  $3s^2$  dans une géométrie coplanaire symétrique (EMS).  $E_1 = E_s = 500$  eV,  $\theta_1 = \theta_s = \theta$  et  $E_2 = 25$  eV. La fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est : (a) Clementi et Roetti, (b') Langlois, (c) Sanchez, (d) Burgess. Les fonctions d'ondes (b'), (c) et (d) incluent des corrélations radiales et angulaires. Dans cette figure, les courbes (a) et (d) sont indistinguables

La figure 4 prouve que les expériences (e, 3-1e) sont un outil puissant pour étudier la corrélation dans l'état initial d'atomes : la section efficace quatre fois différentielle dépend fortement du choix des fonctions d'ondes (a), (b'), et (c) c'est à dire des fonctions d'ondes incluant des parties radiales différentes. Une structure d'un seul pic est observée (le maximum

est au voisinage de  $40^\circ$  et dépend de l'énergie  $E_c$  même si on utilise la fonction d'onde la plus simple (a)).

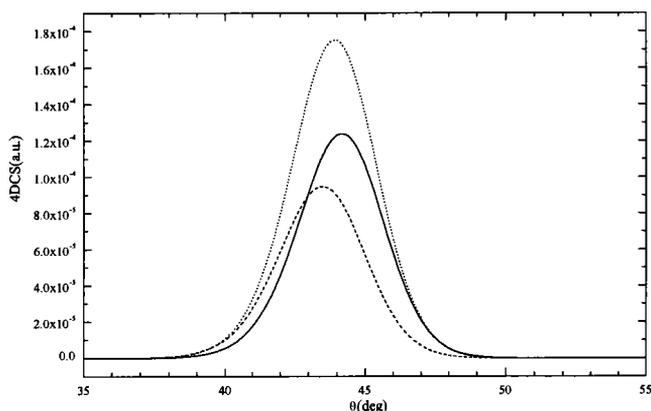


FIG. 5 La section efficace quatre fois différentielle de la double ionisation par impact électronique ( $e, (3-1)e$ ) de l'atome de magnésium  $3s^2$  dans une géométrie coplanaire symétrique (EMS).  $E_1 = E_2 = 500$  eV,  $\theta_1 = \theta_3 = \theta$ . La fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est la fonction de Clementi et Roetti (fonction (a) dans le texte) : —  $E_2 = 1$  eV ; ...  $E_2 = 10$  eV ; ---  $E_2 = 25$  eV.

La figure 5 représente la section efficace quatre fois différentielle pour les mêmes énergies de l'électron éjecté rapide que celles de la figure 4 : le maximum est obtenu pour une énergie  $E_2 = 10$  eV. Une fois de plus la même conclusion est obtenue en utilisant la fonction d'onde (a). En revanche, si on considère une fonction plus corrélée (c) on obtient un maximum pour une énergie  $E_2 = 1$  eV. (fig.6). Un résultat identique est obtenu en utilisant la fonction (b'). Il est important de noter que si nous négligeons les effets de distorsion (le potentiel vu par l'électron éjecté lent se réduit simplement à  $-Z/r$ ), la section efficace quatre fois différentielle et la SEDQ se comportent différemment (par rapport au cas où les effets de distorsion seraient introduits fig 7.). La distorsion a tendance à diminuer ou à masquer les effets de corrélations pour la section efficace quatre fois différentielle calculée en utilisant différentes fonctions d'ondes. Cela est dû aux effets de distorsion de la fonction d'onde décrivant l'électron éjecté lent. La SEDQ et la SED4 sont principalement sensibles aux effets de corrélations radiales dans la cible (figure 4). Ainsi les fonctions d'ondes (a) et (d) ont la même configuration radiale ( $3s^2$ ) par suite les sections efficaces quatre fois différentielle sont identiques. Concernant les fonctions d'ondes (b) et (c) où les configurations de corrélations radiales sont différentes ( $3s^2, 4s^2$ ) et ( $3s^2, 3s4s, 3s5s, 3s6s$  respectivement) les 4 DCS correspondantes sont différentes. On peut conclure que la distorsion agit uniquement sur les corrélations radiales.

La section efficace quatre fois différentielle est également un moyen intéressant pour étudier les corrélations dans l'état initial

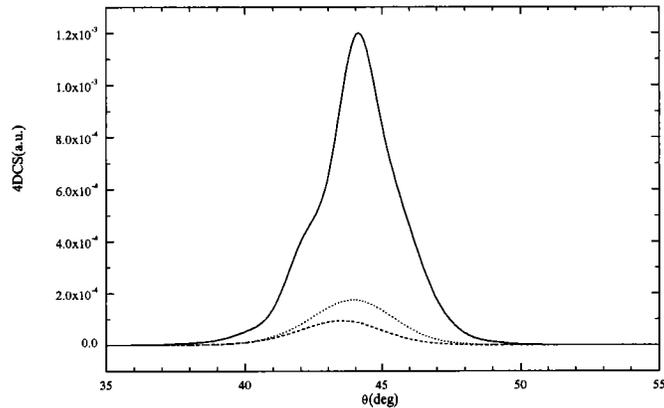


FIG. 6 Mêmes conditions que la figure 5 mais avec utilisation de la fonction d'onde de Sanchez (c) qui inclut des corrélations radiales et angulaires.

La figure 7 montre l'effet de la distorsion en comparant la 4DCS obtenue avec une fonction d'onde distordue pour décrire l'électron lent, avec la 4DCS obtenue en utilisant une fonction d'onde coulombienne. On constate que la structure de la 4DCS présente deux pics qui disparaissent en décrivant l'électron lent avec une fonction d'onde coulombienne. Dans la géométrie EMS La distorsion augmente la 4DCS et masque les effets de corrélations angulaire dans l'état initial.

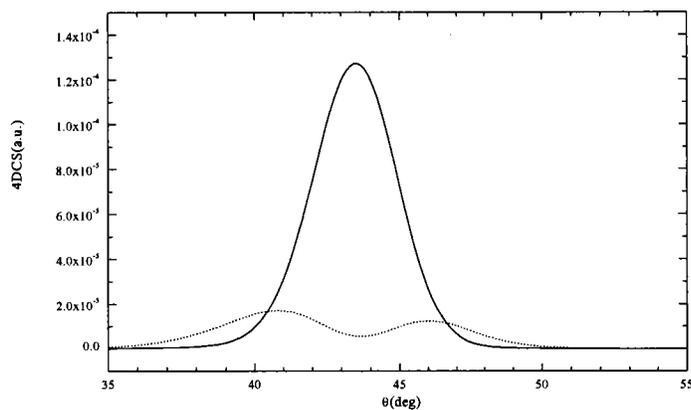


FIG.7. La section efficace quatre fois différentielle de la double ionisation par impact électronique ( $e, 3-1e$ ) de l'atome du magnésium  $3s^2$  dans une géométrie coplanaire symétrique (EMS).  $E_1 = E_s = 500$  eV,  $E_2 = 25$  eV et  $\theta_1 = \theta_s = \theta$ . La fonction d'onde utilisée pour décrire l'état initial est celle de Langlois ((b') dans le texte): —la fonction d'onde distordue pour l'électron éjecté lent ; ...onde coulombienne pour l'électron éjecté lent.

### 3.5 CONCLUSION

Nous avons calculé la SEDQ et SED4 pour le processus de la double ionisation par impact électronique de l'atome de magnésium dans cette nouvelle situation cinématique. Dans cette géométrie, l'électron diffusé et un des deux électrons éjectés partent avec la même énergie. Si les trois électrons sont détectés en coïncidence (expériences (e, 3e)) nous obtenons la SEDQ qui est très sensible aux effets de corrélations dans l'état initial de la cible. Si le diffusé et l'électron éjecté rapide sont détectés en coïncidences (expériences (e, 3-1e)) nous obtenons la section efficace quatre fois différentielle qui est également sensible aux effets de corrélations. L'étude réalisée dans cette cinématique particulière montre que les corrélations électroniques de la cible seraient ainsi facilement accessibles par l'expérience.

# CHAPITRE 4

## Processus de la double ionisation appliquée à l'atome de magnésium

### 4. INTRODUCTION

Grâce aux développements techniques spectaculaires, aussi bien expérimentaux que théoriques, la double ionisation par impact électronique, DI, ( $e, 3e$ ) et photonique, DPI, ( $\gamma, 2e$ ) a suscité l'intérêt de nombreux auteurs lors de ces dernières années. Ainsi de nombreuses études ont été publiées concernant la DPI de l'hélium ([Sch93], [Hue91], [Cer94], [Lab95], [Hue94], [Cap91]). Le processus de la DI a été étudié expérimentalement grâce à la technique de détection par coïncidence et, parmi ces techniques de coïncidences, la technique de triple coïncidences ( $e, 3e$ ), qui reste difficile à réaliser car elle consiste à détecter les trois électrons dans la voie de sortie en coïncidence. Ces expériences ont permis de mesurer les sections efficaces multiplement différentielles en utilisant les atomes de Krypton et d'Argon comme cible ([Lah89], [Lah91], [Lah92]). Plus récemment, El Marji et al ont réalisé des expériences ( $e, 3e$ ) sur l'atome de magnésium [Elm99]. L'autre type de détection consiste à détecter uniquement les deux électrons éjectés parmi les trois électrons sortant en coïncidence. Ces expériences sont appelées ( $e, 3-1e$ ) ([Lah91], [Dug92], [Elm95]). L'objectif des expériences ( $e, 3e$ ) et ( $e, 3-1e$ ) est d'étudier les effets des corrélations électroniques dans les voies d'entrée et de sortie. Afin d'interpréter ces expériences, diverses théories ont été élaborées par plusieurs auteurs ([Ber93], [Bera93], [Ber96], [Jou92], [Jou93], [Cap91], [Twe73], [Smi78], [Cap 95]).

Dans ce chapitre nous présenterons les résultats de nos calculs obtenus sur la DI de l'atome de magnésium dans son état fondamental. Ces résultats ont pour but d'étudier les corrélations dans l'état initial et l'effet de l'ion doublement chargé sur les deux électrons sortant. Dans un premier temps nous comparerons nos calculs de la DPI avec ceux S. C. Ceraulo [Cer94] qui ont été effectués sur l'atome de magnésium, cette comparaison nous permettra de tester notre potentiel de distorsion (effet de l'ion sur les deux électrons sortant) et de vérifier notre code de calcul dans la limite dipolaire  $K \rightarrow 0$ . Dans un deuxième temps nous présenterons les résultats de la DI (e, 3e) que nous comparerons avec les expériences de El Marji et al Puis nous présenterons nos calculs des sections efficaces après intégration sur toutes les directions des deux électrons éjectés (4DCS), les sections efficaces doublement différentielles (2DCS) qui correspondent à l'intégrale de la 4DCS sur toutes les directions de l'électron incident dans l'état final, et finalement nous montrerons la section efficace simplement différentielle (DCS) qui résultera de l'intégration de la 2DCS sur les énergies de l'un des deux électrons sortant. Dans une dernière étape nous présenterons des sections efficaces de la DI calculées en décrivant l'électron incident dans l'état final par une onde coulombienne.

## 4.1 SECTION EFFICACE MULTIPLEMENT DIFFERENTIELLE.

### 4.1-1 Description de l'électron incident dans l'état initial et final par une onde plane.

Nous considérons la double ionisation par impact électronique (e, 3e) de l'atome de magnésium dans son état fondamental ( $3s^2$ ), l'électron incident ayant une grande énergie (grande vitesse par rapport à la vitesse de Bohr des électrons liés) et une quantité de mouvement  $p_i$ , de plus, nous supposons que le moment transféré du projectile à l'atome cible est faible de sorte que l'approximation de Born [Bor26] soit applicable ([Bet30], [Ink71], [Ink78]). L'axe de référence Z est défini par la direction de l'électron incident et le noyau est supposé très lourd par rapport à la masse de l'électron. La section efficace multiplement différentielle des deux électrons '1' et '2' éjectés dans les deux directions  $d\Omega_1$  et  $d\Omega_2$  avec des énergies  $E_1$  et  $E_2$  et l'électron incident étant diffusé dans l'angle solide  $d\Omega_s$  est donnée par:

$$\frac{d^8\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s dE_1 dE_2} = (2\pi)^4 N_{ee} \frac{p_s p_1 p_2}{p_i} |T_{fi}|^2, \quad (4.1)$$

où  $N_{ee}$  désigne le facteur de Gamow.

La quantité de mouvement des électrons éjectés est donnée par  $p_1 = \sqrt{2E_1}$ ,  $p_2 = \sqrt{2E_2}$ , et celle de l'électron incident dans la voie finale sera désignée par  $p_s$ . Le calcul de l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$  repose à la fois sur la description des états initiaux et finaux de la cible, c'est – à – dire pour un atome à  $N$  électrons, l'élément de matrice est tel que:

$$T_{fi} = \langle \psi_f^-(1, \dots, N) | V | \psi_i(1, \dots, N) \rangle, \quad (4.2)$$

où

$$V = \frac{-N}{r_0} + \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_j|}, \quad (4.3)$$

$V$  décrit le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible,  $r_j$  est la position du  $j^{\text{ème}}$  électron. Les deux fonctions d'ondes initiale et finale seront données dans cette section par:

$$\psi_i = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p}_i \cdot \vec{r}_0) \phi_i(\text{cible}) \quad (4.4)$$

$$\psi_f = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{p}_s \cdot \vec{r}_0) \phi_f(\text{ion}, \vec{p}_1, \vec{p}_2), \quad (4.5)$$

où  $\phi_i$  (cible) et  $\phi_f$  (ion résiduel, +2électrons éjectés) représentent, respectivement, les fonctions d'ondes décrivant l'état de la cible avant et après la collision dans la région asymptotique loin du potentiel d'interaction  $V$ . En utilisant la transformation de Bethe [Bet 30]:

$$\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r} \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_j|} = \frac{1}{k^2} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j), \quad (4.6)$$

l'élément de matrice devient alors:

$$T_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 k^2} \langle \phi_f(\text{ion}, \vec{p}_1, \vec{p}_2) | -N + \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) | \phi_i(\text{cible}) \rangle. \quad (4.7)$$

Dans l'équation (4.7) nous avons introduit le vecteur de moment de transfert  $\vec{k} = \vec{p}_i - \vec{p}_s$ .

La double ionisation de l'atome du magnésium ( $3s^2$ ) est un problème qui nécessite un certain nombre d'approximations.

La première approximation consiste à ne tenir compte que des deux électrons de la couche de valence ( $3s^2$ ), car nous considérerons que seuls ces deux électrons sont concernés dans le processus de la double ionisation. La deuxième approximation consiste à supposer que les fonctions d'ondes radiales utilisées pour la description de l'ion  $Mg^{++}$  ( $1s^2 2s^2 2p^6$ ) sont les mêmes que les fonctions d'ondes radiales décrivant les électrons dans l'état initial de l'atome de magnésium neutre (ces approximations sont connues sous le nom d'approximation du **cœur gelé**).

En supposant que les fonctions d'ondes décrivant l'état initial et final de la cible peuvent s'écrire sous la forme d'un produit:

$$\psi_i(1,\dots,12) = \phi_i(1,2)\phi_i(3,\dots,12) \quad (4.8)$$

$$\psi_f(1,\dots,12) = \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(1,2)\phi_f(3,\dots,12), \quad (4.9)$$

où  $\phi_i(3,\dots,12)$  et  $\phi_f(3,\dots,12)$  représentent respectivement les fonctions d'onde du cœur ( $1s^2 2s^2 2p^6$ ) dans l'état initial et final,  $\phi_i(1,2)$  La fonction d'onde des deux électrons actifs de Mg ( $3s^2$ ) dans l'état initial et  $\psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^{(-)}(1,2)$  désigne la fonction d'onde des deux électrons éjectés dans le double continuum. La forme exacte de ces fonctions d'onde est inconnue.

l'élément de matrice  $T_{fi}$  s'écrit:

$$T_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \left\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(1,2)\phi_{ion}^-(3,\dots,12) \left| -2 - \sum_{j=1}^2 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right| \phi_i(1,2)\phi_i(3,\dots,12) \right\rangle, \quad (4.10)$$

et puisque les fonctions  $\phi_i(3,\dots,12)$  et  $\phi_{ion}(3,\dots,12)$  sont supposées identiques, l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$  devient:

$$T_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \left\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(1,2) \left| -2 - \sum_{j=1}^2 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right| \phi_i(1,2) \right\rangle, \quad (4.11)$$

Finalement, le problème se réduit à un problème à deux électrons actifs.

En partant de,

$$\Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(1,2) = \left[ \frac{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)}{\sqrt{2}} \right] \left[ \frac{\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) + \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_1)\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_2)}{\sqrt{2}} \right], \quad (4.12)$$

et de

$$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \left[ \frac{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)}{\sqrt{2}} \right] \phi_i(\vec{r}_1)\phi_i(\vec{r}_2), \quad (4.13)$$

il est facile de vérifier que  $T_{fi}(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = T_{fi}(\vec{p}_2, \vec{p}_1)$  et que

$$T_{fi} = \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2 K^2} \langle \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) | -2 + \sum_{j=1}^2 \exp(i\vec{k}\cdot\vec{r}_j) | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle. \quad (4.14)$$

L'élément de matrice de transition  $T_{fi}$  des deux particules peut s'écrire comme une somme de trois termes,

$$T_{fi} = T_0 + T_1 + T_2. \quad (4.15)$$

L'amplitude de transition  $T_0$  décrit la diffusion par le noyau

$$T_0 = \langle \Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | -2 | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle. \quad (4.16)$$

Ce terme est nul si les fonctions d'ondes sont orthogonales entre elles (et étaient connues exactement). On peut utiliser le procédé d'orthogonalisation de Schmidt :

$$\langle {}^\perp \Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | = \langle \Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | - \langle \Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_i \rangle \langle \phi_i |, \quad (4.17)$$

dans ce cas, l'élément de matrice de transition (voir annexe A-1)  $T_{fi}$  s'écrit:

$${}^\perp T_{fi} = T_1 + T_2 - Z(\mathbf{k}) \langle \Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle, \quad (4.18)$$

avec:

$$Z(\mathbf{k}) = \langle \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle. \quad (4.19)$$

ainsi, le terme  $T_0$ , donné par (4.16), s'annule en utilisant la fonction d'onde  $\psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  pour décrire l'état final des deux électrons sortant. En revanche, la quantité  $\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle$  intervient toujours dans la fonction d'onde définie par l'équation (4.17)

Les amplitudes de transition  $T_1$  et  $T_2$  décrivent la collision directe entre l'électron incident et un électron de la cible ((1) ou (2)):

$$T_1 = \langle \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (4.20)$$

$$T_2 = \langle \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle. \quad (4.21)$$

Les résultats obtenus en utilisant une fonction d'onde orthogonalisée ou non sont, en général, différents [Ber93]. Néanmoins, pour les moments de transfert très faibles ( $k \rightarrow 0$ ), les résultats avec des fonctions d'onde orthogonalisée et non orthogonalisée convergent vers la même limite. Pour les moments de transfert  $k \rightarrow 0$ , le développement par rapport à  $k$  des exponentielles dans les équations (4.20, 4.21) conduit à l'approximation dipolaire:

$$T_{fi} = -ik \langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{v} \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle + O(k^2), \quad (4.22)$$

et

$$\vec{v} = \frac{\vec{k}}{k}. \quad (4.23)$$

A partir de (4.22) il est clair que, au premier ordre de  $k$ , la section efficace de (e,3e) est reliée à la section efficace de la double photoionisation en formulation longueur donnée par [Rou91]:

$$\frac{d^6\sigma}{dE_1 dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2} = 4\pi^2 \alpha a_0 E_\gamma |M_{fi}|^2 \times \delta(E_1 + E_2 + I^{2+} - E_\gamma), \quad (4.24)$$

l'élément de matrice de transition est donné par:

$$M_{fi} = \left\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| z_1 + z_2 \right| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle, \quad (4.25)$$

avec  $\alpha$  la constante de structure hyperfine,  $a_0$  le rayon de Bohr,  $E_\delta$  l'énergie du photon, et  $\delta$  la fonction de Dirac qui assure la conservation de l'énergie. Le vecteur de polarisation est dans la même direction que la direction de  $k$ .

Le principe de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement donne les expressions suivantes:

$$E_i - I^{++} = E_s + E_1 + E_2 \quad (4.26)$$

$$\vec{k} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{k}_{ion}. \quad (4.27)$$

Dans l'équation (4.26) les énergies de l'électron incident dans l'état initial et dans l'état final sont désignés par  $E_i$  et  $E_s$ , respectivement. L'énergie de recul a été négligée à cause de la masse importante du noyau.  $I^{++} = 22,7$  eV est l'énergie d'ionisation des deux électrons de la cible Mg ( $3s^2$ ). Dans l'équation (4.27)  $\vec{k}_{ion}$  représente la quantité de mouvement de l'ion supposé au repos dans l'état initial.

Pour décrire l'état initial de la cible qui est l'atome de magnésium, on utilisera différentes fonctions d'ondes incluant les corrélations électroniques dans la cible. Ces fonctions ont été calculées par la méthode d'interaction de configurations. Les résultats obtenus avec ces fonctions d'ondes seront comparés à ceux obtenus en utilisant la fonction d'onde de Hartree-Fock (Cle74).

- La fonction d'onde de Hartree-Fock (Cle74) est donnée par (voire annexe C):

$$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2), \quad (4.28)$$

avec

$$\varphi(\vec{r}_1) = A\varphi_{1s}(\vec{r}) + \sum_{i=1}^7 A_i\varphi_{3s}(\vec{r}_1) \quad (4.29)$$

Dans l'équation (4.29) les coefficients A et  $A_i$  sont donnés par la table de Clementi [Cle70] (voir annexe C), et les fonctions  $\phi_{1s}$  et  $\phi_{3s}$  sont les orbitales de Slater [Caph]. Par définition la fonction de Hartree-Fock ne contient ni corrélation radiale ni corrélation angulaire.

- Les fonction d'onde de Langlois [Lan]

Nous allons utiliser trois fonctions de Langlois: la première fonction que nous appellerons dans la suite: fonction d'onde de Langlois n=3, incluant des corrélations radiales et angulaires, par addition des termes 3p et 3d à la fonction  $3s^2$  de Hartree-Fock modifiée, la deuxième sera appelée: fonction d'onde de Langlois n=4, fonction qui fait intervenir aussi des corrélations radiales et angulaires par addition des termes 3p, 3d, 4s, 4p et 4d et la dernière fonction que nous appellerons dans la suite, fonction d'onde de Langlois n=5: incluant des corrélations radiales et angulaires par addition des termes 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 5s, 5p et 5d. Ces fonctions d'ondes s'écrivent pour  $n = n'$  (Voir annexe C):

$$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} (-1)^{m_\lambda} \alpha_\lambda R_\lambda(r_1) R_\lambda(r_2) Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat{r}_1) Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{r}_2) \quad (4.30)$$

Afin d'analyser la structure de la section efficace nous avons utilisé pour la fonction d'onde  $\psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ , décrivant l'état final des deux électrons éjectés, les deux modèles suivant:

## MODELE 2 CW

Byron et Joachain [Byr67] ont proposé de décrire les électrons éjectés par des ondes coulombiennes avec une charge fixe correspondante à celle de l'ion résiduel. Dans ce cas la fonction d'onde décrivant les deux électrons éjectés est donnée par:

$$\psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) + \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_2) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_1)), \quad (4.31)$$

avec:

$$\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l e^{-i\sigma_l(p_1)} \frac{F_l(p_1, r_1)}{p_1 r_1} Y_l^m(\hat{p}_1) Y_l^m(\hat{r}_1), \quad (4.32)$$

où  $\sigma_1(p_1)$  représente le déphasage coulombien donné par (1.36, voir chapitre 1), la fonction radiale  $F_1(p_1, r_1)$  a l'expression suivante:

$$F_1(p_1, r_1) = \frac{1}{2(2l+1)!} |\Gamma(1+1+i\eta)| e^{-\frac{\eta\pi}{2}} (2p_1 r_1)^{(l+1)} e^{-ip_2 r_1} {}_1F_1(1+1-i\eta+2ip_1 r_1), (4.33)$$

où  $\Gamma$  et  ${}_1F_1$  sont des fonctions gamma et hypergéométrique confluente [Abr72] respectivement,  $\eta$  est le paramètre de Sommerfeld. Ce modèle néglige l'effet dû à l'ion résiduel sur les deux électrons éjectés. Ce modèle sera désigné dans la suite par le modèle 2CW.

## MODELE 2 DW

Pour tenir compte des effets de distorsion négligés dans le modèle 2 CW, nous utiliserons pour la fonction d'onde décrivant les deux électrons éjectés un produit de deux ondes distordues. Nous avons calculé numériquement ce type de fonctions d'onde dans l'hypothèse où le potentiel vu par les deux électrons éjectés est un potentiel coulombien auquel on ajoute une contribution dû à l'effet de l'ion résiduel (voir chapitre 2). Dans ce cadre nous utiliserons un potentiel que nous avons calculé (section 2.4.1) et le potentiel modèle de BHS (section (2.42)).

$$\Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2) + \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2)), \quad (4.34)$$

avec:

$$\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l e^{-i(\sigma_1(p_1) + \delta_1(p_1))} \frac{X_l(p_1, r_1)^*}{p_1 r_1} Y_l^m(\hat{p}_1) Y_l^m(\hat{r}_1) (4.35)$$

où  $\delta_1(p_1)$  représente le déphasage dû au potentiel additionné au potentiel coulombien, la partie radiale  $X_l(p_1, r_1)$  a été déterminée numériquement. Ce modèle sera désignée dans la suite par: modèle 2DW.

Dans les deux modèles 2DW et 2CW, nous utiliserons le facteur de Gamow pour prendre en compte l'interaction entre les deux électrons dans l'état final, et nous appellerons ces deux modèles: Modèle 2CWG et Modèle 2DWG, respectivement.

#### 4.1-2 Description de l'électron incident dans l'état initial et final par une onde coulombienne.

Dans cette partie on se propose de calculer la section efficace multipliement différentielle de la double ionisation de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ), avec la description de l'électron incident dans l'état final et initial par une onde coulombienne. (Nous appellerons ce modèle: modèle 4CW) En conservant les mêmes notations que dans la partie (4.1-1) les fonctions d'ondes de l'état initial et final du système seront données par :

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_c(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (4.36)$$

$$\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4.37)$$

où

$\psi_c(\vec{p}_i, \vec{r}_0)$  et  $\psi_c(\vec{p}_s, \vec{r}_0)$  sont les fonctions d'onde coulombiennes de l'état initial et final de l'électron incident, respectivement. Ces fonctions remplacent les ondes planes utilisées dans la partie (4.1-1). Nous considérons la procédure de Schmidt pour orthogonaliser l'état final , dans ce cas , l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$  peut s'écrire sous la forme suivante:

$$T_{fi} = T_1' + T_2' - H(\vec{p}_1, \vec{p}_2) T_0' \quad (4.38)$$

avec:

$$T_0' = \left\langle \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \left| \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^+(\vec{p}_0, \vec{r}_0) \right\rangle \quad (4.39)$$

$$T_1' = \left\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \left| \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} \right| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^+(\vec{p}_0, \vec{r}_0) \right\rangle \quad (4.40)$$

$$T_2' = \left\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \left| \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^+(\vec{p}_0, \vec{r}_0) \right\rangle \quad (4.41)$$

$$H(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \langle \Psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle. \quad (4.42)$$

Pour déterminer l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$ , on procède au développement en harmoniques sphériques du potentiel d'interaction coulombien  $\frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|}$  ( $i=1,2$ ):

$$\frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|} = \sum_{l_3, m_3} \frac{4\pi}{(2l_3 + 1)} \frac{r_{<}^{l_3}}{r_{>}^{(l_3+1)}} Y_{l_3, m_3}^*(\hat{r}_0) Y_{l_3, m_3}(\hat{r}_i) \quad (4.43)$$

où  $r_{<} = \min(r_1, r_2)$  et  $r_{>} = \max(r_1, r_2)$ , nous amène à calculer des intégrales généralisées entre deux coulombiennes qui décrivent l'électron incident dans l'état initial et final :

$$R_{i_1, i_s}^{l_j, \lambda} = \int_0^\infty dr F_{l_s}(p_s, r_0) V_{l_j, l_3, \lambda}(r_0, p_j) F_{l_i}(p_i, r_0) \quad (4.44)$$

avec :

$$V_{l_3}^{l_j, \lambda}(r_0, p_0) = \int_0^\infty r F_{l_j}(p_j, r) \frac{r_{<}^{l_3}}{r_{>}^{(l_3+1)}} R(\lambda, r) dr. \quad (4.45)$$

Les fonctions  $F_{l_s}(p_s, r_0)$  et  $F_{l_i}(p_i, r_0)$  sont les parties radiales des fonctions d'ondes coulombiennes décrivant l'électron incident dans l'état initial et dans l'état final,  $R(\lambda, r)$  la partie radiale de la fonction d'onde de la cible et  $F_l(p_j, r)$  la partie radiale de la fonction d'onde coulombienne qui décrit le  $j^{\text{eme}}$  électron éjecté.

L'évaluation directe de l'intégrale double par une quadrature, par exemple, est relativement longue et peu précise. Un calcul entre 2 coulombiennes, dont le caractère est fortement oscillatoire, provoque une perte de précision significative. Dans ce cas, on utilise une méthode plus rapide par rapport à une intégration directe ([Ald65], [Her 92] et [Anc 98]).

## 4.2 SECTIONS EFFICACE INTEGRODIFFERENTIELLE

La détection de trois électrons par coïncidence apparaît difficile en raison du faible taux de comptage pour ce type d'événement. Des comparaisons définitives entre théories et expériences sont donc difficiles dans ce domaine. Pour cela nous avons calculé des sections efficaces intégrodifférentielles.

#### 4.2-1 Section efficace sept fois différentielle

L'intégration de la section efficace multiplement différentielle ( section 2-1) sur l'angle azimutal  $\phi_s$  de l'électron diffusé (voire figure 1), conduit à des sections efficaces sept fois différentielle ( 7DCS ) qui correspond aux récentes expériences proposées par El Marji et al [Elg99 ]. Ce qui s'écrit formellement:

$$\frac{d^7\sigma}{dE_1 dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\theta_s} = \int_0^{2\pi} \frac{d^8\sigma}{dE_1 dE_2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s} d\phi_s \quad (4.46)$$

Dans ces expériences les deux électrons éjectés sont détectés avec des énergies  $E_1 = E_2 = 55$  eV sur une surface d'un cône d'angle  $45^\circ$ , le diffusé est détecté à un angle  $\theta_s$  fixé à  $18^\circ$  (voire Fig.1.) pour tous les angles azimutaux  $\phi_s$  ( de  $0^\circ$  et  $360^\circ$  ).

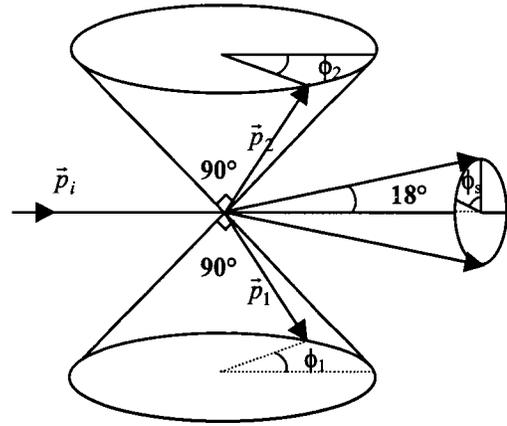


Figure 1. géométrie de détection

#### 4.2-2. Sections efficaces simplement différentielle.

Dans le but de calculer des sections efficaces simplement différentielle et pour des raisons de simplification (complexité du calcul numérique de ces intégrales en présence du facteur du Gamow), nous négligeons l'interaction répulsive entre les deux électrons éjectés, C'est – à – dire nous prenons le facteur de Gamow égal à 1. L'intégration sur tous les angles des deux électrons éjectés permet d'obtenir des sections efficaces quadruplement différentielle :

$$\sigma^{(4)} = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_s dE_s dE_2} = \iint d\Omega_1 d\Omega_2 \frac{d^8\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_s dE_s dE_2}. \quad (4.47)$$

Nous avons calculé analytiquement cette dernière intégrale en utilisant la relation de fermeture des harmoniques sphériques qui apparaît dans l'expression de (8DCS).

Nous avons vérifié numériquement que la  $\sigma^{(4)}$  (4DCS) est isotrope pour toutes les valeurs de l'angle azimutal de l'électron diffusé  $\phi_s$ , par conséquent l'intégration de la  $\sigma^{(4)}$  sur les angles du diffusé se limite à l'intégration sur  $\theta_s$  et on multiplie le résultat de l'intégrale par  $2\pi$ . Cela permet d'obtenir une section efficace doublement différentielle.

$$\frac{d^2\sigma}{dE_s dE_2} = \int d\Omega_s \frac{d^4\sigma}{d\Omega_s dE_s dE_2}. \quad (4.48)$$

La section efficace simplement différentielle est obtenue en intégrant sur l'énergie de l'électron éjecté '2' c'est – à – dire:

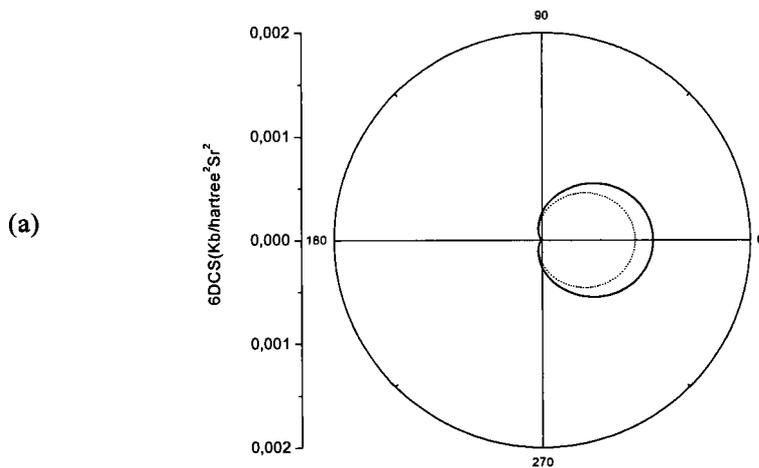
$$\frac{d\sigma}{dE_s} = 2 \int_0^{\frac{E_{2\max}}{2}} dE_2 \frac{d^2\sigma}{dE_s dE_2}. \quad (4.49)$$

$E_{2\max} = E_i - E_s - I^{++}$ , représente l'énergie maximale que l'électron éjecté '2' peut prendre. La section efficace doublement différentielle en fonction de l'énergie de l'électron éjecté '2' est symétrique, par conséquent, on intègre jusqu'à  $E_{2\max}/2$  et on multiplie le résultat par 2.

### 4.3.RESULTATS ET DISCUSSION

#### 4.3-1 La double photoionisation et la limite dipolaire:

Nous montrons dans cette partie quelques résultats des sections efficaces différentielles de double photoionisation de l'atome de magnésium dans son état fondamental ( $3s^2$ ). Ces résultats ont été comparés à ceux obtenus par S. C. Ceraulo et al [Cer94]. Ces résultats peuvent être comparé aux résultats ( $e,3e$ ) dans la limite dipolaire ( $k \rightarrow 0$ ). Ce qui revient à développer le terme  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_i}$  des équations (4.20) et (4.21) en gardant que les deux premiers termes du développement (figure 2-c). La figure 2-a et 2-b représentent, la section efficace différentielle (6DCS) en fonction de l'angle de l'un des deux électrons éjectés. Ce calcul à été effectué en décrivant l'état initial par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par un produit de deux fonctions distordues (2DW), Ces 2DW ont été déterminées numériquement en résolvant l'équation de Schrödinger avec le potentiel de Hartree-Fock (potentiel de distorsion que nous avons calculé numériquement) et le potentiel modèle de BHS (Bhs82). Les résultats (Figure 2-a, 2-b) montrent que ces deux potentiels permettent d'obtenir plus ou moins les mêmes résultats.



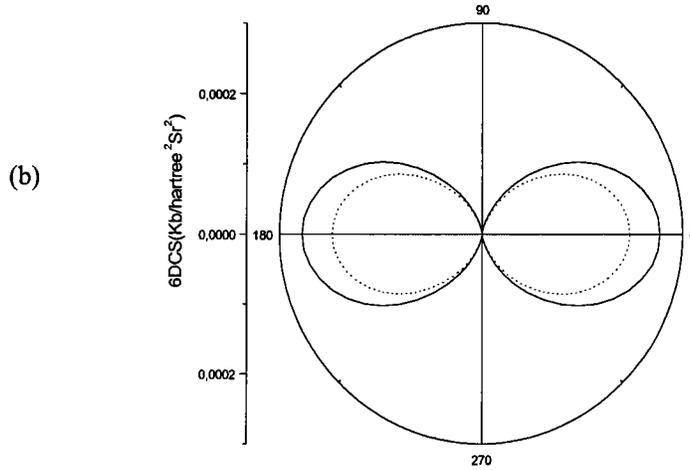


Figure 4.2:  $(6DCS) (\gamma, 2e)$  de double ionisation de magnésium, par des photons d'énergies  $E_\gamma = 52,7$  eV. Les électrons éjectés sont détectés dans une cinématique symétriques  $E_1 = E_2 = 15$  eV. L'électron 1 est éjecté dans des directions (a)  $\theta_1 = 0^\circ$  et (b)  $\theta_1 = 90^\circ$ . L'état initial est décrit par la fonction  $3s^2$  de Clementi et Roetti. L'état final est décrit par le produit de deux ondes distordues en utilisant : (—) le potentiel de BHS (...) le potentiel de Hartree-Fock.

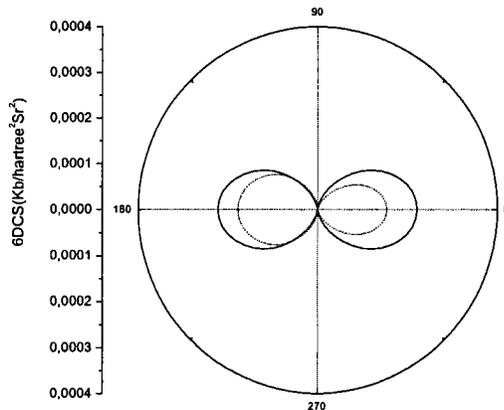


Figure 4.3: Comparaison de la  $(6DCS)$  de double ionisation de magnésium  $(\gamma, 2e)$  (4.24) avec le résultat de la limite dipolaire  $k \rightarrow 0$  de la section efficace quintuplement différentielle  $(e, 3e)$ . Les électrons éjectés sont détectés dans une cinématique symétriques  $E_1 = E_2 = 15$  eV. L'électron 1 est éjecté dans une direction  $\theta_1 = 90^\circ$ . L'état initial est décrit par la fonction  $3s^2$  de Clementi et Roetti. L'état final est décrit par le produit de deux ondes distordues  
—  $(\gamma, 2e)$  et ...  $(e, 3e)$   $K=0,01$  ua.

### 4.3-2 Interprétation des expériences (e,3 e)

Dans cette section nous utiliserons les abréviations suivantes pour l'interprétation et la légende des résultats:

- 1) Modèle SCSDG: désignera le calcul correspondant à la description de l'état initial par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et la description des deux électrons dans l'état final par le produit de deux coulombiennes et du facteur de Gamow.
- 2) Modèle SCDG: désignera le calcul correspondant à la description de l'état initial par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et la description des deux électrons dans l'état final par le produit de deux ondes distordues et du facteur de Gamow.
- 3) Modèle CSDG5: désignera le calcul correspondant à la description de l'état initial par la fonction corrélée de Langlois ( $n = 5$ ) et la description des deux électrons dans l'état final par le produit de deux coulombiennes et du facteur de Gamow.
- 4) Modèle CDG5: désignera le calcul correspondant à la description de l'état initial par la fonction corrélée de Langlois ( $n=5$ ) description des deux électrons dans l'état final par le produit de deux fonctions distordue et du facteur de Gamow.

On se propose ici de confronter notre calcul basé sur le formalisme des ondes distordues dans la voie de sortie et une fonction d'onde corrélée ou non corrélée dans l'état initial aux expériences (e,3e) sur l'atome de magnésium dans l'état fondamental ( $3s^2$ ), Ces expériences très récentes faites par El Marji et al sont symétriques ( $E_1=E_2 = 55$  eV) et non coplanaire (Figure 1).

Dans le cas où nous intégrons la 8DCS sur l'angle azimutal de l'électron diffusé nous obtenons la 7DCS correspondant aux précédentes expériences réalisées par El Marji et al [Elg 99]. Comme on le montre sur la figure de l'article 1 ([Elg99], voir l'article notre calcul basé sur une fonction d'onde corrélée dans l'état initial et où les deux électrons éjectés sont décrit par deux ondes coulombiennes et en tenant compte du facteur de Gamow (Modèle 2CWG) donne un bon accord avec les mesures de EL Marji et al

Dans le but de vérifier la convergence des fonction d'onde décrivant l'état initial de la cible, nous avons comparé différentes configurations de fonctions corrélées de Langlois. La figure 4.4 montre la convergence des fonctions corrélées de Langlois ( $n=3$ ,  $n=4$  et  $n=5$ , voir Annexe C).

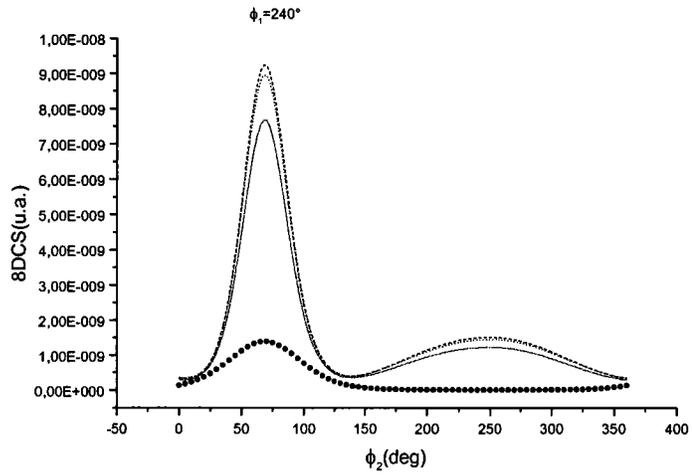


Figure 4.4: 8DCS de la double ionisation de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ) en fonction de l'angle azimutal  $\phi_2$  ( $\theta_2 = 45^\circ$ ) de l'électron éjecté '2' et l'électron '1' est éjecté dans une direction  $\phi_1 = 240^\circ$  ( $\theta_1 = 45^\circ$ ) pour une énergie incidente  $E_i = 1032$  eV et un angle de diffusion  $\theta_s = 18^\circ$  ( $\phi_s = 180^\circ$ ). Les énergies des deux électrons éjectés sont  $E_1=E_2=55$  eV, L'état final est décrit par le modèle 2CWG et l'état initial par: (—) fonction corrélée de Langlois ( $n=3$ ); ... fonction corrélée de Langlois ( $n=4$ ); --- fonction corrélée de Langlois ( $n=5$ ); (-•-•-•-) fonction  $3s^2$  de Clementi et Roetti.

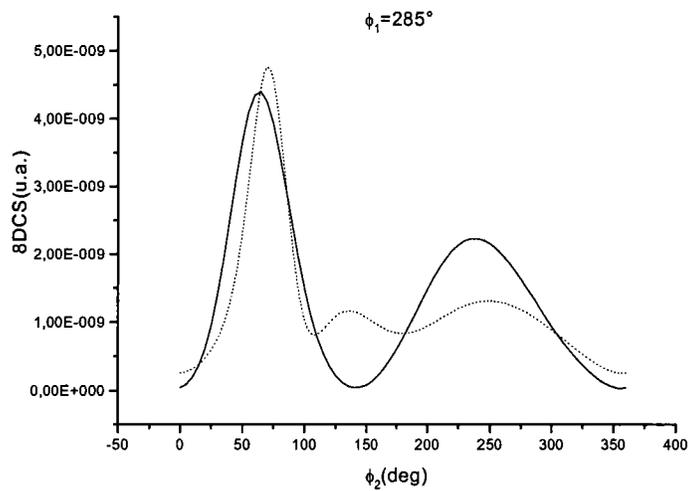


Figure 4.5 : 8DCS de la double ionisation de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ) en fonction de l'angle azimutal  $\phi_2$  ( $\theta_2 = 45^\circ$ ) de l'électron éjecté '2' et l'électron '1' est éjecté dans une direction  $\phi_1 = 285^\circ$  ( $\theta_1 = 45^\circ$ ) pour une énergie incidente  $E_i = 1032$  eV et un angle de diffusion  $\theta_s = 18^\circ$  ( $\phi_s = 180^\circ$ ). Les énergies des deux électrons éjectés sont  $E_1=E_2=55$  eV. (—) Modèle CDG5; (...) Modèle CSDG5.

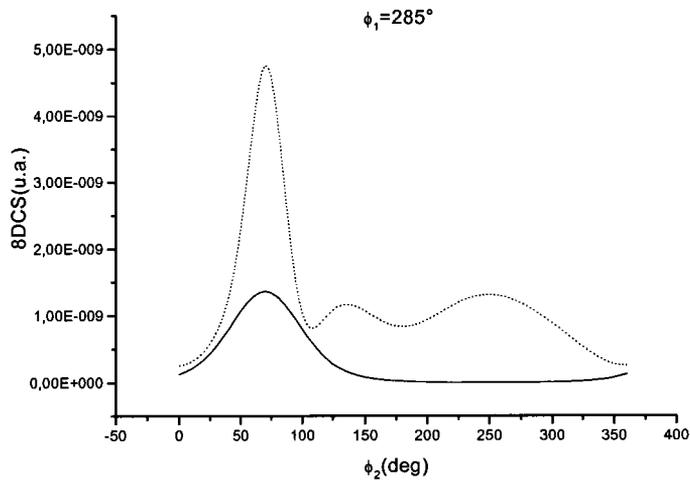


Figure 4.6: 8DCS de la double ionisation de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ) en fonction de l'angle azimutal  $\phi_2$  ( $\theta_2 = 45^\circ$ ) de l'électron éjecté '2' et l'électron '1' est éjecté dans une direction  $\phi_1 = 285^\circ$  ( $\theta_1 = 45^\circ$ ) pour une énergie incidente  $E_i = 1032$  eV et un angle de diffusion  $\theta_s = 18^\circ$  ( $\phi_s = 180^\circ$ ). Les énergies des deux électrons éjectés sont  $E_1 = E_2 = 55$  eV. (—) Modèle SCSDG; (...) Modèle CSDG5.

Comparons maintenant nos prédictions théoriques aux expériences ( $e,3e$ ) très récentes qui ont permis d'obtenir des sections efficaces huit fois différentielles. Ces expériences ont été réalisées dans une géométrie non-coplanaire et symétrique ( $\phi_1 \neq 0$ ,  $\phi_2 \neq 0$  et  $E_1 = E_2 = 55$  eV) (Figure 1). Le calcul que nous comparerons avec ces expériences a été effectué dans le cadre de la 1ère approximation de Born du premier ordre, en utilisant les 4 modèles cités précédemment (SCSDG, SCDG, CSDG5 et CDG5). La double ionisation est supposée due à un processus de 'Shake-off' [Car67]: l'électron incident provoque une première ionisation de la cible en lui transférant énergie et quantité de mouvement, ce qui induit un changement du potentiel effectif de l'atome, et permet le départ du deuxième électron par réarrangement.

Les figures 4.7-(a), 4.7- (b), 4.7- (c), 4.7- (d), 4.7- (e), 4.7- (f), 4.7- (g), 4.7- (h) représentent la section efficace de la DI ( $e,3e$ ) (8DCS) en fonction de l'angle azimutal du deuxième électron éjecté, pour une énergie incidente  $E_i = 1032$  eV à angle de diffusion  $\theta_s = 18^\circ$  ( $\phi_s = 180^\circ$ ). Nos calculs ont été normalisés aux expériences de EL Marji (à  $\phi_2 = 90^\circ$ ). Sur la figure (a) et (b), et

(c) notre modèle utilisant la fonction de Hartree-Fock pour l'état initial et 2DWG reproduit parfaitement le premier pic qui se situe à  $\phi_2 \approx 70^\circ$ . Ce pic se décale selon le modèle utilisé pour décrire les deux électrons sortant et l'état initial et en fonction de l'angle azimutale du premier électron éjecté  $\phi_1$ . Afin de comparer la position du premier pic et du deuxième pic, nous présentons sur les tableaux 1 et 2, l'évolution de ces deux pics selon le modèle utilisé pour décrire l'état initial et final. Les trois figures (a), (b) et (c) ne produisent pas parfaitement bien le deuxième pic et plus précisément dans le cas où  $\phi_1 = 15^\circ$  (figure (a)). Pour  $\phi_1 = 195^\circ$  (f),  $\phi_1 = 240^\circ$  (f) et  $\phi_1 = 285^\circ$  (g) nos calculs sont plus ou moins en accord avec les mesures (e,3e) de El Marji et al, le deuxième pic se situe au voisinage des angles de  $\phi_2 = 250$ , et le premier pic se situe au voisinage de  $\phi_2 \approx 70^\circ$ . Dans le cas où nous utilisons le modèle SCSDG toutes les figures montrent l'absence du deuxième pic, ce qui signifie que l'effet de la distorsion et des corrélations électroniques dans la cible jouent un rôle important dans la double ionisation (e,3e) de l'atome de magnésium, Ceci se confirme en comparant les résultats des deux modèles SCSDG et CSDG5 (Figure: 4.6) et CDG5 et CSDG5 (Figure 4.5). Le désaccord entre théorie et expérience observé en particulier pour  $\phi_1 = 15^\circ$  peut provenir: soit de l'absence de la prise en compte du mécanisme en deux étapes TS2 ( ce mécanisme est loin d'être négligeable lorsque l'énergie incidente est de l'ordre du keV [Cap98] dans lequel l'électron incident ionise successivement les deux électrons de la cible, - soit d'une description insuffisante des deux électrons éjectés (il faudrait effectuer un calcul de type BBK afin de voir si l'approximation qui consiste à ne tenir compte que du seul facteur de Gamow est suffisante).

Tableau-1 : Position du 1<sup>er</sup> pic donnée par chaque approximation.

$\phi_1$ (deg)	$\phi_2$ du 1er pic CDG	$\phi_2$ du 1er pic CSDG	$\phi_2$ du 1 <sup>er</sup> pic SCDG	$\phi_2$ du 1er pic SCSDG
15	50	105	80	75
60	35	40	70	70
105	95	25	55	65
150	80	10	60	65
195	75	70	65	65
240	70	70	70	65
285	65	70	70	65
330	60	35	75	70

Tableau-2 : Position du 2<sup>eme</sup> pic donnée par chaque approximation.

$\phi_1$ (deg)	$\phi_2$ du 1er pic CDG	$\phi_2$ du 1er pic CSDG	$\phi_2$ du 1er pic SCDG	$\phi_2$ du 1er pic SCSDG
15	Pas de pic	260 ( très faible)	Pas de pic	Pas de pic
60	Pas de pic	250	250	Pas de pic
105	Pas de pic	Pas de pic	Pas de pic	Pas de pic
150	250 (très faible)	240 (très faible)	250 (très faible)	Pas de pic
195	260	245	255	Pas de pic
240	255	250	250	Pas de pic
285	240	250	240	Pas de pic
330	240	120 (important)	245	Pas de pic

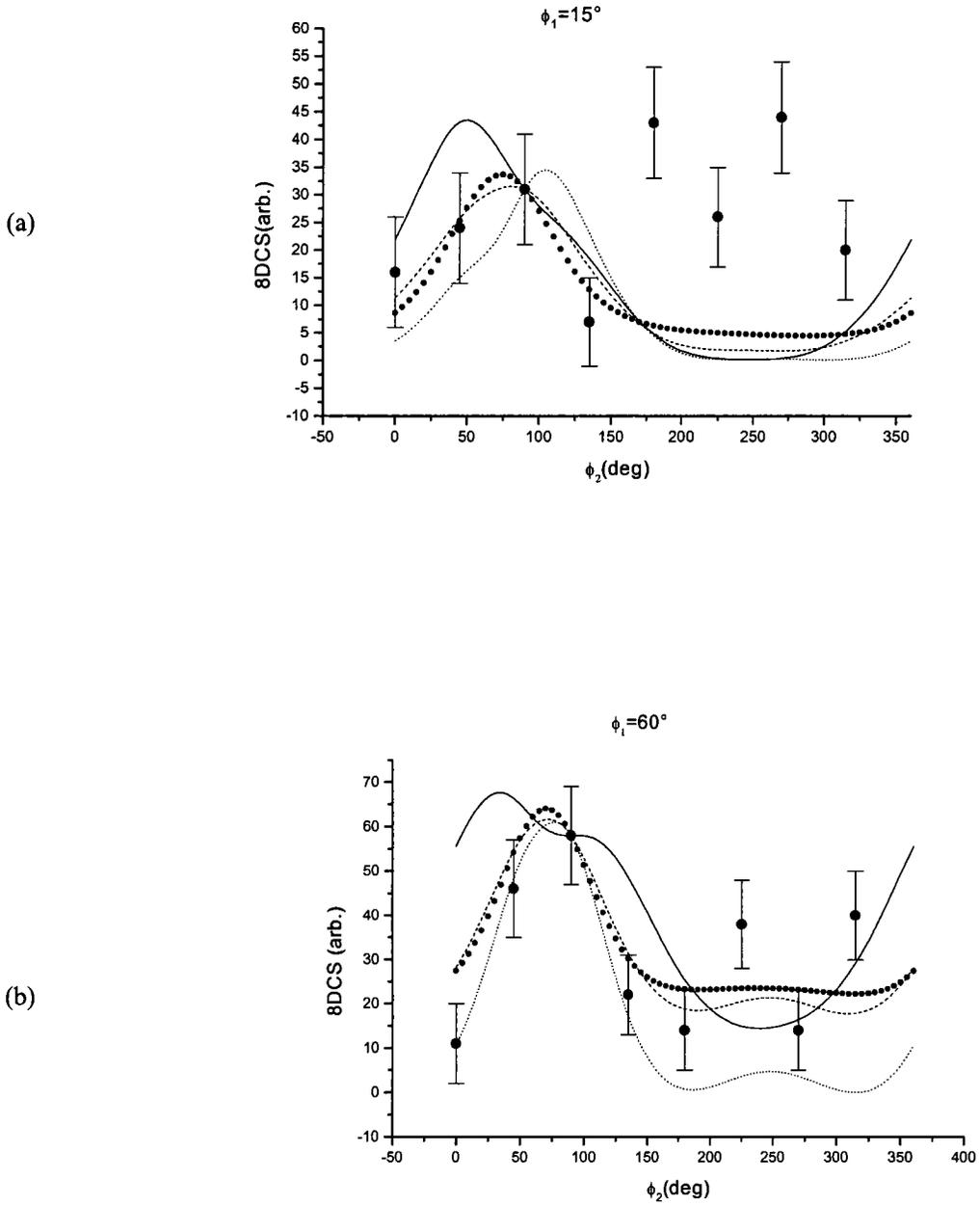
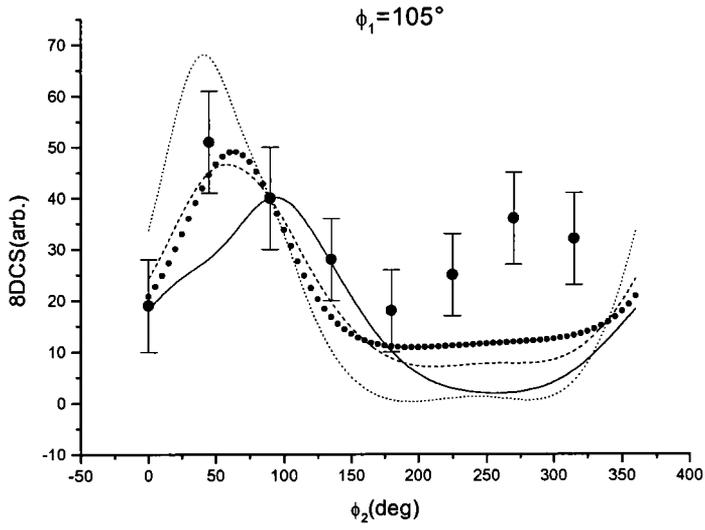


Figure4.7: 8DCS de double ionisation (e,3e) de Mg en fonction de l'angle azimutal du deuxième éjecté  $\phi_2$  pour une énergie incidente  $E_i = 1032$  eV et un angle de diffusion  $\theta_s = 18^\circ$  ( $\phi_s = 180^\circ$ ). Les électrons éjectés sont détectés dans une géométrie symétrique non coplanaire (Fig .1),  $\theta_1 = \theta_2 = 45^\circ$  et avec les mêmes énergies  $E_1 = E_2 = 55$  eV. L'électron '1' est éjecté dans les directions: (a)  $\phi_1 = 15^\circ$ ; (b)  $\phi_1 = 60^\circ$ ; (c)  $\phi_1 = 105^\circ$ ; (d)  $\phi_1 = 150^\circ$ ; (e)  $\phi_1 = 195^\circ$ ; (f)  $\phi_1 = 240^\circ$ ; (g)  $\phi_1 = 285^\circ$ ; (h)  $\phi_1 = 330^\circ$ :—CDG5; ... CSDG5; - - - SCD; (●-●-●) SCSD; ● les mesures de EL Marji et al

(c)



(d)

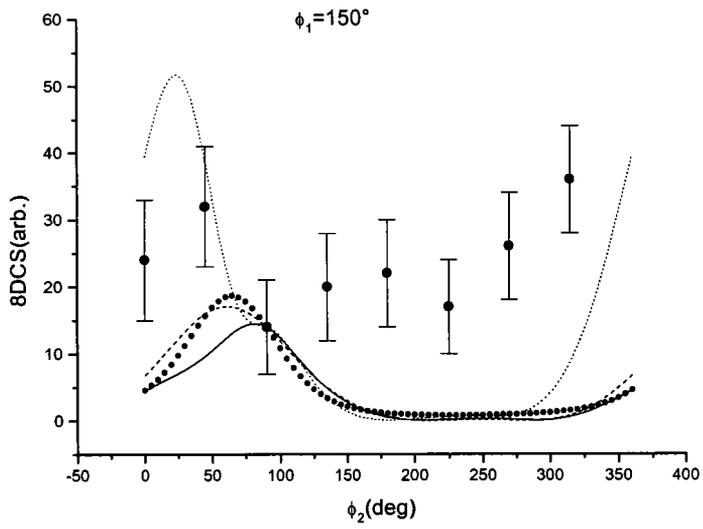
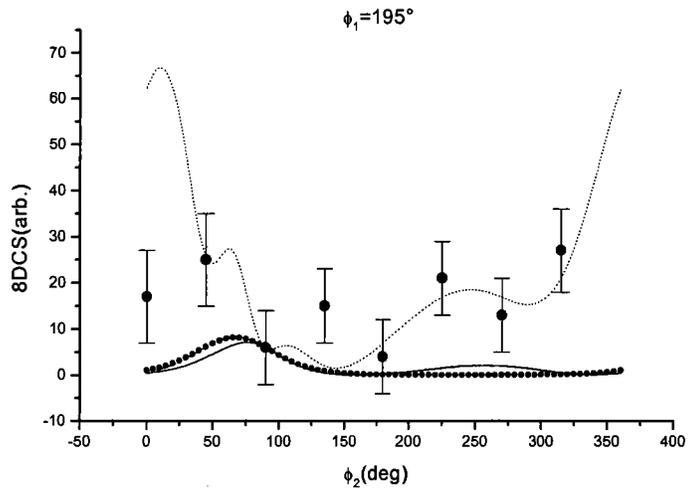


Figure 4.7: (suite)

(e)



(f)

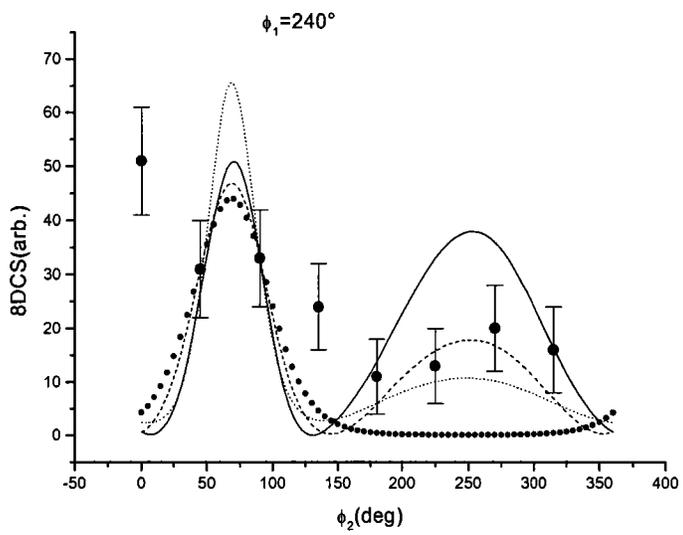
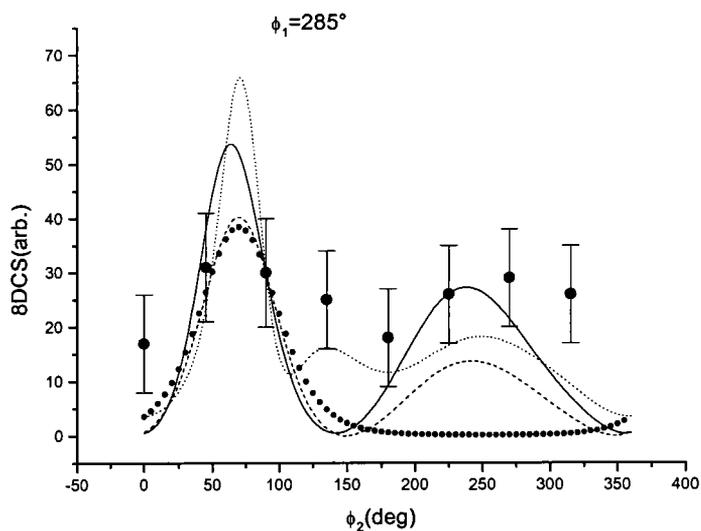


Figure 4.7: (suite)

(g)



(h)

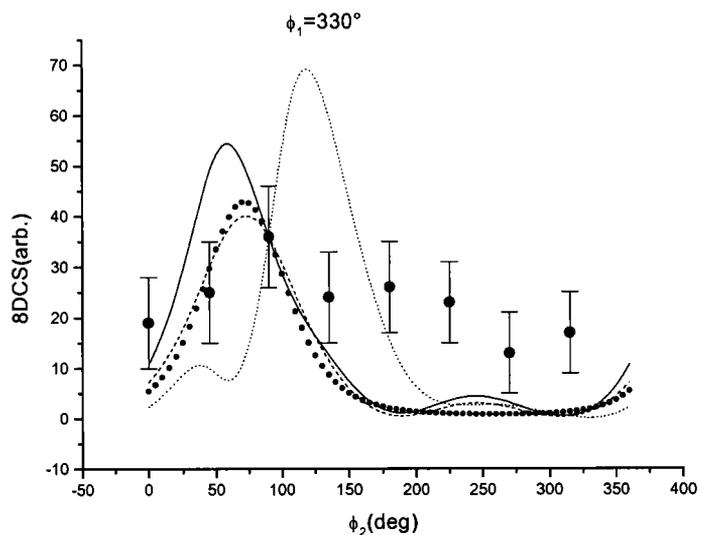


Figure 4.7: (suite)

### 4.3-3 Résultats sur les sections efficaces quadruplement différentielles.

Les figures 4.8-a, 4.8-b et 4.8-c présentent des sections efficaces de la DI (4DCS) de l'atome de magnésium dans son état fondamental ( $3s^2$ ) en fonction de l'énergie de l'électron éjecté (2). Nous avons calculé ces sections efficaces en intégrant sur toute les directions des deux éjectés. La figure 4.8-a montre que les corrélations dans l'état initial présentent un effet très

important sur ce type de section efficace. La distorsion aussi présente un effet non négligeable sur ce type de section efficace, il est moins important dans le cas où l'état initial est décrit par une fonction d'onde de Hartree Fock (figure 4.8-b) que dans le cas où nous décrivons les deux électrons de la cible ( $3s^2$ ) par une fonction corrélée (figure 4.8-c). Les 4DCS présentées sur les figures 7-a, 7-b et 7-c sont symétriques, le point de symétrie étant à  $E_2 = (E_1 + E_2) / 2$ .

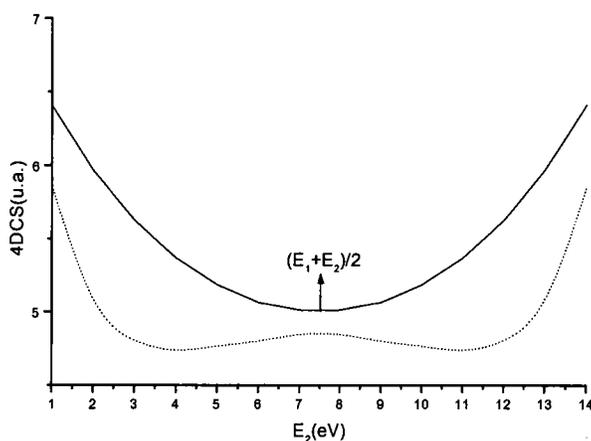


Figure 4.8-a : — L'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2CW  
 ...L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par 2CW (le résultat est multiplié par 650)

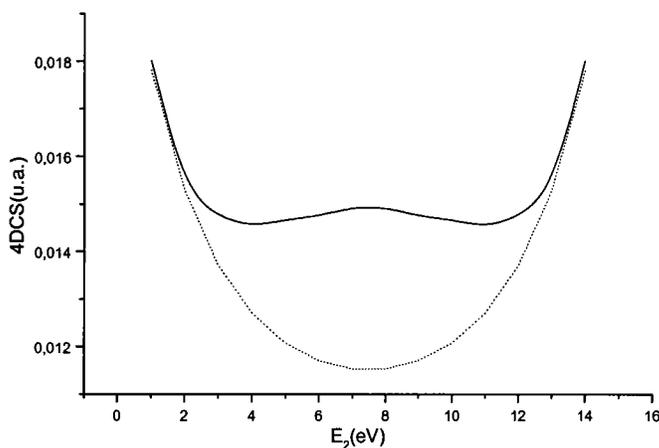


Figure 4.8-b) — L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par 2CW  
 ...L'état initial est décrit par la fonction d'onde de Clementi et Roetti et l'état final par 2DW

Figure 4.8: SED4 d'ionisation double du magnésium en fonction de l'énergie  $E_2$  du deuxième électron éjecté pour une énergie incidente  $E_1 = 1000$  eV à un angle de diffusion  $\theta_s = 0.5$  ( $\varphi_s = 0$ ). Les énergies des éjectés vérifient  $E_1 + E_2 = 15$  eV

Figure 4.8 (suite)

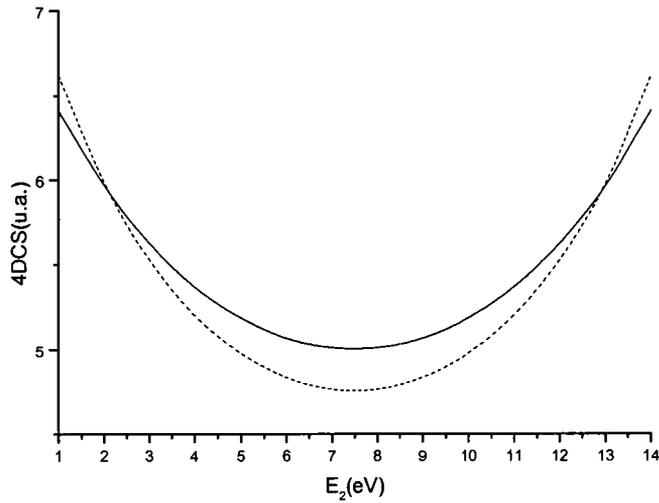


Figure 4.8-c) — L'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2CW  
- - - L'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2DW  
(le résultat est multiplié par 5)

#### 4.3-4 Résultats sur les sections efficaces doublement et simplement différentielle.

Nous avons calculé des section efficaces doublement différentielle en intégrant les 4DCS précédentes sur toutes les directions de l'électron incident dans l'état final. Avant d'effectuer cet intégrale, un point essentiel est l'étude des 4DCS en fonctions de l'angle de diffusion  $\theta_s$ . Les figures (4.9a-d) montrent qu'à partir d'un angle  $\theta_s = 15^\circ$  la section efficace 4DCS est très petite, Par conséquent nous allons négliger la contribution des 4DCS à partir de  $\theta_s = 15^\circ$ .

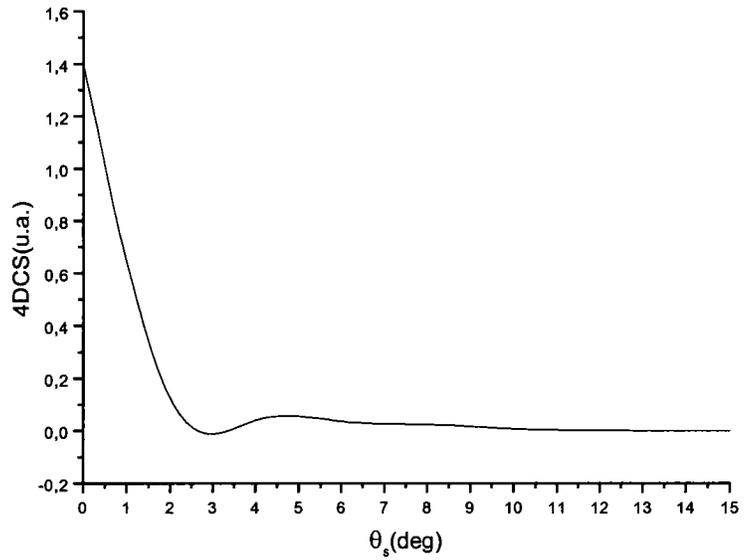


Figure 4.9.a) L'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final 2DW

Figure 4.9: SED4 d'ionisation double de magnésium en fonction de l'angle de l'électron diffusé  $\theta_s$  ( $\varphi_s = 0$ ). L'énergie de l'électron éjecté (2)  $E_2 = 10$  eV et l'énergie de l'électron éjecté (1)  $E_1 = 5$  eV pour une énergie incidente  $E_0 = 1000$  eV

Figure 4.9: (suite)

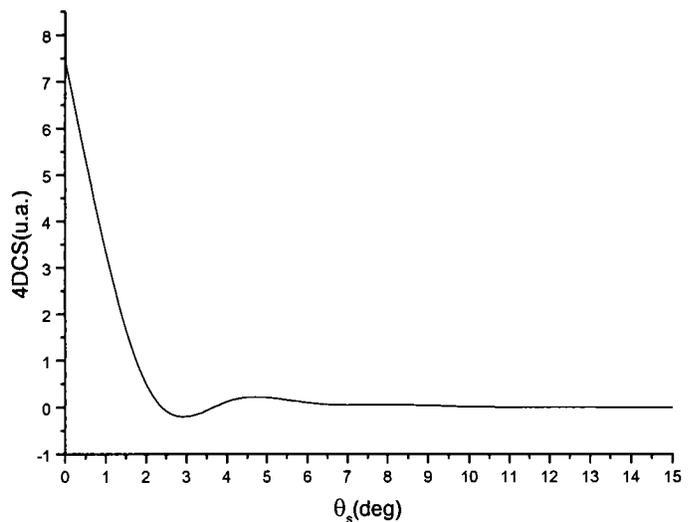


Figure 4.9-b) L'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2CW

Figure 4.9 (suite)

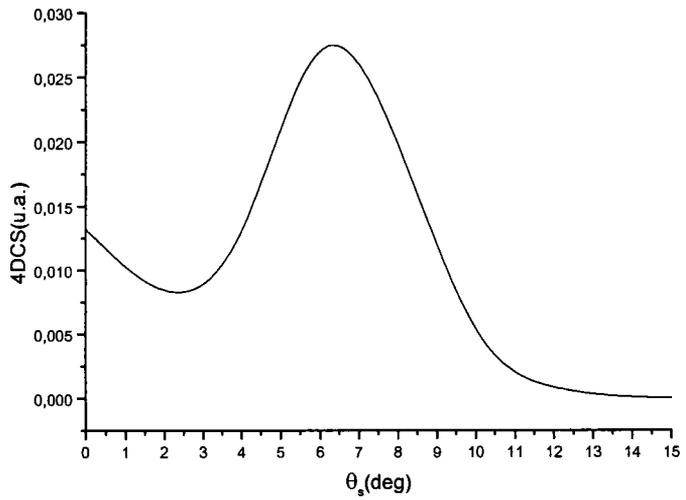


Figure 4.9-c) L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par 2DW

Figure 4.9: (suite)

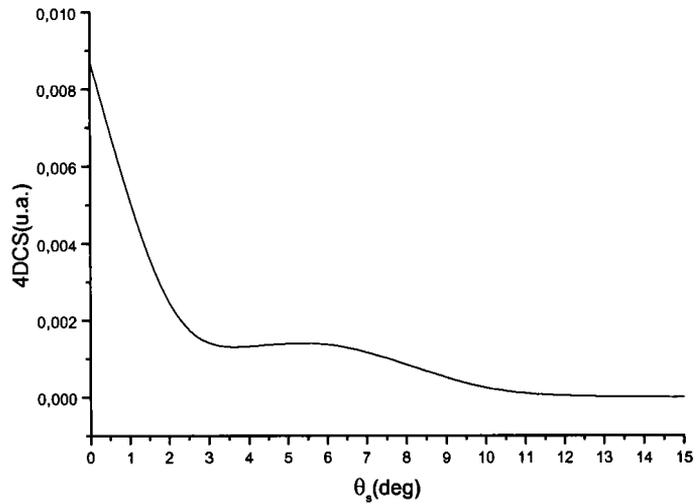


Figure 4.9) L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par 2CW

Les figures 4.10a-c présentent les sections efficaces doublement différentielles en fonction de l'énergie de l'un des deux éjectés. Ces résultats montrent que l'effet de la distorsion dans la voie finale et des corrélations dans l'état initial sont aussi très importants sur ce type de sections efficaces.

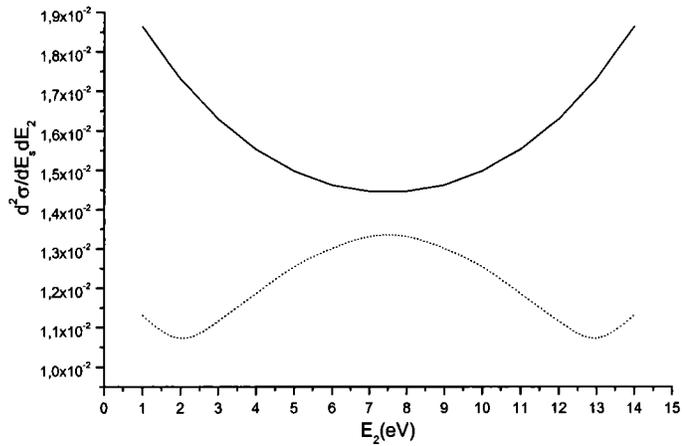


Figure 4.10-a) — L'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2CW  
 --- L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par 2CW (le résultat est multiplié par 110)

Figure 4.10: SED2 de double ionisation de magnesium en fonction de l'énergie de l'électron éjecté (2) pour une énergie incidente  $E_i = 1000$  eV et les énergies des deux électrons éjectés vérifient  $E_1 + E_2 = 15$  eV.

Figure 4.10 : (suite)

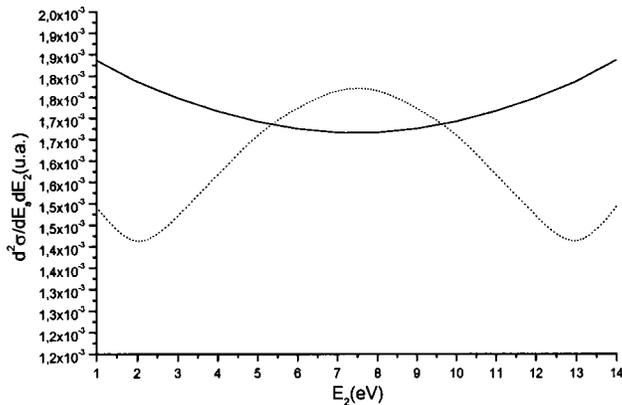


Figure 4.10-b) — L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de C.R et l'état final par 2DW  
 --- L'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par 2CW (le résultat est multiplié par 15)

Figure 4.10 (suite)

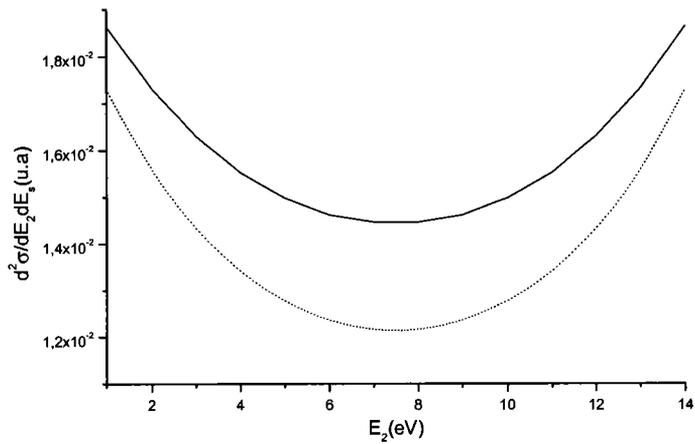


Figure 4.10-c) — L'état initial est décrit par la fonction corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2CW  
 -- L'état initial est décrit par la fonction corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par 2DW (le résultat est multiplié par 3)

La figure 4.11 représente la section efficace différentielle simple en fonction de l'énergie de l'électron diffusé. La figure 4.11-a montre que les corrélations dans l'état initial de la cible a pour effet d'augmenter la section efficace, la figure 4.11-b montre que la section efficace différentielle simple est très sensible aux effets de la distorsion.

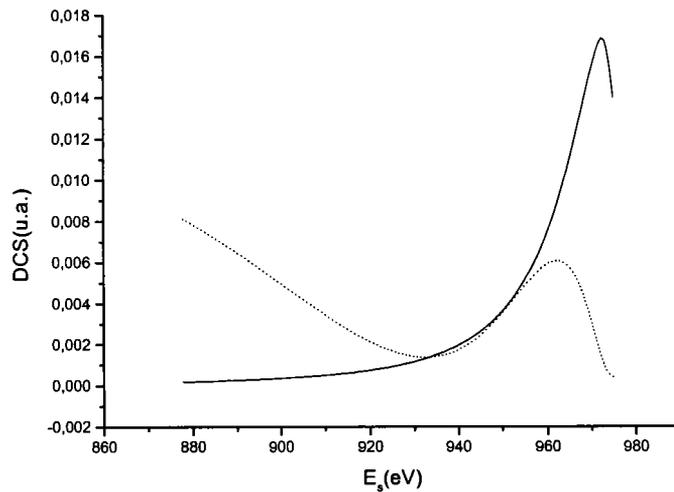


Figure 4.11-a : — l'état initial est décrit par la fonction d'onde corrélée de Langlois ( $n=3$ ) et l'état final par le modèle 2CW; ... l'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par le modèle 2CW (multiplié par 100)

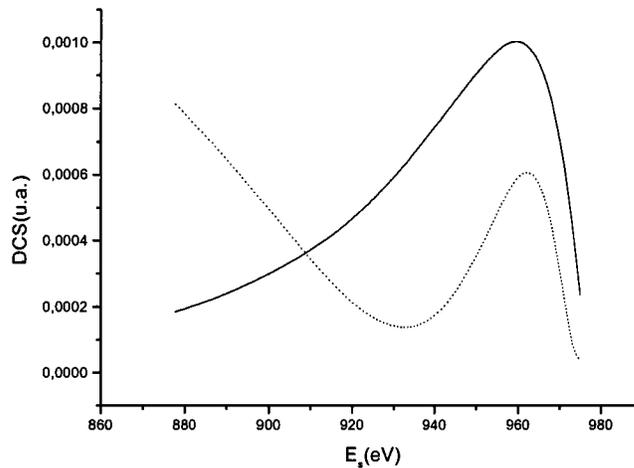


Figure 4.11-b : — l'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par le modèle 2DW; ... l'état initial est décrit par la fonction ( $3s^2$ ) de Clementi et Roetti et l'état final par le modèle 2CW (multiplié par 10)

Figure 4.11: Section efficace différentielle simple de double ionisation de l'atome de magnésium en fonction de l'énergie de l'électron diffusé  $E_s$ , pour une énergie incidente de 1000 eV

#### 4.3-5 résultat du modèle 4CW appliqué à l'atome de magnésium neutre

Dans cette partie nous montrons le résultat du formalisme (4CW) appliqué à la double ionisation de l'atome de magnésium neutre (la charge vue par l'électron incident est nulle ( $Z=0$ )), de ce fait l'électron incident sera décrit par une onde plane. Dans la figure 4.12 nous comparons le résultat de la 5DCS calculée en décrivant l'électron diffusé par une onde coulombienne (la charge vue par l'électron diffusé a été choisi arbitrairement égale à 2) avec le cas où on se limite à une onde plane pour décrire l'électron diffusé. On conclut que le fait de décrire l'électron diffusé par une onde coulombienne a pour effet de diminuer l'amplitude sans changement important de la structure de la section efficace .

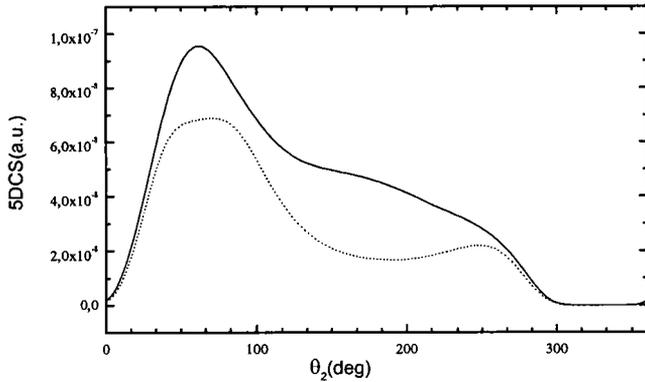


Figure 4.12: Section efficace quintuplement différentielle de double ionisation de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ) en fonction de  $\theta_2$  ( $\phi_2 = 0$ ) l'angle de l'électrons éjecté '2', pour une énergie incidente de 227 eV. Les électrons éjectés sont détectés avec des énergies  $E_1 = 25$  eV et  $E_2 = 20$  eV. L'électrons éjecté '1' est détecté dans une direction  $\theta_1 = 30^\circ$  ( $\phi_1 = 180^\circ$ ) et l'électron diffusé dans une direction  $\theta_1 = 0.5^\circ$  ( $\phi_1 = 0^\circ$ ). L'état initial est décrit par la fonction  $3s^2$  de Clementi et Roetti. Les deux électrons éjectés sont décrit par le produit de deux ondes coulombiennes et du facteur de Gamow.  
 — L'électron diffusé est décrit par une onde coulombienne; ... L'électron diffusé est décrit par une onde plane

#### 4.5 CONCLUSION

Nous avons calculé la 8DCS, 7DCS, 4DCS, 2DCS et la DCS pour le processus de la double ionisation par impact électronique de l'atome de magnésium dans son état fondamental, la 8DCS a été calculée dans la cinématique non-coplanaire des expériences (e,3 e) de El Marji et al, et dans laquelle, les deux électrons éjectés partent avec la même énergie. Les trois électrons sont détectés en coïncidence (expériences (e, 3e)). Nos calculs sont plus ou moins en accord avec les expériences de El Marji et al, et les 8DCS que nous avons obtenues sont très sensibles aux effets de corrélations dans l'état initial de la cible, et aux effets de la distorsion. Nous obtenons la section efficace quatre fois différentielle, deux fois différentielle et simplement différentielle qui sont également sensibles aux effets de corrélations et à l'effet de la distorsion. En fin nous avons montré le résultat du calcul de la double ionisation du magnésium en décrivant l'électron diffusé par une onde coulombienne (formalisme 4CW avec une charge  $Z = 0$  pour l'électron incident).

## CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons présenté un calcul ab-initio pour la double ionisation par impact électronique de l'atome de magnésium basé sur le formalisme du développement en ondes partielles, en utilisant des fonctions d'ondes corrélées pour décrire la cible et des fonctions d'ondes distordues pour décrire les deux électrons éjectés. Nos prédictions théoriques ont été comparés aux mesures expérimentales de El Marji et al. L'accord plus ou moins bon entre théorie et expérience nous permet d'affirmer que la description actuelle du double continuum n'est pas encore satisfaisante et que la présence d'un autre mécanisme (autre que le S.O) de double ionisation est probable.

Malgré les difficultés numériques rencontrées dans le calcul des sections efficaces intégrées, nous avons pu calculer pour la première fois différents types de sections efficaces intégrées (sections efficace quadruplement, doublement et simplement différentielle ) en considérant les corrélations électroniques dans l'état initial et l'effet de la distorsion dans la voie finale.

Nos calculs pourraient être étendus aux autres atomes de type alcalino – terreux (Be, Ca ...) et également à la double ionisation par impact photonique et par impact électronique de cibles ioniques.

Nous avons montré de plus l'importance des corrélations électroniques dans une cinématique EMS (chapitre 3) sur les sections efficaces  $(e, 3-1e)$  et  $(e, 3 e)$ .

En résumé ce travail a montré l'importance de la prise en compte de la corrélation électronique et du rôle non négligeable des effets de distorsion sur les différents types de sections efficaces.

Pour finir nous avons développé un code de calcul permettant de décrire tous les électrons du continuum par des fonctions d'ondes coulombiennes (Modèle 4CW). Nous avons appliqué ce code à la double ionisation du magnésium neutre. On envisage de l'appliquer dans un proche avenir au cas des cibles ioniques qui font l'objet d'expériences au département de physique de l'Université Catholique de Louvain sous la direction du Pr. Defrance.

## REFERENCES

- [Abra72] M. Abramowitz, I. Stegun, Handbook of Mathematical, New York, Dover, (1972).
- [Ald66] B. Alder, S. Fernbach, M. Rothenberg (eds.), Methods in Computational Physics, Vol. 6, Nuclear Physics (Academic Press, New York 1966).
- [Anc98] L. U. Ancarani and P. A. Hervieux, Phys. Rev. A **58**, 336 (1998)
- [Ava90] L. Avaldi, R. Camilloni, C. Dal Cappello, E. Fainelli, A. Lhamam – Bennani, G. Stefani Z, Phys. D, Atoms, Molecules and Clusters, **16**, 107 (1990)
- [Alt83] P. L. Altick, Phys. Rev. A **21**, 1381 (1980) ; **25**, 128 (1982) ; J. Phys. B **16**, 3543 (1983).
- [Ber93] J. Berakdar, J. Phys. (France) **IV 3** , C—135 (1993)
- [Bera93] J. Berakdar et H. Klar, J. Phys. B. At. Mol. Phys, **26**, 4219 (1993)
- [Ber96] J. Berakdar, J. Phys. Rev. A, **53** (1996) 2281
- [Bet30] A. Bethe, Ann, Physik, **37**, 863 (1930)
- [Bhs82] G. B. Bachelet, D. R. Hamann, and M. Schlüter, Phys. Rev. B, **26**, 8 , P. 4199 (1982)
- [Bor26] M. Born, Z. Phys, **37**, 863 (1926)
- [Bra89] M. Brauner, H. Klar, J.S. Briggs, Z. Phys, Atoms, Molecules and Clusters **11**, 257 (1989)
- [Bur97] A. Burgess, M. C. Chidichimo and J.A. Tully, J. Phys. B **30**, 33 (1997).
- [Byr66] Byron F. W., C. J. Joachain, Phys. Rev A. **164**, 1, (1966)
- [Byr67] F.W. Byron, Jr. And C. J. Joachain, Phys Rev. A, **164**, 1 (1967)
- [Cer94] S. C. Ceraulo, R. M. Stehman, and R. S. Berry Phys. Rev. A **49** 3 (1994) 1730
- [Cle74] E. Clementi and C. Roetti, at. Data Nucl. Data Tables **14**, 177 (1974)
- [Cap84] C. Dal Cappello, C. Tavad, A. Lahmam – Bennani, M. C. Dal Cappello, J. Phys. B, **17**, 4557 (1984).
- [Cap98] C. Dal Cappello, R. El Mkanter and P. A. Hervieux, Phys. Rev. A, **57** R693 (1998)
- [Cap91] C. Dal Cappello, Le Rouzo H., Phys. Rev. **A43** (1991) 3, 1395
- [Cap93] B. Joulakian and C. Dal Cappello, Phys. Rev. A, **47**, 5, P. 3788 (1993)
- [Cap94] C. Dal Cappello, Yu. V. Popov, Stefani G, Kuzmina N M and Hda H, J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys. **27**, 1549-60, (1994)
- [Cap95] C. Dal Cappello, H. Hda, and A.C. Roy, Phys. Rev. **A51**, 3735 (1995)
- [Car65] T. A. Carlson, M. O. Krause, Phys. Rev. A **140**, A 1057 (1965)
- [Cap83] C. Dal Cappello, Thèse de l'Université de Metz (1983)

- [Cap92] C. Dal Cappello . and Joulakian B., (e - 2e) and Related processes, edited by Whelan C. T., Walters H. R. J., A. Lahmam-Bennani and Ehrhard H., Kluwer Academic publishers (1993)
- [Cap93] C. Dal Cappello, B. Joulakian et J. Langlois *J. Phys.* **3**, 125 (1993)
- [Com] Robaux, Communication privée.
- [Coh77] Cohen-Tannoudji C, Diu B. et Lalöe F., *Mécanique quantique I et II*, Hermann (Paris) 1977
- [Gui82] J.H. Mc Guire, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1153 (1982)
- [Elg99] S. El Ghazouani, P.A. Hervieux, C. Dal Cappello and J. Langlois, *J. Phys. (France)* (1999) sous presse.
- [Elm95] B. El Marji ,A. Duguet , A. Lahmam-Bennani et M. Lecas et H. F. Wellenstein *J. Phys. B: At. Mol Opt. Phys.* **28** (1995) L733-L737
- [Elm96] R. El Mkhater, C. Dal Cappello, A. Lahmam – Bennani and Yu V Popov, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** , 1101-1107 (1996).
- [Fra91] A. Franz , Ming Tong and P. L Altick., *Inst. Phys. Conf.*, **122**, P.129 (1991)
- [For98] M. J. Ford, B. El Marji, and J. P. Doering
- [Gel56] Geltman S, *J. Phys. Rev.* **102**, 171-9, (1956)
- [Hda94] H. Hda, Double Ionisation des Gaz Rares Par Impact Electronique, Thèse de l'Université de Metz (1994)
- [Her94] P. A. Hervieux, Etude Théorique et Expérimentale de l'Excitation des Ions Multichargés par Impact Electronique, Thèse de L'Université Joseph Fourier – Grenoble I, (1992)
- [Hue91] A. Huetz , P. Selles , D. Waymel and J. Mazeau , *J. Phys B: At. Mol Opt. Phys.* **24** (1991) 1917
- [Hue94] A. Huetz , P. Lablanquie , L. Andric , P. Selle , and J. Mazeau , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994) L13
- [Ink71] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.* **43**, 297 (1971).
- [Ino78] M. Inokutti, Y. Itikawa, and J. E. Turner, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 23 (1978)
- [Joa83] C. J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, North-Holland publishing, (Amsterdam),
- [Jou92] B. Joulakian, C. Dal Cappello, and M. Brauner, *J. Phys. B* **25**, 2863 (1992)
- [Jou93] B. Joulakian and C. Dal Cappello, *Phys. Rev. A* **47**, 3788 (1993)
- [Kob91] H. Kobeissi, K. Fakherddine, and M. Kobeissi, *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. XI, 11-21 (1991)

- [Lab95] P. Lablanquie , J. Mazeau , L. Andric , P. Selles and A. Huetz , Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 2192
- [Lah89] A. Lahmam-Bennani, C. Dupré and A. Duguet, Phys. Rev. Lett. **63**, 1582 (1989)
- [Lah92] A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, A. M. Grisogono, and M. Lecas, J. Phys. B **25**, 2873 (1992)
- [Lah91] A. Lahmam-Bennani, J. Phys. B **24**, 2401 (1991).
- [Lahm92] A. Lahmam-Bennani, H. Ehrhardt, C. Dupré, and A. Duguet, J. Phys. B **24**, 3645 (1991)
- [Dug92] A. Duguet and A. Lahmam-Bennani, Z. Phys. D **23**, 383 (1992).
- [Lang]-J. Langlois Communication privée
- [Land74]-Landau L. et Lifchitz E., Physique Théorique, Editions Mir Moscou
- [Mot65]-Mott N. F. and Massey H.S.W., The Theory of Atomic collision, 3<sup>rd</sup> edition, Clarendon (Oxford) (1965)
- [Nic96]-Nicolas M., Tweed R. J. and O. Robaux , J. Phys. B **29**, 791-811, (1996).
- [Pet82] R. Peterkop, J. Phys. B **15**, L751 (1982).
- [Pop94] Yu V Popov, C. Dal Cappello, B. Joulakian and Kuzmina N M, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27**, 1599-612, (1994)
- [Pop96] Yu. V. Popov, C. Dal Cappello, J. Phys. B **31**, 301 (1998).
- [Rou91] H. Le Rousso and C. Dal Cappello, Phys. Rev. A **43**, 318 (1991).
- [Sch90] E. W. Schmid G. Spitz W. Lösch, Theoretical Physics on the Personal Computer , Second Edition, Springer-Verlag (Berlin) (1990)
- [Sch93] Schwarzkopf O, Krässig B, Elmiger J and Schmidt V, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 3008
- [San] I. Sanchez Communication privée
- [Smi78] Smirnov F. Yu, A. V. Pavlitchenkov, V. G. Levin et V. G. Neudatchin, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **11**, 20 (1987)
- [Sza92] L. Szasz, The Electronic structure of atoms , Wiley intersciences publication (1992)
- [Whe94] Whelan C. T., Allan R. J., Rasch J., Walters H.R.J., Zhang. X., Röder J., Jung K. and Ehrhardt H., Phys. Rev. A **50**, P.4394 (1994)
- [Tiw82] Tiwary S N, J. Phys. B **15**, L323-6, (1982)
- [Twe72] R.J. Tweed, J. Phys. B **5**, 810-19; 820 -4, (1972)
- [Twe73] R. J. Tweed, J. Phys. B **6**, 270 (1973)
- [Twe92]-R. J. Tweed, Z. Phys. D **23**, 309 (1992).

## ANNEXE A

**Calcul de  $T_1$ :**

$$T_1 = \sqrt{2} \langle \varphi^-(\vec{p}_1, r_1) \varphi^-(\vec{p}_2, r_2) | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{A-1})$$

le développement en ondes partielles de  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$  s'écrit :

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{l,m} (-1)^m (i)^l j_l(k, r) Y_l^{-m}(\hat{r}_1) Y_l^m(\hat{k}) \quad (\text{A-2})$$

En portant (A-2) en (A-1) et en remplaçant  $\varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)$ ,  $\varphi^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2)$  par leur développement en ondes partielles donné par (1.30) et  $\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  par son expression donnée par (2.11), après simplification en se basant sur la relation suivante :

$$\int Y_l^m(\hat{r}_1) Y_{l'}^{m'}(\hat{r}_1) d\hat{r}_1 = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (\text{A-3})$$

$T_1$  s'écrit :

$$T_1 = \frac{8\sqrt{2}}{p_1 p_2} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{l_1=0}^{l_{1\max}} \sum_{l=|l_1-\lambda|}^{(l_1+\lambda)} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda_{\max}} \sum_{m=-1}^1 \alpha_\lambda (-1)^{m_\lambda} (i)^l (-i)^{(l_1+\lambda)} e^{i(\sigma_{l_1}(p_1)+\sigma_\lambda(p_2))} \times \quad (\text{A-4})$$

$$I_1(\lambda, l_1, l, p_1, k) I_2(\lambda, p_2) I_3(l_1, \lambda, l, m_1, m_\lambda, m) Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{p}_2) Y_{l_1}^{(m+m_\lambda)}(\hat{p}_1) Y_l^{-m}(\hat{k})$$

On procède de la même façon pour calculer  $T_2$ , qui s'écrit après simplification:

$$T_1 = \frac{8\sqrt{2}}{p_1 p_2} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{l_2=0}^{l_{2\max}} \sum_{l=|l_2-\lambda|}^{(l_2+\lambda)} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda_{\max}} \sum_{m=-1}^1 \alpha_\lambda (-1)^{m_\lambda} (i)^l (-i)^{(l_2+\lambda)} e^{i(\sigma_{l_2}(p_2)+\sigma_\lambda(p_1))} \times \quad (\text{A-5})$$

$$I_1(\lambda, l_2, l, p_2, k) I_2(\lambda, p_1) I_3(l_2, \lambda, l, m_2, m_\lambda, m) Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{p}_1) Y_{l_2}^{(m+m_\lambda)}(\hat{p}_2) Y_l^{-m}(\hat{k})$$

**Calcul de  $H(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ :**

$$H(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \langle \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) \varphi^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1) | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{A-6})$$

en remplaçant  $\psi_c^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)$ ,  $\psi_c^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2)$  par leur développement en ondes partielles donné par (1.29) et  $\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  par son expression donnée par (2.11), après simplification on trouve:

$$H(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^2 p_1 p_2}} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} (-i)^{(2\lambda)} \alpha_\lambda (2\lambda + 1) e^{i(\sigma_\lambda(p_1)+\sigma_\lambda(p_2))} P_\lambda(\cos(\theta_{12})) \times \quad (\text{A-7})$$

$$I_2(\lambda, p_2) I_2(\lambda, p_1)$$

**Calcul de Z(k).**

$$Z(k) = \langle \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} | \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{A-8})$$

En remplaçant  $\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  par son expression donnée par (2.11) et le développement en onde partielle de  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1}$  donné par l'équation (A-2), après simplification Z(k) est donné par:

$$Z(k) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{l=0}^{2\lambda} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda^2 (i)^l (-1)^{m_\lambda} (2\lambda+1) \sqrt{(2l+1)} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & \lambda \\ -m_\lambda & m & m_\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \int_0^\infty r^2 j_l(k, r) R_\lambda^2(r) dr \quad (\text{A-9})$$

En utilisant la relation suivante:

$$\sum (-1)^{m_\lambda} \begin{pmatrix} \lambda & 1 & \lambda \\ -m_\lambda & 0 & m_\lambda \end{pmatrix} = 0 \quad \text{si } l \neq 0 \quad (\text{A-10})$$

et le fait que :

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & \lambda \\ -m_\lambda & 0 & m_\lambda \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{(\lambda-m_\lambda)}}{\sqrt{(2\lambda+1)}} \quad (\text{A-11})$$

et

$$\begin{pmatrix} \lambda & 0 & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^\lambda}{\sqrt{(2\lambda+1)}} \quad (\text{A-12})$$

après simplification Z(k) devient:

$$Z(k) = 2 \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \alpha_\lambda^2 (2\lambda+1) \int_0^\infty r^2 R_\lambda^2(r) j_0(k, r) dr \quad (\text{A-13})$$

Avec:

$$I_1(\lambda, l_1, l, p_1, k) = \int_0^\infty r R_\lambda(r) F_{l_1}(p_1, r) j_l(k, r) dr \quad (\text{A-14})$$

$$I_2(\lambda, p_2) = \int_0^\infty r R_\lambda(k, r) F_\lambda(p_2, r) dr \quad (\text{A-15})$$

$$I_3(l_1, \lambda, l, -m_1, m_\lambda, m) = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2\lambda+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l \\ -m_1 & m_\lambda & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A-16})$$

dans  $I_3$  on utilise les relation de symbole 3j suivantes:

$$-m_1 + m_\lambda + m = 0 \text{ et on déduit } m_1 = m + m_\lambda$$

$$|l_1 - \lambda| \leq l \leq l_1 + \lambda$$

## ANNEXE B

Dans cette annexe on se propose de calculer l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$ , dans le cas où l'on décrit les trois électrons sortant et l'électron incident par des fonctions coulombiennes.

$$T_{fi} = 2 \left\langle \psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \left| V_i \right| \psi_c^+ (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{B-1})$$

avec:

$$V_i = \frac{-2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \quad (\text{B-2})$$

$$\psi_{\vec{p}_1, \vec{p}_2}^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi_f^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1)) \quad (\text{B-4})$$

En portant (A-2), (A-3) et (A-4) dans (A-1), l'élément de matrice de  $T_{fi}$  devient:

$$\begin{aligned} T_{fi} = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left\langle \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle + \right. \\ & \left\langle \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle + \\ & \left\langle \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle + \\ & \left. \left\langle \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \right) - \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left\langle \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_f^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \left| \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \right\rangle + \left. \left\langle \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_f^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \left| \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \right\rangle \right) \times \\ & \left\langle \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{B-5})$$

En tenant compte du fait que les deux électrons éjectés peuvent contribuer d'une façon similaire à l'amplitude de diffusion, l'élément de matrice  $T_{fi}$  s'écrit:

$$\begin{aligned} T_{fi} = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left\langle \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle + \right. \\ & \left\langle \psi_c^- (\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle - \\ & \left\langle \psi_f^- (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_f^- (\vec{r}_2, \vec{r}_1) \left| \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \right\rangle \\ & \left. \left\langle \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+ (\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i (\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{B-6})$$

On pose:

$$T_1' = \sqrt{2} \left\langle \psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \psi_c^+(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{B-7})$$

$$T_2' = \sqrt{2} \left\langle \psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0) \psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{B-8})$$

$$T_0' = \left\langle \psi_c^+(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^+(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{B-9})$$

$$H(\vec{p}_1, \vec{p}_2) = \left\langle \psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_f^-(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \left| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{B-10})$$

L'expression de  $H(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$  est donnée dans l'annexe A par l'équation (A-6)

Calcul de  $T_1'$

Afin de calculer l'élément  $T_{fi}$ , on utilise le développement en ondes partielles de  $\frac{1}{r_{01}}$  donnée par:

$$\frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} = \sum_{l_3, m_3} \frac{4\pi}{(2l_3 + 1)} \frac{r_{<}^{l_3}}{r_{>}^{(l_3+1)}} Y_{l_3, m_3}^*(\hat{r}_0) Y_{l_3, m_3}(\hat{r}_1) \quad (\text{B-11})$$

et on remplace les fonctions coulombiennes  $\psi_c^-(\vec{p}_s, \vec{r}_0)$ ,  $\psi_c^+(\vec{p}_i, \vec{r}_0)$ ,  $\psi_f^-(\vec{p}_1, \vec{r}_1)$  et  $\psi_f^-(\vec{p}_2, \vec{r}_2)$  par leur développement en ondes partielles donné par (1.30),  $\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  par son expression donnée par (4.30). L'expression de  $T_1'$  se simplifie en utilisant le fait que:

$$\int Y_l^m(\hat{r}_1) Y_l^{m'}(\hat{r}_1) d\hat{r}_1 = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (\text{B-12})$$

et comme  $\vec{p}_i$  est parallèle à l'axe Z on a la relation suivante:

$$Y_l^m(\vec{p}_i) = \sqrt{\frac{(2l_0 + 1)}{4\pi}} \delta_{m,0} \quad (\text{B-13})$$

Après simplification  $T_1'$  s'écrit :

$$\begin{aligned}
T_1' &= \sqrt{2} \left( \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \right)^4 \frac{1}{p_1 p_2 p_i p_s} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda (-1)^{m_\lambda} (-i)^\lambda e^{i\sigma_\lambda(p_2)} Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{p}_2) I_1(\lambda, p_2) \\
&\sum_{l_1=0}^{l_1 \max} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} (-1)^{m_1} (-i)^{l_1} e^{i\sigma_{l_1}(p_1)} Y_{l_1}^{m_1}(\hat{p}_1) \sum_{l_3=0}^{l_3 \max} \sum_{m_3=-l_3}^{l_3} \frac{1}{(2l_3+1)} \\
&I_2(l_1, \lambda, l_3, -m_1, m_\lambda, m_3) \sum_{l_0=0}^{l_0 \max} (2l_0+1)(i)^{l_0} e^{i\sigma_{l_0}(p_i)} \sum_{l_s=0}^{l_s \max} \sum_{m_s=-l_s}^{l_s} Y_{l_s}^{m_s}(\hat{p}_s) \times \\
&I_2(l_3, l_s, l_0, m_s, -m_s, 0) I_3(l_0, l_s, l_3, l_1, \lambda, p_1, p_i, p_s)
\end{aligned} \tag{B-14}$$

$$\begin{aligned}
T_2' &= \sqrt{2} \left( \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \right)^4 \frac{1}{p_1 p_2 p_i p_s} \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} \alpha_\lambda (-1)^{m_\lambda} (-i)^\lambda e^{i\sigma_\lambda(p_1)} Y_\lambda^{-m_\lambda}(\hat{p}_1) I_1(\lambda, p_1) \\
&\sum_{l_2=0}^{l_2 \max} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (-1)^{m_2} (-i)^{l_2} e^{i\sigma_{l_2}(p_2)} Y_{l_2}^{m_2}(\hat{p}_2) \sum_{l_3=0}^{l_3 \max} \sum_{m_3=-l_3}^{l_3} \frac{1}{(2l_3+1)} \\
&I_2(l_2, \lambda, l_3, -m_2, m_\lambda, m_3) \sum_{l_0=0}^{l_0 \max} (2l_0+1)(i)^{l_0} e^{i\sigma_{l_0}(p_i)} \sum_{l_s=0}^{l_s \max} \sum_{m_s=-l_s}^{l_s} Y_{l_s}^{m_s}(\hat{p}_s) \times \\
&I_2(l_3, l_s, l_0, m_s, -m_s, 0) I_3(l_0, l_s, l_3, l_2, \lambda, p_1, p_i, p_s)
\end{aligned} \tag{B-15}$$

Calcul de  $T_0'$

$$\begin{aligned}
T_0' &= \left\langle \psi_c^-(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^-(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\
&= 2 \left\langle \psi_c^-(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \psi_c^-(\vec{p}_i, \vec{r}_0) \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle
\end{aligned} \tag{B-16}$$

$$\begin{aligned}
T_0' &= \frac{2}{p_i p_s} \left( \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \right)^2 \sum_{\lambda=0}^{\lambda_{\max}} \sum_{m_\lambda=-\lambda}^{\lambda} (-1)^{m_\lambda} \alpha_\lambda^2 \sum_{l_3=0}^{l_3 \max} \frac{1}{(2l_3+1)} I_2(l_3, \lambda, \lambda, 0, -m_\lambda, m_\lambda) \\
&\sum_{l_0=0}^{l_0 \max} (2l_0+1)(i)^{l_0} e^{i\sigma_{l_0}(p_i)} \sum_{l_s=0}^{l_s \max} \sum_{m_s=-l_s}^{l_s} (-i)^{l_s} e^{i\sigma_{l_s}(p_s)} I_2(l_3, l_s, l_0, 0, 0, 0) \\
&I_3(l_0, l_s, l_3, \lambda, p_i, p_s)
\end{aligned} \tag{B-17}$$

Avec:

$$I_1(\lambda, p_2) = \int_0^\infty r R_\lambda(r) F_\lambda(p_2, r) dr \tag{B-18}$$

$$I_2(l_3, l_s, l_0, m_s, -m_s, 0) = \int Y_{l_3}^{m_s}(\hat{r}) Y_{l_s}^{-m_s}(\hat{r}) Y_{l_0}^0(\hat{r}) d\hat{r} \tag{B-19}$$

$$I_3(l_0, l_s, l_3, l_1, \lambda, p_1, p_i, p_s) = \int F_{l_0}(p_i, r_0) V_{l_3}^{l_1, \lambda}(r_0, p_1) F_{l_s}(p_s, r_0) dr_0 \tag{B-20}$$

$$V_{l_3}^{l_1, \lambda}(r_0, p_1) = \int r_1 R_\lambda(r_1) F_{l_1}(p_1, r_1) \frac{r_{<}^{l_3}}{r_{>}^{l_3+1}} dr_1 \quad (\text{B-21})$$

$$I_3'(l_0, l_s, l_3, \lambda, p_i, p_s) = \int F_{l_0}(p_i, r_0) V_{l_3}^\lambda(r_0) F_{l_s}(p_s, r_0) dr_0 \quad (\text{B-22})$$

$$V_{l_3}^\lambda(r_0) = \int r_1^2 R_\lambda(r_1) R_\lambda(r_1) \frac{r_{<}^{l_3}}{r_{>}^{l_3+1}} dr_1 \quad (\text{B-23})$$

## ANNEXE C

### Méthodes approximatives pour la résolution de l'équation de Schrödinger

#### 1 Méthodes d'approximation

L'équation de Schrödinger associée au mouvement de deux électrons s'écrit:

$$\left[ \frac{\Delta_1}{2} + \frac{\Delta_2}{2} + E + Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) - \frac{1}{r_{12}} \right] R(r_1, r_2) = 0 \quad (\text{C.1})$$

##### a- Méthode des perturbations

La résolution approximative de l'équation:

$$H\phi = E\phi, \quad (\text{C.1}) \quad (\text{C.2})$$

par la méthode des perturbations consiste à écrire le hamiltonien  $H$  sous la forme:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad (\text{C.3})$$

où:

$$H_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + V_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{C.4})$$

$$\lambda H_1 = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - V_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{C.5})$$

$V_0$  est choisi de telle sorte que le hamiltonien  $H_0$  possède une forme simple que l'on puisse séparer les deux mouvements des deux électrons et que la contribution du terme  $\lambda H_1$  soit relativement faible, c'est – à – dire:

$$H_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + V_0(r_1) + V_0(r_2) \quad (\text{C.6})$$

$$\lambda H_1 = -\frac{Z}{r_1} - V(r_1) - \frac{Z}{r_2} - V(r_2) + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{C.7})$$

Les solutions propres  $\phi$  ainsi que les énergies associées  $E$  de l'équation de Schrödinger

$$(H_0 + \lambda H_1 - E)\phi = 0 \quad (\text{C.8})$$

sont données sous forme de série de puissance en  $\lambda$

$$E = \sum \lambda^n E_n \quad \text{et} \quad \phi = \sum \lambda^n \phi_n \quad (\text{C.9})$$

L'état non perturbé  $\phi_0$  est l'énergie  $E_0$  associée vérifiant l'approximation de zéro donnée par l'équation

$$(E_0 - H_0)\phi_0 = 0 \quad (\text{C.10})$$

### b- Méthode variationnelle

La méthode variationnelle de Ritz consiste à résoudre d'une manière approchée l'équation (2.11), cette méthode consiste à choisir une fonction d'essai de sorte que l'expression intégrale

$$E(\lambda) = \frac{\langle \lambda | H | \lambda \rangle}{\langle \lambda | \lambda \rangle} \quad (\text{C.11})$$

soit minimale. Quand la fonction  $\phi_\lambda$  coïncide avec une des solutions propres  $\phi$  de l'équation (C.2),  $E(\lambda)$  devient l'énergie associée. Lorsque cette fonction diffère légèrement de la fonction  $\phi$ , la fonction  $E(\lambda)$  devient légèrement supérieure à  $E$ .

Considérons un état fondamental  $\phi_a$  correspondant à un niveau d'énergie  $E_a$  le plus bas. En écrivant  $\phi_\lambda$  sous la forme :

$$\phi_\lambda = \phi_a + \lambda \phi_b, \quad (\text{C.12})$$

$\phi_b$  une fonction propre de  $H$ , orthogonale à l'état  $\phi_a$ , dont l'énergie propre  $E_b$  associée satisfait la condition  $E_b \geq E_a$ . L'expression (C.20) devient:

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \frac{\langle \phi_a + \delta \phi_b | H | \phi_a + \delta \phi_b \rangle}{\langle \phi_a + \delta \phi_b | \phi_a + \delta \phi_b \rangle} \\ &= E_b + \delta^2 (E_b - E_a) + 0(\delta^4) \geq E_a \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

La méthode de Ritz consiste alors à choisir une expression analytique  $\phi_\lambda$  en fonction d'un certain nombre de paramètres  $\lambda$ . La valeur minimale de la fonction  $E(\lambda)$  que l'on peut trouver représente la limite par excès de la valeur exacte  $E_b$ .

## Hamiltonien d'un système à deux électrons de valence

Le hamiltonien d'un système formé de N électrons et d'un noyau de charge Z est donnée par :

$$H = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 - \frac{Z}{r} \right) + \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{C.14})$$

Les fonctions d'onde et les énergies sont déterminées ont résolvant l'équation de Schrödinger:

$$\left[ \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 - \frac{Z}{r} \right) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{C.15})$$

Les systèmes auxquels on s'intéresse sont constitués des atomes alcalino-terreux (Be, Mg, Ca, etc.) . Dans ce travail on se limite uniquement à l'atome Mg, les fonctions d'onde de Mg ont été calculées par Langlois et I. Sanchez à l'aide de la méthode d'interaction de configuration. L'utilisation de cette méthode consiste à considérer que les électrons du cœur sont 'gelés', c'est à dire qu'il leur est impossible de changer d'état quantique, seul les électrons de valence peuvent quitter l'atome.

Sous cette condition l'équation (C.16) devient:

$$\left[ h(\mathbf{r}_1) + h(\mathbf{r}_2) + \frac{1}{r_{12}} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{C.16})$$

$$h(\mathbf{r}_i) = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + V(\mathbf{r}_i) \quad (\text{C.17})$$

Le calcul de I. Sanchez , prend en compte l'effet du cœur sur chacun des électrons actifs et dans ce cas  $h(\mathbf{r}_i)$  représente le hamiltonien du système cœur et l'électron i. V représente le potentiel modèle ou pseudo-potentiel simulant ce cœur, Dans ce cas les fonctions obtenues ne convergent pas rapidement dans le calcul de la double ionisation. Dans le cas héliumoïde, ce potentiel se réduit à  $V(\mathbf{r}_i) = -\frac{Z}{r_i}$

## Méthode d'interaction de configuration

La méthode d'interaction de configuration pour résoudre l'équation de Schrödinger associée à un système à deux électrons semble être la plus naturelle. Ceci est d'autant plus évident si on considère le modèle à électrons indépendant. Réécrivons le hamiltonien de l'équation (C.1) sous la forme :

$$H = H_{\text{ind}} + H_{\text{corr}} \quad (\text{C.18})$$

où  $H_{\text{ind}} = h(r_1) + h(r_2)$  est le hamiltonien du système à électrons indépendants. L'interaction coulombienne entre les deux électrons est comprise dans le terme de corrélation  $H_{\text{corr}} = 1/r_{12}$  et peut être interprétée comme une perturbation du modèle à électrons indépendants. L'espace des états propres de ce modèle s'écrit donc comme un produit tensoriel de deux espaces d'états propres de systèmes à un électron. Les fonctions d'ondes sont des produits d'orbitales monoélectroniques et les énergies s'écrivent comme la somme des énergies de chaque électron. Ainsi un produit d'états monoélectroniques sera du type (3s,3s), (3p,3p), (3d,3d), (4s,4s), (4p,4p), (4d,4d) par exemple pour le fondamental du magnésium.

Ces produits d'états à un électron sont appelés configurations. Afin que ces configurations correspondent à des états propres physiques de  $H_{\text{ind}}$  il faut qu'elles vérifient le principe d'exclusion de Pauli. Les configurations di-électroniques correctement symétrisées et normalisées sont de la forme :

$$\begin{aligned} \phi_{(n \ln l')}^{S=0, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \sum_{m, m'} (-1)^{(l'-l)} \sqrt{(2L+1)} \begin{pmatrix} 1 & l' & L \\ m & m' & M \end{pmatrix} \\ &\sqrt{\frac{1}{2}} [R_{nl}(r_1)R_{n'l'}(r_2) + (1 \leftrightarrow 2)] \otimes \chi_{0,0}(1,2) \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

pour un état singulet et

$$\begin{aligned} \phi_{(n \ln l')}^{S=0, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \sum_{m, m'} (-1)^{(l'-l)} \sqrt{(2L+1)} \begin{pmatrix} 1 & l' & L \\ m & m' & M \end{pmatrix} \\ &\sqrt{\frac{1}{2}} [R_{nl}(r_1)R_{n'l'}(r_2) - (1 \leftrightarrow 2)] \otimes \begin{cases} \chi_{1,-1}(1,2) \\ \chi_{1,0}(1,2) \\ \chi_{1,+1}(1,2) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.20)$$

pour un état triplet.

Le facteur  $1/\sqrt{2}$  disparaît lorsque  $nl = n'l'$ .  $L$  désigne la valeur du moment cinétique orbital total (couplage de  $l$  et  $l'$ ) et  $M$  sa projection sur l'axe  $oz$ .

La méthode d'interaction de configuration consiste à diagonaliser le hamiltonien complet du système (2.11) dans la base des configurations de (2.13) et (2.14). Les solutions sont alors les états propres du modèle à électrons indépendant corrigées de l'interaction entre les configurations (couplage électron-électron).

#### - Fonctions d'ondes de Mg.

Dans de l'atome de magnésium ( $3s^2$ ),  $L=0$  et  $S=0$ , en ignorant toute composante de spin l'équation de la fonction d'onde décrivant l'état fondamental de l'atome de magnésium devient:

$$\phi_{(nl\ n'l')}^{S=0,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{m,m'} (-1)^{(l'-l)} \begin{pmatrix} 1 & l' & 0 \\ m & m' & 0 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \left[ R_{nl}(r_1) Y_l^m(\hat{r}_1) R_{n'l'}(r_2) Y_{l'}^{-m}(\hat{r}_2) + (1 \leftrightarrow 2) \right] \quad (C.21)$$

Le facteur  $1/\sqrt{2}$  disparaît lorsque  $nl = n'l'$ , et en utilisant les relations suivant du symbole  $3j$  : et  $m=-m'$  (C.22)

$$\begin{pmatrix} 1 & l & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{l-m}}{\sqrt{(2l+1)}} \quad (C.23)$$

L'équation devient:

$$\phi_{(nl\ nl')}^{S=0,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_m \alpha_{n,n}^{l,l} \frac{(-1)^{(l-m)}}{\sqrt{2l+1}} \left[ R_{nl}(r_1) Y_l^m(\hat{r}_1) R_{nl}(r_2) Y_l^{-m}(\hat{r}_1) \right] \quad (C.24)$$

les fonctions décrivant l'atome de magnésium dans l'état fondamental dans le cas où  $n = n'$  seront données par:

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_l \sum_m \alpha_{n,n}^{l,l} \frac{(-1)^{(l-m)}}{\sqrt{2l+1}} \left[ R_{nl}(r_1) Y_l^m(\hat{r}_1) R_{nl}(r_2) Y_l^{-m}(\hat{r}_2) \right] \quad (C.25)$$

La normalisation de ces fonctions d'onde est donnée par :

$$\langle \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = 1 \quad (C.26)$$

en remplace  $\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  par son expression on trouve:

$$\sum_l \frac{(\alpha_{n,n}^{l,l})^2}{2l+1} = 1 \quad (C.27)$$

Les fonctions de Langlois :

Configuration (n=5):

$$3s(1)3s(2)+3p(1)3p(2)+3d(1)3d(2)+4s(1)4s(2)+4p(1)4p(2)+4d(1)4d(2)+5s(1)5s(2)+5p(1)5p(2)+5d(1)5d(2)$$

n=n'	l=l'	$\alpha_{n,n}^{l,l'}$
3	0	0.963959
3	1	-0.260679
3	2	-0.030073
4	0	-0.041793
4	1	-0.011192
4	2	-0.005481
5	0	-0.003883
5	1	-0.002356
5	2	-0.001657

Configuration ( b' ) (n=4):

$$3s(1)3s(2)+3p(1)3p(2)+3d(1)3d(2)+4s(1)4s(2)+4p(1)4p(2)+4d(1)4d(2)$$

n = n'	L = l'	$\alpha_{n,n}^{l,l'}$
3	0	0.963895
3	1	-0.260905
3	2	-0.030154
4	0	-0.042016
4	1	-0.11364
4	2	-0.005607

Configuration (n=3):

$$3s(1)3s(2)+3p(1)3p(2)+3d(1)3d(2)$$

n=n'	l = l'	$\alpha_{n,n}^{l,l'}$
3	0	0.963348d0
3	1	-0.266415d0
3	2	-0.031365d0

Configuration (b): 3s(1)3s(2) + 3s(1)4s(2)

n	n'	l = l'	$\alpha_{n,n}^{l,l'}$
3	3	0	0.998297
3	4	0	-0.058329

Fonction de Sanchez (c) :

Configuration:  $3s(1)3s(1) + 3s(1)4s(2) + 3s(1)5s(2) + 3s(1)6s(2) + 3p(1)3p(2) + 3p(1)4p(2) + 3d(1)3d(1)$

n	n'	l=l'	$\alpha_{n,n'}^{l,l'}$
3	3	0	0.94188
3	4	0	-0.20956
3	5	0	-0.05602
3	6	0	-0.03001
3	3	1	0.24437
3	4	1	0.02572
3	3	2	-0.02191

Fonction de Clémenti et Roetti:

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_2) \quad (2.15)$$

$$\varphi(\vec{r}_1) = A_0\varphi_{1s}(\vec{r}_1) + \sum_{i=1}^7 A_i\varphi_{3s}(\vec{r}_1) \quad (2.16)$$

avec:

$\varphi_{1s}(\vec{r}_1)$  et  $\varphi_{3s}(\vec{r}_1)$  sont les orbitales de Slater [thèse de Dal Cappello]

$A_0 = 0.04691$

i	$A_i$
1	0.00144
2	-0.018500
3	-0.079640
4	-0.13478
5	-0.019060
6	0.48239
7	0.60221