



AVERTISSEMENT

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

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

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

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

LIENS

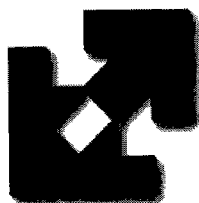
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

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

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

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

UNIVERSITE DE METZ



THESE DE DOCTORAT

présentée par

Farid EL BOUDALI

pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE METZ

**IONISATION ($e,2e$) DU LITHIUM ATOMIQUE ET DIATOMIQUE, INFLUENCE DES
ELECTRONS DU COEUR DANS LA DETERMINATION, PAR ONDES DISTORDUES,
DE LA SECTION EFFICACE MULTIPLEMENT DIFFERENTIELLE**

Soutenance le Vendredi 06 juillet 2001

devant la Commission d'Examen :

M. ALLAN Robert, Professeur à C.C.L.R.C., Royaume Uni

Rapporteur

Mme AUBERT-FRECON Monique, Directeur de Recherche CNRS

à l'université Claude Bernard de Lyon I

Rapporteur

M. A. LAHMAM-BENNANI, Professeur à l'université Paris-sud (Orsay)

Examineur

M. Jean-Louis BRETONNET, Professeur à l'université de Metz

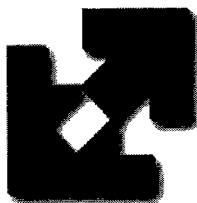
Examineur

M. Boughos JOULAKIAN, Professeur à l'Université de Metz

Directeur de thèse

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	2001 1045
Cote	S/M2 01/35
Loc	Magasin

UNIVERSITE DE METZ



THESE DE DOCTORAT

présentée par

Farid EL BOUDALI

pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE DE METZ

**IONISATION ($e,2e$) DU LITHIUM ATOMIQUE ET DIATOMIQUE, INFLUENCE DES
ELECTRONS DU COEUR DANS LA DETERMINATION, PAR ONDES DISTORDUES,
DE LA SECTION EFFICACE MULTIPLEMENT DIFFERENTIELLE**

Soutenance le Vendredi 06 juillet 2001

devant la Commission d'Examen :

M. ALLAN Robert, Professeur à C.C.L.R.C., Royaume Uni

Rapporteur

Mme AUBERT-FRECON Monique, Directeur de Recherche CNRS

à l'université Claude Bernard de Lyon I

Rapporteur

M. A. LAHMAM-BENNANI, Professeur à l'université Paris-sud (Orsay)

Examineur

M. Jean-Louis BRETONNET, Professeur à l'université de Metz

Examineur

M. Boughos JOULAKIAN, Professeur à l'Université de Metz

Directeur de thèse

Remerciement

Le présent travail a été réalisé au laboratoire de Physique Moléculaire et des collisions (LPMC) de l'université de Metz, sous la direction de Monsieur le Professeur B. JOULAKIAN que je prie d'accepter l'expression de ma profonde gratitude pour l'intérêt et la confiance indéfectible qu'il n'a cessé de me manifester ainsi que son attitude libérale et constamment bienveillante à mon égard.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Monsieur le Docteur B. Najjari pour son amitié et pour son aide précieuse qu'il a apporté à ce travail. Je lui suis reconnaissant d'avoir bien voulu me faire profiter des ses compétences scientifiques et pour nos discussions très constructives.

Mes remerciements vont également au Docteur M. Madjet et à mes collègues Z. Bilal et B. Hafida pour leurs amitiés, j'exprime ma gratitude pour l'atmosphère de sympathie et de soutien cordial dont ils m'ont entouré.

Je remercie également tous mes amis de CLOES au Suplec. Je voudrais en particulier témoigner ma profonde amitié aux futurs docteurs Mohamed Bensalah et Vincent Brice qui ont pu contribuer à l'ambiance amicale que j'ai pu y trouver le jour de la soutenance.

Je remercie également tous les personnels administratifs et techniques du LPMC.

Table des matières

Introduction générale.....	1
-----------------------------------	----------

1- Notions de base des collisions ionisantes par impact électronique

1.1 : Introduction	6
1.2 : Description d'une réaction (e, 2e).....	6
1.3 : Notion de section efficace	7
1.3.1 : Section efficace différentielle	8
1.3.2 : La section efficace simplement et doublement différentielle pour la double ionisation ...	9
1.3.3 : La section efficace triplement différentielle	9
1.3.4 : Section efficace quintuplement différentielle	10
1.4 : Développement de Born.....	10
1.5 : Détermination de la matrice de transition	11
1.5.1 : Cas d'un électron incident rapide.....	11
1.5.2 : Cas d'un électron incident lent	12
1.6 : Les fonctions d'onde du continuum.....	14
1.6.1 : Résolution de l'équation de Schrödinger -Méthode des ondes partielles	14
1.6.1.1 : Cas d'une particule libre	16
1.6.1.2 : Cas d'un potentiel coulombien.....	17
1.6.1.3 : Cas d'un potentiel de distorsion	18
1.7 : Résolution numérique de la fonction d'onde radiale $F_l(k,r)$	19
1.8 : Fonctions radiales.....	20
1.8.1 : Détermination du déphasage	23
1.9 : Modèles 2C et 3C	24
Conclusion.....	25

2- Détermination des fonctions d'onde du système collisionnel

2.1 : Introduction	27
2.2 : Fonction d'onde totale des systèmes collisionnels à plusieurs électrons.....	27
2.2.1 : Système collisionnel à deux électrons	28

2.2.2 : Système collisionnel à trois électrons actifs	31
2.2.3 : Système collisionnel à quatre électrons	33
2.2.4 : Fonctions d'onde dans le cas d'une double ionisation d'un système à trois électrons actifs	37
Conclusion	38

3- L'étude de l'ionisation simple d'un système à trois électrons actifs : Application au lithium

3.1 : Introduction	39
3.2 : Processus (e, 2e) aux faibles énergies d'incidence	39
3.3 : Ionisation (e,2e) du lithium atomique à trois électrons actifs	40
3.3.1 : Section efficace triplement différentielle	40
3.3.2 : Détermination de l'élément de transition	41
3.3.3 : Détermination de la fonction d'onde monoélectronique du continuum.....	43
3.3.3.1 : Etat initial du système	43
3.3.3.1.1 : Fonction radiale de l'électron incident.....	44
3.3.3.2 : Etat final du système	44
3.3.3.2.1 : Fonction radiale des électrons éjecté et diffusé.....	46
3.3.3.2.2 : Correction de la répulsion entre les deux électrons.....	46
3.3.3.4 : Choix de la fonction d'onde de l'état lié	47
3.3.3.5 : Calcul du terme direct f1 de la SEDT	48
3.4 : Résultats et discussions	50
3.4.1 : Ordre d'importance des différents termes d'échange	51
3.4.1.1 Conclusion	61
3.4.2 : Facteur d'asymétrie	62
Conclusion	66

4- Ionisation (e,2e) de la molécule diatomique Li₂ par impact d'électron rapide

4.1 : Introduction	67
4.2 : Détermination des fonctions d'onde électroniques	67
4.2.1 : Système diatomique mono électronique Li ⁺ ₂	68
4.2.2 : Système diatomique biélectronique Li ₂	70

4.2.2.1 : Le terme d'interaction électron-électron..... 72

4.3 : Etude de l'ionisation simple de la molécule diatomique à deux électrons actifs 74

4.3.1 : Fonction d'état électronique initial et final du système..... 75

4.3.2 : Calcul de l'élément de transition 76

4.3.3 : Application de l'approximation 'DWBA' aux systèmes diatomiques 77

4.4 : Résultats et discussion 79

4.4.1 : Ionisation (e,2e) de la molécule Li₂ 83

Conclusion..... 90

Conclusion générale..... 91

Annexes..... 93

Références

Introduction générale

L'étude de l'ionisation des atomes et des molécules par impact électronique constitue une branche importante de la physique des collisions, qui suscite un intérêt de plus en plus grandissant grâce aux réponses qu'elle apporte aux problèmes posés dans différents domaines, comme la physique des plasmas, l'astrophysique et l'étude des réactions ionisantes sur les molécules vivantes (Champion et al 1998). Cet intérêt est amplifié par le développement de techniques récentes de détection qui ont donné naissance à une nouvelle génération d'expérience de collision où les détections en coïncidence des électrons émergents sont réalisées avec une grande précision et efficacité.

Historiquement, l'étude du processus de simple ionisation, noté $(e,2e)$, dans lequel les deux électrons dans la voie finale sont détectés en coïncidence, a débuté avec les expériences de Langmuir et Jones (1928) et Rudberg (1930), suivies par une série de travaux théoriques qui ont développé le formalisme quantique avec un double objectif : comprendre la structure électronique de la cible et la corrélation électron-électron et analyser les mécanismes d'ionisation. Les travaux de Bethe (1930), puis Massy et Mohr (1933) ont réussi à établir la base de la description de l'ionisation en utilisant l'approximation de Born. Peterkop (1960), puis Rudge et Seaton (1964, 1965) ont également contribué aux formulations théoriques du problème en proposant des approximations pour l'étude des systèmes à trois corps dans l'état final, comme la notion de charge effective qui permet de décrire les corrélations post-collisionnelles entre les électrons du continuum. En 1969, Ehrhardt et al et Amaldi et al ont réussi respectivement à détecter en coïncidence les deux électrons sortant de l'ionisation $(e,2e)$ d'hélium et d'un film mince de carbone. D'autres expériences de même type ont été ensuite réalisées sur des cibles d'hélium et d'argon par Lahmam-Bennani et al (1983) pour des énergies incidentes de l'ordre de 8 KeV et par Di Martino et al (1984) pour des énergies incidentes comprises entre 500 eV et 2000 eV. Par ailleurs, de nouvelles techniques de détection ont apparues, telles que la technique appelée communément COLTRIMS "Cold Target Recoil Ion momentum Spectroscopy" développée par le groupe de Frankfort (Döner et al en 1996),

permettant de mesurer dans l'ionisation (e,2e) de H_2^+ , la quantité de mouvement de l'ion résiduel avec celle de l'un des électrons émergents, donnant ainsi une information complète sur le processus.

L'évolution de ces expériences a été accompagnée, tout naturellement, par le développement et la diversification des approches théoriques qui ont suivi l'amélioration des moyens de calcul : Ainsi dans le cadre de l'approximation perturbative de Born, différents modèles ont été proposés pour décrire les ondes représentant les électrons incident, diffusé et éjecté, allant de l'onde plane simple pour les électrons rapides (≈ 1000 eV) jusqu'aux différents modèles du double continuum corrélé proposé par Garibotti et Miraglia (1980) et appliqué pour la première fois par Brauner et al (1989) à l'ionisation simple d'hélium, en passant par une description sous forme de produits appropriés d'ondes coulombiennes (Peterkop 1969) ou par des ondes distordues utilisées dans l'ionisation (e,2e) de cibles atomiques par Madison et al (1977) et Whelan et al (1993). Il faut ajouter à ces méthodes, les approches plus radicales comme la méthode R-Matrix (Burke and Berrington 1993) ou la méthode de 'CCC' "convergent close-coupling" (Bray et al 1999), qui sont des approches numériques et qui demandent des moyens de calcul importants pour la construction des bases nécessaires dans la détermination de la section efficace des processus collisionnels.

En ce qui concerne les cibles diatomiques, leurs études ont débuté avec les travaux de Neudachin et al (1969) qui ont développé un formalisme adapté aux cibles moléculaires en ignorant les effets liés à leurs mouvements de rotation et de vibration. Les premiers calculs de la section efficace triplement différentielle ont débuté avec Dey et al (1975) sur la molécule H_2 et D_2 . A la même époque, les premières mesures expérimentales ont été réalisées par Weigold et al (1973) sur H_2 . La meilleure correspondance avec l'expérience fut obtenue par la modélisation de Zurales et Lucchese (1987, 1988), représentant l'interaction de l'électron éjecté avec l'ion résiduel par un potentiel effectif. L'extension de l'ionisation par impact électronique aux systèmes diatomiques autres que la molécule H_2 a rarement été considérée à cause de la difficulté de décrire les états du continuum à deux centres (Cherid et al. (1989) et Dal Cappello M. C. et al. (1989)). Dans l'étude de (e,2e) de la molécule H_2 , Motassim et al (1999) ont proposé une solution approchée basée sur l'approximation de Pluvillage (1950,1951) qui permet de décrire l'état de continuum à deux centres par le produit d'une onde plane centrée sur le centre de la molécule et deux fonctions hypergéométriques centrées sur chacun des noyaux.

Dans le présent travail, nous étudierons l'ionisation (e,2e) du lithium atomique et diatomique par une approche perturbative en utilisant les ondes distordues pour décrire les électrons du continuum. Le mémoire comporte deux sections principales : La première concernant l'étude de l'ionisation (e,2e) de l'atome du lithium atomique à trois électrons actifs par impact électronique à faible et moyenne énergie d'incidence, et la deuxième concerne l'étude de l'ionisation (e,2e) du lithium moléculaire Li_2 par impact d'électron rapide.

Nous allons, dans la première section étudier d'une façon générale un système collisionnel à quatre électrons, dans le cadre de l'approximation 'DWBA' " Distorted Wave Born approximation", appliquée à l'ionisation (e,2e) de l'atome du lithium pour lequel les électrons de cœur sont pris directement en compte.

Bien que le lithium soit l'un des systèmes atomiques les plus simples après l'hydrogène et l'hélium, l'étude de son ionisation par impact électronique a été limitée pendant longtemps au calcul de la section efficace totale. On cite ici les travaux de Mc Dowell et al (1964) ainsi que ceux de Jalin et al (1972), puis Bartschat et al (1989). Les premières mesures expérimentales à notre connaissance sur la section efficace triplement différentielle, ont été obtenues par Frost et al (1990). En 1994 Hafid et al ont étudié l'ionisation de la couche 2s de l'atome du lithium en utilisant pour la description du double continuum la fonction d'onde corrélée, développée par Brauner et al (1989). Ce modèle se prête mal au développement en ondes partielles, car la séparation de la partie radiale et angulaire présente des difficultés pratiques insurmontables (Peterkop et al 1982, Altick 1983). Depuis lors, un grand nombre de résultats a été obtenu, explorant en particulier la région de basse énergie en utilisant différents modèles théoriques. Citons les calculs d'Igor Bray et al (1999) pour la détermination du paramètre d'asymétrie associé à la section efficace triplement différentielle qui ont été comparé aux mesures expérimentales récentes de Streun et al (1998, 1999). Le but principal de notre étude dans cette première partie est de quantifier l'influence de la prise en compte des électrons de cœur et la contribution de différents termes d'échange à la section efficace triplement différentielle, qui jusqu'à maintenant, n'ont jamais été considérés.

Dans la deuxième section, nous appliquons la procédure des ondes distordues 'DWBA' à l'étude de l'ionisation (e,2e) des systèmes diatomiques en étendant le modèle d'atomes séparés proposé par Motassim et al (1999) et Weck et al (2000) à la molécule Li_2 . Le but de ce travail est de présenter une approximation élégante qui donnera une description en ondes partielles du continuum électronique bicentrique.

Dans le premier chapitre, nous rappelons quelques notions de la théorie des collisions nécessaires pour notre étude. Le développement en ondes partielles et la méthode numérique de Fox-Godwin (Schmid et al 1990) nécessaires pour résoudre l'équation de Schrödinger radiale seront également présentées dans ce chapitre. Dans le deuxième chapitre, nous complétons notre construction des éléments de base nécessaires dans les chapitres suivants, en décrivant le système électronique complet avant et après la collision. Nous commençons par l'antisymétrisation des fonctions d'onde susceptibles de décrire les systèmes collisionnels à deux électrons, à trois électrons et à quatre électrons. Nous déduisons ensuite l'expression de l'élément de matrice de transition correspondant à chacun de ces systèmes.

Dans le chapitre 3, nous proposons d'étudier l'ionisation simple de l'atome du lithium dans le cadre d'une cible multiélectronique. Nous commençons, par développer le calcul de la section efficace triplement différentielle d'un système collisionnel à quatre électrons (incident+atome à 3 électrons), en introduisant pour la première fois les différents termes d'échanges possibles dans l'expression de l'élément de transition. Les résultats obtenus par nos approches seront confrontés aux calculs théoriques récents (Bray et al 1999), ainsi qu'à des mesures expérimentales de la section efficace triplement différentielle (Frost et al 1990) et du paramètre d'asymétrie (Streun et al 1998 et 1999). Dans une autre étape nous allons répondre à certaines questions concernant la contribution des électrons internes dans la détermination de la section efficace, en représentant une série de comparaison de nos résultats théoriques obtenus par l'application de notre approche pour des systèmes à quatre électrons, avec des calculs effectués par nous même en utilisant l'approximation du cœur gelé, qui consiste à retenir uniquement l'électron de valence. Nous constatons pour certaines conditions cinématiques, que l'approximation du cœur gelé et l'approche du potentiel modèle sont incapables de décrire correctement le processus d'ionisation et que les électrons internes contribuent activement à la section efficace triplement différentielle et particulièrement pour les grands angles de diffusions.

Dans le chapitre 4 consacré à l'ionisation ($e,2e$) des molécules diatomiques à deux électrons actifs, nous commençons en un premier lieu par le calcul, dans le cadre de l'approximation de Born Oppenheimer, de la fonction d'onde électronique de la molécule Li_2 et de son ion Li_2^+ en utilisant la méthode variationnelle. Vu la complexité du système moléculaire diatomique, nous considérons la molécule Li_2 comme une cible à deux électrons actifs et nous

nous contentons d'une description modélisée du potentiel de cœur ($1s^2$) de chaque atome Li. Nous développons ensuite le calcul de l'élément de transition en négligeant les mouvements rotationnels et vibrationnels de la molécule cible (Weck et al 2000), et nous vérifions notre procédure de détermination de la section efficace de diffusion sur la molécule H_2 pour laquelle des résultats expérimentaux existent. Les cinématiques considérées correspondent à des situations envisagées dans les expériences de Cherid et al (1989) réalisées pour des énergies d'éjections faibles. Nous présentons et analysons ensuite les résultats de la section efficace multiple de l'ionisation ($e,2e$) de la molécule Li_2 par impact d'électron incident rapide, dans une géométrie coplanaire asymétrique avec une énergie d'éjection relativement faible.

Dans la dernière partie, nous présentons dans l'annexe A la détermination de la fonction coulombienne radiale et nous développons dans l'annexe B la méthode numérique proposée par Fox-Godwin. Dans l'annexe C, nous construisons les fonctions d'onde totales d'un système collisionnel à quatre électrons. Nous détaillons dans l'annexe D, le calcul de l'élément de matrice de transition nécessaire pour déterminer la *SED*T de ($e,2e$) du lithium. Dans l'annexe E, nous présentons le calcul de différentes intégrales nécessaires dans la détermination des éléments matriciels S et H de l'énergie totale de la molécule diatomique à deux électrons actifs. Dans l'annexe F, nous présentons quelques intégrales nécessaires pour déterminer l'élément de transition de l'ionisation ($e,2e$) de la molécule Li_2 .

Chapitre 1

Notions de base des collisions ionisantes par impact électronique

1.1 : Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les outils théoriques de base concernant l'étude et l'interprétation des résultats d'expériences de collisions ionisantes par impact électronique, appelées communément (e,2e) et (e,3e), où les électrons émergents sont détectés en coïncidence.

Nous allons en premier lieu, définir la section efficace multiplement différentielle de ces processus collisionnels, qui est directement proportionnelle à la probabilité de transition d'un état initial à un état final. Nous allons ensuite présenter nos approches pour la détermination de la matrice de transition par l'application du développement de Born, et par l'approche des ondes distordues.

1.2 : Description d'une réaction (e, 2e)

Considérons la réaction d'ionisation simple d'une cible atomique (ou moléculaire) A , par impact d'électron e_i d'impulsion $\vec{k}_i$ et d'énergie E_i :



A^+ représente l'ion résiduel, e_e et e_s sont respectivement les électrons éjecté et diffusé.

L'état initial du système est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1.2)$$

Où le hamiltonien H du système peut s'écrire comme :

$$H = K + V, \quad (1.3)$$

Avec K le hamiltonien du système en l'absence de toute interaction V entre l'électron incident et la cible.

Dans l'état final, l'ion A^+ et les électrons émergents se trouvent à nouveau séparés.

L'hamiltonien H du système peut s'écrire alors :

$$H = K' + V', \quad (1.4)$$

Où K' représente l'hamiltonien du système (ion + deux électrons) en absence de toute interaction et V' le potentiel d'interaction entre l'ion, l'électron diffusé et l'électron éjecté auxquels on attribue respectivement les vecteurs d'onde $\vec{q}$, $\vec{k}_s$ et $\vec{k}_e$, avec les énergies cinétiques des électrons émergents E_s , E_e .

Le projectile étant beaucoup plus léger que la cible, nous pouvons négliger le transfert d'énergie cinétique de l'électron à l'ion. Les équations de conservation des énergies et les quantités de mouvements totales ($E_i = E_f$, $\vec{k}_i = \vec{k}_f$) sont données par :

$$E_i = E_{IO} + E_e + E_s, \quad (1.5)$$

$$\vec{k}_i = \vec{k}_e + \vec{k}_s + \vec{q}, \quad (1.6)$$

Où E_{IO} représente le potentiel d'ionisation de l'atome cible. Nous définissons également le transfert d'impulsion $\vec{k}$ par :

$$\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s. \quad (1.7)$$

1.3 : Notion de section efficace

Dans une expérience typique de collision, on considère un flux F de particules incidentes, homogène et de même énergie, qui rentrent en collision avec N_t particules identiques à l'état gazeux. La densité des cibles et le flux sont supposés faibles afin d'obtenir un choc par particule. Cette hypothèse permet d'éviter la prise en compte de phénomènes très complexes de collisions multiples.

Loin de la zone d'interaction, on dispose d'un détecteur mesurant le nombre N de particules diffusées par unité de temps. Dans la pratique expérimentale, les résultats sont exprimés par la quantité caractéristique appelée section efficace, donnée par (Goldberger 1967) :

$$\sigma = \frac{N}{FN_i}, \quad (1.8)$$

Elle est mesurée en m^2 et reliée à la probabilité de transition P_{fi} de l'état initial vers l'état final, par unité de temps, par la relation suivante (Goldberger 1967, Joachin 1975) :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{fi}}{F}, \quad (1.9)$$

La probabilité de transition est reliée à l'élément de matrice de transition $|T_{fi}|$ (défini plus loin dans l'équation (1.21)), par la relation :

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \delta(E_i - E_f) \delta(k_i - k_f) |T_{fi}|^2 F. \quad (1.10)$$

Pour plus de détail voir (Goldberger 1967, Najjari 1997).

1.3.1 : Section efficace différentielle

Dans le cas d'une ionisation simple, l'état final du système est constitué par un électron éjecté, d'un électron diffusé et un ion résiduel. La section efficace est calculée en intégrant sur toutes les valeurs possibles de différentes quantités de mouvement $\vec{k}_e$, $\vec{k}_s$ et $\vec{q}$ (équ 1.6) tout en respectant les conditions de conservation des énergies et les quantités de mouvements totales (équations (1.5) et (1.6)) (Joachin 1983) :

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int d\vec{k}_e d\vec{k}_s d\vec{q} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{k}_i - (\vec{k}_e + \vec{k}_s + \vec{q})) |T_{fi}|^2, \quad (1.11)$$

L'intégration dans l'équation (1.11) sur $d\vec{q}$, conduit à l'aide de la fonction $\delta(\vec{k}_i - (\vec{k}_e + \vec{k}_s + \vec{q}))$ à une nouvelle expression :

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int d\vec{k}_e d\vec{k}_s \delta(E_i - E_f) |T_{fi}|^2, \quad (1.12)$$

qui correspond donc à une expérience de collision dans laquelle seule la présence de l'ion A^+ dans un état donné est observée.

1.3.2 : La section efficace simplement et doublement différentielle

Dans une expérience de collision, on peut obtenir aussi des informations supplémentaires sur l'état final du système, en plaçant un détecteur qui permet de déterminer la direction de l'un des électrons en coïncidence avec l'ion. Nous pouvons parler dans ce cas, d'une section efficace simplement différentielle, que nous présentons sous la forme :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int k_s^2 dk_s d\vec{k}_e \delta(E_i - E_f) |T_{fi}|^2, \quad (1.13)$$

qui est proportionnelle à la probabilité de détecter un électron dans une direction Ω_s . Ici, on tient compte de $d\vec{k}_s = k_s^2 dk_s d\Omega_s$.

Si le détecteur permet aussi la détermination de l'énergie de l'un des électrons émergents, on peut définir à partir de l'équation (1.13), une section efficace doublement différentielle :

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_e \int d\Omega_e |T_{fi}|^2. \quad (1.14)$$

L'intégration sur $dE_e = d(\frac{k_e^2}{2})$ disparaît car la valeur de l'énergie du deuxième électron sera fixée.

1.3.3 : La section efficace triplement différentielle

Le processus de simple ionisation par impact électronique, qu'on note (e,2e), entraîne un électron éjecté et un électron diffusé dans la voie finale. Ces deux électrons seront détectés par deux détecteurs placés respectivement dans les angles solides $d\Omega_s$ et $d\Omega_e$ centrés sur les directions (θ_s, φ_s) et (θ_e, φ_e) . La détection en coïncidence de ces deux électrons émergents conduit à la mesure de la section efficace triplement différentielle *SED*T. A partir de l'équation (1.14), on peut facilement obtenir l'expression suivante :

$$SED T = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_e |T_{fi}|^2, \quad (1.15)$$

Cette quantité décrit pour une énergie donnée, la distribution angulaire de l'électron après diffusion, nous obtenons donc une fonction qui contient tous les paramètres inhérents à la collision, c'est à dire, E_i , E_s et E_e ainsi que les angles θ_s , θ_e et φ_s , φ_e .

1.3.4 : Section efficace quintuplement différentielle pour la double ionisation

Le processus de double ionisation par impact électronique, que l'on note par (e,3e), résulte en quatre corps dans l'état final : Deux électrons éjectés, un diffusé et un ion résiduel. Son étude consiste à mesurer les caractéristiques de toutes les particules que présente le système après collision. La section efficace totale de transition correspondante est donnée par :

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int d\vec{k}_{e1} d\vec{k}_{e2} d\vec{k}_s d\vec{q} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{k}_i - \vec{k}_f) |T_{fi}|^2, \quad (1.16)$$

Elle est définie en fonction de tous les paramètres cinématiques qui caractérisent ce phénomène d'ionisation : Les quantités de mouvement, de l'électron diffusé notée $\vec{k}_s$, des deux électrons éjectés notées $\vec{k}_{e1}$, $\vec{k}_{e2}$ et celle de la cible qu'on note par $\vec{q}$.

Dans le cas d'une détection en coïncidence des trois électrons émergents, la section efficace est quintuplement différentielle :

$$SED5 = \frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_{e1} d\Omega_{e2} dE_{e1} dE_{e2}} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_{e1} k_{e2} k_s |T_{fi}|^2, \quad (1.17)$$

dans une géométrie coplanaire, en angle et en énergie de l'électron diffusé et des deux électrons éjectés.

1.4 : Développement de Born

L'ionisation par impact électronique est un processus très complexe, son étude nécessite la détermination de la probabilité de transition d'un état initial à un état final qui peut être exprimée en terme de l'élément de transition, associé à l'opérateur de diffusion T.

Le développement de Born basé sur la perturbation, permet d'exprimer cet opérateur de diffusion sous la forme d'un développement en terme de l'opérateur d'interaction V . Etant donné que ce potentiel est indépendant du temps, on passe facilement par l'application de l'opérateur d'évolution à la définition de l'opérateur de transition, en introduisant l'opérateur de Green G^+ associé à l'hamiltonien H du système (Messiah 1964, Najjari 1997) :

$$T = V + V' \frac{1}{E_i - H + i\eta} V = V + V' G^+ V \quad (1.18)$$

Où H et V' sont définis dans l'équation (1.4).

Cette formulation de Born qui nous conduit à un développement en V , nous pouvons l'interpréter comme étant une série de diffusion multiple dans laquelle le projectile interagit de façon répétitive avec le potentiel V , et se propage librement entre deux interactions successives :

$$T = V + V \frac{1}{E_i - K + i\eta} V + V \frac{1}{E_i - K + i\eta} V \frac{1}{E_i - K + i\eta} V + \dots \quad (1.19)$$

autrement écrit

$$T = V + VG_0^+ V + VG_0^+ VG_0^+ V + \dots$$

Où $G_0^+ = \frac{1}{E_i - K + i\eta}$ représente l'opérateur de Green associé à l'hamiltonien K défini dans l'équation (1.3).

Dans cette série de Born, nous retenons que le premier terme du développement en négligeant la contribution des termes d'ordre supérieur, ce traitement est surtout valable pour les électrons incidents dont les énergies sont suffisamment élevées par rapport à celles des électrons de la cible (Born 1926). Nous écrivons ainsi l'opérateur de transition par :

$$T = V = - \sum_{a=1} \frac{Z_{N_a}}{|\vec{r} - \vec{r}_a|} + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|}, \quad (1.20)$$

Où $|\vec{r} - \vec{r}_j|$ est la distance entre l'électron incident et l'électron j de la cible, $|\vec{r} - \vec{r}_a|$ la distance entre l'électron incident et les différents noyaux constituant la cible, Z_{N_a} est la charge du noyau (a) et N_e désigne le nombre des électrons de la cible.

1.5 : Détermination de la matrice de transition

1.5.1 : Cas d'un électron incident rapide

Dans le cas d'une ionisation par impact d'électron rapide, la matrice de transition ne tenant compte que du premier ordre de la série de Born, est donnée par l'expression suivante :

$$T_{fi} = \langle \Psi_f^- | V | \Psi_i^+ \rangle \quad (1.21)$$

Ψ_i et Ψ_f^- sont respectivement les fonctions d'onde décrivant le système avant et après la collision.

Comme nous l'avons précisé plus haut (équ 1.3) l'hamiltonien H du système constitué d'un électron incident et une cible atomique à N_e électrons, s'écrit comme la somme de deux

opérateurs : l'opérateur K , dont on connaît les états stationnaires et l'opérateur V qui décrit l'interaction de l'électron incident avec la cible.

$$H = K + V \quad (1.22)$$

$$K = -\frac{\nabla_{inci}^2}{2} - \sum_{j=1}^{N_e} \left(\frac{\nabla_j^2}{2} + \frac{Z_N}{r_j} \right) + \sum_{i < j}^{N_e} \frac{1}{r_{ij}} \quad (1.23)$$

Z_N représente la charge du noyau.

Soit Ψ_i la solution exacte qui correspond aux états propres de l'opérateur K vérifiant l'équation suivante :

$$K \Psi_i = E \Psi_i \quad (1.24)$$

Nous allons écrire Ψ_i sous la forme d'un produit antisymétrisé de la fonction d'onde variationnelle de la cible $\varphi_{cible}(r_1, r_2, \dots, r_N)$ et la fonction d'onde de l'électron incident ϕ_i^+ .

$$\Psi_i^+ = A(\phi_i^+(\vec{k}_i) \varphi_{cible}(r_1, r_2, \dots, r_N)) \quad (1.25)$$

Ici A représente l'opérateur d'antisymétrisation.

La fonction d'onde qui correspond à l'électron incident sera celle d'une particule libre ϕ_i^+ , qui peut être représentée par une onde plane $(2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}}$.

Dans l'état final, on construit la fonction d'onde Ψ_f^- sous forme d'un produit antisymétrisé de la fonction variationnelle de l'ion résiduel $\varphi_{ion}(r_1, r_2, \dots, r_{N-1})$ et deux ondes qui représentent respectivement l'électron éjecté χ_e^- et l'électron diffusé χ_s^- :

$$\Psi_f^- = A(\chi_e^- \chi_s^- \varphi_{ion}(r_1, r_2, \dots, r_{N-1})), \quad (1.26)$$

Ψ_f^- doit être une solution asymptotiquement exacte de l'état final, solution de l'équation de Schrödinger satisfaisant les conditions aux limites :

$$(E - H) \Psi_f^- = 0. \quad (1.27)$$

1.5.2 : Cas d'un électron incident lent

Nous verrons dans ce présent paragraphe que la définition donnée à la matrice de transition dans l'équation (1.21), prend une nouvelle forme quand il s'agit d'une ionisation par impact d'électron à faible énergie. Dans ce cas, le potentiel d'interaction n'est plus négligeable devant

l'énergie du projectile, ce dernier subit l'effet d'un potentiel statique U_{cible} , une perturbation importante qu'on doit prendre en considération dans la description de sa fonction d'onde.

Soit l'équation (1.22) :

$$\begin{aligned} H &= K + V + U - U \\ H &= (K + U) + (V - U) \\ H &= K^{DWBA} + W \end{aligned} \quad (1.28)$$

On définit donc un nouvel hamiltonien K^{DWBA} , à qui on associe une nouvelle fonction d'onde de l'état initial X_i^+ qui obéit à l'équation suivante :

$$(E - K^{DWBA})X_i^+ = 0 \quad (1.29)$$

Dans ce cas, la matrice de transition est donnée par l'approximation des ondes distordues 'DWBA' (Joachain 1983), sous la forme :

$$T_{fi} = \langle \Psi_f^- | W | X_i^+ \rangle \quad (1.30)$$

$$T_{fi} = \langle \Psi_f^- | V - U | X_i^+ \rangle$$

U représente le potentiel de distorsion de l'état initial. Dans le cas d'un atome à N_e électrons, il est défini par:

$$U_{cible}(r_0) = -\frac{Z_N}{r_0} + \langle \varphi_{cible}(r_1, r_2, \dots, r_N) \left| \sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{r_{0i}} \right| \varphi_{cible}(r_1, r_2, \dots, r_N) \rangle \quad (1.31)$$

$\varphi_{cible}(r_1, \dots, r_N)$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de la cible, qu'on relie à X_i^+ par une nouvelle fonction d'onde (distordue) χ_i^+ de l'électron incident:

$$X_i^+ = A(\varphi_{cible}(r_1, r_2, \dots, r_N) \chi_i^+) \quad (1.32)$$

On remarque que la définition habituelle de l'élément de transition défini dans l'équation (1.21), peut être obtenue en remplaçant dans (1.30) le potentiel U par zéro, et que la fonction d'onde χ_i^+ dans ce cas, est une onde plane.

Dans l'état final, la fonction d'onde distordue sera donnée d'une façon similaire sous la forme suivante :

$$\Psi_f^- = A(\chi_e^- \chi_s^- \varphi_{ion}(r_1, r_2, \dots, r_{N-1})) \quad (1.33)$$

Où $\varphi_{ion}(r_1, \dots, r_{N-1})$ représente la fonction d'onde décrivant l'ion résiduel dans l'état final, et $\chi_e \chi_s$ la fonction d'onde distordue du double continuum qui correspond à un produit de deux

fonctions d'onde distordues, de l'électron éjecté χ_e et de l'électron diffusé χ_s , qui sont calculées comme fonctions propres de l'hamiltonien :

$$H^{ion} = h_f + U_{ion}(r_i), \quad (1.34)$$

avec

$$h_f = -\frac{\nabla^2}{2} - \sum_{j=1}^{N_e-1} \left(\frac{\nabla_j^2}{2} + \frac{Z_N}{r_j} \right) + \sum_{j<i} \frac{1}{r_{ij}}$$

U_{ion} est le potentiel de distorsion dans l'état final. Il est défini comme une moyenne sur toutes les interactions de chaque électron sortant avec l'ion résiduel à $(N_e - 1)$ électrons, il s'écrit :

$$U_{ion}(r_0) = -\frac{Z_N}{r_0} + \langle \varphi_{ion}(r_1, r_2, \dots, r_{N-1}) \left| \sum_{i=1}^{N_e-1} \frac{1}{r_{0i}} \right| \varphi_{ion}(r_1, r_2, \dots, r_{N-1}) \rangle, \quad (1.35)$$

1.6 : Les fonctions d'onde du continuum

Nous avons vu dans ce qui précède que l'une des tâches majeures de notre étude, consiste en la description des électrons du continuum. La description électronique de la cible étant donnée par des fonctions d'onde dont la détermination est rendue possible par l'application des méthodes variationnelles habituelles, comme la méthode de Hartree-Fock. La fonction d'onde du système collisionnel est donnée par un produit antisymétrisé d'orbitales monoélectroniques représentant les électrons liés et celui du continuum mono et biélectronique.

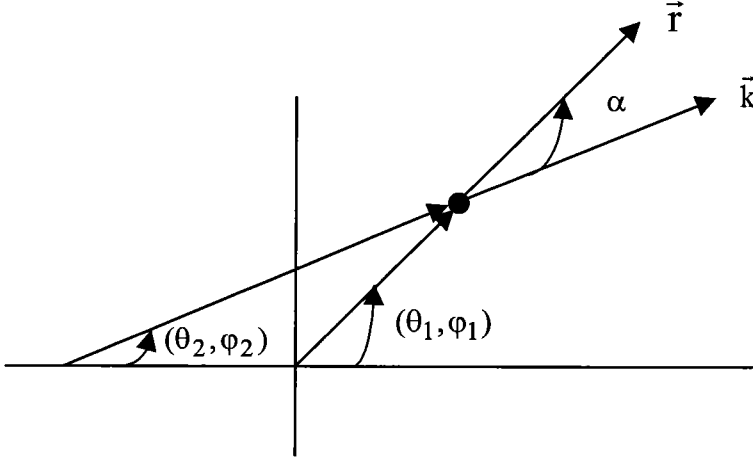
Dans ce qui suit, nous allons présenter la résolution de l'équation de Schrödinger en utilisant notre approche basée sur la méthode des ondes partielles, pour déterminer la fonction d'onde d'un électron dans un champ de potentiel radial, qu'il soit coulombien ou distordu.

1.6.1 : Résolution de l'équation de Schrödinger - Méthode des ondes partielles

La décomposition en ondes partielles est utile dans le cas où la résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un potentiel U , ne possède pas de solutions analytiques. Dans le présent travail, nous allons étudier l'effet de la distorsion dans le cadre d'une ionisation (e,2e) par impact d'électron incident à faible énergie. Le traitement des ondes distordues que nous proposons dans cette partie, est utile dans le problème où une interaction s'ajoute à l'interaction coulombienne et dans le cas d'un potentiel modèle.

L'équation de Schrödinger indépendante du temps, s'écrit dans un système de coordonnées sphériques sous la forme suivante (Landau et al 1974, Messiah 1964):

$$\left(\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{L}^2}{r^2} \right] + k^2 - U(r) \right) \Psi(\vec{k}, \vec{r}) = 0 \quad (1.36)$$



Dans le cas d'un potentiel central, les opérateurs H , $\hat{L}^2$ et $\hat{L}_Z$ commutent deux à deux (Cohen 1977). On construit l'état stationnaire $\Psi(\vec{k}, \vec{r})$ comme combinaisons linéaires d'ondes partielles, il est donné par :

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{\ell}^{\infty} C_{\ell} R_{\ell}(k, r) P_{\ell}(\cos(\alpha)) \quad (1.37)$$

Où $P_{\ell}(\cos(\alpha))$ est le polynôme de Legendre qui dépend explicitement de l'angle α entre $\vec{k}$ et $\vec{r}$ (Cohen 1977, Landau et al 1974).

En sachant que :

$$\frac{(2\ell+1)}{4\pi} P_{\ell}(\cos(\alpha)) = \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{m*}(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell}^m(\theta_2, \varphi_2), \quad (1.38)$$

$Y_{\ell,m}(\vec{k})$ est une harmonique sphérique, par définition cette fonction est une fonction propre de L^2 et L_Z , avec

$$L^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad \ell \in N \quad (1.39)$$

$$L_Z Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad m \in Z, |m| \leq \ell$$

L'écriture des solutions de (1.39) dans le système des coordonnées polaires, permet de séparer les parties radiale et angulaire. L'équation (1.36) se réduit à celle d'une équation différentielle concernant la partie radiale $R_\ell(k, r)$ seulement :

$$\left(\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] + k^2 - U(r) \right) R_\ell(k, r) = 0 \quad (1.40)$$

Le deuxième terme de l'équation (1.40) qui représente la barrière centrifuge, est un potentiel répulsif à courte distance (à cause du terme $1/r^2$) dès que $\ell \neq 0$, et d'autant plus grand que la valeur du moment cinétique est grande.

En introduisant une nouvelle fonction, dite fonction réduite définie par $F_\ell(k, r) = r R_\ell(k, r)$, l'équation (1.40) se transforme en :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) \right] F_\ell(k, r) = 0 \quad (1.41)$$

dont nous ne retenons que les solutions ayant un sens physique. Sous cette condition les seules familles qui nous intéressent, sont celles qui sont régulières à l'origine et qui possèdent le comportement suivant (Cohen 1977, Landau et al 1974) :

$$u_\ell(k, r) \underset{r \rightarrow 0}{\approx} \alpha r^{\ell+1} \quad \forall \ell \quad (1.42)$$

Satisfaisant la condition à l'origine :

$$u_{\ell, k}(0) = 0 \quad (1.43)$$

L'expression finale de la fonction d'onde Ψ solution de l'équation (1.36), peut s'écrire en terme de $F_\ell(k, r)$ sous la forme :

$$\Psi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{(4\pi)}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{i\Delta_\ell} i^\ell \frac{F_\ell(k, r)}{kr} Y_{\ell, m}^*(\hat{k}) Y_{\ell, m}(\hat{r}) \quad (1.44)$$

Δ_ℓ représente le déphasage dû au potentiel radial $U(r)$.

1.6.1.1 : Cas d'une particule libre

Dans le cas où le potentiel d'interaction $U=0$, l'équation précédente, se réduit à celle d'une particule libre qu'on décrit par une onde plane Ψ_p . Les solutions radiales de l'équation (1.41) sont des Bessels sphériques qu'on note $j_\ell(k, r)$.

$$\Psi_p = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$\Psi_p = \frac{(4\pi)}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} j_{\ell}(k, r) Y_{\ell, m}^*(\hat{k}) Y_{\ell, m}(\hat{r}) \quad (1.45)$$

Le comportement asymptotique de la fonction coulombienne sphérique régulière F_{ℓ} et irrégulière G_{ℓ} , est donné dans ce cas par :

$$F_{\ell} \approx_{r \rightarrow \infty} \sin(kr - \frac{1}{2}\ell\pi) \quad (1.46)$$

$$G_{\ell} \approx_{r \rightarrow \infty} \cos(kr - \frac{1}{2}\ell\pi) \quad (1.47)$$

Dans le modèle des ondes planes, utilisé par Wetzel (1933) et Veldre et al (1966) dans l'ionisation simple de l'hydrogène, le continuum de l'état final est décrit par le produit de deux ondes planes. Cette description n'est valable que pour des collisions à très haute énergie, et pour avoir une telle situation, il faut que les deux électrons émergent avec un très grand transfert d'impulsion.

1.6.1.2 : Cas d'un potentiel coulombien

Dans le cas d'une interaction entre un électron et un noyau de charge Z séparés par une distance r , le traitement se ramène à la résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un potentiel central U donné par :

$$U = -\frac{Z}{r} \quad (1.48)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - \frac{2\eta k}{r} \right] F_{\ell}(k, r) = 0 \quad (1.49)$$

Avec $\eta = \frac{Z}{k}$ le paramètre de Sommerfeld. Dans ce cas particulier la fonction d'onde entrante de cet électron s'écrit sous la forme compacte suivante (Mott et al 1965):

$$\Psi_c(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{-\frac{\pi\eta}{2}} \Gamma(1+i\eta) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})) \quad (1.50)$$

Où les fonctions Γ et ${}_1F_1$ désignent respectivement la fonction gamma et la fonction hypergéométrique confluyente (Abramovich et al 1972) (le détail du calcul est donné dans l'annexe A).

Dans ce cas on peut également traiter le problème de diffusion par la méthode des ondes partielles, en décomposant la fonction d'onde coulombienne $\Psi_c(\vec{k}, \vec{r})$ sous la forme suivante :

$$\Psi_c = \frac{(4\pi)}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{i\sigma_{\ell}} i^{\ell} \frac{F_{\ell}(k, r)}{kr} Y_{\ell, m}^*(\hat{k}) Y_{\ell, m}(\hat{r}) \quad (1.51)$$

Par définition, dans le cas d'un potentiel coulombien, l'onde régulière $F_{\ell}(k, r)$ et irrégulière $G_{\ell}(k, r)$, solutions de l'équation (1.41) ont la forme asymptotique suivante :

$$F_{\ell} \approx_{r \rightarrow \infty} \sin(kr - \eta \ln(2kr) - \frac{1}{2}\ell\pi + \sigma_{\ell}) \quad (1.52)$$

$$G_{\ell} \approx_{r \rightarrow \infty} \cos(kr - \eta \ln(2kr) - \frac{1}{2}\ell\pi + \sigma_{\ell}). \quad (1.53)$$

Notons que le terme logarithmique présent dans l'expression asymptotique traduit la présence du potentiel de longue portée, et σ_{ℓ} porte le nom du déphasage coulombien qu'on définit par :

$$\sigma_{\ell} = \arg \Gamma(\ell + 1 + i\eta). \quad (1.54)$$

L'intérêt du traitement de la diffusion par séparation des variables angulaires et radiales, n'offre pas grand intérêt pour le traitement de la diffusion coulombienne, puisqu'on dispose d'une solution analytique (1.50) exacte dont l'utilisation facilite les calculs de l'élément de transition, contrairement à la méthode des ondes partielles qui converge très lentement.

1.6.1.3 : Cas d'un potentiel de distorsion

Contrairement au cas d'une diffusion dans un potentiel coulombien, la résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un potentiel radial quelconque, ne possède pas toujours une solution analytique.

Reprenons l'équation (1.41) pour un potentiel radial de type :

$$U = U_c + U_{cp}, \quad (1.55)$$

Où la perturbation U_{cp} qui s'ajoute au potentiel coulombien U_c , est le résultat d'une interaction de courte portée entre chaque électron sortant et l'ion restant à $(N_e - 1)$ électrons. Au-delà d'une certaine distance r_{limite} du noyau, l'effet du potentiel U_{cp} devient quasiment nul, c'est le potentiel coulombien U_c qui domine. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'à l'infini, la charge vue par l'électron sortant est égale à la charge du noyau Z_N moins celle des $(N_e - 1)$ électrons.

La fonction d'onde d'un électron dans le potentiel U , n'est plus représentée par l'onde coulombienne pure, mais par une onde distordue dont $X_\ell(k, r)$ sa fonction radiale solution de l'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) \right] X_\ell(k, r) = 0 \quad (1.56)$$

Aux grandes distances, le potentiel coulombien U_c prédomine sur le potentiel à courte portée $U_{cp}(r)$ et la barrière centrifuge $\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$. Par définition, la fonction $X_\ell(k, r)$ s'écrit dans ce cas, comme combinaison linéaire des fonctions coulombiennes régulière et irrégulière (Landau 1974)

$$X_\ell(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_\ell [H_\ell^{(-)}(k, r) + e^{2i\Delta_\ell} H_\ell^{(+)}(k, r)], \quad (1.57)$$

Où A_ℓ est une constante de normalisation.

avec:

$$\Delta_\ell = \sigma_\ell + \delta_\ell \quad (1.58)$$

$$H_\ell^{(\pm)}(k, r) = e^{(\mp i\sigma_\ell)} \{F_\ell \pm iG_\ell\}, \quad (1.59)$$

La quantité Δ_ℓ , représente le déphasage total dû au potentiel U . Le terme δ_ℓ additionné au déphasage coulombien σ_ℓ pur, est dû au potentiel U_{cp} .

En substituant (1.57) et (1.58) dans (1.59) on trouve:

$$X_\ell(k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\propto} 2e^{i\delta_\ell} (\cos(\delta_\ell)F_\ell(k, r) + \sin(\delta_\ell)G_\ell(k, r)) \quad (1.60)$$

1.7 : Résolution numérique pour la fonction d'onde radiale

Comme nous l'avons dit précédemment, la détermination des fonctions radiales solutions de l'équation de Schrödinger (1.56) se fait numériquement en utilisant la méthode Fox-Godwin (Schmid et al 1990). On commence par intégrer à partir d'un point $r > 0$ au voisinage de l'origine, en respectant le comportement donné dans l'équation (1.60), ensuite on passe d'un point à un autre jusqu'au point $r = r_{limite}$, où r_{limite} est la distance à partir de laquelle le potentiel à courte portée s'annule, et la partie radiale $X_\ell(k, r)$ prend la forme asymptotique habituelle définie dans le cas d'un potentiel coulombien par les deux équations (1.52) et (1.53). Trois étapes sont respectées : D'abord le choix judicieux de $r \approx 0$, la bonne détermination de r_{limite} et en fin l'intégration propre de l'équation (1.56).

Le traitement numérique que nous avons utilisé, consiste à remplacer dans (1.56), le premier terme par la définition de la dérivée seconde de $X_\ell(k, r)$ qu'on notera ici par X'' , tel que :

$$X'' = \frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + O(h^2) \quad (1.61)$$

L'équation s'écrit alors sous la forme :

$$X'' + W(r)X(r) = 0 \quad (1.62)$$

On obtient enfin, après quelques manipulations (voir annexe B), l'expression finale suivante :

$$X(r+h) = \frac{2X(r) - X(r-h) - \frac{h^2}{12}(10W(r)X(r) + W(r+h)X(r-h))}{1 + \frac{h^2}{12}W(r+h)} \quad (1.63)$$

Le comportement de $X(r)$ au voisinage de l'origine permet de déduire les premières valeurs de $X(r)$, et par itération on détermine $X(r)$ sur tout le domaine $[0, r_{limite}]$

Les fonctions radiales données par (1.63) ne sont pas normalisées, pour cela on calcule le coefficient de proportionnalité entre la forme asymptotique de la fonction (1.63) donnée par l'équation (1.60) et la fonction numérique pour des grandes valeurs de r :

$$X_{Num}(r) = AX_{asym}(r), r \rightarrow \infty \quad (r \rightarrow r_{Max}) \quad (1.64)$$

On obtient les fonctions radiales normalisées :

$$X_{Num}^{Norm} = \frac{1}{A} X_{Num}. \quad (1.65)$$

La méthode numérique des ondes partielles est moins efficace dans le cas d'un potentiel purement coulombien, car le développement de l'amplitude en harmoniques sphériques converge très lentement. Cependant, la résolution de l'équation de Schrödinger se ramène à celle d'une équation différentielle de Laplace, dont la solution est bien connue dans la théorie des fonctions (équation (1.50)).

1.8 : Les fonctions radiales $F_\ell(k, r)$:

Nous allons présenter pour des ondes partielles 0 et 1, les courbes des fonctions radiales $F_\ell(k, r)$ solutions de l'équation de Schrödinger obtenues dans le cadre de l'ionisation (e,2e) de l'atome du lithium. Nous avons pris ici le potentiel U_{ion} (potentiel de distorsion de l'état final) appliqué à l'équation (1.41) pour déterminer la fonction radiale du continuum, que nous allons calculer pour des énergies d'éjection de 5eV, 24.5 eV et 124.5 eV.

On remarque que pour $\ell=0$ (figure 1), où l'énergie centrifuge ne figure pas, la principale différence qui existe entre les deux courbes en fonction de r , est due au déphasage à courte portée.

Pour $\ell > 1$, les deux fonctions radiales possèdent un comportement tout à fait similaire à la fonction pour laquelle $\ell=1$ (figure 2), dans ce cas, l'examen des courbes montre que pour des grandes valeurs propres du moment angulaire, les fonctions d'onde radiales tendent vers les fonctions coulombiennes. Aux grandes énergies (figures 3 et 4) ces fonctions oscillent très fortement, ce qui demande plus d'ondes partielles pour la convergence dans le calcul de l'élément de transition.

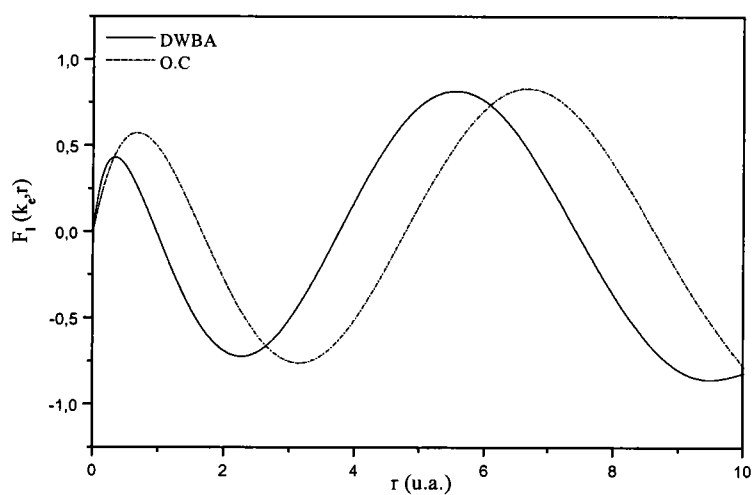


Figure 1 : Comparaison entre la fonction radiale distordue -DWBA- et la fonction radiale coulombienne -OC-, représentant un électron éjecté d'énergie 5 eV, pour $\ell = 0$.

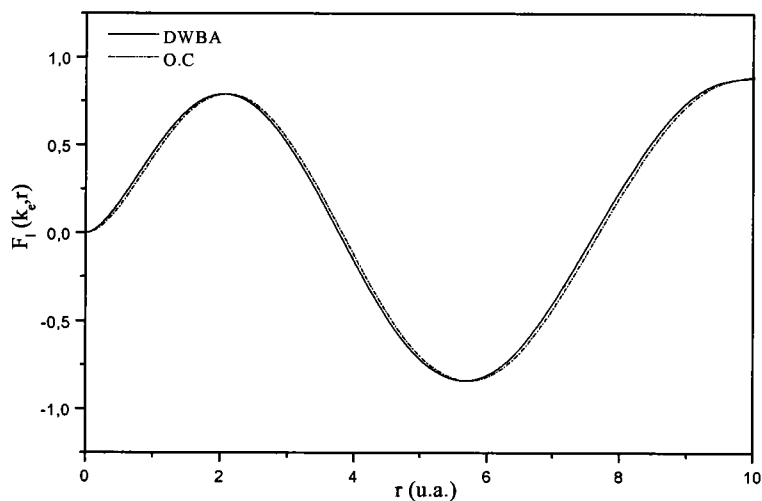


Figure 2 : Même condition que la figure 1, mais avec $\ell = 1$

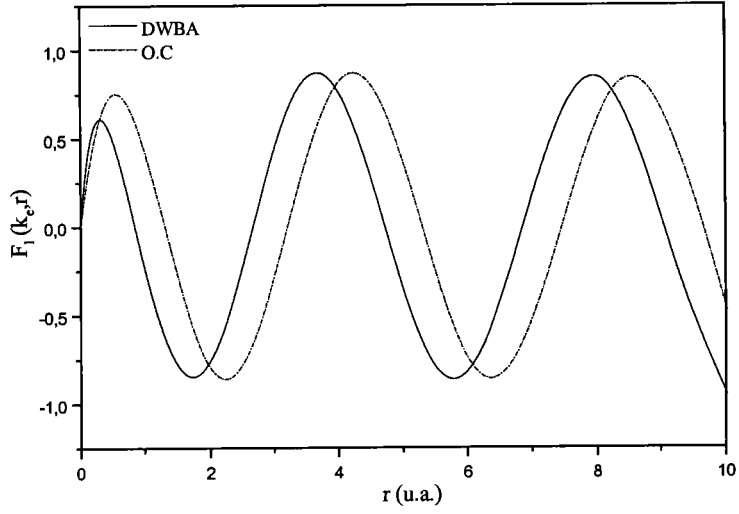


Figure 3: Comparaison entre la fonction radiale distordue –DWBA- et la fonction radiale coulombienne – OC-représentant un électron éjecté d’énergie 24.5 eV, pour $\ell = 0$

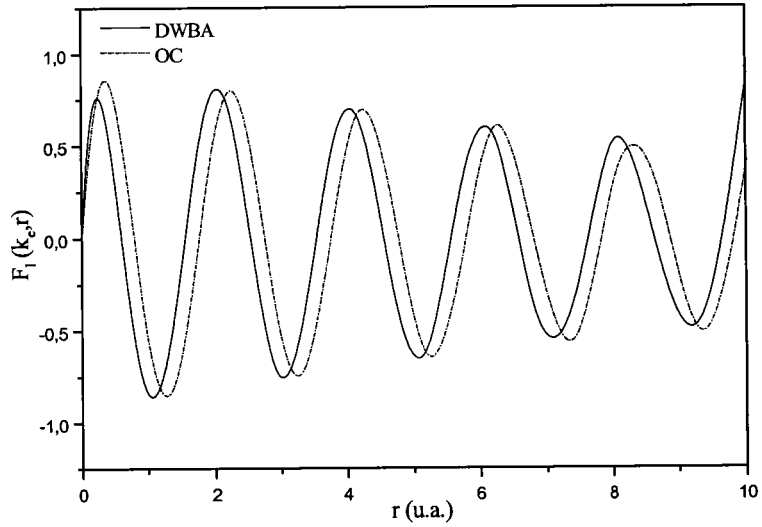


Figure 4 : Comparaison entre la fonction radiale distordue –DWBA-, et la fonction radiale coulombienne-OC- représentant un électron éjecté d’énergie 124.5 eV, pour $\ell = 0$.

1.8.1 : Détermination du déphasage

La perturbation supplémentaire due au potentiel à courte portée, consiste en un déphasage de chaque onde partielle sortante. La détermination de cette quantité additionnelle $\delta_\ell(E)$, se fait numériquement après avoir intégré l’équation de Schrödinger.

Le comportement asymptotique de $X_\ell(r)$ permet d'écrire :

$$X_\ell(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 2e^{i\delta_\ell} (\cos(\delta_\ell)F_\ell(k,r) + \sin(\delta_\ell)G_\ell(k,r), \quad (1.66)$$

$$X_\ell(r-h) \xrightarrow{r \rightarrow (r-h)} 2e^{i\delta_\ell} (\cos(\delta_\ell)F_\ell(k,r-h) + \sin(\delta_\ell)G_\ell(k,r-h), \quad (1.67)$$

Où $h = r_{limite} / NB$, et NB le nombre de points de l'intervalle. Le rapport des deux équations (1.66) et (1.67) permet d'obtenir le déphasage:

$$\text{tg} \delta_\ell = \frac{F_\ell(k,b-h)X_\ell(b) - F_\ell(k,b)X_\ell(b-h)}{G_\ell(k,b-h)X_\ell(b) - G_\ell(k,b)X_\ell(b-h)}, \quad \text{Avec } b = r_{Max}. \quad (1.68)$$

Afin d'interpréter les courbes des fonctions radiales, nous présentons dans cette partie une comparaison directe entre le déphasage coulombien et le déphasage dû au potentiel total, pour une énergie d'éjection égale à 24.5 eV .

$E_e =$ 24.5 eV	Déphasage coulombien σ_ℓ	Déphasage total $\Delta_\ell = \sigma_\ell + \delta_\ell$	Rapport $R = \sigma_\ell / \Delta_\ell$
$\ell = 0$	0.299051	1.15568	3.86451
$\ell = 1$	-0.341378	-0.266659	0.781127
$\ell = 2$	-0.698048	-0.692875	0.992590
$\ell = 3$	-0.941523	-0.941149	0.999602
$\ell = 4$	-.12571	-1.12569	0.999976
$\ell = 5$	-1.27367	-1.27367	0.999998
$\ell = 6$	-1.39724	-1.39724	1.00000

On remarque d'après ce tableau, que le déphasage supplémentaire provenant des forces à courte portée s'annule pour les grands moments angulaires lorsque le rapport $R = \sigma_\ell / \Delta_\ell$ égal à 1. On constate aussi que la probabilité de présence de l'électron près du noyau, là où l'effet de distorsion est important, est quasiment nul pour des moments angulaires supérieurs à 2.

1.9 : Modèles 2C et 3C

Après avoir déterminé la fonction d'onde d'un électron dans un potentiel radial, que nous avons déterminé approximativement par la méthode 'DWBA', nous allons passer brièvement dans

cette partie au problème de trois corps (double continuum + ion résiduel) rencontré dans l'état final d'une ionisation (e,2e). Pour résoudre ce problème plusieurs modèles ont été proposés.

Dans le modèle (2C) (Najjari 1997), la fonction d'onde décrivant les électrons émergents dans l'état final d'une ionisation (e,2e), est un produit entre deux fonctions d'onde coulombiennes $\chi_e(k_e, r_1)$ $\chi_s(k_s, r_2)$, une pour l'électron éjecté et l'autre pour l'électron diffusé. Pour tenir compte de la répulsion coulombienne entre les deux électrons, Brauner, Briggé et Klar (1989) ont proposé une fonction d'onde corrélée satisfaisant exactement les conditions asymptotiques, elle s'écrit :

$$\Psi(r_1, r_2) = \chi_e(k_e, r_1) \chi_s(k_s, r_2) C(k_{es}, r_{12}) \quad (1.69)$$

$\chi_e(k_e, r_1)$ $\chi_s(k_s, r_2)$ représente la fonction d'onde du double continuum composé par l'électron éjecté et l'électron diffusé en absence de leur interaction mutuelle. La troisième fonction $C(k_{es}, r_{12})$ représente l'interaction répulsive des deux électrons. Whelan et al (1994), Rouet et al (1996) ont proposé un autre traitement simplifié de l'interaction post-collisionnel, en introduisant le facteur N_{ee} dit facteur de Gamow dans la normalisation de la section efficace :

$$N_{ee} = \frac{2\pi}{|\vec{k}_s - \vec{k}_e|} (e^{\frac{2\pi}{|\vec{k}_s - \vec{k}_e|}} - 1)^{-1} \quad (1.70)$$

Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre la définition de la section efficace multiplement différentielle d'une ionisation (e,2e) d'une cible atomique par impact électronique. Après avoir défini le développement de Born, nous avons étudié le problème d'une particule dans un potentiel radial quelconque, en utilisant la méthode des ondes partielles pour résoudre l'équation de Schrödinger correspondante. Nous avons ensuite évoqué le problème à trois corps rencontré dans l'état final d'une ionisation par impact électronique, et nous avons proposé notre approche numérique correspondant aux potentiels radiaux distordus 'DWBA' que nous allons appliquer aux calculs de l'élément de transition, dans les prochains chapitres prévus à l'étude de la simple ionisation du lithium atomique et moléculaire.

Chapitre 2

Détermination des fonctions d'onde du système collisionnel

2.1 : Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons exposé les outils théoriques de base nécessaires pour déterminer les fonctions d'onde initiale et finale du continuum, dans le cas d'une ionisation ($e, 2e$), et nous avons défini la section efficace multilement différentielle du processus d'ionisation.

Nous allons nous intéresser dans ce chapitre à la détermination de la fonction d'onde totale, décrivant le système électronique complet avant et après la collision. Pour cela, nous commençons par l'antisymétrisation des fonctions d'onde susceptibles de décrire les systèmes collisionnels à deux électrons, à trois électrons et à quatre électrons. Nous allons ensuite examiner brièvement l'expression de l'élément de matrice de transition correspondant à chacun de ces systèmes.

2.2 : Fonction d'onde totale des systèmes collisionnels à plusieurs électrons

Dans le cas d'un traitement non relativiste de l'ionisation par impact électronique des cibles atomiques ou moléculaires, on fait face dans un premier temps au problème d'indiscernabilité qui se pose entre les électrons du continuum et les différents électrons de l'état lié. Pour aborder la construction des fonctions d'onde antisymétriques du système collisionnel, nous allons considérer que ces électrons peuvent avoir des spins parallèles ou antiparallèles. La

détermination de la fonction d'onde antisymétrique du système collisionnel est donnée à partir des différents états de spins totaux. Ces états de spin construits sont fonctions propres aux opérateurs S^2 et S_z .

2.2.1 : Système collisionnel à deux électrons

Considérons un système composé d'un électron incident de fonction χ_i et une cible d'hydrogène atomique de fonction φ . Dans ce cas, le nombre quantique S peut prendre deux valeurs 0 et 1, on a donc quatre combinaisons de spins possibles dans l'état initial : $\uparrow\uparrow$, $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$, $\downarrow\downarrow$

Les fonctions d'onde de spin total $S=0$ et $S=1$ représentant le système avant la collision, sont données en terme de quatre déterminants de Slater suivants :

$$|\bar{\chi}_i\bar{\varphi}|, |\chi_i\bar{\varphi}|, |\bar{\chi}_i\varphi| \text{ et } |\chi_i\varphi|. \quad (2.1)$$

Où la barre qui figure sur les fonctions χ_i et φ correspond à un spin $m_{Si} = -1/2$. Ainsi pour l'état de spin total ($S=0, M=0$) on peut écrire :

$$\psi_{i1}(S=0, M=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\bar{\chi}_i\varphi| - |\chi_i\bar{\varphi}|] \quad (2.2)$$

satisfaisant la relation

$$\begin{aligned} S^2\psi_{i1}(S=0, M=0) &= 0, \\ S_z\psi_{i1}(S=0, M=0) &= 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Pour $S=1$, trois états sont possibles :

$$\begin{aligned} \psi_{i2}(S=1, M=1) &= |\chi_i\varphi|, \\ \psi_{i3}(S=1, M=-1) &= |\bar{\chi}_i\bar{\varphi}|, \\ \psi_{i4}(S=1, M=0) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\bar{\chi}_i\varphi| + |\chi_i\bar{\varphi}|]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

On peut définir de la même manière les fonctions d'onde correspondant à l'état final d'une ionisation (e,2e) de l'hydrogène atomique, où les deux électrons émergents, le diffusé et l'éjecté, sont décrits par leurs fonctions d'onde respectives χ_e et χ_s .

$$\begin{aligned}
\psi_{f1}(S=0, M=0) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\bar{\chi}_s \chi_e| - |\chi_s \bar{\chi}_e|], \\
\psi_{f2}(S=1, M=1) &= |\chi_e \chi_s|, \\
\psi_{f3}(S=1, M=-1) &= |\bar{\chi}_e \bar{\chi}_s|, \\
\psi_{f4}(S=1, M=0) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\bar{\chi}_s \chi_e| - |\chi_s \bar{\chi}_e|].
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Comme nous l'avons défini dans le premier chapitre, l'élément de transition T_{fi} est relié à la fonction d'onde de l'état initial et final du système, par la définition générale suivante :

$$T_{fi}^{(S,M),(S',M')} = \langle S, M | V | S', M' \rangle = A \delta_{M,M'} \delta_{S,S'}, \tag{2.6}$$

Nous désignons par A l'amplitude de diffusion dans le cas d'une transition entre l'état initial $|S', M'\rangle$ et l'état final $|S, M\rangle$. Cette égalité reste valable lorsqu'on exclut toute sorte d'interaction dépendante du spin dans le potentiel d'interaction V entre l'électron incident et la cible.

En utilisant l'équation (2.6), l'élément de matrice de transition qui correspond à l'état ($S=1, M=0$), donné en fonction de V , le potentiel d'interaction entre l'incident et l'atome d'hydrogène, s'écrit :

$$T_{fi}^{S=1, M=0} = \langle \psi_f(1,0) | V | \psi_i(1,0) \rangle, \tag{2.7}$$

Autrement écrit

$$T_{fi}^{S=1, M=0} = \frac{1}{2} \langle |\bar{\chi}_s(1) \chi_e(2)| - |\chi_s(1) \bar{\chi}_e(2)| V | |\bar{\chi}_i(1) \varphi(2)| - |\chi_i(1) \bar{\varphi}(2)| \rangle, \tag{2.8}$$

Ce terme peut être déterminé sous forme de quatre tableaux :

$\langle \bar{\chi}_s(1) \chi_e(2) V \bar{\chi}_i(1) \varphi(2) \rangle$	$\bar{\chi}_i(1) \varphi(2)$	$-\varphi(1) \bar{\chi}_i(2)$
$\bar{\chi}_s(1) \chi_e(2)$	f	0
$-\chi_e(1) \bar{\chi}_s(2)$	0	f

$\langle \bar{\chi}_s(1) \chi_e(2) V \chi_i(1) \bar{\varphi}(2) \rangle$	$\chi_i(1) \bar{\varphi}(2)$	$-\bar{\varphi}(1) \chi_i(2)$
$\bar{\chi}_s(1) \chi_e(2)$	0	$-g$
$-\chi_e(1) \bar{\chi}_s(2)$	$-g$	0

$\langle \chi_s(1)\bar{\chi}_e(2) \ V_I \ \bar{\chi}_i(1)\varphi(2) \rangle$	$\bar{\chi}_i(1)\varphi(2)$	$-\varphi(1)\bar{\chi}_i(2)$
$\chi_s(1)\bar{\chi}_e(2)$	0	$-g$
$-\bar{\chi}_e(1)\chi_s(2)$	$-g$	0

$\langle \chi_s(1)\bar{\chi}_e(2) \ V_I \ \chi_i(1)\bar{\varphi}(2) \rangle$	$\chi_i(1)\bar{\varphi}(2)$	$-\bar{\varphi}(1)\chi_i(2)$
$\chi_s(1)\bar{\chi}_e(2)$	f	0
$-\bar{\chi}_e(1)\chi_s(2)$	0	f

Où

$$f = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \chi_s(1)\chi_e(2)[V_I]\chi_i(1)\varphi(2), \quad (2.9)$$

dit terme direct, dans lequel l'indice de l'électron incident est attribué à l'électron diffusé.

et

$$g = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \chi_s(2)\chi_e(1)[V_I]\chi_i(1)\varphi(2), \quad (2.10)$$

dit terme d'échange, dans lequel l'indice de l'électron incident est attribué à l'électron éjecté.

On détermine de la même manière les éléments de matrice qui correspondent aux autres états de spin. On obtient pour l'état singulet ($S=0$, $M_s=0$)

$$T_{fi}^{S=0,M=0} = f + g. \quad (2.11)$$

Pour l'état triplet $S=1$, on obtient :

$$T_{fi}^{S=1,M} = f - g \quad M=1, -1, 0. \quad (2.12)$$

Faisant la moyenne sur tous les états initiaux possibles :

$$|T_{fi}|^2 = \frac{1}{4} \sum_{(S,M)} |T_{fi}^{(S,M)}|^2, \quad (2.13)$$

et en utilisant la formule (2.6), l'expression finale de l'élément de transition est donnée par :

$$|T_{fi}|^2 = \frac{1}{4} |f + g|^2 + \frac{3}{4} |f - g|^2. \quad (2.14)$$

2.2.2 : Système collisionnel à trois électrons actifs

Considérons un système composé d'un électron incident de fonction $\chi_i(\vec{k}_i)$ et une cible d'hélium à deux électrons actifs de fonction $\varphi_1\varphi_2$. Le nombre quantique S peut prendre dans ce cas, une seule valeur $1/2$, car les deux électrons de l'atome dans son état fondamental doivent obligatoirement occuper une couche fermée, tout en respectant le principe d'exclusion de Pauli (Cohen 1977, Landau et al 1974). Pour l'état initial, on obtient quatre combinaisons de spin possibles données sous forme de déterminants de Slater suivants :

$$|\chi_i\varphi_1\bar{\varphi}_2|, |\chi_i\bar{\varphi}_1\varphi_2|, |\bar{\chi}_i\varphi_1\bar{\varphi}_2| \text{ et } |\bar{\chi}_i\bar{\varphi}_1\varphi_2|, \quad (2.15)$$

Dans l'état initial, les deux fonctions d'onde antisymétriques qui correspondent à l'état de spin total $S=1/2$ ($M_S=1/2$, $M_S=-1/2$) sont données par :

$$\begin{aligned} \psi_i(1/2, 1/2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\chi_i\bar{\varphi}_1\varphi_2| - |\chi_i\varphi_1\bar{\varphi}_2| \} \\ \psi_i(1/2, -1/2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\bar{\chi}_i\bar{\varphi}_1\varphi_2| - |\bar{\chi}_i\varphi_1\bar{\varphi}_2| \} \end{aligned} \quad (2.16)$$

On définit de la même manière les fonctions d'onde de l'état final d'une ionisation (e,2e) de l'atome d'hélium, où les deux électrons émergents, le diffusé et l'éjecté, sont décrit par leurs fonctions d'onde respectives χ_e et χ_s . Ici deux états sont possibles, et chaque état peut être écrit sous forme de deux combinaisons possibles :

Pour $S=1/2$, $M_S=1/2$

$$\begin{aligned} \psi_f^-(1/2, 1/2) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ 2|\bar{\chi}_s\chi_e\phi| - |\chi_s\bar{\chi}_e\phi| - |\chi_s\chi_e\bar{\phi}| \}, \\ \psi_f^-(1/2, 1/2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\chi_s\chi_e\bar{\phi}| - |\chi_s\bar{\chi}_e\phi| \}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

Pour $S=1/2$, $M_S=-1/2$

$$\begin{aligned} \psi_f^-(1/2, -1/2) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \{ |\bar{\chi}_e\bar{\chi}_s\phi| + |\bar{\chi}_e\chi_s\bar{\phi}| - 2|\chi_e\bar{\chi}_s\bar{\phi}| \} \\ \psi_f^-(1/2, -1/2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\bar{\chi}_s\bar{\chi}_e\phi| - |\bar{\chi}_s\chi_e\bar{\phi}| \} \end{aligned} \quad (2.18)$$

La fonction ϕ représente l'électron de l'ion résiduel.

En respectant la propriété d'orthogonalité définie dans l'équation (2.6), le calcul de l'élément $T_2 = \langle \chi_s(1) \bar{\chi}_e(2) \phi(3) | V_2 | \chi_i(1) \bar{\phi}(2) \phi(3) \rangle$ où V_2 désigne le potentiel d'interaction entre l'incident et la cible d'hélium, est déterminé en utilisant le tableau suivant :

T_2	$\chi_i^{(1)} \bar{\phi}_1^{(2)} \phi_2^{(3)}$	$-\chi_i^{(1)} \bar{\phi}_1^{(3)} \phi_2^{(2)}$	$-\chi_i^{(2)} \bar{\phi}_1^{(1)} \phi_2^{(3)}$	$\chi_i^{(2)} \bar{\phi}_1^{(3)} \phi_2^{(1)}$	$\chi_i^{(3)} \bar{\phi}_1^{(1)} \phi_2^{(2)}$	$-\chi_i^{(3)} \bar{\phi}_1^{(2)} \phi_2^{(1)}$
$\chi_s^{(1)} \bar{\chi}_e^{(2)} \phi^{(3)}$	f	0	0	0	0	$-h$
$-\chi_s^{(1)} \bar{\chi}_e^{(3)} \phi^{(2)}$	0	f	0	$-h$		0
$-\chi_s^{(2)} \bar{\chi}_e^{(1)} \phi^{(3)}$	0	0	f	0	$-h$	0
$\chi_s^{(2)} \bar{\chi}_e^{(3)} \phi^{(1)}$	0	$-h$	0	f	0	0
$\chi_s^{(3)} \bar{\chi}_e^{(1)} \phi^{(2)}$	0		$-h$	0	f	0
$-\chi_s^{(3)} \bar{\chi}_e^{(2)} \phi^{(1)}$	$-h$	0	0	0	0	F

Où

$$f = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s(1) \chi_e(2) \phi(3) [V_2] \chi_i(1) \phi_1(2) \phi_2(3), \quad (2.19)$$

dit terme direct, dans lequel l'indice de l'électron incident est attribué à l'électron diffusé.

et

$$g = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s(2) \chi_e(1) \phi(3) [V_2] \chi_i(1) \phi_1(2) \phi_2(3), \quad (2.20)$$

dit terme d'échange, dans lequel l'indice de l'électron incident est attribué à l'électron éjecté.

et finalement

$$h = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s(3) \chi_e(2) \phi(1) [V_2] \chi_i(1) \phi_1(2) \phi_2(3), \quad (2.21)$$

dit terme de 'capture', dans lequel l'indice de l'électron incident est attribué à l'un des électrons liés de l'ion résiduel.

Les éléments de matrice qui correspondent aux autres états de spin totaux, sont déterminés de la même manière que le terme précédent (T_2).

Prenant la moyenne sur tous les états initiaux possibles :

$$|T_{\hat{n}}|^2 = \frac{1}{2} \sum_{(S,M)} |T_{\hat{n}}^{(S,M)}|^2, \quad (2.22)$$

on obtient enfin l'expression de l'élément de transition de l'ionisation simple d'hélium, qui est donnée par :

$$|T_{fi}|^2 = \left\{ \frac{1}{2} |2f - g - h|^2 + \frac{3}{2} |g - h|^2 \right\}. \quad (2.23)$$

2.2.3 : Système collisionnel à quatre électrons

Nous considérons maintenant un système à quatre électrons. A titre d'application nous étudions le cas de l'ionisation simple de l'atome du lithium à trois électrons, par impact électronique (objet d'étude du prochain chapitre). La fonction d'onde du système dans son état initial est une combinaison de produits de fonctions d'onde, décrivant respectivement l'électron incident $\chi_i(\vec{k}_i)$ et l'atome du lithium décrit par le produit de différents orbitales atomiques : φ_i ($i=1,2$) pour les électrons de la couche interne et φ_3 décrivant l'électron de valence. Le nombre quantique S peut prendre dans ce cas, deux valeurs : 0 et 1 où deux électrons doivent obligatoirement occuper une couche fermée $1s^2$ ($S=0 \Rightarrow M_s=0$ et $S=1 \Rightarrow M_s=0, -1, 1$).

En respectant le principe d'exclusion de Pauli (Cohen 1977, Landau et al 1974), les combinaisons possibles des quatre électrons avant la collision, sont données par les huit déterminants de Slater :

$$\begin{aligned} & |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3|, |\bar{\chi}_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3|, |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3|, |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \bar{\varphi}_3|, \\ & |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3|, |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3|, |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3|, |\bar{\chi}_i \varphi_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3|, \end{aligned} \quad (2.24)$$

A la valeur de spin total $S=0$, est attribuée une seule fonction d'onde ($S=0, M_s=0$), et à la valeur de spin $S=1$, sont associées trois fonctions d'onde initiales à cause de trois états de spin total possible ($M_s=1, -1, 0$) (voir Annexe C) :

$$\begin{aligned} \psi_{i1}(S=0, M_s=0) &= \frac{1}{\sqrt{4}} \{ |\bar{\chi}_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| - |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| - |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \bar{\varphi}_3| + |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3| \}, \\ \psi_{i2}(S=1, M_s=1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| - |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \}, \\ \psi_{i3}(S=1, M_s=0) &= \frac{1}{\sqrt{4}} \{ |\bar{\chi}_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| - |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| + |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \bar{\varphi}_3| - |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3| \}, \\ \psi_{i4}(S=1, M_s=-1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\bar{\chi}_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \bar{\varphi}_3| - |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3| \}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Dans l'état final d'une ionisation (e,2e) de l'atome du lithium, nous sommes en présence d'un système constitué de deux électrons, l'un diffusé et l'autre éjecté, qu'on décrit respectivement par leur fonction d'onde $\chi_s(\vec{k}_s)$ et $\chi_e(\vec{k}_e)$, et les deux électrons de l'ion résiduel dans son état fondamental qu'on décrit par le produit de leur fonction d'onde d'état lié ($\phi_{Li^+} = \phi_1\phi_2$). Ici nous obtenons aussi un état singulet auquel est attribuée une seule fonction d'onde ($M_s = 0$), et un état triplet composé de trois fonctions d'onde $M_s = 0, -1, 1$:

$$\begin{aligned}\psi_{f1}^-(S=0, M_s=0) &= \frac{1}{\sqrt{4}} \left\{ |\bar{\chi}_s\phi_1\bar{\phi}_2\chi_e| - |\bar{\chi}_s\bar{\phi}_1\phi_2\chi_e| - |\chi_s\phi_1\bar{\phi}_2\bar{\chi}_e| + |\chi_s\bar{\phi}_1\phi_2\bar{\chi}_e| \right\}, \\ \psi_{f2}^-(S=1, M_s=1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\chi_s\phi_1\bar{\phi}_2\chi_e| - |\chi_s\bar{\phi}_1\phi_2\chi_e| \right\}, \\ \psi_{f3}^-(S=1, M_s=0) &= \frac{1}{\sqrt{4}} \left\{ |\bar{\chi}_s\phi_1\bar{\phi}_2\chi_e| - |\bar{\chi}_s\bar{\phi}_1\phi_2\chi_e| + |\chi_s\phi_1\bar{\phi}_2\bar{\chi}_e| - |\chi_s\bar{\phi}_1\phi_2\bar{\chi}_e| \right\}, \\ \psi_{f4}^-(S=1, M_s=-1) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |\bar{\chi}_s\phi_1\bar{\phi}_2\bar{\chi}_e| - |\bar{\chi}_s\bar{\phi}_1\phi_2\bar{\chi}_e| \right\}.\end{aligned}\tag{2.26}$$

On remarque que les valeurs de S supérieures à 1 sont exclues : pour que $S = 2$ par exemple soit possible, il faudrait qu'il existe une fonction propre de S_z de valeur propre égale à 2, ce qui n'est pas possible d'après le principe d'exclusion de Pauli (Cohen 1977, Landau et al 1974): (Les deux électrons de la couche interne $1s^2$ ne peuvent se trouver dans le même état individuel).

Pour déterminer l'élément de matrice de transition d'une ionisation simple (e,2e) de l'atome du lithium, définit par la relation :

$$|T_{fi}|^2 = \frac{1}{4} \sum_{(S,M)} |T_{fi}^{(S,M)}|^2,\tag{2.27}$$

nous allons procéder de la même manière que précédemment en utilisant des tableaux pour écrire explicitement les déterminants de Slater, et déduire les différents éléments tout en respectant la loi de conservation de spin imposée par l'équation (2.6). Nous présentons pour l'état de spin ($S=0, M_s=0$), le calcul du terme $\langle |\bar{\chi}_s(1)\chi_e(2)\bar{\phi}_1(3)\phi_2(4)|V_3|\bar{\chi}_i(1)\phi_1(2)\bar{\phi}_2(3)\phi_3(4) \rangle$, qui dépend de V_3 , le potentiel d'interaction entre l'électron incident et le lithium, où nous allons utiliser le tableau suivant :

$$T_3 = \left\langle \left| \bar{\chi}_s \chi_e \bar{\Phi}_1 \Phi_2 \right| \left| V_3 \right| \left| \bar{\chi}_i \Phi_1 \bar{\Phi}_2 \Phi_3 \right| \right\rangle$$

T_3	$\bar{1}2\bar{3}4$	$-\bar{1}2\bar{4}3$	$-\bar{1}3\bar{2}4$	$\bar{1}34\bar{2}$	$\bar{1}4\bar{2}3$	$-\bar{1}4\bar{3}2$	$-\bar{2}1\bar{3}4$	$\bar{2}1\bar{4}3$	$\bar{2}3\bar{1}4$	$-\bar{2}3\bar{4}1$	$-\bar{2}4\bar{1}3$	$\bar{2}4\bar{3}1$	$\bar{3}1\bar{2}4$	$-\bar{3}1\bar{4}2$	$-\bar{3}2\bar{1}4$	$\bar{3}2\bar{4}1$	$\bar{3}4\bar{1}2$	$-\bar{3}4\bar{2}1$	$-\bar{4}1\bar{2}3$	$\bar{4}1\bar{3}2$	$\bar{4}2\bar{1}3$	$-\bar{4}2\bar{3}1$	$-\bar{4}3\bar{1}2$	$\bar{4}3\bar{2}1$
$\bar{1}2\bar{3}4$	f2					-f1									-h3		h2							
$-\bar{1}2\bar{4}3$		f2		-f1																	-h3		h2	
$-\bar{1}3\bar{2}4$			f2		-f1				-h3		h2													
$\bar{1}34\bar{2}$		-f1		f2																	h2		-h3	
$\bar{1}4\bar{2}3$			-f1		f2				h2		-h3													
$-\bar{1}4\bar{3}2$	-f1					f2									h2		-h3							
$-\bar{2}1\bar{3}4$							f2					-f1	-h3					h2						
$\bar{2}1\bar{4}3$								f2		-f1									-h3					h2
$\bar{2}3\bar{1}4$			-h3		h2				f2		-f1													
$-\bar{2}3\bar{4}1$								-f1		f2									h2					-h3
$-\bar{2}4\bar{1}3$			h2		-h3				-f1		f2													
$\bar{2}4\bar{3}1$						-f1						f2	h2					-h3						
$\bar{3}1\bar{2}4$						-h3						h2	f2					-f1						
$-\bar{3}1\bar{4}2$														f2		-f1				-h3		h2		
$-\bar{3}2\bar{1}4$	-h3				h2										f2		-f1							
$\bar{3}2\bar{4}1$														-f1		f2				h2		-h3		
$\bar{3}4\bar{1}2$	h2				-h3										-f1		f2							
$-\bar{3}4\bar{2}1$						h2						-h3	-f1					f2						
$-\bar{4}1\bar{2}3$							-h3		h2										f2					
$\bar{4}1\bar{3}2$														-h3		h2				f2		-f1		
$\bar{4}2\bar{1}3$		-h3		h2																	f2		-f1	
$-\bar{4}2\bar{3}1$														h2		-h3				-f1		f2		
$-\bar{4}3\bar{1}2$		h2		-h3																	-f1		f2	
$\bar{4}3\bar{2}1$								h2		-h3									-f1					f2

L'expression finale de l'élément de transition dans le cadre de Born I, est obtenue en remplaçant les différentes fonctions des équations (2.25) et (2.26) dans l'expression donnée par l'équation (2.13) :

$$|T_{fi}|^2 = \left\{ \frac{3}{4} |f1 + g2 + h1 - f2 - g1 - h2|^2 + \frac{1}{4} |f1 + g1 + 2h3 - f2 - g2 - h1 - h2|^2 \right\}, \quad (2.28)$$

Où

$|f1 + g1 + 2h3 - f2 - g2 - h1 - h2|^2$ représente l'amplitude de diffusion qui correspond à l'état singulet de spin total $S=0$, et $|f1 + g2 + h1 - f2 - g1 - h2|^2$ l'amplitude de diffusion qui correspond à l'état triplet de spin total $S=1$.

Avec $f1$ et $f2$ représentant le premier et le deuxième termes directs, dans lesquels l'indice de l'électron incident est attribué au diffusé.

$$\begin{aligned} f1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_3) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) [V_3] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3), \\ f2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_2, \vec{r}_3) [V_3] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Les termes d'échange $g1$ et $g2$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} g1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= f1(\vec{k}_e, \vec{k}_s), \\ g2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= f2(\vec{k}_e, \vec{k}_s), \end{aligned} \quad (2.30)$$

$h1$, $h2$ et $h3$ correspond aux termes de "capture", dans lesquels l'indice de l'électron incident est attribué à l'un des électrons de l'ion résiduel.

$$\begin{aligned} h1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_3) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_0, \vec{r}_2) [V_3] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3), \\ h2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= h1(\vec{k}_e, \vec{k}_s), \end{aligned} \quad (2.31)$$

et finalement

$$h3(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_2) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_0, \vec{r}_3) [V_3] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3). \quad (2.32)$$

2.2.4 : Fonctions d'onde dans le cas d'une double ionisation d'un système à trois électrons actifs

Dans le cas d'une double ionisation (e,3e) de l'atome du lithium à trois électrons actifs, par impact électronique, l'état initial du système est représenté par la fonction d'onde totale donnée précédemment par l'équation (2.25), qui est un produit antisymétrisé entre la fonction d'onde de l'électron incident et ceux de l'atome du lithium dans son état fondamental. L'état final est composé d'un électron diffusé décrit par la fonction χ_s , de deux électrons éjectés décrits respectivement par les fonctions χ_{e1} , χ_{e2} et d'un électron dans l'état lié décrit par la fonction ϕ_l .

Le nombre quantique S peut prendre dans ce cas trois valeurs possibles $S=0$, $S=1$ et $S=2$. Dans un traitement non relativiste, la loi de conservation de spin total ne permet pas aux états de spin $S > 1$ de contribuer à la définition de l'élément de matrice de transition, car ces états de spin > 1 ne figurent pas dans l'état initial à cause de la couche fermée ($1s^2$) du lithium. Nous présentons donc les fonctions d'états qui correspondent uniquement à l'état de spin $S=0$, et $S=1$.

$$\begin{aligned}
 \Psi_{f1}(S=0, M_S=0) &= \frac{1}{\sqrt{12}} \left\{ 2|\bar{\chi}_S \bar{\chi}_{e1} \chi_{e2} \phi_l| - |\bar{\chi}_S \chi_{e1} \bar{\chi}_{e2} \phi_l| - |\bar{\chi}_S \chi_{e1} \chi_{e2} \bar{\phi}_l| \right. \\
 &\quad \left. - |\chi_S \bar{\chi}_{e1} \bar{\chi}_{e2} \phi_l| - |\chi_S \bar{\chi}_{e1} \chi_{e2} \bar{\phi}_l| + 2|\chi_S \chi_{e1} \bar{\chi}_{e2} \bar{\phi}_l| \right\}, \\
 \Psi_{f2}(S=1, M_S=0) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ |\bar{\chi}_S \bar{\chi}_{e1} \chi_{e2} \phi_l| + |\bar{\chi}_S \chi_{e1} \bar{\chi}_{e2} \phi_l| + |\bar{\chi}_S \chi_{e1} \chi_{e2} \bar{\phi}_l| \right. \\
 &\quad \left. - |\chi_S \bar{\chi}_{e1} \bar{\chi}_{e2} \phi_l| - |\chi_S \bar{\chi}_{e1} \chi_{e2} \bar{\phi}_l| - |\chi_S \chi_{e1} \bar{\chi}_{e2} \bar{\phi}_l| \right\}, \\
 \Psi_{f3}(S=1, M_S=1) &= \frac{1}{\sqrt{12}} \left\{ 3|\bar{\chi}_S \chi_{e1} \chi_{e2} \phi_l| - |\chi_S \chi_{e1} \bar{\chi}_{e2} \phi_l| - |\chi_S \bar{\chi}_{e1} \chi_{e2} \phi_l| - |\chi_S \chi_{e1} \chi_{e2} \bar{\phi}_l| \right\}, \\
 \Psi_{f4}(S=1, M_S=-1) &= \frac{1}{\sqrt{12}} \left\{ \bar{\chi}_S \bar{\chi}_{e1} \bar{\chi}_{e2} \phi_l + |\bar{\chi}_S \bar{\chi}_{e1} \chi_{e2} \bar{\phi}_l| + |\bar{\chi}_S \chi_{e1} \bar{\chi}_{e2} \bar{\phi}_l| - 3|\chi_S \bar{\chi}_{e1} \bar{\chi}_{e2} \bar{\phi}_l| \right\}.
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

L'élément de matrice de transition est donné par l'expression suivante :

$$|T_{fi}|^2 = \frac{1}{4} \left\{ |T_{fi}^{(0,0)}|^2 + |T_{fi}^{(1,1)}|^2 + |T_{fi}^{(1,0)}|^2 + |T_{fi}^{(1,-1)}|^2 \right\}, \tag{2.34}$$

Les éléments de matrice de transition qui correspondent à chaque état de spin total, sont obtenus en utilisant le même traitement que dans le cas de la simple ionisation.

Conclusion

En admettant la conservation de spin total dans le processus d'ionisation par impact électronique, nous avons obtenu dans ce chapitre les différentes expressions générales de l'élément de transition concernant des systèmes collisionnels à deux, trois et à quatre électrons en termes des éléments de transitions de base dans lesquels toutes les possibilités d'échange sont prises en compte.

Chapitre 3

L'étude de l'ionisation simple d'un système à trois électrons actifs : Application au lithium

3.1 : Introduction

Après avoir présenté, dans les chapitres précédents, notre approche pour la détermination des fonctions d'onde décrivant un électron dans un potentiel radial et les différents termes de la matrice de transition d'un processus d'ionisation $(e,2e)$ d'un système collisionnel à quatre électrons, nous passons dans le présent chapitre à la détermination de la section efficace d'un tel processus. Notre objectif principal est d'étudier le mécanisme d'ionisation d'un tel système en introduisant, pour la première fois, les différents termes d'échange, qui sont dus à la présence des électrons du cœur. Nous présentons ensuite des résultats théoriques que nous comparons à des résultats des calculs théoriques récents, ainsi qu'à des résultats des mesures expérimentales de la section efficace triplement différentielle et du paramètre d'asymétrie.

3.2 : Processus $(e, 2e)$ aux faibles énergies d'incidence

L'ionisation d'une cible atomique par impact électronique, conduit à un état final composé de deux électrons libres dans le champ d'un ion résiduel. Les modèles quantiques utilisés couramment pour décrire ce processus $(e,2e)$ aux faibles énergies, sont actuellement incapables de décrire correctement l'électron incident et de tenir compte des différentes interactions existant entre les trois particules chargées dans l'état final. Dans le modèle **(2C)** (Najjari 1997) cité dans le premier chapitre, par exemple, seules les interactions coulombiennes individuelles des deux électrons avec l'ion sont prises en compte. Le modèle proposé par Brauner et al (1989), apporte une correction classique aux résultats du modèle **(2C)**, en introduisant une troisième fonction hypergéométrique dans la description du double continuum. Cependant, ces deux modèles

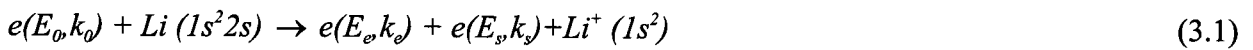
s'avèrent insuffisants au cas d'impact par électron à faible énergie dans la mesure où ils utilisent une fonction d'onde plane pour décrire l'électron incident. Le traitement que nous proposons dans cette section est basé sur le développement en ondes partielles (Landau et al 1974) (voir chapitre 1). Contrairement aux autres modèles où les interactions sont coulombiennes à toutes distances, nous utilisons ici l'approche des ondes distordues pour décrire les électrons incident, éjecté et diffusé d'une simple ionisation de l'atome du lithium par impact électronique.

3.3 : Ionisation (e,2e) du lithium atomique à trois électrons actifs

L'étude d'ionisation (e,2e) d'une cible atomique ou moléculaire, devient d'autant plus complexe que le nombre des électrons de la cible est important. Le lithium atomique est l'un des systèmes les plus simples après l'hélium et l'hydrogène, il est constitué d'un noyau de charge $Z_N = 3$ et de trois électrons répartis sur deux couches différentes, une couche fermée $1s^2$ et une couche de valence occupée par un seul électron.

3.3.1 : Section efficace triplement différentielle

Nous avons vu dans les chapitres précédents, que la section efficace triplement différentielle d'un processus de simple ionisation par impact électronique (e, 2e), associée à la réaction :



est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{d^3}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = (2\pi)^4 \frac{k_e k_s}{4k_i} \sum_{\nu=1}^4 |T_{if, \nu}|^2 \quad (3.2)$$

ν correspond aux quatre valeurs du spin total du système :

$$(S = 0, M_s = 0) \quad \text{Pour l'état singulet}$$

et

$$(S = 1, M_s = 1)$$

$$(S = 1, M_s = 0)$$

$$(S = 1, M_s = -1) \quad \text{Pour l'état triplet}$$

Dans un traitement non relativiste, le spin total de notre système collisionnel composé de quatre électrons, est conservé. C'est-à-dire que pour $\nu_i \neq \nu_f$, l'élément de transition est égal à zéro.

Cette orthogonalité est obtenue en négligeant les interactions relativistes, dues aux spins, entre l'électron incident et la cible.

3.3.2 : Détermination de l'élément de transition :

Dans l'approximation des ondes distordues, l'élément de transition entre un état initial X_f^- qui décrit l'état du système avant la collision et un état final X_f^- qui décrit le système total après la collision est donné par (Joachain 1983):

$$T_{fi} = \langle X_f^- | V(r_0, r_{01}, r_{02}, r_{03}) - U_{atome}(r_0) | X_i^+ \rangle, \quad (3.3)$$

Où r_0 et r_{0i} représentent respectivement les distances entre l'électron incident, les trois électrons atomiques et le noyau pris ici comme origine des coordonnées. On désigne par X_i^+ et X_f^- les deux fonctions d'onde initiale et finale du système collisionnel (voir chapitre 1). U_{atome} (défini plus loin dans l'équation 3.11) représente le potentiel de distorsion de l'état initial, et V représente le potentiel d'interaction entre le projectile et l'atome du lithium (à trois électrons actifs). Dans le but d'étudier le processus (e,2e) du lithium atomique, plusieurs formes de ce potentiel ont été proposées, Hafid et al. (1994) l'ont remplacé par un potentiel modèle de Klapisch (Klapisch 1971), ou Gupta S et al. (1999) ont adopté l'approximation du cœur gelé pour le même objectif.

Le traitement que nous proposons dans cette étude, consiste à considérer la description complète du potentiel d'interaction V , en tenant compte de toutes les interactions coulombiennes entre l'électron incident et la cible du lithium à trois électrons.

$$V(r_0, r_{01}, r_{02}, r_{03}) = \frac{-Z_N}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + \frac{1}{r_{03}}, \quad (3.4)$$

Nous avons montré dans le chapitre 2, qu'en remplaçant les fonctions X_i^+ et X_f^- par leurs expressions données par (2.25) et (2.26) dans l'équation (3.3), nous obtenons la forme finale de la section efficace triplement différentielle :

$$\sigma^{(3)} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{4k_i} \left\{ 3 |f1 + g2 + h1 - f2 - g1 - h2|^2 + |f1 + g1 + 2h3 - f2 - g2 - h1 - h2|^2 \right\} \quad (3.5)$$

Où les énergies k_i , k_e et k_s représentent respectivement la quantité de mouvement de l'électron incident, éjecté et diffusé.

Nous définissons ici χ_i , χ_s et χ_e les fonctions d'onde du continuum monoélectronique qui correspondent respectivement aux électrons incident, diffusé et éjecté et par $\varphi_{Li}(r_1, r_2, r_3) = \varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2)\varphi_3(r_3)$ et $\phi_{Li^+}(r_1, r_2)$ les fonctions d'onde respectives du lithium cible et de son ion résiduel.

$f1$ et $f2$ représentent les premier et deuxième termes directs, dans lesquels l'indice de l'électron incident est attribué à l'électron diffusé.

$$\begin{aligned} f1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_3) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) [V - U_{atome}] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3) \\ f2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_2, \vec{r}_3) [V - U_{atome}] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Les termes d'échange $g1$ et $g2$ sont donnés par

$$\begin{aligned} g1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= f1(\vec{k}_e, \vec{k}_s) \\ g2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= f2(\vec{k}_e, \vec{k}_s) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Où $h1$, $h2$ et $h3$ correspond aux termes de "capture", dans lesquels l'indice de l'électron incident est attribué à l'un des électrons de l'ion résiduel.

$$\begin{aligned} h1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_3) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_0, \vec{r}_2) [V - U_{atome}] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3) \\ h2(\vec{k}_s, \vec{k}_e) &= h1(\vec{k}_e, \vec{k}_s) \end{aligned} \quad (3.8)$$

et finalement

$$h3(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_2) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{Li^+}^*(\vec{r}_0, \vec{r}_3) [V - U_{atome}] \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \varphi_3(\vec{r}_3) \quad (3.9)$$

En pratique ces trois derniers termes sont négligeables dans tous les domaines énergétiques.

Il est intéressant de noter ici, que lorsqu'on néglige la contribution des électrons internes, comme dans le cas de l'approximation du cœur gelé ou dans le cas d'un potentiel modèle, l'expression de la section efficace (l'équation 3.5) se réduit à l'expression habituelle connue dans le cas d'une ionisation (e,2e) d'une cible à un électron actif.

$$\sigma^{(3)} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{4k_i} \left\{ 3|f1 - g1|^2 + |f1 + g1|^2 \right\} \quad (3.10)$$

3.3.3 : Détermination de la fonction monoélectronique du continuum

Après avoir défini les différents termes d'échange possibles dans l'élément de transition de (e,2e) du lithium à trois électrons actifs, nous passons maintenant à la détermination approchée des fonctions d'onde du continuum et de l'état lié du système avant et après la collision.

3.3.3.1 : Etat initial du système

Dans l'état initial de l'ionisation (e,2e) de *Li*, le potentiel de distorsion U_{atome} de l'onde incidente est donné comme valeur moyenne de l'interaction électrostatique entre l'incident et le lithium atomique à trois électrons actifs :

$$U_{\text{atome}}(r) = \langle \varphi_{\text{Li}}(1,2,3) | V(r_0, r_{01}, r_{02}, r_{03}) | \varphi_{\text{Li}}(1,2,3) \rangle, \quad (3.11)$$

$\varphi_{\text{Li}}(1,2,3)$ est la fonction d'onde représentant le lithium dans son état fondamental

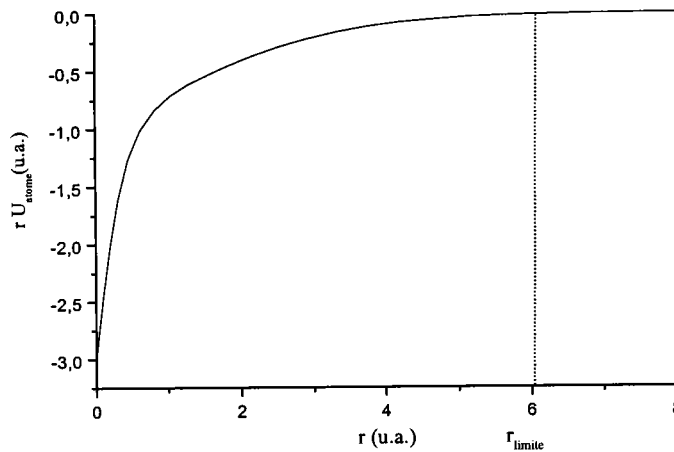


Figure A : Variation du rU_{atome} en fonction de la distance r donnée en (u.a.)

Nous représentons sur la figure (A), la variation avec r de la charge du potentiel de distorsion rU_{atome} , dans laquelle se déplace l'électron incident avant de heurter la cible du lithium. On remarque qu'à l'infini (pour $r > r_{\text{limite}}$), l'allure de la courbe tend vers 0. Dans cette région, la charge vue par l'électron incident est proportionnelle à la charge positive du noyau moins la charge négative des électrons atomiques, et que ce potentiel de distorsion dans la voie d'entrée joue un rôle de moins en moins important lorsque l'énergie cinétique du projectile augmente. Alors que près de l'atome, quand r tend vers zéro, l'électron entrant ne voit que la charge du noyau qui est égale à 3, en ignorant complètement la charge des électrons atomiques.

3.3.3.1.1 : Fonction radiale de l'électron incident

L'état initial du système collisionnel est composé d'un électron incident et de l'atome cible à trois électrons. Soit X_i^+ la fonction d'onde qui correspond à cet état (équ (1.32)) et qui obéit à l'équation suivante :

$$(E - K^{DWBA})X_i^+ = 0 \quad (3.12)$$

On définit l'hamiltonien K^{DWBA} qui décrit l'énergie cinétique, l'attraction électron-noyau ainsi que le potentiel de distorsion $U_{atome}(r_0)$ de l'état initial par (équ (1.28)) :

$$K^{DWBA} = K + U_{atome}(r_0) \quad (3.13)$$

avec

$$K = -\frac{\nabla_{inci}^2}{2} - \sum_{j=1}^3 \left(\frac{\nabla_j^2}{2} + \frac{Z_N}{r_j} \right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} \quad (3.14)$$

La fonction d'onde de l'électron incident est décrite par une onde distordue $\chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$, elle est donnée en ondes partielles par :

$$\chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) = \frac{(4\pi)}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell_i=1}^{\infty} \sum_{m_i=-\ell_i}^{\ell_i} i^{\ell_i} e^{i\delta'_{\ell_i}} \frac{F_{\ell_i}(k_i, r_0)}{k_i r_0} Y_{\ell_i, m_i}^*(\hat{k}_i) Y_{\ell_i, m_i}(\hat{r}_0) \quad (3.15)$$

$F_{\ell_i}(k_i, r_0)$ est la fonction radiale solution de l'équation de Schrödinger (équ (1.41) ch1) qui correspond à l'électron incident d'impulsion $\vec{k}_i$ et qui doit obéir à la forme asymptotique suivante :

$$F_{\ell_i}(k_i, r_0) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \sin(k_i r_0 - \frac{\ell_i \pi}{2} + \delta'_{\ell_i}) \quad (3.16)$$

δ'_{ℓ_i} est le déphasage créé par le potentiel de distorsion de l'état initial U_{atome} .

3.3.3.2 : Etat final du système

Dans l'état final, les deux électrons sortants, l'éjecté et le diffusé, sont en présence d'un potentiel U_{ion} créé par l'ion résiduel. Ce potentiel de distorsion est représenté comme étant la moyenne des interactions entre l'électron sortant et l'ion résiduel Li^+ à deux électrons actifs.

$$U_{ion}(r_0) = \left\langle \phi_{h^+}(r_1, r_2) \left| \frac{-Z_N}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \phi_{h^+}(r_1, r_2) \right\rangle \quad (3.17)$$

Où r_0 représente le module du vecteur position de l'électron émergent et $\phi_{li^+}(1,2)$ la fonction d'onde de l'ion Li^+ dans son état fondamental.

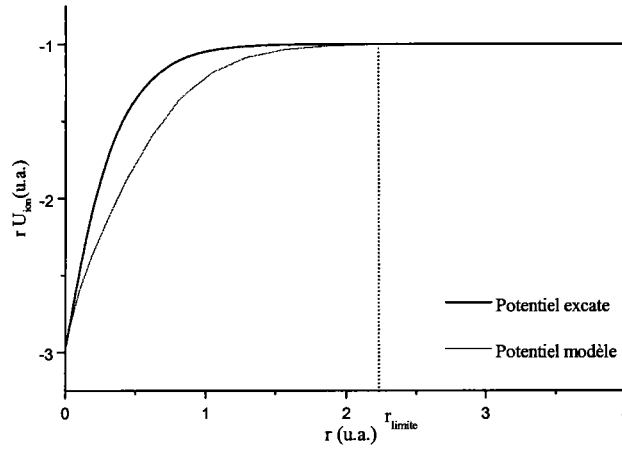


Figure B : Variation du rU_{ion} en fonction de la distance r donnée en (u.a.)

Nous présentons sur la figure (B) la variation de rU_{ion} en fonction de r . Nous remarquons qu'à l'origine la charge tend vers -3 (la charge du noyau $Z_N=3$). A l'infini, l'électron sortant voit une charge proportionnelle à la charge du noyau moins celle des deux électrons liés, et $rU_{ion}(r)$ tend vers -1 . Nous constatons donc que le potentiel n'est vraiment coulombien qu'aux grandes distances ($r > r_{limite}$).

Dans l'état final de la simple ionisation du lithium atomique, le système est composé de deux électrons, d'un électron éjecté de vecteur $\vec{k}_e$ supposé d'indice 3, et d'un électron diffusé de vecteur $\vec{k}_s$ d'indice 0, en présence d'un potentiel U_{ion} de l'ion résiduel. Nous avons donc à résoudre l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[-\frac{\nabla_0^2}{2} - \frac{\nabla_3^2}{2} - U_{ion}(r_0) - U_{ion}(r_3) - E \right] \psi(\vec{r}_0, \vec{r}_3) = 0 \quad (3.18)$$

Notons qu'à ce stade, nous avons négligé la répulsion électrostatique entre les électrons sortants, et nous désignons par E l'énergie correspondante à ces deux électrons.

$$E = \frac{k_e^2}{2} + \frac{k_s^2}{2} \quad (3.19)$$

L'absence de répulsion entre les deux électrons, nous permet de séparer l'équation de Schrödinger en deux équations, une pour chaque électron :

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2} + k_a^2 - U_{ion}(r_i) \right] \chi_a(\vec{k}_a, \vec{r}_i) = 0 \quad (3.20)$$

Avec $i=0,3$ et $a=e,s$ les indices qui correspondent aux électrons éjecté et diffusé.

3.3.3.2.1 : Fonctions radiales des électrons éjecté et diffusé

Pour définir la fonction d'onde des deux électrons dans l'état final, nous écrivons la solution de l'équation (3.18), approximativement par le produit de fonctions d'onde de chacun des électrons émergents, $\chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_3)$ pour l'éjecté et $\chi_s(\vec{k}_s, \vec{r}_0)$ pour le diffusé :

$$\psi(\vec{r}_0, \vec{r}_3) = \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_3) \chi_s(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \quad (3.21)$$

où $\chi(\vec{k}, \vec{r})$ est donnée par

$$\chi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{(4\pi)}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} i^{\ell} e^{i\Delta_{\ell}} \frac{F_{\ell}(k, r)}{kr} Y_{\ell, m}^*(\hat{k}) Y_{\ell, m}(\hat{r}) \quad (3.22)$$

$F_{\ell}(k, r)$ représente la fonction radiale qui possède la forme asymptotique suivante :

$$F_{\ell}(k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} \sin\left(kr - \frac{\ell\pi}{2} - \eta \ln(2kr) + \sigma_{\ell} + \delta_{\ell}\right) \quad (3.23)$$

Elle est solution de l'équation radiale (équ (1.41) ch1) pour un potentiel de distorsion $U=U_{ion}(r)$. Δ_{ℓ} représente le déphasage qui caractérise la modification du comportement asymptotique de la fonction d'onde due à l'effet de distorsion, il est donné par la somme d'un déphasage σ_{ℓ} dû à l'interaction de type coulombienne et un déphasage δ_{ℓ} qui provient de la modification apportée par le potentiel à courte portée.

3.3.3.2.2 : Correction de la répulsion entre les deux électrons

Nous avons cité dans le premier chapitre, quelques approches théoriques pour résoudre approximativement le problème à trois corps rencontré dans l'état final d'une collision (e,2e) d'une cible par impact électronique. On note que le développement en ondes partielles de la fonction d'onde corrélée pour le double continuum de type 3C (Brauner et al 1989), s'avère long et difficile à cause de la présence d'une troisième fonction hypergéométrique confluyente, dont l'argument fait intervenir le terme r_{03} dû à la corrélation entre les deux électrons sortants. Nous allons nous contenter dans ce travail d'une approche qui assure la validité des conditions asymptotiques, sans recourir au terme supplémentaire de la fonction 3C. Nous allons introduire

la charge effective dynamique dans la fonction radiale $F_{\ell_j}(k_j, r_j)$ qui dépendra des impulsions des deux électrons sortants, et que nous déterminons en appliquant la condition de Peterkop (1962) entre la charge effective Z_e de l'électron éjecté et celle de l'électron diffusé Z_s :

$$\frac{Z_s}{k_s} + \frac{Z_e}{k_e} = \frac{Z_N}{k_s} + \frac{Z_N}{k_e} - \frac{1}{|\vec{k}_s - \vec{k}_e|} \quad (3.24)$$

qui rend le produit des deux ondes asymptotiquement exacte. En 1973, M. Schulz et al ont proposé la solution suivante :

$$Z_i = Z_N - \Delta_i(\vec{k}_i, \vec{k}_j) \quad (3.25)$$

$$\Delta_i(\vec{k}_i, \vec{k}_j) = \frac{k_i(k_i^2 - \vec{k}_i \cdot \vec{k}_j)}{|\vec{k}_i - \vec{k}_j|^3}, \quad j \neq i = e, s \quad (3.26)$$

Ici Z_N représente la charge du noyau de la cible.

L'équation (3.24) de Peterkop est résolue en introduisant la solution de symétrie suivante sur $\Delta_e(\vec{k}_e, \vec{k}_s)$ et $\Delta_s(\vec{k}_s, \vec{k}_e)$:

$$\Delta_e(\vec{k}_e, \vec{k}_s) = \Delta_s(\vec{k}_s, \vec{k}_e) \quad (3.27)$$

La solution (3.25) satisfait toutes les conditions asymptotiques physiquement convenables. Ainsi dans le cas limite où $|\vec{k}_s| \gg |\vec{k}_e|$, on obtient la solution qui correspond bien à la situation physique où la charge de l'électron éjecté fait un écran total à l'électron diffusé.

$$Z_e(\vec{k}_e, \vec{k}_s) = Z_N \quad (3.28)$$

$$Z_s(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = Z_N - 1$$

Δ_i , $i = e, s$ est introduit dans le potentiel de distorsion U_{ion} de l'état final sous la forme suivante :

$$U_{ion} = \left\langle \phi_{Li^+}(r_1, r_2) \left| \frac{-(Z_N - \Delta_i)}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right| \phi_{Li^+}(r_1, r_2) \right\rangle \quad (3.29)$$

Le potentiel de distorsion est donné ici dans le cas d'un ion résiduel Li^+ à deux électrons.

3.3.3.4 : Choix de la fonction d'onde de l'état lié

Dans le calcul de l'élément de transition qui correspond à l'ionisation (e,2e) de l'atome du lithium par impact électronique, nous avons utilisé des fonctions d'onde Hartree-Fock de

Clementi Roetti (1974) dans la description de la cible et de son ion résiduel. Elles sont données respectivement pour Li et Li⁺ par :

$$\varphi_{Li}(r_1, r_2, r_3) = \varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2)\varphi_3(r_3) \quad (3.30)$$

$$\phi_{Li^+}(r_1, r_2) = \phi_1(r_1)\phi_2(r_2) \quad (3.31)$$

Où

$$\varphi_a = R_a^{Li}(r)Y_{L,M}(\theta, \phi) \quad (a=1,2,3) \quad (3.32)$$

$$\phi_b = R_b^{Li^+}(r)Y_{L,M}(\theta, \phi) \quad (b=1,2) \quad (3.33)$$

Pour l'état fondamental ($L=0, M=0$) ces fonctions radiales sont données par le développement suivant :

$$R_a^{Li}(r) = \sum_{i=1}^6 C_i r^n e^{-\alpha_i r} \quad n = 0 \text{ si } i \leq 2, \quad n = 1 \text{ si } i > 2$$

$$R_b^{Li^+}(r) = \sum_{j=1}^4 B_j e^{-\beta_j r} \quad (3.34)$$

$$\text{et } Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Les paramètres C_i , α_i , B_j et β_j sont donnés dans le tableau de Clementi Roetti (1974).

3.3.3.5 : Calcul du terme direct fl de SEDT

Nous développons ici le calcul du premier terme direct fl . Pour cela nous présentons l'électron incident de vecteur $\vec{k}_i$ par la fonction $\chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0)$, l'électron diffusé de vecteur d'onde $\vec{k}_s$ par $\chi_s(\vec{k}_s, \vec{r}_0)$ et l'éjecté, de vecteur d'onde $\vec{k}_e$, par $\chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_1)$.

L'amplitude de diffusion s'écrit

$$f1 = \left\langle \phi_{Li^+}(r_1, r_2) \chi_s(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \left| V(r_0, r_{01}, r_{02}, r_{03}) - U_{atome}(r_0) \right| \chi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \varphi_{Li}(r_1, r_2, r_3) \right\rangle \quad (3.35)$$

Où l'indice de l'électron incident (0) est attribué à l'électron diffusé et l'indice (3) de l'électron de valence est attribué à l'électron éjecté.

$$f1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_3 \chi_s^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \chi_e^*(\vec{k}_e, \vec{r}_3) [W(r_0, r_3)] \chi_i(\vec{r}_0) \varphi_3(\vec{r}_3)$$

Où

$$W(r_0, r_3) = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \phi_1(\vec{r}_1) \phi_2(\vec{r}_2) [V - U_{atome}] \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) \quad (3.36)$$

En remplaçant (voir annexe D) chaque fonction par son expression donnée précédemment, nous obtenons pour $f1$, l'expression finale suivante :

$$f1(\vec{k}_s, \vec{k}_e) = \frac{(4\pi)^{3/2}}{k_i k_e k_s} \sum_{\ell_i=0}^{\infty} \sum_{\ell_e=0}^{\infty} \sum_{m_e=-\ell_e}^{\ell_e} \sum_{\ell_s=|\ell_i-\ell_e|}^{\ell_i+\ell_e} (i)^{-\ell_e-\ell_s+\ell_i} e^{i\Sigma_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e}} M_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} \beta_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} Y_{\ell_i}^{*0}(\hat{k}_i) Y_{\ell_e}^{*m_e}(\hat{k}_e) Y_{\ell_s}^{*-m_e}(\hat{k}_s)$$

Avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \Sigma_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} = \delta_{\ell_i} + \delta_{\ell_e} + \delta_{\ell_s} \\ M_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} = \left(\frac{(2\ell_i+1)(2\ell_s+1)}{(2\ell_e+1)} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_i & \ell_s & \ell_e \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_i & \ell_s & \ell_e \\ 0 & -m_e & m_e \end{pmatrix} \\ \beta_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} = \int \tilde{\mathfrak{R}}_{\ell_e}(r_0) \frac{F_{\ell_i}(k_i, r_0) F_{\ell_s}^*(k_s, r_0)}{r_0} dr_0 \end{array} \right.$$

$$\text{et } \tilde{\mathfrak{R}}_{\ell_e} = (-Z_N I1 + I2(r_0)) \delta_{\ell_e, 0} \int_0^{\infty} r_1 F_{\ell_e}(k_e, r_1) \varphi_3(r_1) dr_1 + I1 \int_0^{\infty} \frac{r^{\ell_e <}}{r^{\ell_e + I}} F_{\ell_e}(k_e, r_1) r_1 \varphi_3(r_1) dr_1$$

(3.37)

$Z_N=3$ désigne le noyau atomique du lithium. $I1$, $I2$ sont définis dans l'annexe D.

3.4 : Résultats et discussion

Comme nous l'avons précisé dans le chapitre 1, la section efficace triplement différentielle est déterminée expérimentalement en détectant par la technique de coïncidence les deux électrons, diffusé et éjecté, issus de la même collision ionisante. Les directions sont définies respectivement par les angles polaires θ_s , θ_e ainsi que par l'angle azimutal relatif aux deux électrons émis $\phi = \phi_e - \phi_s$, le plan d'incidence étant défini par les directions de l'impulsion de l'électron incident et de celle de l'électron diffusé.

On distingue la géométrie coplanaire dans laquelle $\phi = 0$, et la non coplanaire dans laquelle $\phi \neq 0$. La géométrie est dite symétrique lorsque les valeurs des énergies et des angles polaires des deux électrons émergents sont égales et la variation de la section efficace est étudiée en fonction de $\theta = \theta_e = -\theta_s$. En géométrie coplanaire asymétrique, la variation de la section efficace est étudiée habituellement en terme de l'angle θ_e , l'angle θ_s étant fixé, l'énergie de l'électron diffusé est alors généralement beaucoup plus grande que celle de l'électron éjecté $E_s \gg E_e$.

Dans le but de vérifier notre procédure des ondes partielles, nous avons comparé tout d'abord les résultats obtenus par notre approche, pour le cas d'un potentiel coulombien, à ceux obtenus pour les mêmes conditions par la méthode analytique en employant l'intégrale de Nordsieck (1954) et Lewis (1956).

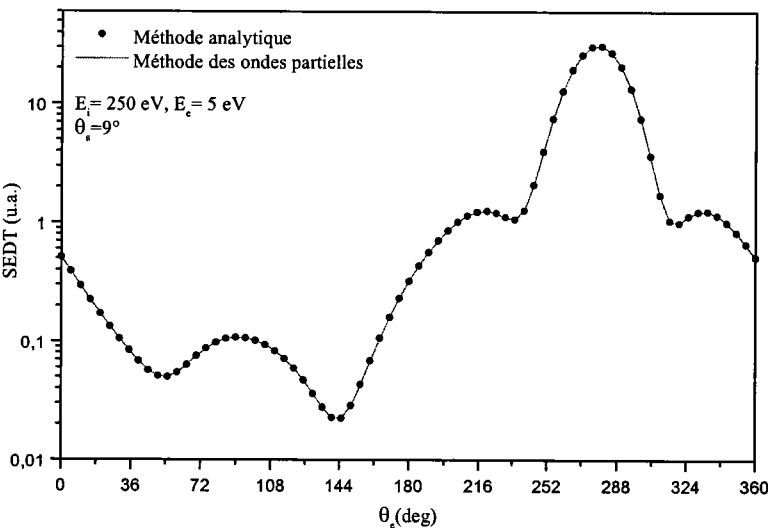


Figure 1 : Variation de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation (e,2e) du lithium en fonction de l'angle de l'électron éjecté

Sur la figure (1), nous montrons ces deux résultats de *SED*T de (e,2e) du lithium, qui coïncident pour le cas d'une énergie d'incidence égale à 250 eV et l'énergie de l'électron éjecté égale à 5eV, avec un angle de diffusion fixé à 9°.

Dans ce qui suit, nous allons en premier lieu étudier les effets de différents termes d'échange dans la contribution au processus d'ionisation (e,2e) du lithium. Pour cela nous allons explorer un domaine d'énergie d'incidence allant de quelques centaines d'eV à quelques KeV par des approches appropriées à chaque domaine. Aux hautes énergies, le processus d'ionisation est décrit par la première approximation de Born, en utilisant le modèle (2C) (Najjari 1997) pour décrire le double continuum dans l'état final. Nous étudierons dans un premier lieu, la variation de la section efficace triplement différentielle qui correspond à la contribution des deux termes directs $f1$ et $f2$, en évaluant leur ordre d'importance indépendamment des autres termes. Nous allons ainsi comparer nos résultats obtenus en utilisant notre approche à quatre électrons avec ceux obtenus en utilisant l'approximation du cœur gelé ou par un potentiel modèle de Klapisch (1971).

Nous allons ensuite, étudier l'ionisation aux faibles valeurs d'énergies d'incidences (≈ 200 eV) où nous allons appliquer notre modèle basé sur l'approximation 'DWBA', dont les résultats sur l'atome Li seront comparés à ceux obtenus par Zhang et al (1992), ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Frost et al (1990). Nous allons également présenter dans le même domaine d'énergie, les résultats du paramètre d'asymétrie associé à la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de la cible du lithium initialement polarisée, par impact des électrons incidents également polarisés, dans une géométrie coplanaire symétrique et asymétrique que nous allons comparer avec les expériences de Baun et al (1992) ainsi qu'avec des résultats obtenus récemment par Streun et al (1998 et 1999).

3.4.1 : Ordre d'importance des différents termes d'échange

Dans cette première partie, nous allons présenter le calcul de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation (e,2e) du lithium. Afin de justifier notre approche à quatre électrons, nous allons étudier ce processus d'ionisation pour des situations où la contribution des termes $f2$, $g2$ n'est pas négligeable par rapport à la contribution des termes habituels $f1$ et $g1$. Pour cela nous présentons d'abord sur la figure (2a) et (2b), la contribution des termes directs $f1$ et $f2$ dans

la section efficace triplement différentielle, en fonction de l'angle d'éjection dans une géométrie coplanaire asymétrique.

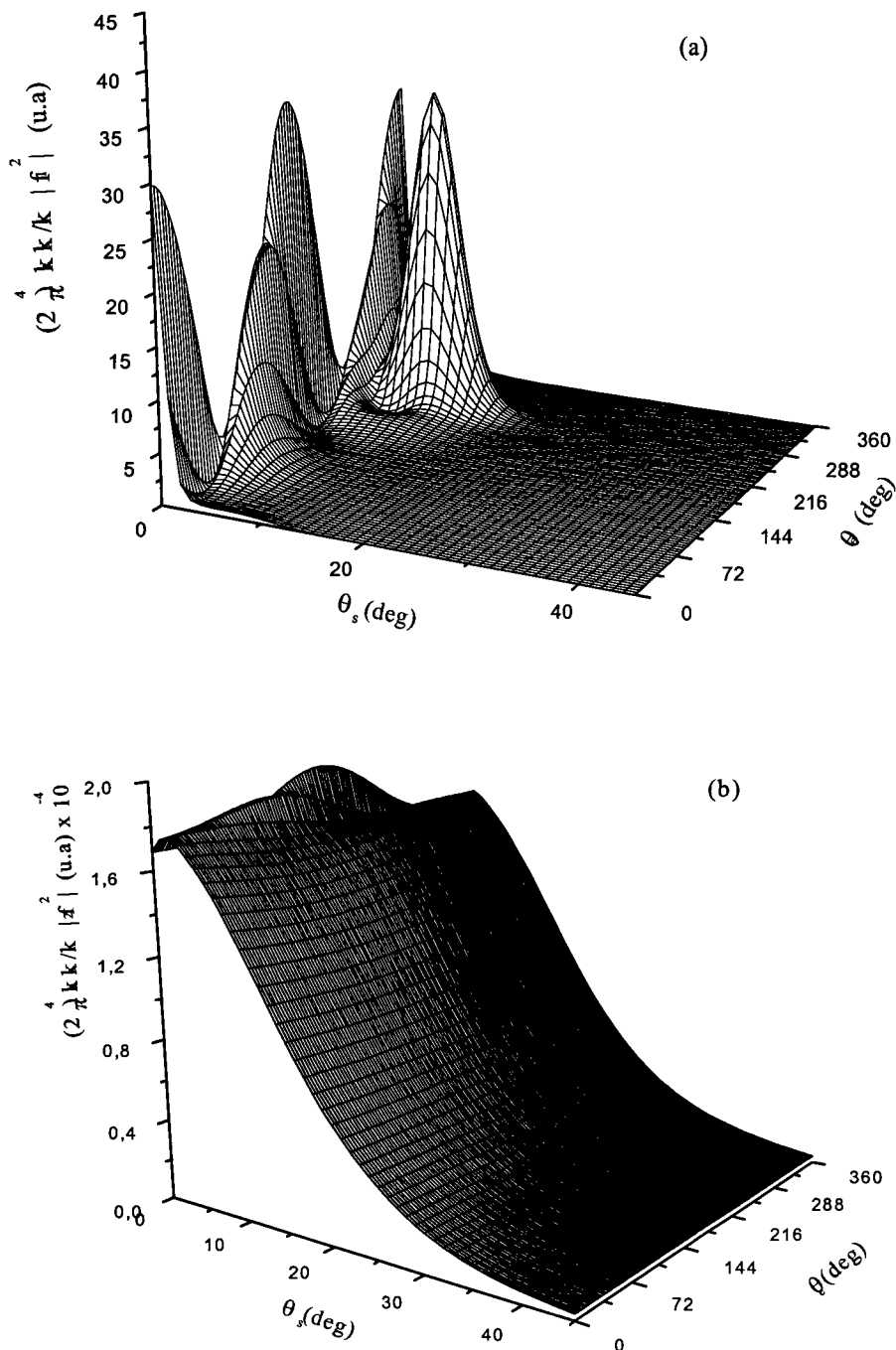


Figure 2 : Variation de la section efficace *SEDT* coplanaire de l'ionisation simple du lithium en fonction de l'angle d'éjection θ_e et l'angle de diffusion, θ_s . (a) représente $f1$ et (b) représente $f2$.

Sur les figures (2a et 2b), nous présentons la variation de $SED T$ qui correspond à la contribution des termes directs respectifs $f1$ et $f2$, dans une géométrie asymétrique avec des énergies d'incidence de 250 eV , et d'éjection de 5 eV , l'angle de diffusion est fixé à $\theta_s = 9^\circ$. Sur la figure (2a), la variation de $SED T$ fait apparaître deux pics importants : le premier est trouvé dans la direction du moment du transfert $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ est appelé pic binaire, prévenant de la collision entre l'électron incident et la cible, un second pic d'amplitude correspond à la direction opposée et qui disparaît avec l'augmentation de l'angle de diffusion, appelé pic de recul.

L'étude systématique de l'influence de différents termes d'échange qui correspondent à la contribution des électrons internes $f2$, $g2$, $h1$, $h2$ et $h3$ définis par les équations (3.6, 3.7, 3.8 et 3.9) sur la section efficace triplement différentielle, pour un domaine d'énergie d'incidence varie entre 50 eV et 5 KeV , prouve que les termes de "capture" $h1$, $h2$ et $h3$ sont toujours négligeables même pour des énergies d'incidence faibles, comme nous l'avons testé pour 50 eV . D'autre part les termes $f2$ et $g2$ sont négligeables seulement pour des énergies d'incidence très élevées ainsi que pour des petits angles de diffusion. Ceci semble raisonnable, car le paramètre d'impact dans ces deux cas étant grand, l'électron incident interagit de préférence avec l'électron de valence.

Pour montrer l'importance de ces effets d'échange, nous présentons sur les figures (3a, 3b, 3c) la variation de la section efficace triplement différentielle avec l'angle d'éjection obtenue pour des énergies d'incidence et d'éjection respectivement égales à 250 eV et 5 eV , par les trois méthodes suivantes : premièrement, par notre méthode qui décrit correctement le lithium à trois électrons actifs, deuxièmement par une approximation du cœur gelé où l'électron incident voit seulement l'électron de valence et le noyau avec une charge $Z_N = 1$, et troisièmement par une approche où le cœur est décrit par un potentiel modèle proposé par Klapisch (1971).

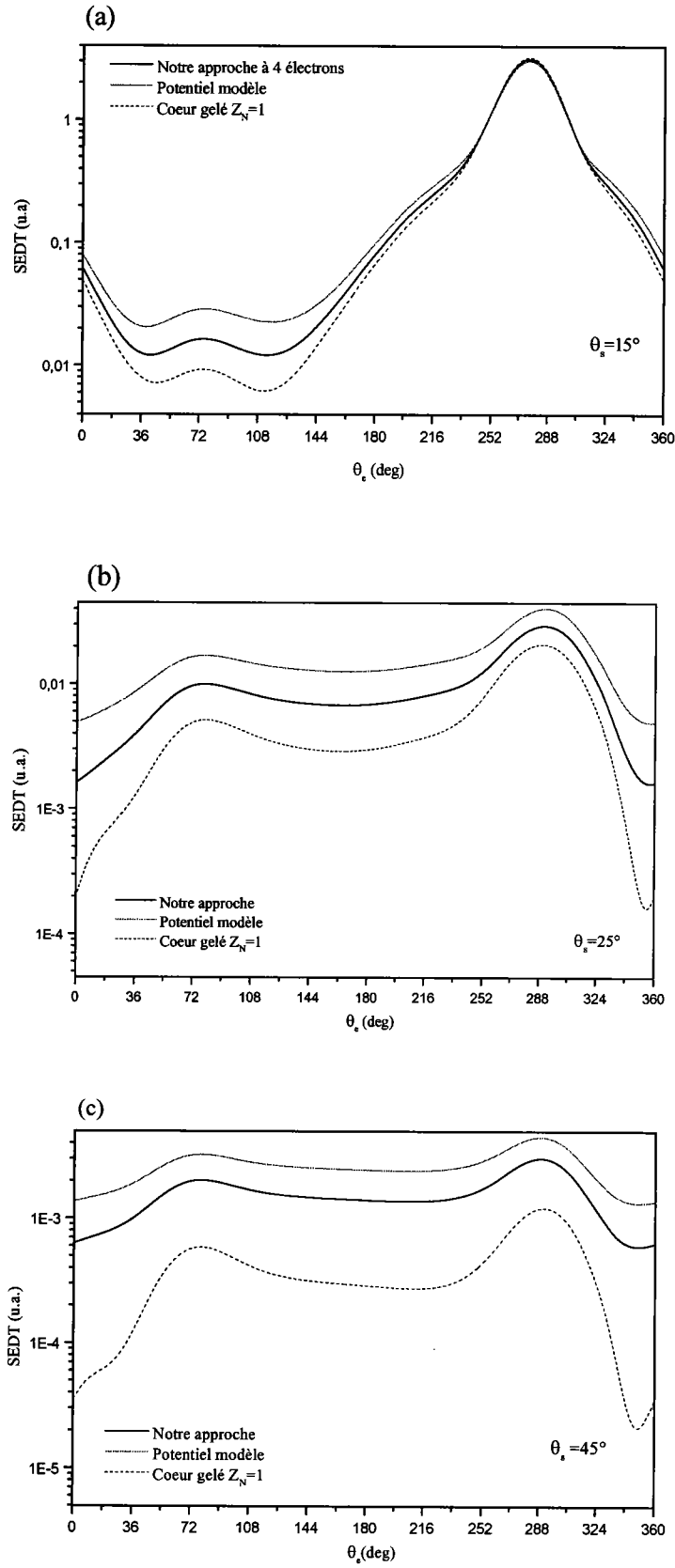


Figure 3 : Variation de la section efficace triplement différentielle obtenue par les trois méthodes en fonction de l'angle d'éjection, pour des énergies $E_i=250\text{ eV}$, $E_e=5\text{ eV}$ et pour des angles de diffusion (a) : $\theta_s = 15^\circ$,

(b) : $\theta_s = 25^\circ$ et (c) : $\theta_s = 45^\circ$

Sur la figure (3a) à $\theta_s = 15^\circ$, les trois méthodes donnent le même pic binaire au même angle d'éjection qui est en générale orienté vers le moment du transfert. Nous observons sur la figure (3b) et (3c), où nous avons pris successivement $\theta_s = 25^\circ$ et $\theta_s = 45^\circ$, les différences en module et en direction d'éjection sur le pic binaire entre les trois méthodes qui peuvent être expliquées par le fait qu'aux grands angles de diffusion, le paramètre d'impact est petit et la contribution des électrons internes devient relativement importante, phénomène qu'on peut aussi obtenir en augmentant l'énergie d'incidence pour des angles de diffusion fixes.

Nous présentons maintenant la variation de la section efficace triplement différentielle pour des énergies d'incidence égales à 550 eV , 750 eV et 950 eV .

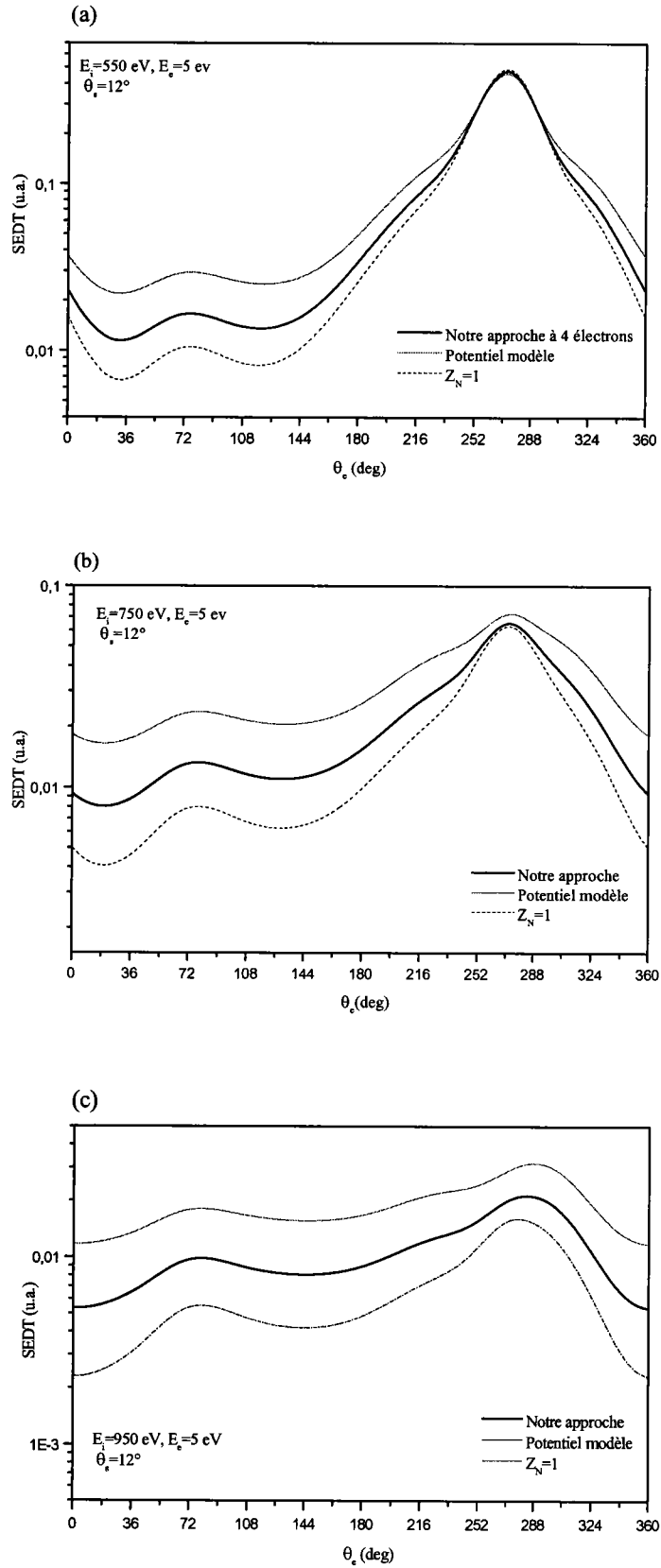


Figure 4 : Courbes représentant la variation de $SEDT$ pour une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV et pour un angle de diffusion $\theta_s = 12^\circ$, pour des énergies d'incidence fixées respectivement pour (a) 550 eV, (b) 750 eV et pour (c) 950 eV

Sur les figures (4a, 4b et 4c) où nous augmentons les valeurs de l'énergie d'incidence, nous montrons la variation de la section efficace triplement différentielle en fonction de θ_e pour un angle de diffusion fixé à $\theta_s = 12^\circ$. Les différentes figures sont obtenues avec des énergies d'impact différentes, $E_i = 550 \text{ eV}$ pour (4a), $E_i = 750 \text{ eV}$ pour (4b) et $E_i = 950 \text{ eV}$ pour (4c). Nous observons que les trois méthodes citées plus haut donnent des résultats comparables pour les faibles valeurs d'énergies et différents pour des énergies élevées.

Ainsi, sur la figure (4a), les deux méthodes sont en accord avec notre approche à quatre électrons, alors que lorsque nous augmentons les énergies d'incidence, les résultats des figures (4b et 4c) ont la même allure mais pas la même amplitude. Cette différence devient de plus en plus importante en augmentant l'énergie d'impact, cela s'explique par le fait que les électrons rapides pénètrent à l'intérieure de la cible et interagissent avec tous les électrons.

Une autre situation très intéressante est rencontrée pour des valeurs d'énergie d'éjection et de diffusion égales. Il s'agit de varier l'angle d'éjection tout en gardant l'angle θ_{es} , entre les électrons sortants, constant. Ceci donne en générale des valeurs très petites pour la section efficace triplement différentielle.

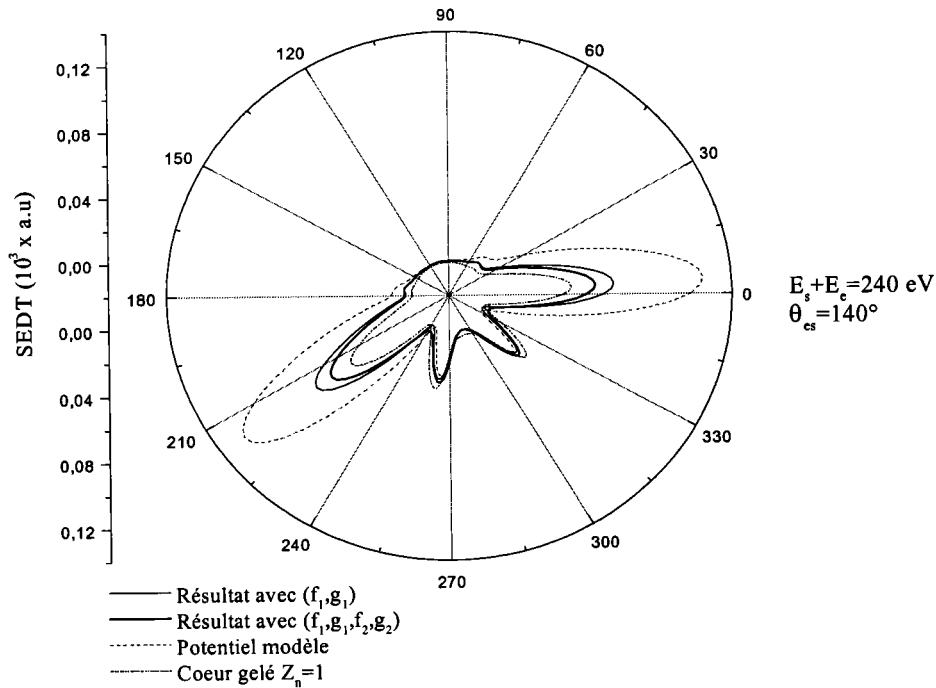


Figure 5 : Courbe représentant la variation de $SEDT$ en coordonnées polaires, pour une énergie $E_e + E_s = 240 \text{ eV}$ et $\theta_{es} = 140^\circ$

Nous montrons sur la figure (5), la variation de la section efficace dans une représentation polaire où l'angle de l'électron éjecté θ_e , joue le rôle de l'angle polaire et la distance d'un point de l'origine représente l'amplitude de la section efficace triplement différentielle. Les résultats sont obtenus par les trois méthodes différentes décrites plus haut, pour une énergie d'incidence de 250eV et $\theta_{es} = 140^\circ$. Ici, nous avons effectué un calcul supplémentaire dans lequel nous avons négligé les effets d'échange dus aux électrons internes connus dans notre travail sous f_2 et g_2 .

Après avoir évalué l'importance des différents termes d'échange dans le processus $(e,2e)$ du lithium à trois électrons actifs, nous reproduisons maintenant quelques résultats de *SED*T pour lesquels des résultats expérimentaux et théoriques récents existent.

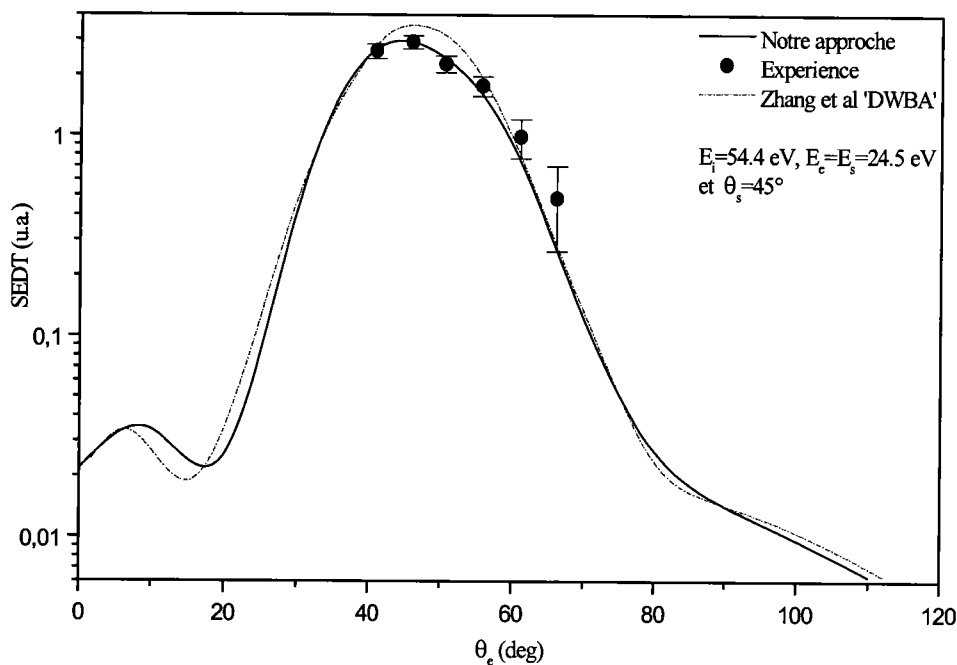


Figure 6 : Variation de la *SED*T en fonction de l'angle d'éjection, avec des énergies $E_i=54.4\text{ eV}$, et $E_e=24.5\text{ eV}$ pour un angle de diffusion fixé à 45°

La figure (6) montre la variation de la section efficace triplement différentielle *SED*T en fonction de l'angle d'éjection pour une valeur d'énergie de l'électron incident égale à $54,4\text{ eV}$. La comparaison avec les résultats de Zhang et al (1992), prouve que notre méthode donne un meilleur accord avec les résultats expérimentaux obtenus par Frost et al (1990), cette petite

amélioration devrait être attribuée à l'utilisation de notre approche à quatre électrons ainsi qu'à l'effet de distorsion pris en compte dans la détermination de l'élément de transition.

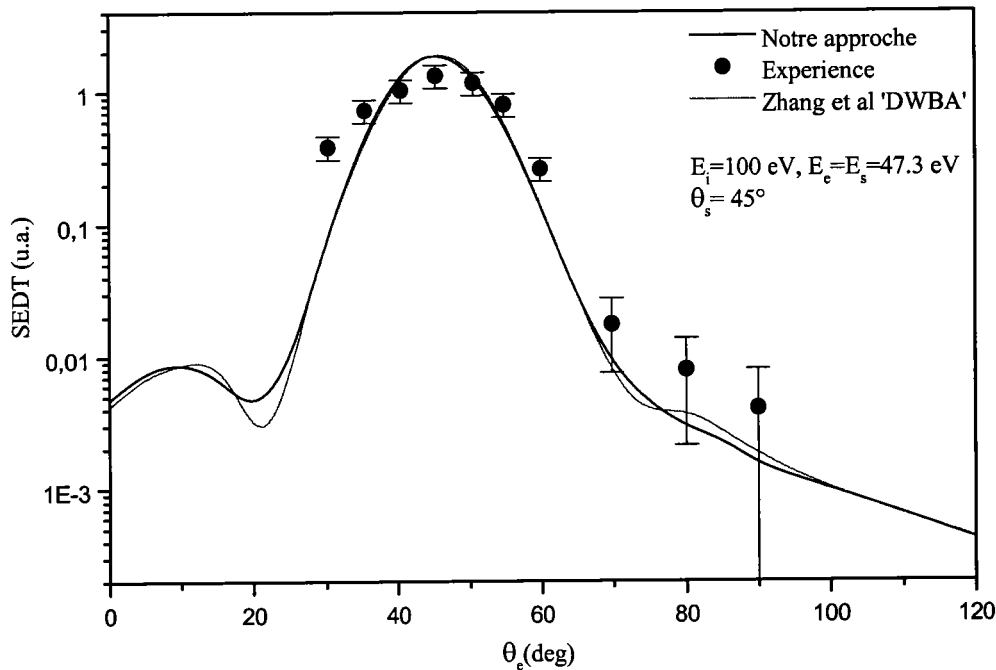


Figure 7 : Variation de la *SEDT* en fonction de l'angle d'éjection, pour une énergie d'incidence $E_i=100\text{ eV}$, et d'éjection $E_e=47.3\text{ eV}$ pour un angle de diffusion fixé à 45°

La figure (7) montre, pour une valeur de l'énergie d'incidence légèrement supérieure à celle de la figure 6, la variation de la section efficace triplement différentielle en fonction de l'angle d'éjection. La courbe représentant notre calcul obtenu par l'approche 'DWBA' possède la même allure que celle obtenue par Zhang et al (1992). Cependant, on remarque que l'accord avec les résultats expérimentaux obtenus par Frost et al (1992) est moins bon que celui de la figure 6.

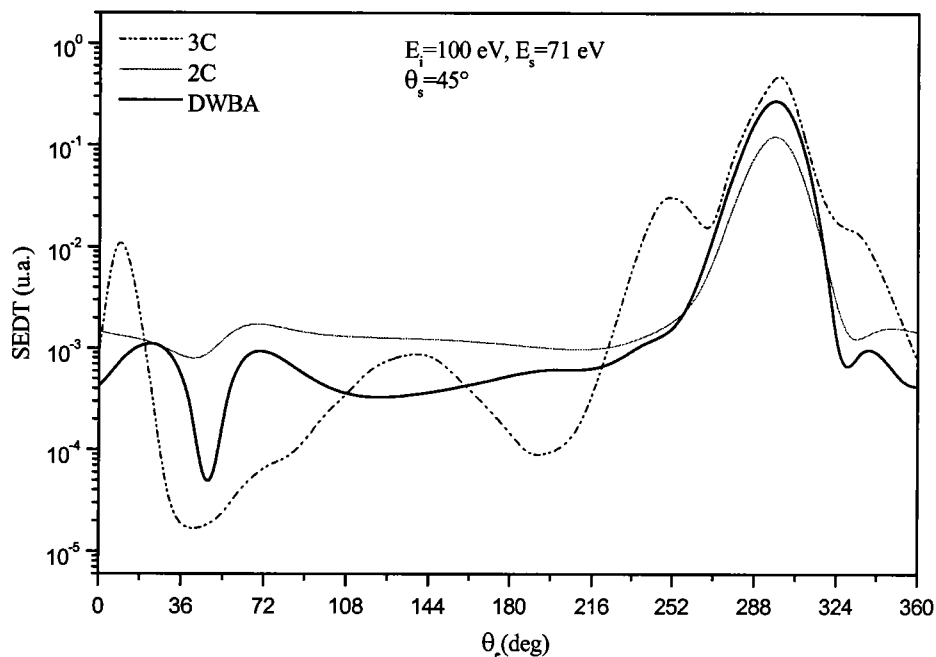


Figure 8 : Variation de la $SEDt$ en fonction de l'angle d'éjection, pour des énergies d'incidence $E_i=100$ eV et d'éjection $E_s=71$ eV pour un angle de diffusion fixé à 45°

Sur la figure (8), nous représentons la variation de la section efficace triplement différentielle en fonction de l'angle d'éjection, dans une géométrie asymétrique pour une valeur d'énergie d'incidence égale à 100 eV, avec une énergie d'éjection égale à 23.6 eV et pour un angle de diffusion fixé à 45° . Dans la comparaison des trois résultats théoriques, on remarque une légère différence avec les résultats obtenus par Hafid et al (1994) en utilisant le modèle (3C), et ceux obtenus par nous même en employant les deux modèles respectifs (2C) et 'DWBA'. Cette différence, au niveau de l'amplitude de diffusion, se situe au point maximum et correspond à la direction du transfert. On remarque également une différence importante au niveau du minimum situé à $\theta_e = \theta_s = 45^\circ$, à ce point spécifique l'amplitude de la section efficace triplement différentielle obtenue par le modèle (3C) de Hafid et al (1994), et notre calcul 'DWBA' est beaucoup plus petite que celle obtenue en appliquant le modèle (2C). Ceci peut être expliqué par le fait que les deux électrons du continuum ne peuvent pas sortir dans la même direction, à cause de leur interaction répulsive prise en compte dans le calcul de l'élément de transition de ces deux modèles.

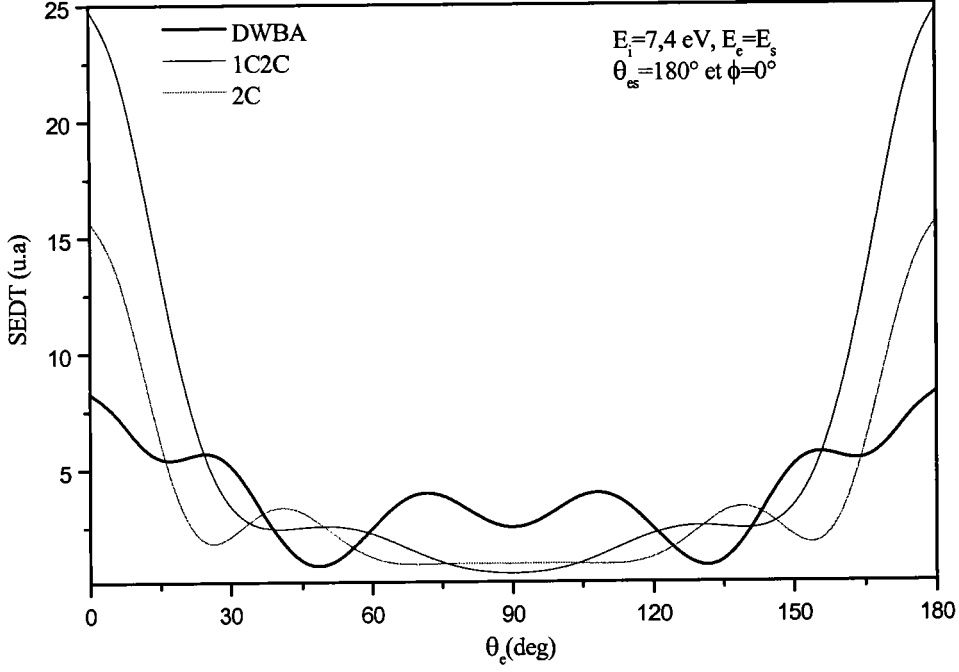


Figure 9 : Variation de la section efficace triplement différentielle de la simple ionisation du lithium en fonction de l'angle d'éjection pour $E_i = 7.4 \text{ eV}$, $E_e = E_s$ et $\theta_{es} = 180^\circ$

Sur la figure (9), nous présentons la variation de la section efficace triplement différentielle en fonction de l'angle d'éjection réalisée en géométrie coplanaire à $\theta_{es} = 180^\circ$, pour des énergies $E_e = E_s$. Dans le but d'étudier les effets liés aux corrélations des deux électrons dans le continuum aux faibles énergies, nous comparons ici les trois méthodes 'DWBA', '2C' et '1C2C'. Dans ce dernier modèle nous avons modifié le '2C' par l'introduction d'une onde coulombienne pour décrire l'électron incident. Contrairement aux autres modèles où les effets de l'écrantage dynamique sont ignorés, le modèle 'DWBA' donne une section efficace non nulle autour de l'angle $\theta_e = 90^\circ$. Ceci peut être expliqué par les effets de l'interaction répulsive des deux électrons, et qui sont dus dans notre calcul à la charge effective introduite dans le potentiel de distorsion de l'état final.

Conclusion :

Nous avons présenté dans cette première partie, les résultats théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation (e,2e) du lithium, pour une énergie d'incidence variant entre 7eV et 950 eV. Dans la présentation des premiers résultats, nous avons pu remarquer

l'importance des effets d'échange avec les électrons internes qui contribuent dans plusieurs situations à la détermination de la section efficace. Nous avons constaté dans la comparaison avec les mesures expérimentales, que l'approche des ondes distordues utilisée dans le calcul de l'élément de transition, qui est exacte en ce qui concerne les conditions asymptotiques liées à l'état final, est la mieux adaptée à l'étude de l'ionisation par impact électronique à faible énergie.

3.4.2 : Facteur d'asymétrie

Nous considérons maintenant une expérience d'ionisation (e,2e) du lithium initialement polarisé, par impact d'électron incident également polarisé, où les résultats seront présentés par le paramètre d'asymétrie associé à la section efficace triplement différentielle défini par la relation suivante :

$$A = \frac{\sigma^{(3)\uparrow\downarrow} - \sigma^{(3)\uparrow\uparrow}}{\sigma^{(3)\uparrow\downarrow} + \sigma^{(3)\uparrow\uparrow}} \quad (3.38)$$

Vu l'importance des termes d'échange dans la situation étudiée, la section efficace différentielle dans le cas de notre approche à quatre électrons, est donnée en fonctions de tous les termes d'échange possibles.

Elle est donnée, dans le cas de spin parallèle par :

$$\sigma^{(3)\uparrow\uparrow} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} \left\{ |f1 + g2 + h1 - f2 - g1 - h2|^2 \right\} \quad (3.39)$$

et dans le cas de spin antiparallèle par :

$$\sigma^{(3)\uparrow\downarrow} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} \left\{ \frac{1}{2} |f1 + g2 + h1 - f2 - g1 - h2|^2 + \frac{1}{2} |f1 + g1 + 2h3 - f2 - g2 - h1 - h2|^2 \right\} \quad (3.40)$$

Dans le cas d'un atome à un électron actif, ou d'un potentiel modèle (Klapisch 1971), ces expressions prennent les formes habituelles suivantes :

$$\sigma^{(3)\uparrow\uparrow} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} \left\{ |f1 - g1|^2 \right\} \quad (3.41)$$

et

$$\sigma^{(3)\uparrow\downarrow} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} \left\{ \frac{1}{2} |f1 - g1|^2 + \frac{1}{2} |f1 + g1|^2 \right\} \quad (3.42)$$

Les conditions cinématiques prises dans le calcul du facteur d'asymétrie A représentent des situations typiques pour lesquelles des expériences et des résultats théoriques récents existent. Dans le calcul de la section efficace triplement différentielle nécessaire pour déterminer le facteur d'asymétrie, nous avons négligé seulement les termes de «capture» $h1$, $h2$ et $h3$ qui sont comme nous l'avons mentionné précédemment petits et négligeables dans toutes les circonstances.

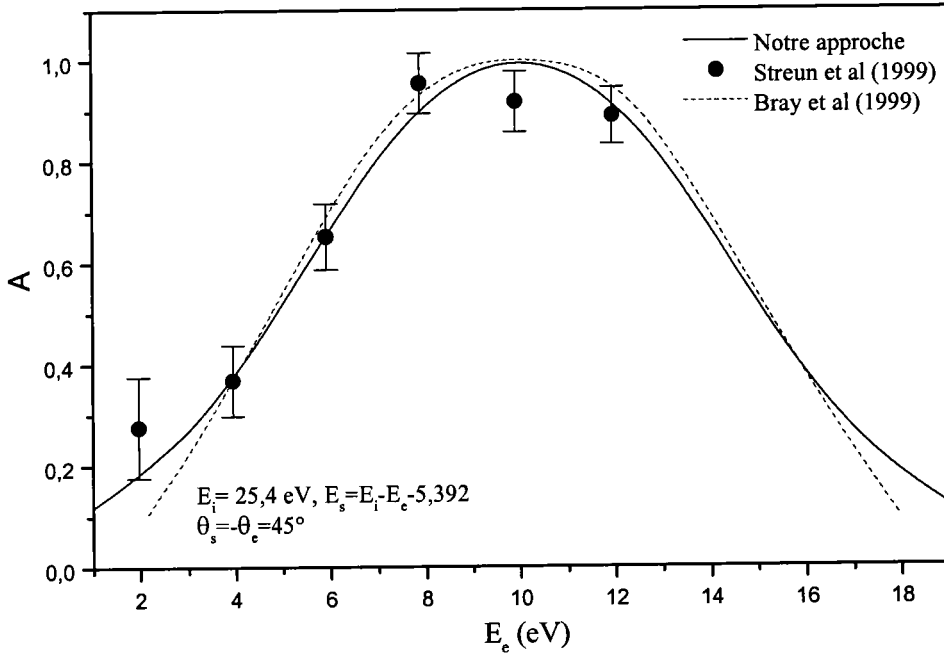


Figure 10 : Variation du facteur d'asymétrie associé à la SEDT de l'ionisation simple du lithium en fonction de l'énergie d'éjection E_e pour une énergie d'incidence $E_i=25,4$ eV et $\theta_s = -\theta_e = 45^\circ$

Nous présentons sur la figure (10) la variation de A en fonction de l'énergie d'éjection, pour des angles de diffusion et d'éjection sont fixés respectivement à 45° et à -45° . Le maximum théorique du facteur d'asymétrie qui est égal à 1, se trouve comme prévu pour une valeur d'énergie égale à $E_e = E_s = 10$ eV, car dans cette direction $k_e = k_s$, implique $g1=f1$, $g2=f2$ et $h2=h1$, ce qui donne :

$$\sigma^{(3)\uparrow\uparrow} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} \left\{ f1 + g2 + h1 - f2 - g1 - h2 \right\}^2 = 0 \quad (3.43)$$

Dans le cas d'un processus d'ionisation (e,2e) où seul le cas singulet est observé, on trouve une valeur de $A=1$, alors que pour un processus purement triplet $A=-1/3$. Ce fait ne dépend pas de la procédure utilisée ni de la qualité de la fonction d'onde employée. Dans le cas d'une collision

symétrique le processus triplet est nul, puisque les deux électrons sortants sont indiscernables. Le principe de Pauli exige que leurs spins soient antiparallèles, ce qui implique une collision purement singulet. Le désaccord au point spécifique de la valeur expérimentale $A \cong 0.9$ qu'on remarque sur la figure (10), peut être expliqué par l'absence du deuxième terme du développement de Born dans l'élément de transition. En ce qui concerne les autres régions de la même figure, on voit bien que nos résultats obtenus avec des efforts de calculs relativement raisonnables par rapport aux résultats obtenus par la méthode 'CCC', améliorent l'accord avec l'expérience, et particulièrement dans la situation asymétrique $E_e = 2 \text{ eV}$ où l'effet de distorsion agit fortement sur l'électron éjecté.

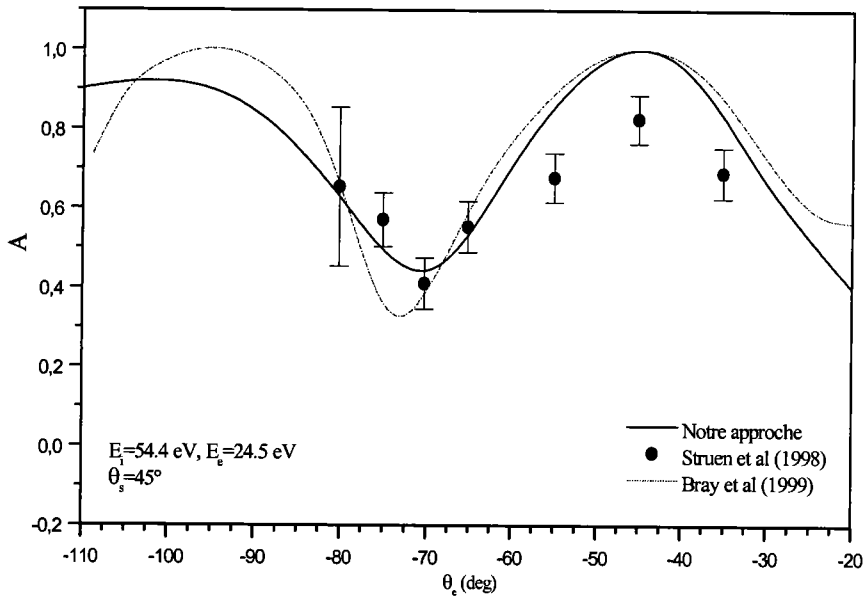


Figure 11 : Variation de A le facteur d'asymétrie de $(e,2e)$ du lithium en fonction de l'angle de l'électron éjecté pour une énergie d'incidence $E_i = 54,4 \text{ eV}$ et $E_e = 24,5 \text{ eV}$ avec $\theta_s = 45^\circ$

Sur la figure (11), nous présentons la variation du paramètre d'asymétrie en fonction de l'angle d'éjection pour une énergie d'incidence égale à 54.4 eV où les deux électrons sortent avec des énergies égales. Nous observons également une amélioration considérable de nos résultats, comparés à ceux obtenus par Bray et al (1999). Nous remarquons aussi dans la comparaison avec les mesures expérimentales de Streun et al (1998), que le minimum expérimental situé au point $\theta_e = -70^\circ$ est bien respecté par nos résultats, et que le désaccord de tous les résultats théoriques au maximum expérimental $A=1$ situé en l'angle d'éjection -45° , est dû probablement à la l'écartement des termes d'ordre supérieurs du développement de Born, dans le calcul de l'élément de transition (Ch1).

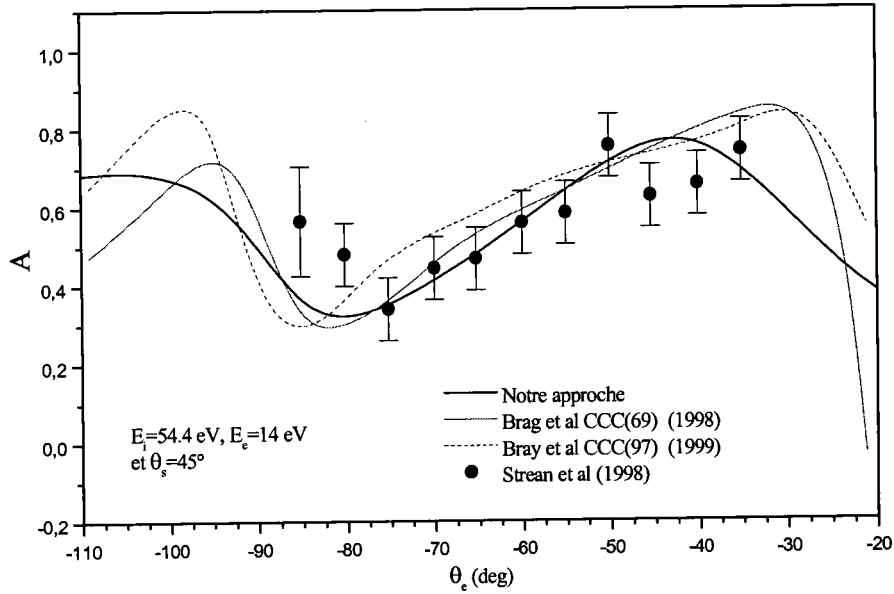


Figure 12 : Variation de A le facteur d'asymétrie de $(e,2e)$ du lithium en fonction de l'angle de l'électron éjecté pour une énergie d'incidence $E_i=54.4 \text{ eV}$ et $E_e=14 \text{ eV}$ avec $\theta_s = 45^\circ$

Sur la figure (12), nous montrons la variation de A en fonction de l'angle d'éjection. Nos résultats obtenus par l'approche 'DWBA' pour une énergie d'éjection $E_e=14 \text{ eV}$, présentent la même allure que ceux obtenus par Bray et al (1999), avec une petite amélioration au niveau du minimum expérimental situé à $\theta_e = -75^\circ$.

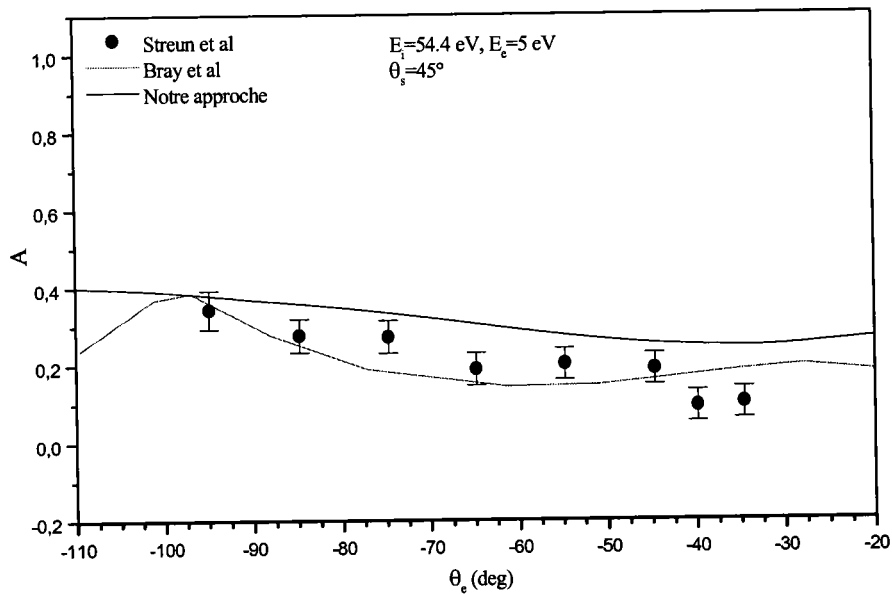


Figure 13 : Variation de A en fonction de l'angle de l'électron éjecté pour une énergie d'incidence $E_i=54.4 \text{ eV}$ et $E_e=5 \text{ eV}$ avec $\theta_s = 45^\circ$ de l'ionisation simple du lithium.

Sur la figure (13), nous présentons la variation de A en fonction de l'angle d'éjection, pour une énergie d'incidence égale à 54 eV et une énergie d'éjection de 5 eV . On remarque que notre courbe a une variation lente par rapport à l'angle d'éjection et son allure ne présente pas les mêmes structures de la courbe représentant le résultat théorique de Bray et al (1999). Les points expérimentaux donnés par Streun et al (1998) sont situés entre les deux courbes représentant les deux calculs théoriques, à l'exception des points autour de $\theta_e = -35^\circ$.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'étude théorique de l'ionisation simple (e,2e) de l'atome du lithium à trois électrons actifs, par impact électronique. Nous avons commencé dans un premier temps par décrire l'état initial et final du système collisionnel qui est composé dans notre cas de quatre électrons. Ensuite nous avons développé le calcul de la section efficace triplement différentielle dans un domaine d'énergie très grand, en introduisant pour la première fois les différents termes d'échange possibles dans l'élément de transition et nous avons montré que les termes d'échange correspondant à une capture de l'électron incident restent très faibles dans tous les domaines énergétiques, par contre dans plusieurs situations, la prise en compte directe des électrons du cœur modifie sensiblement les résultats, et qu'aux faibles énergies les résultats sont améliorés par l'introduction de la distorsion.

Chapitre 4

Ionisation (e,2e) de la molécule diatomique Li_2 par impact d'électron rapide

4.1 : Introduction

Après avoir étudié l'ionisation du lithium atomique en utilisant les ondes partielles, nous étendons dans ce chapitre, l'application de cette approche à l'étude de l'ionisation (e,2e) du lithium moléculaire Li_2 , pour lequel des expériences d'ionisation peuvent être envisagées dans un proche avenir. Vu la complexité du système diatomique, nous allons considérer la molécule Li_2 comme une cible à deux électrons actifs et nous contenter d'une description modélisée du potentiel dû aux électrons du cœur ($1s^2$) de chaque centre Li. Nous allons dans ce qui suit, présenter notre procédure de détermination des fonctions d'onde des états électroniques fondamentaux de Li_2^+ et Li_2 , sous forme de combinaisons de fonctions de Slater centrées sur chaque noyau du système moléculaire. Cette présentation des fonctions d'onde, nous permet d'appliquer notre approche des ondes partielles, développée dans les chapitres précédents, aux systèmes moléculaires à deux centres.

Après la vérification de la validité de notre approche par la reproduction des résultats existants pour la molécule H_2 , nous présentons des résultats théoriques concernant quelques situations favorables de l'ionisation (e,2e) de la molécule Li_2 , par impact d'électron rapide, qui seront utiles pour les premières expériences à venir.

4.2 : Détermination des fonctions d'onde électroniques

Avant de présenter notre procédure de détermination de la section efficace différentielle de (e,2e) d'un système moléculaire, nous allons dans un premier temps déterminer les fonctions d'onde électroniques dans le cadre de l'approximation de Born Oppenheimer, qui vu le rapport

de masses des noyaux et des électrons, permet la séparation des mouvements de ces derniers et l'obtention d'un hamiltonien électronique où la distance internucléaire joue le rôle de paramètre, ainsi permettant la détermination de l'énergie électronique du système pour chaque distance internucléaire.

4.2.1 : Système diatomique monoélectronique Li_2^+

Considérons l'hamiltonien monoélectronique du Li_2^+ pour une distance internucléaire donnée, qu'on écrit en unité atomique par :

$$H = -\frac{\nabla^2}{2} + V_m(r_a) + V_m(r_b), \quad (4.1)$$

défini dans le repère lié à la molécule dont l'axe internucléaire coïncide avec l'axe OZ . r_a , r_b représentent les distances respectives entre l'électron et les deux noyaux a et b. $V_m(r)$ représente le potentiel modèle d'interaction entre l'électron de valence et le cœur Li^+ donné sous la forme suivante :

$$V_m(r) = -\frac{1}{r} - (Z_N - 1) \frac{e^{-\alpha r}}{r} - \beta e^{-\gamma r}, \quad (4.2)$$

dont le premier terme représente l'interaction coulombienne et le deuxième terme représente la correction qui tient compte des électrons du cœur proposé par Klapisch (1971). Pour le lithium, on a :

$$Z_N = 3, \alpha = 7.9, \beta = 10.3 \text{ et } \gamma = 3.893. \quad (4.3)$$

Pour le besoin de notre modèle du continuum électronique dans l'élément de transition (équ 4.36), nous écrivons la fonction d'onde d'essai ψ , sous forme d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques, sur les deux centres a et b, qui satisfait les propriétés de symétrie de l'état $^2\Sigma_g$:

$$\psi = c_1(e^{-\alpha_1 r_a} + e^{-\alpha_1 r_b}) + c_2(e^{-\alpha_2 r_a} + e^{-\alpha_2 r_b}) + c_3(r_a e^{-\alpha_2 r_a} + r_b e^{-\alpha_2 r_b}) \quad (4.4)$$

$$\psi = \sum_{i=1}^3 c_i \varphi_i. \quad (4.5)$$

Où les coefficients c_i et les paramètres α_i seront déterminés par la procédure variationnelle.

En employant les coordonnées elliptiques :

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{r_a + r_b}{\rho} & 1 \leq \lambda \leq \infty, \\
\mu &= \frac{r_a - r_b}{\rho} & -1 \leq \mu \leq 1, \\
\varphi & & 0 \leq \varphi \leq 2\pi.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Où ρ représente la distance internucléaire.

Nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\varphi_1(\lambda, \mu, \varphi) &= e^{-\beta_1 \lambda} (e^{-\beta_1 \mu} + e^{\beta_1 \mu}), \\
\varphi_2(\lambda, \mu, \varphi) &= e^{-\beta_2 \lambda} (e^{-\beta_2 \mu} + e^{\beta_2 \mu}), \\
\varphi_3(\mu, \lambda, \varphi) &= \frac{\rho}{2} e^{-\beta_2 \lambda} \left\{ \lambda (e^{-\beta_2 \lambda} + e^{\beta_2 \mu}) + \mu (e^{-\beta_2 \lambda} - e^{\beta_2 \mu}) \right\}.
\end{aligned} \tag{4.7}$$

La fonction d'onde (équ 4.5) est définie avec de nouveaux paramètres variationnels qu'on note par :

$$\beta_1 = \frac{\alpha_1}{2} \rho \text{ et } \beta_2 = \frac{\alpha_2}{2} \rho. \tag{4.8}$$

L'expression de l'hamiltonien monoélectronique en coordonnées elliptiques devient :

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{2}{\rho^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu} \right] - \frac{4}{\rho} \left(\frac{\lambda}{\lambda^2 - \mu^2} \right) \\
&+ \frac{2(Z_N - 1)}{\rho(\lambda^2 - \mu^2)} \left(\lambda (e^{-\omega_1 \mu} + e^{\omega_1 \mu}) e^{-\omega_1 \lambda} + \mu (e^{-\omega_1 \mu} - e^{\omega_1 \mu}) e^{-\omega_1 \lambda} \right) \\
&+ \frac{2}{\rho} \left(\omega_2 (e^{-\omega_3 \mu} + e^{\omega_3 \mu}) e^{-\omega_3 \lambda} \right)
\end{aligned} \tag{4.9}$$

où $\omega_1 = \frac{\alpha \rho}{2}$, $\omega_2 = \frac{\beta \rho}{2}$ et $\omega_3 = \frac{\gamma \rho}{2}$ avec α , β et γ sont les paramètres donnés dans l'équation (4.3).

En remplaçant la fonction d'essai par son expression (4.5) dans l'équation suivante :

$$H|\psi\rangle = E_\psi |\psi\rangle, \tag{4.10}$$

on obtient :

$$H \sum_j c_j |\varphi_j\rangle = E_\psi \sum_j c_j |\varphi_j\rangle. \tag{4.11}$$

En multipliant à gauche par $\langle \varphi_i |$ nous obtenons pour un (i) donné :

$$\sum_j c_j \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle = E_\psi \sum_j c_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle, \tag{4.12}$$

En considérant toutes les valeurs de (i) , nous obtenons un système d'équations algébriques qui peut être mis sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} \langle \varphi_i | H | \varphi_j \rangle \\ c1 \\ c2 \\ c3 \end{pmatrix} = E_\psi \begin{pmatrix} \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle \\ c1 \\ c2 \\ c3 \end{pmatrix}. \quad (4.13)$$

Le calcul de E_ψ , se ramène donc à diagonaliser une matrice carrée qui est ici d'ordre 3. Les éléments de matrice de S et de H (Annexe E) sont obtenus en utilisant les deux intégrales de base I et J données par :

$$I(\alpha, n) = \int_1^\infty \lambda^n e^{-\alpha \lambda} d\lambda, \quad (4.14)$$

$$J(\beta, n) = \int_{-1}^1 \mu^n e^{-\beta \mu} d\mu. \quad (4.15)$$

Après la détermination de l'énergie minimale et les paramètres variationnels qui correspondent à l'état fondamental du système moléculaire, et avant de passer à l'étude de la molécule Li_2^+ , nous avons d'abord testé nos calculs sur la molécule H_2^+ , en remplaçant dans l'hamiltonien H (équation 4.1) la charge du noyau par $Z_N = 1$ et $\alpha = \beta = \gamma = 0$. Le minimum est obtenu pour une distance internucléaire $\rho = 2.001$ (*u.a*) et pour une énergie totale $E_T = -0.59084$ (*u.a*), des valeurs qui sont en accord avec les résultats expérimentaux. Pour l'état fondamental de la molécule Li_2^+ , le minimum est obtenu pour une distance internucléaire $\rho = 6.2$ (*u.a*) et pour une énergie totale $E_T = -0.2151$ (*u.a*).

4.2.2 : Système diatomique biélectronique Li_2

Considérons le hamiltonien de la molécule Li_2 donné sous la forme suivante :

$$H_T = H_1 + H_2 + \frac{1}{r_{12}} + V_{CC} = H_{ele} + V_{CC}, \quad (4.16)$$

H_i ($i=1,2$) est l'hamiltonien monoélectronique correspondant à l'électron (i) donné par l'équation (4.1). Le terme $\frac{1}{r_{12}}$ représente l'interaction électron-électron et $V_{CC}(\rho)$ désigne

l'interaction cœur-cœur qui est un terme diagonal défini par la relation suivante :

$$V_{CC}(\rho) = \frac{1}{\rho} + f(\rho), \quad (4.17)$$

La contribution du deuxième terme sera négligée ($\frac{1}{\rho} \gg f(\rho)$).

L'équation différentielle décrivant ce système dans son état fondamental est :

$$H_T \Psi(1,2) = E_T \Psi(1,2). \quad (4.18)$$

Où $\Psi(1,2)$ représente la fonction d'essai, qui est donnée dans le cadre de l'approximation de particules indépendantes sous forme d'un produit de deux orbitales, décrivant chacune un électron comme étant indépendant de l'autre.

Elle est donnée par :

$$\Psi(1,2) = \psi(1)\psi(2) \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)). \quad (4.19)$$

On rappelle que la fonction d'onde monoélectronique désignée par ψ , est une combinaison linéaire des orbitales atomiques sur les deux centres **a** et **b**, avec de nouveaux paramètres variationnels α'_i ($i=1,2$), elle est donnée par :

$$\psi = c'_1(e^{-\alpha'_1 r_a} + e^{-\alpha'_1 r_b}) + c'_2(e^{-\alpha'_2 r_a} + e^{-\alpha'_2 r_b}) + c'_3(r_a e^{-\alpha'_2 r_a} + r_b e^{-\alpha'_2 r_b}) = \sum_{i=1}^3 c'_i \phi_i, \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \psi(1)\psi(2) = & c_1'^2 \phi_1(1)\phi_1(2) + c_1' c_2' (\phi_1(1)\phi_2(2) + \phi_2(1)\phi_1(2)) \\ & + c_1' c_3' (\phi_1(1)\phi_3(2) + \phi_3(1)\phi_1(2)) + c_2'^2 \phi_2(1)\phi_2(2) \\ & + c_2' c_3' (\phi_2(1)\phi_3(2) + \phi_3(1)\phi_2(2)) + c_3'^2 \phi_3(1)\phi_3(2). \end{aligned} \quad (4.21)$$

qu'on peut réécrire sous la forme :

$$\Psi(1,2) = \sum_{i=1}^6 A_i \Phi_i(1,2). \quad (4.22)$$

Par une approche semblable à celle utilisée pour la molécule Li_2^+ , nous déterminons les six coefficients A_i et les deux paramètres α'_i par la méthode variationnelle, qui se réduit dans ce cas à la résolution de l'équation matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A1 \\ A2 \\ A3 \\ A4 \\ A5 \\ A6 \end{pmatrix} = E_T \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A1 \\ A2 \\ A3 \\ A4 \\ A5 \\ A6 \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

4.2.2.1 : Le terme d'interaction électron-électron

L'énergie d'interaction entre les deux électrons actifs de la molécule est donnée sous la forme suivante :

$$\langle \frac{1}{r_{12}} \rangle = \langle \Psi(1,2) | \frac{1}{r_{12}} | \Psi(1,2) \rangle. \quad (4.24)$$

Nous utilisons le développement de Neumann (1978) de $\frac{1}{r_{12}}$ en fonction des coordonnées elliptiques :

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{2}{\rho} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} P_{\ell}^m(\lambda_1) Q_{\ell}^m(\lambda_2) Y_{\ell}^m(\mu_1) Y_{\ell}^{-m}(\mu_2) e^{im(\varphi_1 - \varphi_2)}, \lambda_1 < \lambda_2. \quad (4.25)$$

Où $P_{\ell}^m(\lambda_1)$ et $Q_{\ell}^m(\lambda_2)$ sont respectivement les fonctions de Legendre associées de premier et du second type, et les $Y_{\ell}^m(\mu_i)$ sont les harmoniques sphériques.

En posant

$$\phi_p^q(\beta, \delta) = \lambda^p e^{-\beta\lambda} \mu^q e^{-\delta\mu}. \quad (4.26)$$

Les expressions des fonctions données dans l'équation (4.7) deviennent

$$\begin{aligned} \phi_1(\beta_1) &= e^{-\beta_1\lambda} (e^{-\beta_1\mu} + e^{\beta_1\mu}) = \phi_0^0(\beta_1, \beta_1) + \phi_0^0(\beta_1, -\beta_1), \\ \phi_2 &= \phi_1(\beta_2), \\ \phi_3(\beta_2) &= \frac{\rho}{2} e^{-\beta_2\lambda} \{ \lambda (e^{-\beta_2\mu} + e^{\beta_2\mu}) + \mu (e^{-\beta_2\mu} - e^{\beta_2\mu}) \} \\ &= \frac{\rho}{2} (\phi_0^1(\beta_2, \beta_2) + \phi_0^1(\beta_2, -\beta_2) + \phi_1^0(\beta_2, \beta_2) + \phi_1^0(\beta_2, -\beta_2)). \end{aligned} \quad (4.27)$$

En suivant la méthode de F.E Harris (1960), nous écrivons l'intégrale :

$$\begin{aligned} J(1,2,3,4) &= \int \phi_{p1}^{q1}(\beta_1, \delta_1, 1) \phi_{p2}^{q2}(\beta_2, \delta_2, 2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{p3}^{q3}(\beta_3, \delta_3, 2) \phi_{p4}^{q4}(\beta_4, \delta_4, 1) d\Omega_1 d\Omega_2 \\ &= \frac{\rho^5}{8} \pi^2 \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \int_1^{\infty} d\lambda_2 \frac{1}{(\lambda_2^2 - 1) [P_{\ell}^m(\lambda_2)]^2} \Gamma_1 x \Gamma_2, \end{aligned} \quad (4.28)$$

avec

$$\Gamma_1 = \begin{bmatrix} \int_1^{\lambda_2} \lambda^{(2+p_1+p_2)} d\lambda e^{-(\beta_1+\beta_2)\lambda} P_\ell^0(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu \mu^{(q_1+q_2)} e^{-(\delta_1+\delta_2)\mu} P_\ell^0(\mu) \\ - \int_1^{\lambda_2} \lambda^{(p_1+p_2)} d\lambda e^{-(\beta_1+\beta_2)\lambda} P_\ell^0(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu \mu^{(2+q_1+q_2)} e^{-(\delta_1+\delta_2)\mu} P_\ell^0(\mu) \end{bmatrix}, \quad (4.29)$$

$$\Gamma_2 = \begin{bmatrix} \int_1^{\lambda_2} \lambda^{(2+p_3+p_4)} d\lambda e^{-(\beta_3+\beta_4)\lambda} P_\ell^0(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu \mu^{(q_3+q_4)} e^{-(\delta_3+\delta_4)\mu} P_\ell^0(\mu) \\ - \int_1^{\lambda_2} \lambda^{(p_3+p_4)} d\lambda e^{-(\beta_3+\beta_4)\lambda} P_\ell^0(\lambda) \int_{-1}^1 d\mu \mu^{(2+q_3+q_4)} e^{-(\delta_3+\delta_4)\mu} P_\ell^0(\mu) \end{bmatrix}. \quad (4.30)$$

Sur les deux tableaux suivants, nous présentons les valeurs de l'énergie à la distance d'équilibre ρ_e de H_2 et Li_2 ainsi que les coefficients et les paramètres variationnels de la fonction électronique des systèmes diatomiques H_2 , Li_2 , H_2^+ et Li_2^+ .

Tableau 1 : Energie, coefficients et paramètres variationnels de H_2 et H_2^+ pour $\rho_e = 1.4$ (u.a)

Molécules	Energie totale en (u.a)	Coefficients	Paramètres
H_2	$E_T = -1.13475$	$A1 = -3.226$ $A2 = 3.206$ $A3 = -0.3757$ $A4 = -3.062$ $A5 = 0.3599$ $A6 = -0.0432$	$\alpha_1' = 1.1$ $\alpha_2' = 0.9$
H_2^+	$E_T = -0.5602$	$c1 = 0.82149$ $c2 = -0.34924$ $c3 = -0.34713$	$\alpha_1 = 1.617$ $\alpha_2 = 3.175$

Tableau 2 : Energie, coefficients et paramètres variationnels de Li_2 et Li_2^+ pour $\rho_e = 5.23$ (u.a)

Molécules	Energie totale en (u.a)	Coefficients	Paramètres
Li_2	$E_T = -0.3964$	$A1 = 0.0826$ $A2 = 0.02823$ $A3 = -0.0316$ $A4 = -0.00682$ $A5 = -0.00131$ $A6 = 0.00756$	$\alpha_1' = 2.7$ $\alpha_2' = 0.7$
Li_2^+	$E_T = -0.20720$	$c1 = 0.72067$ $c2 = -1.02521$ $c3 = -0.0000261$	$\alpha_1 = 0.8$ $\alpha_2 = 1.175$

Ces résultats sont en accord avec des résultats de calculs de même niveau de satisfaction (Mc lean et al. 1960).

Sur la figure 4.1, nous présentons les courbes de potentiel de l'état fondamental $^1\Sigma_g$ de Li_2 et de l'état fondamental $^2\Sigma_g$ de Li_2^+ . L'objectif de notre travail est d'étudier la transition qui se produit entre ces deux états dans une expérience d'ionisation par impact électronique.

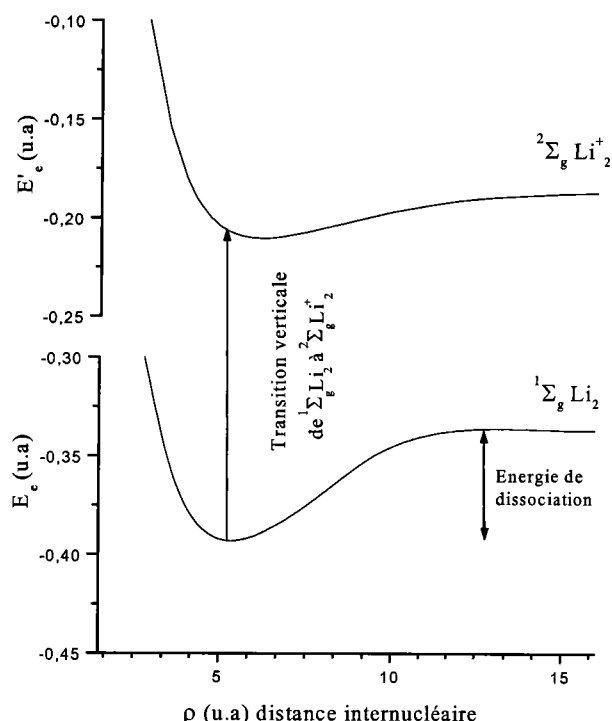


Figure 4.1 : Courbes de potentiel des états fondamentaux de la molécule Li_2 et de son ion Li_2^+ .

4.3 : Etude de l'ionisation simple des molécules diatomiques à deux électrons actifs

Comme nous l'avons précisé ci-dessus, l'ionisation de Li_2 par impact électronique est supposée s'effectuer très rapidement par rapport au mouvement du noyau dont nous négligeons l'influence (Weck et al 2000). Ceci implique une transition verticale (ρ_e fixe) entre deux états dont l'écart énergétique est donné par :

$$E_{Io} = E'_e(Li_2^+) - E_e(Li_2) = -0.20721 - (-0.3964)$$

$$E_{Io} = 0.1894 \text{ (u.a)} \quad (4.31)$$

Nous admettons également que durant l'ionisation, l'orientation de la molécule ne varie pas, et que la plupart des événements se produisent à la distance d'équilibre ρ_e de la cible.

Dans l'état initial, le système est constitué d'une cible moléculaire Li_2 considérée comme un système à deux électrons actifs et d'un électron incident rapide d'énergie E_i et de vecteur d'onde $\vec{k}_i$. Dans un repère du laboratoire (figure 4.2). On désigne par $\vec{r}_0$ la position de cet électron par rapport au centre de masse du système confondu avec l'origine du repère.

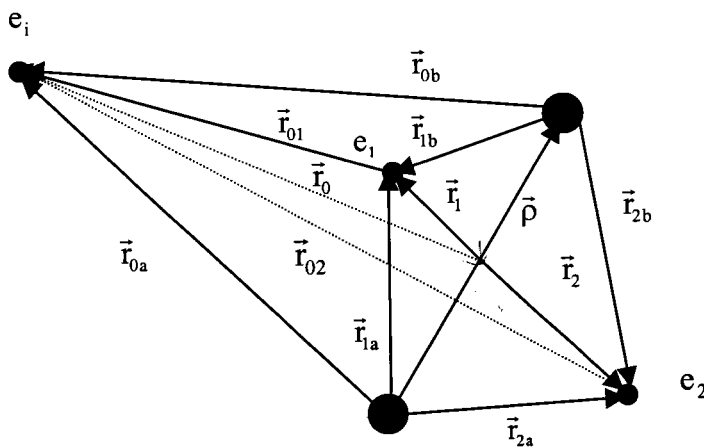


Figure 4.2 : Les vecteurs positions des trois électrons e , e_1 et e_2 et les deux noyaux a et b

Sur la figure 4.2, nous présentons les positions relatives des trois électrons (l'électron incident et les deux électrons liés) par rapport aux deux noyaux (a) et (b) de la molécule Li_2 .

$$\begin{aligned}\vec{r}_{12} &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \\ \vec{r}_{0a} &= \vec{r}_0 + \frac{\vec{\rho}}{2}, \quad \vec{r}_{0b} = \vec{r}_0 - \frac{\vec{\rho}}{2} \\ \vec{r}_{1a} &= \vec{r}_1 - \frac{\vec{\rho}}{2}, \quad \vec{r}_{1b} = \vec{r}_1 + \frac{\vec{\rho}}{2} \\ \vec{r}_{2a} &= \vec{r}_2 - \frac{\vec{\rho}}{2}, \quad \vec{r}_{2b} = \vec{r}_2 + \frac{\vec{\rho}}{2}\end{aligned}\tag{4.32}$$

4.3.1 : Fonctions d'état électronique initial et final du système

L'état initial du système sera décrit par un produit approprié d'une onde plane $\frac{e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$ décrivant

l'électron incident et de la fonction d'onde de la cible $\Psi_{Li_2}(r_1, r_2)$ donnée par l'équation (4.22) :

$$\Psi_i^e = A(\Psi_{Inc}(\vec{r}_0)\Psi_{Li_2}(r_1, r_2)), \quad (4.33)$$

Où A représente l'opérateur d'antisymétrisation.

L'état final du système est composé d'un électron diffusé de vecteur d'onde $\vec{k}_s$, d'un électron éjecté de vecteur d'onde $\vec{k}_e$ et d'un ion moléculaire Li_2^+ , dont l'état électronique est décrit par un produit antisymétrisé d'une fonction électronique $\Psi_{Li_2^+}(r_2)$ de l'ion restant (équ 4.4), d'une

onde plane $\frac{e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}$ pour l'électron diffusé rapide et d'une fonction d'onde distordue $\chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_1)$

attribuée à l'électron éjecté supposé lent :

$$\Psi_f^e = A(\Psi_{diff}(\vec{r}_0) \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \Psi_{Li_2^+}(r_2)), \quad (4.34)$$

La section efficace quintuplement différentielle s'écrira alors (Weck et al 1999)

$$\sigma^{(5)} = \frac{d^5\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \frac{k_s k_e}{4\pi} \int d\Omega_\rho |T_{fi}^e(\theta_\rho, \varphi_\rho)|^2 \quad (4.35)$$

Où nous avons considéré que toutes les orientations de la molécule données par θ_ρ , φ_ρ sont équiprobables, et égales à $\frac{1}{4\pi}$.

$$T_{fi}^e = \langle \Psi_f^e | V | \Psi_i^e \rangle \quad (4.36)$$

V est le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible moléculaire, il est donné par :

$$V = V_1 + V_2 = \frac{1}{r_{01}} + V_m(r_{0a}) + \frac{1}{r_{02}} + V_m(r_{0b}) \quad (4.37)$$

$$V = \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} - \frac{1}{r_{0a}} - \frac{1}{r_{0b}} - (Z_N - 1) \left(\frac{e^{-\alpha r_{0a}}}{r_{0a}} + \frac{e^{-\alpha r_{0b}}}{r_{0b}} \right) - \beta (e^{-\gamma r_{0a}} + e^{-\gamma r_{0b}})$$

Où α, β et γ sont les paramètres donnés par l'équation (4.3).

4.3.2 : Calcul de l'élément de transition

L'élément de transition dans le cas d'une ionisation (e,2e) d'une cible à deux électrons actifs est donné par (équ (2.23)) :

$$|T_{fi}^e|^2 = \frac{1}{2} |2f - g - h|^2 + \frac{3}{2} |g - h|^2, \quad (4.38)$$

Les notations f , g et h (équations (2.19), (2.20) et (2.21)) désignent respectivement les amplitudes directe, d'échange et de «capture». Dans le cas d'impact par électron incident très rapide (quelques KeV) les termes g et h sont négligeables et

$$f = \left\langle \Psi_{Li_2^+}^e(r_2) \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \psi_{diff}(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \middle| V \middle| \Psi_{Li_2}^e(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_{inc}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \right\rangle. \quad (4.39)$$

En remplaçant V par son expression (équ 4.37), on obtient donc :

$$\begin{aligned} f = & \left\langle \chi_e(1) e^{i\vec{k}_s \vec{r}_0} \Psi_{Li_2^+}^e \middle| -\frac{1}{r_{0a}} - \frac{1}{r_{0b}} + \frac{1}{r_{0l}} + \frac{1}{r_{02}} \middle| e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \Psi_{Li_2}^e \right\rangle \\ & - (Z_N - 1) \left\langle \chi_e(1) e^{i\vec{k}_s \vec{r}_0} \Psi_{Li_2^+}^e \middle| \frac{e^{-\alpha r_{0a}}}{r_{0a}} + \frac{e^{-\alpha r_{0b}}}{r_{0b}} \middle| e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \Psi_{Li_2}^e \right\rangle \\ & - \beta \left\langle \chi_e(1) e^{i\vec{k}_s \vec{r}_0} \Psi_{Li_2^+}^e \middle| e^{-\gamma r_{0a}} + e^{-\gamma r_{0b}} \middle| e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \Psi_{Li_2}^e \right\rangle. \end{aligned} \quad (4.40)$$

Et puis les fonctions d'onde de l'état lié par leurs expressions :

$$\Psi_{Li_2^+}^e = \sum_{j=1}^3 c_j \phi_j \quad (4.41)$$

$$\Psi_{Li_2}^e = \sum_{j=1}^6 A_j \Phi_j(1,2)$$

En utilisant la relation de Bethe :

$$\int \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{|\vec{r} - \vec{\rho}|} d\vec{r} = 4\pi \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{\rho})}{k^2} \quad (4.42)$$

l'élément de transition entre l'état initial et l'état final devient :

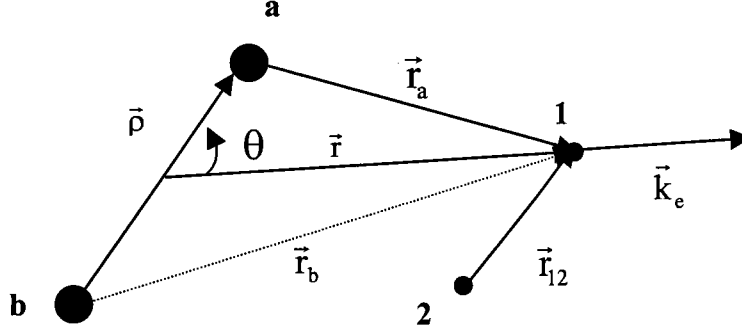
$$\begin{aligned} f = 4\pi \left\langle \Psi_{Li_2^+}^e(\vec{r}_2) \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| \frac{(e^{i\vec{k} \vec{r}_1} + e^{i\vec{k} \vec{r}_2})}{k^2} \right. \\ \left. - (e^{i\vec{k} \vec{\rho}/2} + e^{-i\vec{k} \vec{\rho}/2}) \left[\frac{1}{k^2} + \frac{(Z_N - 1)}{(k^2 + \alpha^2)} + \frac{\beta}{(k^2 + \alpha^2)^2} \right] \middle| \Psi_{Li_2}^e(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \end{aligned} \quad (4.43)$$

avec $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$

4.3.3 : Application de l'approximation 'DWBA' aux systèmes diatomiques

Pour appliquer notre procédure des ondes partielles, présentée dans les chapitres précédents, à la description de l'électron éjecté d'une cible moléculaire, nous adoptons le modèle d'atomes

séparés et nous admettons que le potentiel dans lequel se déplace l'électron éjecté peut être approché par un potentiel moyen radial centré sur chacun des noyaux du système.



La première difficulté essentielle du traitement, consiste en l'évaluation de la contribution à deux centres de types :

$$\left\langle r_a^n e^{-ar_a} + r_b^n e^{-ar_b} \left| e^{i\vec{k}\vec{r}} \right| \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}) \right\rangle \quad (4.44)$$

et

$$\left\langle r_a^n e^{-ar_a} + r_b^n e^{-ar_b} \left| \chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}) \right. \right\rangle \quad (4.45)$$

Avec $n=0$ ou 1 (voir annexe F).

$\chi_e(\vec{k}_e, \vec{r})$ représente la fonction d'onde de l'électron éjecté dans le champ des deux centres Li^+ et l'électron lié. Sa solution est obtenue par un développement en ondes partielles sur une base de fonctions sphéroïdales (cylindriques) solutions de l'équation de Schrödinger de Li^+ , mais l'application de cette solution ne paraît pas être, pour le moment, réaliste vu la difficulté de calculs. Nous allons donc adopter les modèles de continuum à deux centres proposé par Motassim et al (1999) et Weck et al (2000) basé sur la séparation des deux centres de la molécule. Ainsi, en adaptant la représentation en ondes partielles nous écrivons :

$$\chi_e(\vec{k}_e, \vec{r}) = \frac{(4\pi)}{(2\pi)^{3/2}} P \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{i\Delta_{\ell}} i^{\ell} \frac{F_{\ell}(k_e, r_d)}{kr_d} Y_{\ell,m}^*(\hat{k}_e) Y_{\ell,m}(\hat{r}_d) \quad (4.46)$$

où $r_d = r_a$ ou r_b dépendant du centre a ou b de la fonction d'onde initiale dans (4.44) et (4.45),

Δ_{ℓ_e} son déphasage et $F_{\ell_e}(\vec{k}_e, r_d)$ représente la solution radiale de l'équation de Schrödinger

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial r_d^2} + k_e^2 - \frac{\ell_e(\ell_e + 1)}{r_d^2} - V_m(r_d) \right] F_{\ell_e}(\vec{k}_e, r_d) = 0 \quad (4.47)$$

où le potentiel $V_m(r_d)$ ($d=a$ ou $d=b$) représente la moyenne des interactions électrostatiques de l'électron éjecté avec l'ion résiduel (Li^+) donné par (4.2).

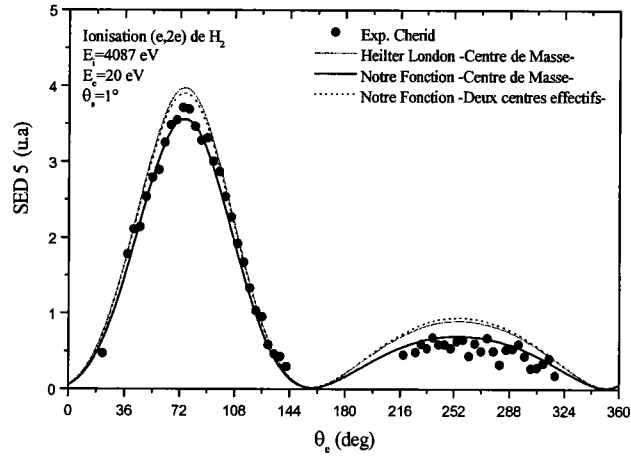
P une constante qui est égale à 1 dans le modèle de deux centres séparés.

$P = e^{+i\vec{k}\vec{\rho}/2}$ ($\varepsilon = +1$ si $d=a$ et $\varepsilon = -1$ si $d=b$) introduit dans ce cas un déphasage qui admet que l'origine de l'onde du continuum soit fixée sur le centre de la molécule, comme il a été proposé dans les travaux de Weck et al (1999).

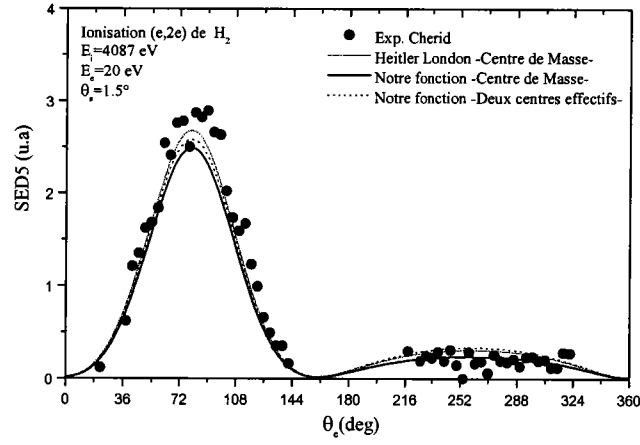
4.4 : Résultats et discussion :

Les résultats théoriques de l'ionisation (e,2e) de l'atome du lithium, obtenus dans le chapitre précédent par l'application des ondes distordues, ont montré le bon accord avec les résultats expérimentaux correspondant aux différentes situations cinématiques étudiées. Dans cette partie, nous allons étendre l'application de ce modèle à l'étude des cibles moléculaires diatomiques à deux électrons actifs, ici en l'occurrence à la molécule Li_2 , de manière à décrire l'effet du potentiel de distorsion induit par chaque ion Li^+ sur la trajectoire d'un électron éjecté lent. Ce travail porte sur des collisions où l'énergie incidente est élevée et la perte d'énergie est plutôt faible (quelques dizaine d'eV). Dans ces conditions nous décrivons le projectile et l'électron diffusé par des ondes planes et nous considérons que l'effet d'échange est négligeable dans toutes les situations cinématiques étudiées. Nous commençons cette partie, en comparant nos calculs de *SED5* obtenus dans un premier temps sur la molécule H_2 , avec des résultats expérimentaux obtenus par Cherid et al (1989). L'objectif de cette première étude sera de tester notre fonction d'onde sur la molécule H_2 avant de passer à l'étude de l'ionisation de la molécule Li_2 en utilisant le même type de fonction donnée précédemment par l'équation (4.22). Dans la deuxième partie, nous appliquons la même procédure à la molécule Li_2 . En l'absence des résultats expérimentaux sur l'ionisation (e,2e) de la molécule Li_2 , nous présentons ici les résultats théoriques concernant la section efficace multiplement différentielle pour des situations cinématiques intéressantes.

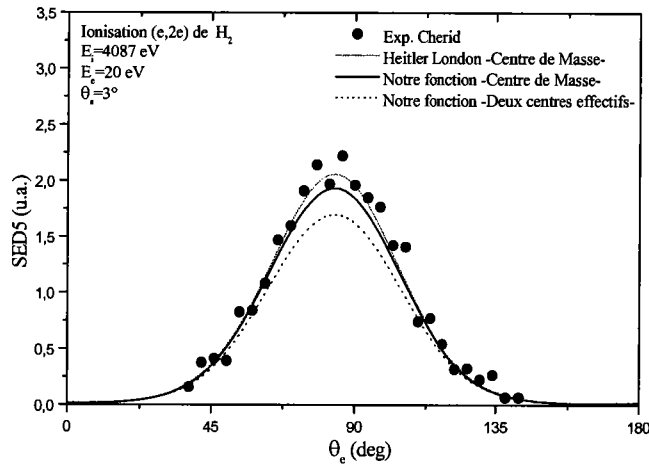
Parmi les expériences réalisées par Cherid et al (1989), nous choisissons quelques exemples représentatifs effectués pour des énergies d'éjections faibles avec des angles de diffusion variant entre 1° et 3° . Nous allons présenter ici une série de comparaison des résultats théoriques obtenus par deux types de fonctions d'onde de l'état lié : la première fonction de type Heitler London (1927) et la deuxième celle proposée par nous (équ 4.22) en utilisant la méthode variationnelle.



(4.1-a)



(4.1-b)



(4.1-c)

Figure 4.1 : Courbes représentant la variation de la $SED5$ de la simple ionisation de la molécule H_2 en fonction de l'angle d'éjection pour des énergies $E_i = 4087$ eV, $E_e = 20$ eV, pour des angles de diffusion respectivement fixés à 1° (4.1-a), 1.5° (4.1-b) et 3° (4.1-c), comparé aux mesures de $SED3$ de Cherid et al (1989).

Sur les figures (4.1-a, 4.1-b et 4.1-c) nous présentons la variation de la section efficace *SED5* (triplement différentielle dans le cas coplanaire) de la molécule H_2 , pour une énergie d'incidence $E_i = 4087 \text{ eV}$, $E_e = 20 \text{ eV}$, avec des angles de diffusions fixes respectivement à 1° , 1.5° et 3° , obtenue en utilisant l'approche des ondes partielles. Nous remarquons que les résultats théoriques obtenus en employant notre fonction d'onde sont en excellent accord avec les mesures expérimentales de Cherid et al (1989) ainsi qu'avec les résultats théoriques obtenus en utilisant la fonction d'onde d'Heitler London (1927). Nous observons dans la région de recul une amélioration considérable de nos résultats théoriques obtenus par notre fonction d'onde, cet accord peut être attribué à l'effet de distorsion qui est strictement lié au potentiel de l'ion moléculaire H_2^+ ainsi qu'à la qualité de cette fonction d'onde électronique donnée par l'équation (4.22). Lorsque nous augmentons l'angle de diffusion $\theta_s = 3^\circ$ (figure 3-a), où le paramètre d'impact est petit, l'utilisation de la fonction d'onde centrée sur le centre de masse améliore l'accord avec les résultats expérimentaux.

Nous allons maintenant présenter d'autres résultats d'ionisation (e,2e) de H_2 en fonction du moment de transfert $\vec{k}$ pour lesquels les conditions cinématiques ont été choisies de manière à mener une comparaison directe avec les mesures expérimentales de Cherid et al (1989).

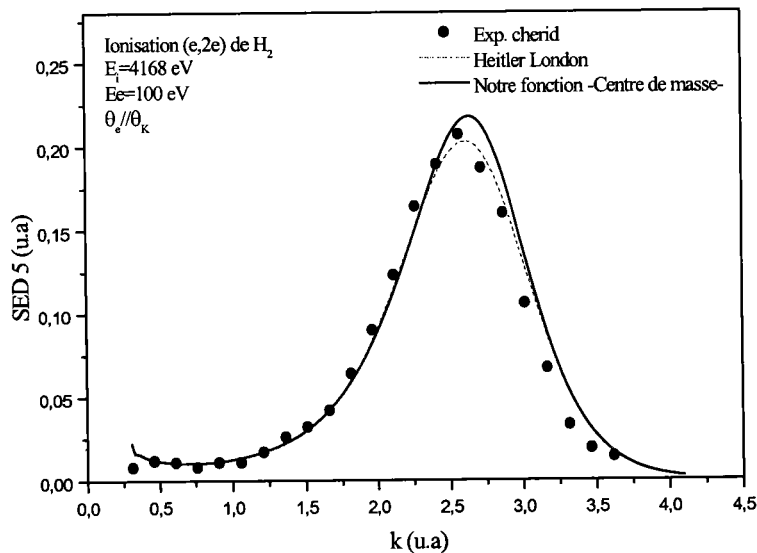


Figure 4.2 : Variation de la *SED5* de la simple ionisation (e,2e) de H_2 en fonction du moment de transfert obtenu par le modèle des ondes partielles comparée aux mesures expérimentales de *SED3* de Cherid et al (1998)

Nous présentons sur la figure 4.2, la variation de *SED5* en fonction du module du moment de transfert $\vec{k}$, avec des énergies d'incidence de 4168 eV et d'éjection de 100 eV , la direction

d'éjection est maintenue parallèle à la direction du transfert $\theta_e // \theta_k$. A l'exception d'un léger décalage au niveau des grands moments du transfert, le bon accord de nos résultats théoriques avec les mesures expérimentales de *SED3* de Cherid et al (1998), explique une nouvelle fois la bonne qualité de notre fonction d'onde. Nous remarquons que le maximum est obtenu comme prévu pour un angle de diffusion égale à 8.9° qui correspond exactement au moment de transfert $k=2.71$ (u.a), où le moment de recul est nul c'est à dire pour $k=k_e$.

Nous avons également reproduit des résultats de la section efficace *SED5* en fonction du moment de transfert k , pour une énergie d'éjection égale à 20 eV. Dans ces conditions, l'électron éjecté est lent, il subit, à cause de l'ion moléculaire H_2^+ , l'effet d'un potentiel important dont nous tenons compte dans la description de l'électron éjecté.

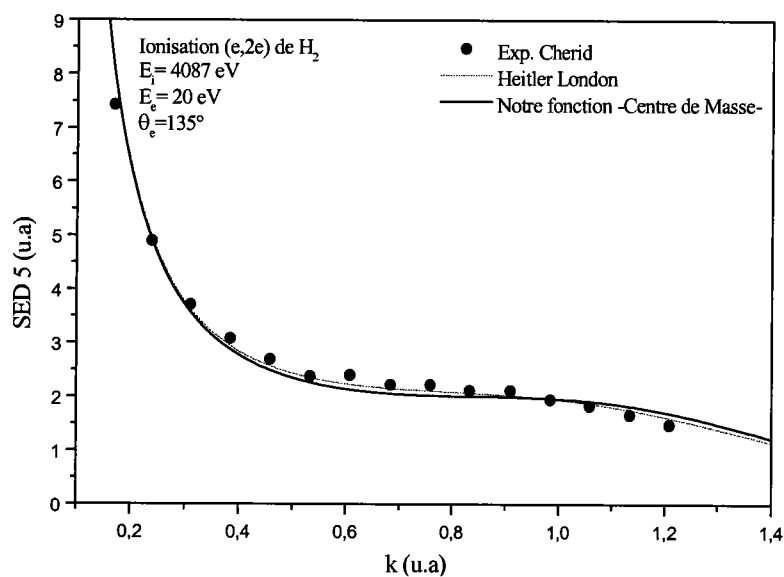


Figure 4.3 : Variation de la *SED5* de la simple ionisation de H_2 en fonction du moment du transfert obtenue par le modèle 'DWBA'.

Sur la figure 4.3, nous montrons la variation de la section efficace *SED5* en fonction du moment de transfert k , pour des énergies d'incidence et d'éjection fixées respectivement à $E_i = 4087$ eV et $E_e = 20$ eV. Nous remarquons une nouvelle fois le bon accord de nos résultats avec les mesures expérimentales de Cherid et al (1989). Les résultats obtenus avec les deux fonctions d'état lié coïncident pour les petits moments du transfert.

4.4.1 : Ionisation (e,2e) de la molécule Li_2 .

Les diverses situations que nous avons étudiées sur (e,2e) de la molécule H_2 révèlent un bon accord entre nos résultats et ceux de différentes mesures expérimentales obtenues par Cherid et al (1989). Ceci vérifie la validité de notre procédure de calcul de la fonction électronique et permet ainsi d'étendre l'approche des ondes partielles au cas de la molécule Li_2 . En l'absence des résultats expérimentaux sur l'ionisation (e,2e) de Li_2 , et par analogie avec ceux obtenus sur le H_2 , nous analysons ici quelques situations cinématiques à des énergies d'éjection faibles, en fixant l'énergie des électrons incident et diffusé à des valeurs élevées ($\approx \text{KeV}$). Les conditions de validité de la première approximation de Born apparaissent être remplies. La section efficace, pour une énergie incidente déterminée, dépend de l'énergie et de la direction de deux électrons sortants. Nous présentons ici la variation de la section efficace multipliement différentielle en fonction de l'angle d'éjection, l'angle de diffusion est maintenu fixe dans une géométrie asymétrique coplanaire dans laquelle les impulsions $\vec{k}_i$, $\vec{k}_s$ et $\vec{k}_e$ des électrons respectivement incident, diffusé et éjecté se trouvent dans un même plan. L'étude systématique pour différentes valeurs de l'énergie montre que l'influence de l'échange électronique est négligeable pour les valeurs élevées de l'énergie d'incidence.

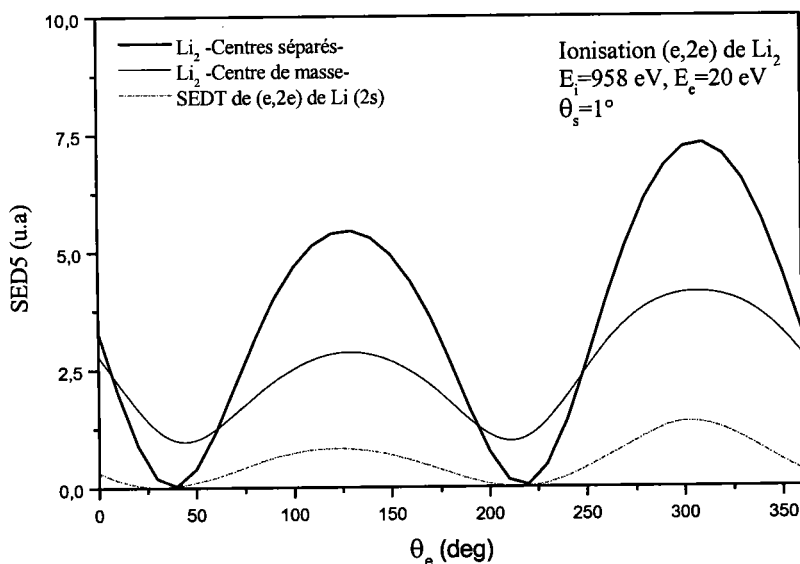


Figure 4.4 : Courbe représentant la variation de $SED5$ de (e,2e) de Li_2 et $SEDT$ de (e,2e) du Lithium atomique, en fonction de l'angle d'éjection pour une énergie d'incidence égale à 958 eV et d'éjection égale à 20 eV .

Sur la figure 4.4, nous montrons la variation de $SED5$ de l'ionisation (e,2e) de Li_2 comparée à celle de l'ionisation (e,2e) du lithium atomique dans son état fondamental. Les énergies d'incidence et d'éjection sont respectivement fixées à 928 eV et à 20 eV . L'angle de diffusion égale à 1° . La comparaison entre ces deux résultats montre que l'amplitude de la section efficace correspondant au cas de la molécule Li_2 est largement supérieure à celle du lithium atomique, ceci est dû à la faible énergie d'ionisation de l'électron de valence de la molécule Li_2 et aussi à la large dispersion spatiale de son orbitale moléculaire.

Nous présentons aussi la variation de $SED7$ en fonction de l'angle de diffusion pour des orientations données de l'axe internucléaire de la molécule Li_2 . La direction de l'électron éjecté est fixée parallèlement à la direction du transfert. Nous considérons une énergie d'incidence égale à 2100 eV et une énergie d'éjection faible de 15 eV . Dans le but de comparer l'aspect moléculaire à l'aspect atomique, nous représentons la variation de la section efficace d'ionisation de l'atome du lithium dans les mêmes conditions cinématiques. Nous commençons d'abord par étudier la situation où la molécule est alignée avec la direction de l'électron incident, c'est à dire $\theta_\rho = 0^\circ$.

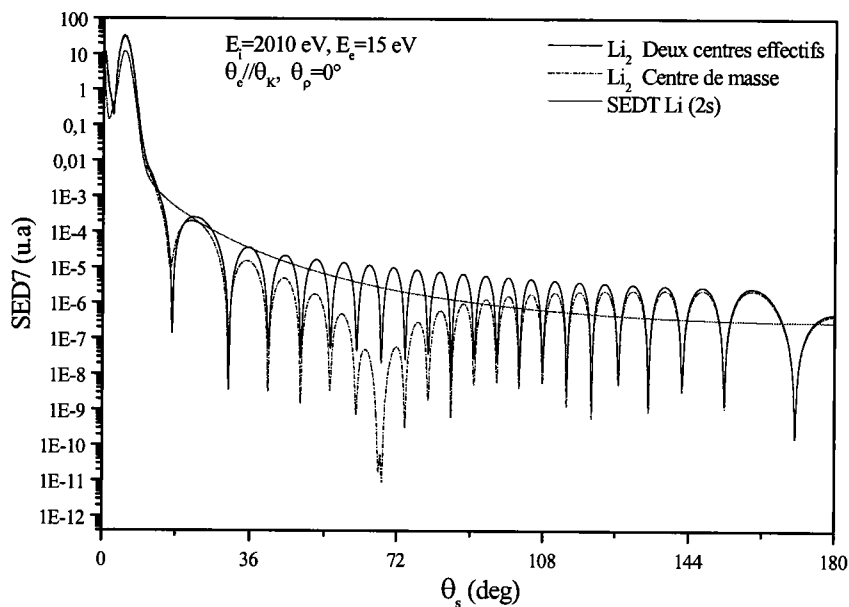


Figure 4.5 : Courbe représentant la variation de $SED7$ en fonction de l'angle de diffusion, la direction de l'électron éjecté est fixée parallèlement à celle du transfert, les énergies d'incidence et d'éjection sont respectivement fixées à 2010 eV et 15 eV , $\theta_\rho = 0^\circ$.

Pour les mêmes conditions cinématiques que celles de la figure précédente 4.5, nous allons étudier ici la variation de $SED7$ de l'ionisation (e,2e) de la molécule Li_2 , dont l'axe internucléaire sera orienté dans un angle égale à 45° par rapport à la direction du projectile.

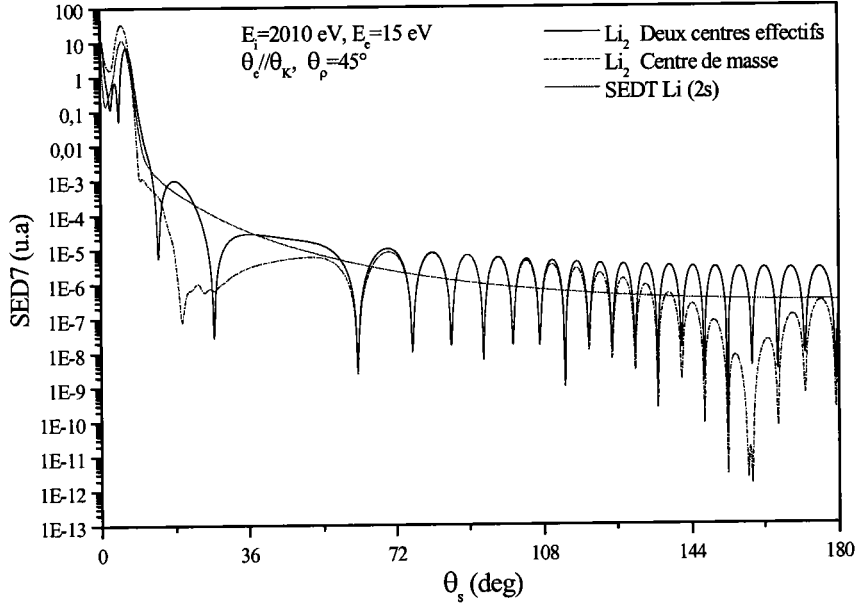


Figure 4.6 : Même conditions cinématiques que la figure 4.5, avec $\theta_\rho = 45^\circ$

Nous remarquons sur les figures (4.5) et (4.6), que pour les grands angles de diffusion ($20^\circ < \theta_s < 180^\circ$), l'amplitude de la section efficace est très faible et sa variation dans cette région révèle un phénomène de diffraction important qui est dû aux effets nucléaires, car le paramètre d'impact est très faible. Des effets analogues ont été observés dans les expériences d'interférence pratiquées en optique. Ce phénomène est très sensible à l'énergie d'incidence ainsi qu'à l'orientation de la molécule cible. Le désaccord entre les résultats obtenus par les deux modèles, explique largement la sensibilité de la section efficace à la description employée dans le calcul de l'élément de transition.

En ce qui concerne le comportement de la section efficace dans la région des faibles angles de diffusion, nous présentons sur la figure (4.7), la variation de $SED7$ autour de la région de Bethe. Nous observons que le maximum qui correspond à $q = 0$ pour $k = k_e$ ($\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ le vecteur de transfert) se situe au voisinage de $\theta_s = 5^\circ$.

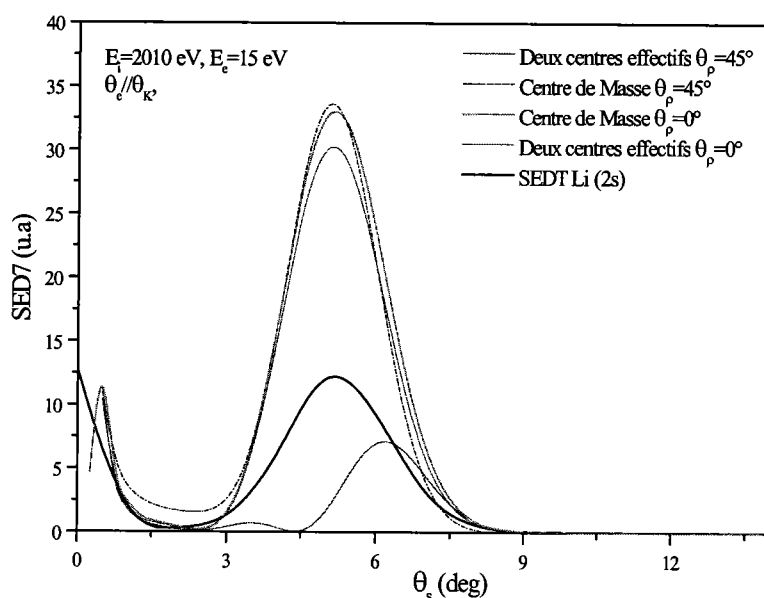


Figure 4.7 : Variation de la $SED7$ de la simple ionisation (e,2e) de Li_2 en fonction de l'angle de diffusion obtenu pour $E_i=2010\text{ eV}$ et $E_e=15\text{ eV}$

Sur la figure (4.7), qui représente la variation de la $SED7$ en fonction de l'angle de diffusion, on remarque que quel que soit l'orientation de l'axe internucléaire et le modèle utilisé, à l'exception de la courbe en tri plein (Modèle de deux centres effectifs à $\theta_\rho = 45^\circ$), les différentes courbes représentent un maximum qui correspond à la région de Bethe au voisinage de $\theta_s = 5^\circ$.

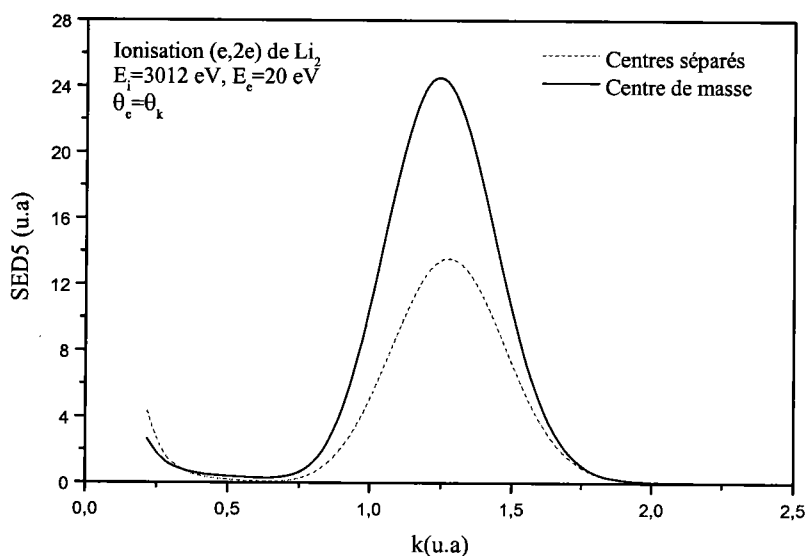


Figure 4.8 : Variation de $SED5$ en fonction du transfert $k\text{ (u.a)}$

Nous présentons sur la figure 4.8, la variation de $SED5$ en fonction du moment du transfert k , les énergies d'incidence et d'éjection sont respectivement de 3012 eV et 20 eV . Nous remarquons que le maximum est obtenu comme prévu pour un angle de diffusion égal à 4.67° , ce qui correspond exactement au moment du transfert $k=1.212 \text{ (u.a)}$, où le moment de recul est nul c'est à dire pour $k=k_e$.

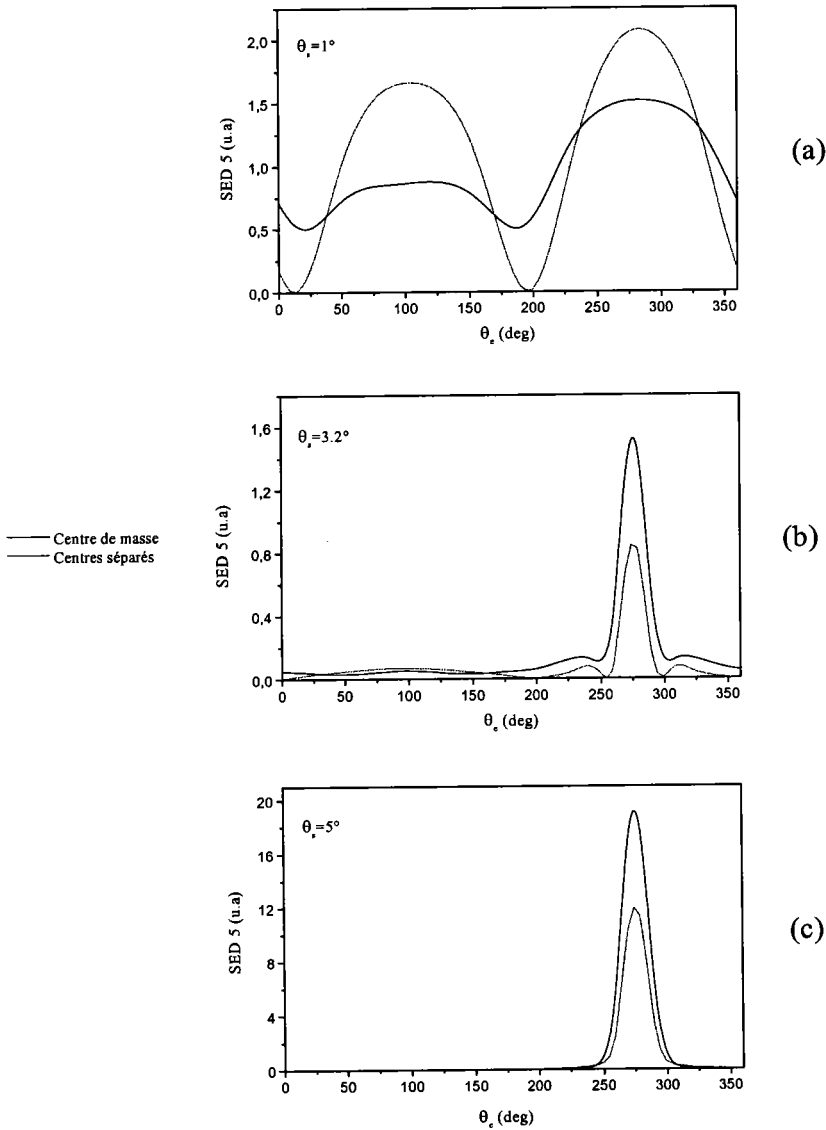


Figure 4.9 : Courbes représentant la variation de la $SED5$ de la simple ionisation de la molécule Li_2 en fonction de l'angle d'éjection, obtenus pour des énergies $E_i=3012 \text{ eV}$, $E_e=20 \text{ eV}$

Sur les figures 4.9 (a, b et c) nous présentons la variation de $SED5$ de l'ionisation (e,2e) effectuée sur la molécule Li_2 , pour une énergie d'incidence $E_i=3012 \text{ eV}$ et une énergie d'éjection égale à 20 eV . Sur la figure 4.9-a ($\theta_i = 1^\circ$) nous remarquons deux pics : un pic binaire qui se trouve dans la direction du transfert d'impulsion k , et le pic de recul qui se trouve dans la direction opposée du transfert d'impulsion. En augmentant l'angle de diffusion ce dernier pic est remplacé par un minimum comme le montre la figure 4.9-b ($\theta_i = 3.2^\circ$). Sur la figure 4.9-c

($\theta_s = 5^\circ$) le maximum de la courbe se trouve dans la région de Bethe qui correspond à la direction du transfert d'impulsion k , c'est à dire au moment de recul $q=0$.

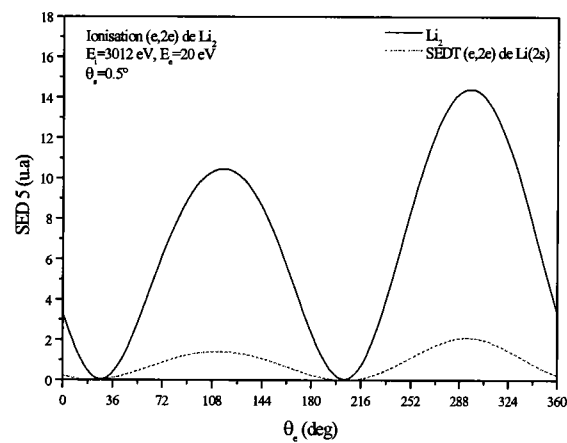


Figure 4.10 : Courbe représentant la variation de *SED5* de (e,2e) de Li_2 et *SEDT* de (e,2e) du Lithium atomique, pour une énergie d'incidence égale à 3012 eV et d'éjection égale à 20 eV.

La figure 4.10, correspond aux mêmes conditions cinématiques que celles des figures précédentes, pour un angle de diffusion égale à 0.5° . Elle présente un pic de Bethe et un pic de recul. Elle permet également de confirmer que la section efficace *SED5* de Li_2 est beaucoup plus grande que la *SEDT* obtenue dans l'ionisation (e,2e) du lithium atomique.

Dans les mêmes conditions géométriques que celles du dernier résultat, nous choisissons quelques situations particulières qui peuvent intéresser les premières mesures expérimentales. Nous présentons d'abord la variation de *SED5* pour des énergies d'incidence et d'éjection fixées à 6012eV et à 25 eV en fonction du moment du transfert k (u.a).

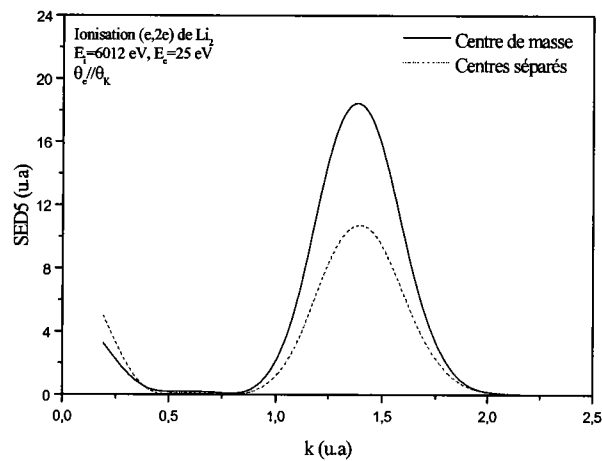


Figure 4.11 : Variation de *SED5* en fonction du transfert k (u.a)

La figure 4.11, montre la variation de $SED5$ en fonction du moment du transfert k , pour une énergie d'incident égale à 6012 eV et celle d'éjection égale à 25 eV . Les résultats sont donnés pour une situation binaire, c'est à dire pour un angle d'éjection fixée parallèlement à la direction du transfert k . Un maximum est observé pour $k_e=k$.

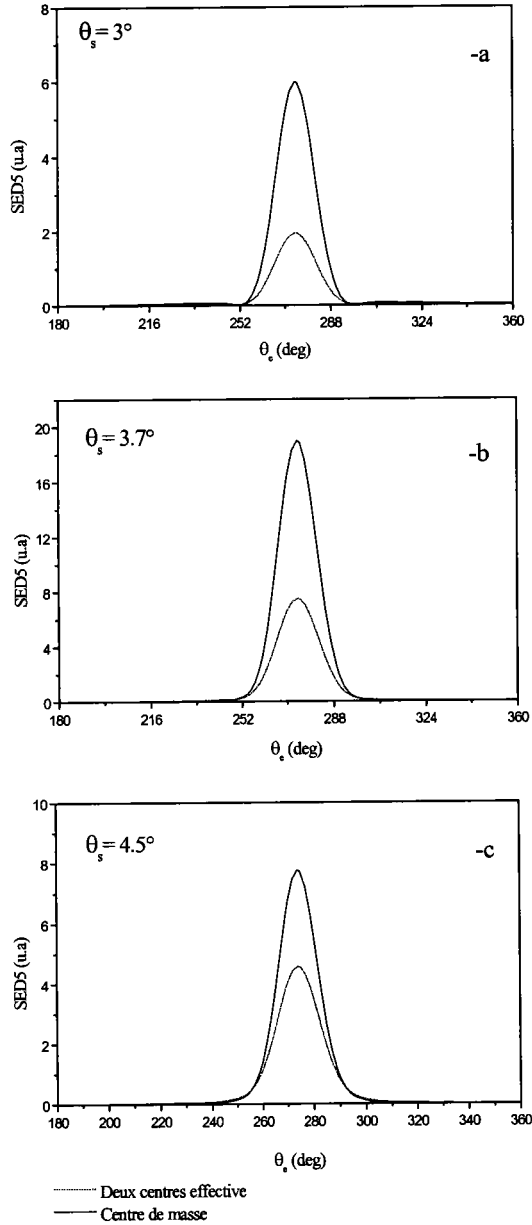


Figure 4.12 : Courbes représentant la variation de la $SED5$ de la simple ionisation de la molécule Li_2 pour des énergies d'incidence et d'éjection sont respectivement de 6012 eV et de 25 eV .

Sur les figures 4.12 (a, b et c) nous présentons la variation de $SED5$ en fonction de l'angle d'éjection, obtenus pour des angles de diffusions donnés autour de la région de Bethe et qui sont respectivement fixés à $\theta_s = 3^\circ$ (fig 4.12-a), $\theta_s = 3.7^\circ$ (fig 4.12-b) et $\theta_s = 4.5^\circ$ (fig 4.12-c). Nous remarquons que lorsque la description du continuum est prise relativement au centre de masse,

la *SED5* est beaucoup plus importante que celle obtenue en utilisant la description du modèle de deux centres effectifs.

Nous avons également reproduit des résultats de la section efficace *SED5* en fonction de l'angle d'éjection pour un angle de diffusion faible ($\theta_s = 1^\circ$).

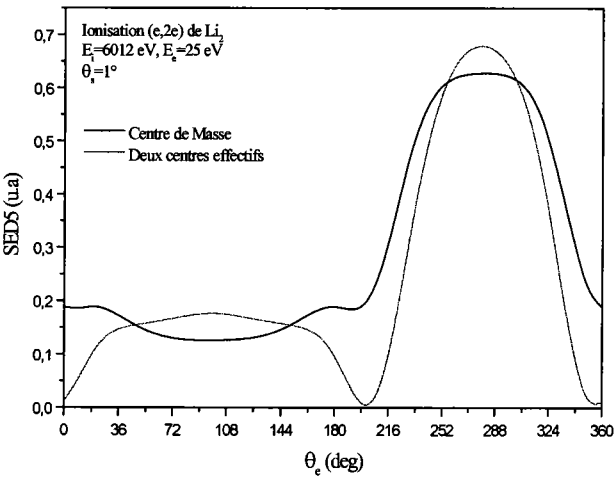


Figure 4.13 : Variation de la *SED5* en fonction de l'angle d'éjection, pour des énergies d'incidence et d'éjection fixées respectivement à 6012 eV et à 25 eV.

Comme il a été précisé précédemment pour les faibles angles de diffusions, la section efficace possède deux pics. Ceci est bien évident dans les figures 4.13 qui représente la variation de *SED5* en fonction de l'angle d'éjection, pour des énergies d'incidence et d'éjection respectivement fixées à 6012 eV et à 25 eV.

Conclusion

Nous avons présenté dans ce dernier chapitre le calcul des fonctions d'onde électroniques de H_2^+ , Li_2^+ , H_2 et Li_2 dans le cadre de l'approximation de Born Oppenheimer, et nous avons calculé la fonction d'onde du continuum pour déterminer la section efficace multiplément différentielle de la simple ionisation de Li_2 en utilisant le développement en ondes partielles. En l'absence des résultats expérimentaux sur Li_2 , nous avons vérifié notre procédure en reproduisant des résultats de la section efficace de l'ionisation (e,2e) effectuée sur la molécule H_2 et pour lesquels l'expérience existe (Cherid et al (1989)). Nous avons présenté ensuite quelques résultats théoriques de la section efficace concernant des situations intéressantes de (e,2e) de Li_2 .

Conclusion générale

Nous avons présenté dans ce travail l'étude de l'ionisation ($e,2e$) du lithium atomique et moléculaire par impact électronique. Après avoir rappelé dans le chapitre 1, les notions de base concernant l'étude et l'interprétation des résultats d'expériences de collisions ionisantes, nous avons présenté notre approche pour la détermination de la matrice de transition par l'application de l'approche des ondes distordues. Dans le deuxième chapitre nous avons étudié l'antisymétrisation des fonctions d'onde électroniques complet du système collisionnel à quatre électrons, avant et après la collision, que nous avons appliqué dans le chapitre 3 à l'étude de l'ionisation ($e,2e$) de l'atome du lithium, en considérant pour la première fois, les différents termes d'échange possibles dans le calcul de l'élément de transition. Notre étude prouve que le terme d'échange correspondant à une capture de l'électron d'incident demeure très faible dans tous les domaines énergétiques, par contre dans plusieurs situations cinématiques la prise en compte direct des électrons du cœur, modifie sensiblement les résultats. Nous avons également montré que dans des situations de faible énergie d'incidence où les termes d'échanges (f_2 , g_2) sont moins importants, l'application de l'approche 'DWBA' aux électrons du continuum dans l'état initial et final, améliore l'accord avec les résultats expérimentaux. Dans une autre étape, nous avons effectué un calcul supplémentaire en utilisant un potentiel modèle, la comparaison avec les résultats obtenus par notre approche à quatre électrons, prouve une nouvelle fois l'importance des effets d'échanges avec les électrons internes, et surtout pour les grands angles de diffusion.

Dans le chapitre 4 consacré à l'étude ($e,2e$) des systèmes moléculaires biélectroniques, nous avons commencé en premier lieu par construire la fonction d'onde électronique en nous basant sur l'approximation de Born Oppenheimer et sur le principe variationnel. Nous avons ensuite, étendu l'application de l'approche 'DWBA' à l'étude de l'ionisation ($e,2e$) des systèmes diatomiques en utilisant notre fonction électronique de l'état lié, que nous avons vérifié en reproduisant des résultats existants pour la molécule H_2 . Nous avons obtenu un excellent accord avec les mesures expérimentales de Cherid et al (1998). En l'absence des mesures expérimentales sur l'ionisation ($e,2e$) de la molécule Li_2 , nous avons présenté ensuite des résultats théoriques concernant quelques situations favorables de la section efficace septuplement différentielle, dans un domaine d'énergie d'incidence variant entre quelques centaines d'eV et quelque KeV. Des résultats qui seront extrêmement utiles pour les premières mesures expérimentales.

Les résultats satisfaisant que nous avons obtenu par l'application de l'approximation 'DWBA' à l'étude de l'ionisation (e,2e) de l'atome du lithium et de la molécule H_2 , nous permettent d'envisager son extension à l'étude de l'ionisation (e,3e) sur d'autres atomes alcalins ainsi qu'à des systèmes diatomiques comme H_2 et Li_2 . Nous envisageons éventuellement, dans un avenir proche, de calculer le développement en onde partielle de la troisième hypergéométrique du modèle 3C évoqué dans le chapitre 1.

Annexe A

Détermination de la fonction radiale $F_\ell(k,r)$ solution de l'équation :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + k^2 - \frac{2\eta k}{r} \right] F_\ell(k,r) = 0, \quad (\text{A.1})$$

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

On pose :

$$F_\ell(k,r) = e^{ikr} (kr)^{(\ell+1)} f_\ell(k,r), \quad (\text{A.2})$$

où f_ℓ exprimée en $(\rho = kr)$ vérifie l'équation de Kummer-Laplace (Joachain 1983):

$$\rho \frac{d^2 f_\ell}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{df_\ell}{d\rho} - (\ell + 1 + i\eta) f_\ell = 0. \quad (\text{A.3})$$

En choisissant $\alpha = -2ik$, la solution de l'équation (A.1) régulière à l'origine ($r = 0$) est donnée par (Joachain 1983):

$$f_\ell = C_\ell {}_1F_1(\ell + 1 + i\eta; 2\ell + 2; -2ikr), \quad (\text{A.4})$$

et la fonction coulombienne sphérique régulière à l'origine est obtenue en substituant (A.4) dans (A.2) ce qui donne:

$$F_\ell(k,r) = C_\ell e^{ikr} (kr)^{\ell+1} {}_1F_1(\ell + 1 + i\eta; 2\ell + 2; -2ikr), \quad (\text{A.5})$$

Où

$$C_\ell = \frac{2^\ell e^{-\frac{\pi\eta}{2}} |\Gamma(\ell + 1 + i\eta)|}{(2\ell + 1)!}. \quad (\text{A.6})$$

Annexe B

Résolution numérique de l'équation de Schrödinger $X''+W(r)X=0$

L'expression de la dérivée seconde de $X(r)$ est :

$$X''(r) = \frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + 0(h^2), \quad (B.1)$$

avec le terme d'erreur:

$$0(h^2) = -\frac{h^2}{12} f''''(r) + \dots \quad (B.2)$$

En négligeant le terme d'erreur $0(h^2)$ on obtient

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + w(r)X(r) = 0, \quad (B.3)$$

et puis

$$X(r+h) = 2X(r) - X(r-h) - h^2 w(r)X(r). \quad (B.4)$$

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

$$X(0) = 0, \quad (B.5)$$

et

$$X(h) = 1. \quad (B.6)$$

En utilisant (B.3) 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 . On obtient

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} = X''(r) + \frac{h^2}{12} X^{(4)}(r) + 0(h^4). \quad (B.7)$$

qui s'écrit

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{X^2(r)} + X(r)w(r) = \frac{h^2}{12} X^{(4)}(r) + 0(h^4). \quad (B.8)$$

En appliquant l'opérateur $1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}$ par la méthode de Fox-Goodwin (Schmid et al 1990) à la définition de la dérivée seconde, nous obtenons :

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}\right) X''(r) = -w(r)X(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}(w(r)X(r)). \quad (B.9)$$

En remplaçant le deuxième terme de (B.7) par son expression donnée par (B.9) on obtient:

$$\frac{X(r+h) + X(r-h) - 2X(r)}{h^2} + 0(h^4) + w(r)X(r) + \frac{h^2}{12} \frac{d^2}{dr^2}(w(r)X(r)) = 0. \quad (B.10)$$

En négligeant les termes de correction d'ordre supérieur ou égal à quatre et en remplaçant dans (B.1)

$$X(r+h) = \frac{2X(r) - X(r-h) - \left(\frac{h^2}{12}\right)(10W(r)X(r) + W(r+h)X(r-h))}{1 + \left(\frac{h^2}{12}\right)W(r+h)}. \quad (B.11)$$

nous allons normaliser les fonctions radiales en calculant le coefficient de proportionnalité

$$X_{\text{Num}}(r) = AX_{\text{asym}}(r), \forall r \rightarrow \infty \quad (B.12)$$

On obtient les fonctions radiales normalisées, d'où l'expression finale

$$X_{\text{Num}}^{\text{Norm}} = \frac{1}{A} X_{\text{Num}}. \quad (B.13)$$

Annexe C

Construction des fonctions d'onde des états de spin total $S=1$

L'état de spin $S=1$, $M=1$ d'un système de quatre électrons, dont trois liés, est une combinaison linéaire de deux déterminant de Slater suivants : $|\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3|$ et $|\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3|$. Nous écrivons donc :

$$|S=1, M_s=1\rangle = c_1 |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + c_2 |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \quad (C.1)$$

Nous devons avoir :

$$c_1^2 + c_2^2 = 1$$

et

$$\hat{S}^2 |S=1, M_s=1\rangle = 2 |S=1, M_s=1\rangle \quad (C.2)$$

$$\hat{S}^2 |S=1, M_s=1\rangle = 2c_1 |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + 2c_2 |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3|$$

D'après la définition, la composante de l'opérateur du moment cinétique total du système suivant l'axe (OZ) est donnée par la somme des composantes individuelles :

$$\hat{S}_z = \sum_{i=1}^4 \hat{S}_{zi} \quad (C.3)$$

et de même pour

$$\hat{S}^+ = \sum_{i=1}^4 \hat{S}_i^+ \quad \text{et} \quad \hat{S}^- = \sum_{i=1}^4 \hat{S}_i^- \quad (C.4)$$

où

$$\hat{S}^+ |S=1, M_s=1\rangle = c_1 |\chi_i \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3| + c_2 |\chi_i \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3| \quad (C.5)$$

$$\begin{aligned} \hat{S}^- \hat{S}^+ |S=1, M_s=1\rangle &= c_1 |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + c_1 |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| + c_2 |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + c_2 |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \\ &= (c_1 + c_2) \{ |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \} \end{aligned}$$

En respectant le principe d'exclusion de Pauli, deux électrons ne peuvent occuper le même état

$$|\chi_i \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3| = |\chi_i \bar{\varphi}_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| = 0 \quad (C.6)$$

alors

$$\begin{aligned} (\hat{S}_z^2 + \hat{S}_z + \hat{S}^- \hat{S}^+) |S=1, M_s=1\rangle &= (c_1 + c_2) \{ |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \} \\ &\quad + 2c_1 |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| + 2c_2 |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \end{aligned} \quad (C.7)$$

L'égalité des deux équations (C.7)=(C.2) et la condition de normalisation donne naissance à trois équations à deux inconnus

$$\begin{aligned} c_1^2 + c_2^2 &= 1 \\ 3c_1 + c_2 &= 2c_1 \\ 3c_2 + c_1 &= 2c_2 \end{aligned} \tag{C.8}$$

Ce qui donne $c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

Finalement

$$|S=1, M_s=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| - |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| \} \tag{C.9}$$

Ensuite par l'application de l'opérateur $\hat{S}^-$ à $|S=1, M_s=1\rangle$, on obtient les autres états qui sont donnés par :

$$|S=1, M_s=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}} \{ |\bar{\chi}_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \varphi_3| - |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \varphi_3| + |\chi_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \bar{\varphi}_3| - |\chi_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3| \} \tag{C.10}$$

$$|S=1, M_s=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |\bar{\chi}_i \varphi_1 \bar{\varphi}_2 \bar{\varphi}_3| - |\bar{\chi}_i \bar{\varphi}_1 \varphi_2 \bar{\varphi}_3| \} \tag{C.11}$$

De la même manière nous déterminons les autres états de spins correspond à l'état initial et final de l'ionisation (e,2e) des cibles à un électron, à deux électrons et à trois électrons actifs.

Annexe D

Calcul du terme f1 de SEDT de l'ionisation (e,2e) du lithium :

$$f1 = \langle \chi_s(0) \chi_e(1) \phi_1^+(2) \phi_1^+(3) \left| \frac{-Z_N}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + \frac{1}{r_{03}} \right| \chi_i(0) \phi_1(2) \phi_2(3) \phi_3(1) \rangle \quad (D.1)$$

$$f1 = \langle \chi_s(0) \chi_e(1) \left| \left(\frac{-Z_N}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} \right) I1 + I2(r_0) \right| \chi_i(0) \phi_3(1) \rangle$$

Où les termes I1 et I2 sont définis et calculés plus bas.

$$\chi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = (4\pi) \sum_{\ell, m} i^\ell e^{i\Delta_\ell} \frac{F_\ell(\mathbf{k}, \mathbf{r})}{kr} Y_{\ell, m}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell, m}^*(\hat{\mathbf{r}}) \quad (D.2)$$

avec

$$f1 = \langle \chi_s(0) | \text{oper}(r_0) | \chi_i(0) \rangle$$

$$\text{oper}(r_0) = \frac{(4\pi)^{3/2}}{k_e} \sum_{\ell_e, m_e} \frac{i^{-\ell_e}}{(2\ell_e + 1)} e^{-i\Delta_{\ell_e}} Y_{\ell_e, m_e}(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{\ell_e, m_e}^*(\hat{\mathbf{r}}_0) \mathfrak{R}_{\ell_e} \quad (D.3)$$

$$\mathfrak{R}_{\ell_e} = (-Z_N I1 + I2(r_0)) \delta_{\ell_e, 0} \int_0^\infty r_1 F_{\ell_e}(k_e, r_1) \phi_3(r_1) dr_1 + I1 \int_0^\infty \frac{r_1^{\ell_e <}}{r_1^{\ell_e + 1}} F_{\ell_e}(k_e, r_1) r_1 \phi_3(r_1) dr_1 \quad (D.4)$$

$$f1 = \frac{(4\pi)^{3/2}}{k_i k_s k_e} \sum_{\ell_i, 0} \sum_{\ell_e, m_e = -\ell_e} \sum_{\ell_s, m_s} e^{-i(\Delta_{\ell_e} + \Delta_{\ell_s} - \Delta_{\ell_i})} Y_{\ell_i, 0}(\hat{\mathbf{k}}_i) Y_{\ell_e, m_e}(\hat{\mathbf{k}}_e) Y_{\ell_s, m_s}^*(\hat{\mathbf{k}}_s) \Gamma_{m_e, m_s}^{\ell_i, \ell_e, \ell_s}(k_e, k_s, k_i)$$

on définit

$$\Gamma_{m_e, m_s}^{\ell_i, \ell_e, \ell_s}(k_e, k_s, k_i) = M_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} \times \beta_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e}$$

$$\beta_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} = \int_0^\infty dr_0 \mathfrak{R}_{\ell_e}(k_e, r_0) \frac{F_{\ell_s}(k_s, r_0) F_{\ell_i}(k_i, r_0)}{r_0}$$

$$\beta_{\ell_i, \ell_s}^{\ell_e} =$$

$$\int \frac{d\hat{\mathbf{r}}_0}{(2\ell_e + 1)} Y_{\ell_i, 0}(\hat{\mathbf{r}}_0) Y_{\ell_e, m_e}(\hat{\mathbf{r}}_0) Y_{\ell_s, m_s}(\hat{\mathbf{r}}_0) = \left[\frac{(2\ell_i + 1)(2\ell_s + 1)}{4\pi(2\ell_e + 1)} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} \ell_i & \ell_s & \ell_e \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_i & \ell_s & \ell_e \\ 0 & m_s & m_e \end{pmatrix}$$

$$m_s = -m_e \quad (D.5)$$

et

$$|\ell_i - \ell_e| \leq \ell_s \leq \ell_i + \ell_e \quad (D.6)$$

Calcul du terme I2

$$\begin{aligned}
I_2 &= \langle \phi_1^+(r_2) \phi_1^+(r_3) \left| \frac{1}{r_{02}} + \frac{1}{r_{03}} \right| \phi_1(r_2) \phi_2(r_3) \rangle \\
&= 2 \langle \phi_1^+(r_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \phi_1(r_2) \rangle \langle \phi_1^+(r_3) | \phi_1(r_3) \rangle
\end{aligned} \tag{D.7}$$

Le terme $\langle \phi_1^+(r_3) | \phi_1(r_3) \rangle$ est calculé en utilisant l'identité donnée dans l'équation

$$\int r^n e^{-\alpha r} d\vec{r} = (4\pi) \frac{(n+2)!}{\alpha^{n+3}} \tag{D.8}$$

Pour terme calculer le premier terme, on a utilisé le développement de Neumann

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_{\ell, m} \frac{(4\pi)}{(2\ell+1)} \frac{r^{\ell <}}{r^{\ell+1 >}} Y_{\ell, m}(\hat{r}_i) Y_{\ell, m}^*(\hat{r}_j) \tag{D.9}$$

En remplaçant $\frac{1}{r_{02}}$ par son expression, on obtient :

$$\begin{aligned}
\langle \phi^+(r_2) \left| \frac{1}{r_{02}} \right| \phi_1(r_2) \rangle &= \sum_{\ell, m} \frac{(4\pi)}{(2\ell+1)} \int_{r_0}^{\ell <} R^+(r_2) R_1(r_2) Y_{\ell, m}(\hat{r}_0) Y_{\ell, m}^*(\hat{r}_2) Y_{0,0}(\hat{r}_2) Y_{0,0}^*(\hat{r}_2) d\vec{r}_2 \\
&= (4\pi)^2 \int_{r^>} \frac{1}{r^>} R^+(r_2) R_1(r_2) r_2^2 dr_2 \\
&= (4\pi)^2 \left[\frac{1}{r_0} \int_0^{r_0} R^+(r_2) R_1(r_2) r_2^2 dr_2 + \int_{r_0}^{\infty} R^+(r_2) R_1(r_2) r_2 dr_2 \right]
\end{aligned} \tag{D.10}$$

Annexe E

Calcul des éléments matriciels S et H d'un système diatomique monoélectronique

Dans le calcul des éléments de matrice de S nous avons utilisé les deux intégrales de base I et J qui sont données par :

$$I(\alpha, n) = \int_1^{\infty} \lambda^n e^{-\alpha\lambda} d\lambda \quad (\text{E.1})$$

$$J(\beta, n) = \int_{-1}^1 \mu^n e^{-\beta\mu} d\mu \quad (\text{E.2})$$

on obtient

$$\begin{aligned} S_{12}(\beta_1, \beta_2) &= \int \varphi_1^* \varphi_2 d\tau = \frac{\pi\rho^3}{2} \iint (\lambda^2 - \mu^2) e^{-(\beta_1 + \beta_2)\lambda} (e^{-\beta_1\mu} + e^{\beta_1\mu}) (e^{-\beta_2\mu} + e^{\beta_2\mu}) d\lambda d\mu \\ &= \frac{\pi R^3}{2} (I(\beta_1 + \beta_2, 2)[J(\beta_1 + \beta_2, 0) + J(\beta_1 - \beta_2, 0)] - I(\beta_1 + \beta_2, 0)[J(\beta_1 + \beta_2, 2) + J(\beta_1 - \beta_2, 2)]) \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

On note que

$$S_{11} = S_{12}(\beta_1, \beta_1)$$

$$S_{22} = S_{12}(\beta_2, \beta_2) \quad (\text{E.3})$$

avec

$$S_{13}(\beta_1, \beta_2) = \int \varphi_1^* \varphi_3 d\tau = \frac{\pi\rho^4}{4} (S'_{13} - S''_{13})$$

Avec :

$$S'_{13} = I(\beta_1 + \beta_2, 3)[J(\beta_1 + \beta_2, 0) + J(\beta_1 - \beta_2, 0)] + I(\beta_1 + \beta_2, 2)[J(\beta_1 + \beta_2, 1) - J(\beta_1 - \beta_2, 1)]$$

$$S''_{13} = I(\beta_1 + \beta_2, 1)[J(\beta_1 + \beta_2, 2) + J(\beta_1 - \beta_2, 2)] + I(\beta_1 + \beta_2, 0)[J(\beta_1 + \beta_2, 3) - J(\beta_1 - \beta_2, 3)]$$

(E.4)

On note aussi que :

$$S_{23} = S_{13}(\beta_2, \beta_2)$$

et

$$\begin{aligned} S_{33} &= \int \varphi_2^* \varphi_2 d\tau = \frac{\pi\rho^5}{16} \iint (\lambda^2 - \mu^2) e^{-2\beta_2\lambda} (\lambda^2 (e^{-2\beta_2\mu} + e^{2\beta_2\mu} + 2) + \mu^2 (e^{-2\beta_2\mu} + e^{2\beta_2\mu} - 2) \\ &\quad + 2\mu\lambda (e^{-2\beta_2\mu} - e^{2\beta_2\mu})) \\ &= \frac{\pi\rho^5}{8} (S'_{33} + 2S''_{33}) \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Avec

$$\begin{aligned} S'_{33} &= I(2\beta_2, 4)[J(2\beta_2, 0) + J(0, 0)] - I(2\beta_2, 0)[J(2\beta_2, 4) + J(0, 4)] \\ S''_{33} &= I(2\beta_2, 3)J(2\beta_2, 1) - I(2\beta_2, 2)J(0, 2) - I(2\beta_2, 1)J(2\beta_2, 3) \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

Pour raison de symétrie de la matrice S_{nm} , on a les égalités suivantes :

$$\begin{aligned} S_{12} &= S_{21}, \\ S_{13} &= S_{31} \\ S_{23} &= S_{32} \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

on note que :

$$\begin{aligned} J(\beta, n) &= (-1)^n J(-\beta, n) \\ J(0, 0) &= 2 \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

Calcul de H_{ij} :

Dans le calcul des éléments de matrice H_{ij} de l'hamiltonien H , nous présentons ici la partie

cinétique $\frac{\nabla^2}{2}$ qui est donnée en coordonnée polaire par

$$\frac{\nabla^2}{2} = \frac{2}{\rho^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} - \frac{\partial}{\partial \mu} (\mu^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \quad (\text{E.9})$$

et

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= e^{-\beta_1 \lambda} (e^{-\beta_1 \mu} + e^{\beta_1 \mu}) \\ \varphi_2 &= \varphi_1(\beta_2) \\ \varphi_3 &= \frac{\rho}{2} e^{-\beta_2 \lambda} \{ \lambda (e^{-\beta_2 \lambda} + e^{\beta_2 \mu}) + \mu (e^{-\beta_2 \lambda} - e^{\beta_2 \mu}) \} \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Les dérivés correspondants à chaque fonction sont les suivants :

$$\begin{aligned} \frac{\nabla^2}{2} \varphi_1 &= \beta_1 e^{-\beta_1 \lambda} (\beta_1 (\lambda^2 - \mu^2) (e^{-\beta_1 \mu} + e^{\beta_1 \mu}) - 2(\lambda - \mu) e^{-\beta_1 \mu} - 2(\lambda + \mu) e^{\beta_1 \mu}) : \\ \frac{\nabla^2}{2} \varphi_3 &= \left[e^{-\beta_2 \lambda} (\beta_2^2 (\lambda^3 - \mu^3) + \beta_2^2 (\lambda^2 \mu - \mu^2 \lambda) - 4\beta_2 (\lambda^2 - \mu^2) + 2(\lambda - \mu)) \right. \\ &\quad \left. + e^{\beta_2 \lambda} (\beta_2^2 (\lambda^3 + \mu^3) - \beta_2^2 (\lambda^2 \mu + \mu^2 \lambda) - 4\beta_2 (\lambda^2 - \mu^2) + 2(\lambda + \mu)) \right] \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

Annexe F

Calcul de l'intégrale $A(\vec{k}, \alpha, \beta) = \int d\vec{r} e^{-\alpha r_a} e^{-\beta r_b} e^{i\vec{k}\vec{r}}$:

En utilisant la transformée de **Bethe** (Bethe et Salpeter 1957) pour les termes $e^{-\alpha r}$ qui s'écrit :

$$e^{-\alpha r} = \frac{1}{2\pi^2} \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \int d\vec{q} \frac{e^{i\vec{q}\vec{r}}}{q^2 + \alpha^2}, \quad (F.1)$$

l'intégrale devient :

$$A(\vec{k}, \alpha, \beta) = \int d\vec{r} \frac{1}{4\pi^4} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} \right) \int d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 \frac{e^{i\vec{q}_1 \vec{r}_a} e^{i\vec{q}_2 \vec{r}_b}}{[q_1^2 + \alpha^2][q_2^2 + \beta^2]} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (F.2)$$

En utilisant les relations liant les coordonnées $\vec{r}_a$, $\vec{r}_b$ et $\vec{r}$ (voir figure 4.2 chapitre 4) on obtient :

$$A(\vec{k}, \alpha, \beta) = \frac{1}{4\pi^4} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} \right) \int d\vec{r} d\vec{q}_1 d\vec{q}_2 \frac{e^{i(\vec{q}_1 - \vec{q}_2) \vec{r}}}{[q_1^2 + \alpha^2][q_2^2 + \beta^2]} e^{i(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{k}) \vec{r}} \quad (F.3)$$

L'identité suivante :

$$\int d\vec{r} e^{i(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{k}) \vec{r}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{q}_1 + \vec{q}_2 - \vec{k}) \quad (F.4)$$

permet d'écrire l'intégral g sous la forme :

$$A(\vec{k}, \alpha, \beta) = \frac{(2\pi)^3}{4\pi^4} \left(\frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} \right) \int d\vec{q} \frac{e^{i\vec{q}\vec{\rho}} e^{i\frac{\vec{k}\vec{\rho}}{2}}}{[q^2 + \alpha^2][|\vec{q} + \vec{k}|^2 + \beta^2]} \quad (F.5)$$

En utilisant la transformée de Feynman (Abramovich et Stegun 1972) qui s'écrit :

$$\frac{1}{[q^2 + \alpha^2][|\vec{q} + \vec{k}|^2 + \beta^2]} = \int_0^1 dx \frac{1}{[|\vec{q} + x\vec{k}|^2 + \mu^2]^2}, \quad (F.6)$$

où μ est défini par :

$$\mu^2 = x(1-x)k^2 + (1-x)\alpha^2 + x\beta^2, \quad (F.7)$$

l'intégral g devient :

$$A(\vec{k}, \alpha, \beta) = \frac{2}{\pi} \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} \int dx \int d\vec{q} \frac{e^{i\vec{q}\vec{\rho}}}{\left[|\vec{q} + x\vec{k}|^2 + \mu^2\right]^2} e^{i\frac{\vec{k}\vec{\rho}}{2}} \quad (\text{F.8})$$

En utilisant la transformée de Bethe, l'intégration sur le variable q donne :

$$\int d\vec{q} \frac{e^{i\vec{q}\vec{\rho}}}{\left[|\vec{q} + x\vec{k}|^2 + \mu^2\right]^2} = \frac{\pi^2}{\mu} e^{-(\mu\rho + ix\vec{k}\vec{\rho})} \quad (\text{F.9})$$

A l'aide de cette équation, l'équation (F.9) devient :

$$A(\vec{k}, \alpha, \beta) = 2\pi e^{i\frac{\vec{k}\vec{\rho}}{2}} \int dx \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} \left(\frac{e^{-(\mu\rho + ix\vec{k}\vec{\rho})}}{\mu} \right) \quad (\text{F.10})$$

On peut calculer aussi :

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} r_a e^{-\alpha r_a} e^{-\beta r_b} e^{i\vec{k}\vec{r}} &= -\frac{\partial}{\partial \alpha} A(\vec{k}, \alpha, \beta) \\ &= 2\pi e^{i\frac{\vec{k}\vec{\rho}}{2}} \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) \int dx \frac{\partial^2}{\partial \alpha \partial \beta} \left(\frac{e^{-(\mu\rho + ix\vec{k}\vec{\rho})}}{\mu} \right) \end{aligned} \quad (\text{F.11})$$

Références

- Abramovich M. and Stegun I. A., (1972), Handbook of Mathematic functions (New York:Dover)
- Alder B, S. Fernbach, M. Rothenberg (eds.), Methods in Computational Physics, Vol. 6, Nuclear Physics (Academic Press, New York 1966).
- Altick P. L, Phys. Rev. A **21**, 1381 (1980) ; **25**, 128 (1982) ; J. Phys. B **16**, 3543 (1983).
- Amaldi U, Egidi A., Marconero R. and Pizella G., (1969), Rev. Sci. Instrum. **40**,1001-4
- Avaldi L. Camilloni R. and Stefani G., Phys. Rev. A **40** 4282 (1989)
- Bartschat K (1990) : J. Phys. B **23**, 981
- Bates D. R., Ledsham K., and Stewart G. L., (1953a), Phil. Trans. Roy. Soc. London Ser. A **246**, 215
- Bates D. R. et Poots G., (1953b), Proc. Phys. Soc. **66**, 784
- Bates D. R., Oepik U. and Poots G. (1953c), Proc. Phys. Soc. **66**,1113
- Baum G., Blask W., Freienstein P., Frost L., Hesse S., Raith W., Rappolt P. and Streun M., Phys. Rev. Lett. **69**, 3037 (1992)
- Berakdar J and Buckman S. J Phys. Rev. A, Volume **54**, Number 6
- Bethe H A, Ann. Phys. Lpz. **5**, 325-400, (1930).
- Bethe H. A. and Salpeter E. E., (1957), « Quantum Mechanics of One and Two Electron Systems » (Springer Verlag)
- Born M, Z. Phys. **37**, 863, (1926).
- Born M. and Oppenheimer J.R., (1927), Ann. der Phys., **84**, 457
- Brauner M., Briggs J. S. and Klar H., (1989), J. Phys. B.:At. Mol. Opt., **22**, 2265-87
- Bray I., Beck J. and Plottke C., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **32**, 4309 (1999)
- Bray I. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **28** (1995)
- Burke P G and Berrington K A (ed) 1993 *Atomic and molecular Processes : an R-Matrix Approach 1993* (Bristol : Institute of Physics Publishing)
- Byron F. W. Jr., Joachain C. J. and Piraux B., Phys. Lett. **99A** 427 (1983)
- Camilloni R. , Giardini-Guidoni A. Tiribelli R and Stephani G, Phys. Rev . Lett. **29** , 618 (1972)

- Champion C., L'Hoir A., Politis M.F., Chetoui A., Fayard B. et Touati A., dans Proceeding of the Fourth International Conference on Swift Heavy Ions in Matter, Berlin 1998, édité par Klaumünzer S. et Stolterfoht N., North-Holland, Elsevier (1998)
- Cheikh R., Hanssen J. and Joulakian B.(1998), Eur. Phys. J. D 2, 203-8
- Cheng Pan, Phys. Rev A Volume **47**, Number 3 (1993)
- Cherid M., (1988), thèse d'université (Université de Paris Sud)
- Cherid M., Lahmam-Bennani A., Zuraes R. W., Lucchese R. R., Dal Cappello M. C. and Dal Cappello C., (1989), J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **22**, 3483-99
- Clementi E and Roetti C, At. Data Tables 14, 177, (1974).
- Cohen-Tannoudji C, Diu B. et Lalöe F., Mécanique quantique I et II, Hermann (paris) 1977
- Corchs S. E., Rivarola R. D., McGuire J. H. and Wang Y. D. (1993) Phys. Rev A., **47**, 201
- Corchs S. E., Rivarola R. D., McGuire J. H. and Wang Y. D. (1994) Phys. Scr. **50**, 469
- Crowe A. and Mc Conkey J. W. (1973), Phys. Rev. Lett. **31**, 192-96
- Dal Cappello C., thèse de l'université de Metz (1983)
- Dal Cappello M. C., Dal Cappello C., Tavard C, Cherid M., Lahmam Bennani A. and Duguet A., (1989), J. Phys. France, **50**, 207-217
- Dal Cappello C, and Joulakian B, (e,2e) and Related processes, edited by Whelan C. T, Walter H. R. J, A Lahmam –Bennani and Ehrhardt H, Kluwer Academic publishers (1993)
- Dal Cappello C. and Le Rouso H. (1991), Phys. Rev. A **43**, 1395-1403
- Dal Cappello C., Tavard C., Lahmam-Bennani A. and Dal Cappello M.C. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **17**, 4557 (1984)
- Dey S. Mc. Carty I. E., Teubner P. J. O et Weigold E., Phys. Rev. Lett **34**, 782 (1975).
- Di Martino, R. Fantoni, A. Giardini-Guidoni et R. Tiribelli, Phys. Lett. 103A, **45** (1984)
- Dörner R., Feagin J.M., Cocke C. L., Bräuning H., Jagutzki O., Jung M. Kanter E. P, Khemliche H., Kravis S., Mergel V., Prior M. H., Schmidt-Böcking H., Spielberger L., Ullrich J., Unverzagt M. and Vogt T., Phys. Rev. Lett **77**, 1024 (1996)
- Duguet A, Cherid M, Lahmam-Bennani A, Franz A and Klar H, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **20**, 6145-56, (1987).
- Ehrhardt H., Jung K., Knoth G. and Schlemmer P., Z. Phys. D **1 3** (1986)
- Ehrhardt H, Jung K and Schubert E, " Low-Energy Electron Impact Ionization With Completely Determined Kinematics", Coherence and Correlation in Atomic Collisions , Ed. H Kleinpoppen & J F Williams, pp : 159-208, (Amsterdam : North-Holland, 1980).
- Ehrhardt H. Schultz M., Tekaats T. and Willman K., (1969) Phys. Rev. Lett. **22**, 89

- Electron Impact Ionisation, édité par Mark T. D. et G. H. Dunn, Springer –Verlag, Wien (1989)
- Frost L. Freinstein P., Hesse S., Blask W., Baum G. and Raith W. 3rd European Conference on (e,2e) Collisions and Related Problems. Invited Papers and Progress Reports P; 295, (1990) Edited by Stefani G. (Rome CNR-IMAI),
- Goldberger M. L., and Watson K. M., (1967), « Collision Theory » (John Wiley & Sons, New York).
- Gupta S and Srivastava M. K , J. Phys. B : At . mol. Opt. Phys. **28** (1995)
- Gupta S. and Srivastava M. K., J. Phys. B. : At. Mol. Opt. Phys. **29** (1996)
- Gupta S. and Srivastava M. K., Phys. Rev. A **52**, 4309 (1999)
- Garibotti C. R. and Miraglia J. E., (1980), Phys.Rev. A, **21**, 572-80
- Hafid H., (1994), Thèse de physique (université de Metz)
- Hafid H. and Joulakian B., Z. Phys D 31, 49 (1994)
- Hafid H., Joulakian B., and Dal Cappello C. (1993), J. Phys. B. **26**, 3415
- Hanssen J., Joulakian B., Rivarola R. D. and Allan R. J., (1996) Phys. Scr. **53**, 41-45
- Harris F. E The Journal of Chemical Physics **32** 3-18 (1960)
- Hda H, Dal Cappello C and Langlois J, Z. Phys. D 29, 25, (1994)
- Heitler W. et London F., Z Physik **44**, 455 (1927)
- Jalin R, Hogemnn R and Botter R '1973) : J. Chem. Phys. 59 952
- James H. M. and Coolidge A.S., Phys. Rev. **49**, 688 (1936)
- Joachain J. C. (1975), « Quantum Collision Theory », North-Holland physics publishing, (Amsterdam)
- Joachain J. C, Quantum Collision Theory, North-Holland publishing, (Amsterdam) (1983)
- Joulakian B., Dal Cappello C. and Brauner M., (1992), J. Phys. B: At. Mol. opt. Phys. **25**, 2863-2871
- Joulakian B and Dal Cappello C, Phys. Rev. A **47**, 3788-95 (1993).
- Joulakian B., Hanssen J., Rivarola R. and Motassim A., (1996), Phys. Rev. A, **54**,1473-79
- Jung K., Schubert E., Paul D. A . L et Ehrhardt H. J. Phys. B : atome. Molec. Phys. **8** 1330 (1975)
- Klapisch M (1971), Compt. Phys. Commun 2, 239.
- Klar H., (1990), Z. Phys. D., 16, 231
- Lahmam-Bennani A., Avaldi L. Fainelli E and Stefani G., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **21** 2145 (1988)

- Lahmam-Bennani A., H.F Wellenstein, A. Duguet et M. Rouault, J. Phys. B **16**, 121 (1983) ; J. Phys. B **16**, 4089 (1983)
- Lahmam-Bennani A., H.F Wellenstein, C. Dal Cappello , M. Rouault et A. Duguet, J. Phys. B **16**, 2219 (1983)
- Landau L. et Lifchitz E., Physique Théorique, Editions Mir Moscou
- Langmuir J. J. and Jones T. (1928), Phys. Rev. **31**, 357
- Lewis R R Jr, Phys. Rev. **102**, 537-43, (1956).
- Lippmann B A and Schwinger J, Phys. Rev. **79**, 469, (1950).
- Madison D. H, Calhoun R.V and Shelton W.N 1977, Phys. Rev A **16**, 552
- Madison D. H., Jones S. Franz A. and Altick P. L., (e, 2e) & related processes, 171-184. Edited by Whelan C.T., Walters H.R., Lahmam-Bennani A. and Ehrhardt H. Kluwer Academic Publishers (1993)
- Massey H. S. W. and Mohr C. B. O., (1933), Proc. R. Soc. A. **140**, 613-36
- Mc Carthy I. E. and Weigold E. (1991), Rep. Prog. Phys., **54**, 789-800
- McCarthy I E and Weigold E, Phys. Rep. **27C**, 275-371, (1976).
- McDowell R, Myercough V P and Peach G (1964) : Proc. Phys. Soc **85**, 703
- Mclean A. D, Weiss A and Yoshimine M. Rev, of Modern Physics **32**, 211-218 (1960)
- Messiah A., (1964), « Mécanique Quantique », tome 2 édition (Dunod, Paris)
- Mott N F and Massey H S W, " The Theory of Atomic Collisions " (London : Oxford University Press, 1965).
- Najjari B., (1997), Thèse d'université (Université de Metz)
- Neudachin V.G, Novoskol'tseva G.A et Smirnov Yu. F., Sov. Phys. JETP **28**, 540 (1969).
- Neumann F. E. (1878) « Vorlesungen über die Theorie des Potentiels und der Kugelfunktionen » Chap. 13 (B. G. Teubner, Leipzig Germany)
- Nordsieck A., (1954) Phys. Rev. **93**, 785-78
- Peterkop R. K., (1960), Izv. Akad Nauk Latv SSR N°9, 79
- Peterkop R. K , J. Phys. B **15**, L751 (1982).
- Peterkop R.K. Optics and Spectroscopy **13**, 87 (1962)
- Peterkop R K, " *Theory of Ionization of Atoms by the Electron impact* " , (Colorado Associated University Press, Boulder, 1977).
- Peterkop R K, (In Physics of one and two electrons atoms), ed F Boppand, H Kleinppopen (North-Holland, Amestardam, 1969) p. 649.
- Pluvinaige P., (1950), Ann. Phys. Paris **5**, 145

- Pluvinaige P., (1951), Phys. Radium **12**, 789
- Ponomarev L. I. and Somov L. N., (1976), Comput. Phys.,**20**, 183-95
- Rankin J. and Thorson W. R., (1978), J. Comput. Phys., **32**, 437-446
- Röder, J. Rasch, K. Jung, Colm T. Whelan, H. Ehrhardt, R.J. Allan and Walters H. R. J Pys. Rev A. Volume **53**, Number1
- Rouet F, Tweed R J and Langlois J 1996 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29** 1767
- Roy A, Roy K and Sil N. C, J. Phys. B : At. Molec. Phys. **13** (1980)
- Rudberg E.,(1930) Proc. Roy. Soc. London A **129**, 628
- Rudge M. R. H. and Seaton M. J., (1964), Proc. Phys. Soc. **83**, 680
- Rudge M. R. H. and Seaton M. J., (1965), Proc. Phys. Soc. A **283**, 262-90
- Rudge M. R. H., (1968) Rev. Mod. Phys. **40**, 564-90
- Schmid E W G. Spitz W. Löscher, Theoretical Physics on the Personal Computer , Second Edition, Springer-Verlag (Berlin) (1990)
- Schulz M. (1973), J. Phys. B: At. Mol. Phys., **6**, 2580-99
- Stefani G., Camilloni R. and Giardini-Guidoni A. (1978), Phys. Lett. A **64**, 364
- Streun M., Baum G., Blask W., Rasch J., Bray I., Fursa D.V., Jones S., Madison D.H., Walters H.R.J. and Whelan C.T. , J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **31**, 4401 (1998)
- Streun M, Baum G and al Phys. Rev A **59** 410 –12 (1999)
- Streun M, Baum G, Blask W and Barakdar J 1999 Phys. Rev. A **59** 4109
- Tergiman Y. S. (1993), Phys.Rev.A, **48**, 88-95
- Tweed R. J., J. Phys. B **13**, 4467 (1980)
- Veldre V Ya, Damburg R Ya, Peterkop R K, Atomic Collisions (London : Butterworths, 1966).
- Walters H.R., Zhang X. and Whelan C.T., (e, 2e) & related processes, p. 33-74, Edited by Whelan C.T., Walters H.R., Lahmam-Bennani A. and Ehrhardt H., Kluwer Academic Publishers (1993)
- Wannier G. H. (1953), Phys. Rev., **90**, 817
- Watson D.K, Cerjan C.J, Guberman and Dalgarno A. Chem. Phys. Lettres Volume **50**, Number 2 (1997)
- P.Weck, B. Joulakian and P.A Hervieux Phys. Rev A Volume **60**, Number 4 (1999)
- P.Weck, B. Joulakian and J. Hanssen Phys. Rev A Volume **62**, 014701 (2000)
- Weigold E, Hood S. T., Mc. Carty I. E and Teubner P. J. O, Phys. Lett. **44 A**, 531 (1973)
- Weigold E. and Mc Carthy I.E., Physics Reports C **27** 275 (1976)

- Wetzel W W, Phys. Rev. **44**, 25-30, (1933).
- Whelan C T, Allan R J, Walters H R J and Zhang X, ““(e,2e) & related processes”” Whelan et al (ed.), 1-32, (Academic Publ. Netherlands, 1993) et Whelan C T, Allan R J and Walters H R J, J. de Physique IV, 39-49, (1993).
- Whelan C T, Allan R J, Rasch J, Walters H R J, Zhang X, Röder J, Jung K and Ehrhardt H 1994 Phys. Rev. A **50** 4394.
- Zhang Y, Mc Carthy I E, Weiglod E and Zhang D 1990 Phys. Rev. Lett **64** 1358
- Zhang X., Whelan C.T. and Walters H.R.J., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys **25**, L457 (1992).
- Zuraes R. W et Lucchese R. R., Phys. Rev A **35**, 2852 (1987)
- Zuraes R. W et Lucchese R. R., Phys. Rev A **37**, 1176 (1988)

Résumé

Nous présentons dans ce travail l'étude de l'ionisation ($e,2e$) du lithium atomique et moléculaire par impact électronique. Dans la première section nous étudions l'ionisation ($e,2e$) de l'atome du lithium, en considérant pour la première fois, les différents termes d'échange dans le calcul de l'élément de transition. Notre étude prouve que le terme d'échange correspondant à une capture de l'électron d'incident demeure très faible dans tous les domaines énergétiques, par contre dans plusieurs situations cinématiques la prise en compte direct des électrons du cœur, modifie sensiblement les résultats. Nous montrons également que dans des situations de faible énergie d'incidence où les termes d'échanges ($f2$, $g2$) sont moins importants, l'application de l'approche 'DWBA' aux électrons du continuum dans l'état initial et final, améliore l'accord avec les résultats expérimentaux.

Dans la deuxième section consacrée à l'étude ($e,2e$) des systèmes moléculaires biélectroniques, nous étendons l'application de l'approche 'DWBA' à l'étude de l'ionisation ($e,2e$) de Li_2 en utilisant notre fonction électronique de l'état lié, que nous avons vérifié en reproduisant des résultats existants pour la molécule H_2 . En l'absence des mesures expérimentales sur l'ionisation ($e,2e$) de la molécule Li_2 nous présentons des résultats théoriques concernant quelques situations favorables de la section efficace septelument différentielle, dans un domaine d'énergie d'incidence variant entre quelques centaines d'eV et quelque KeV.