



HAL
open science

Etude de la double ionisation d'atomes par impact d'électrons : élaboration et utilisation du modèle A6C

Saïid El Azzouzi

► **To cite this version:**

Saïid El Azzouzi. Etude de la double ionisation d'atomes par impact d'électrons : élaboration et utilisation du modèle A6C. Autre [cond-mat.other]. Université Paul Verlaine - Metz, 2006. Français. NNT : 2006METZ014S . tel-01752455

HAL Id: tel-01752455

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01752455>

Submitted on 29 Mar 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



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 PAUL VERLAINE-METZ
Laboratoire de Physique Moléculaire et
des collisions



Thèse pour obtenir le grade de **Docteur de l'Université de Metz**

présentée par

Saïd EL AZZOUZI

le 10 novembre 2006

Etude de la double ionisation d'atomes par impact
d'électrons : Elaboration et utilisation du modèle A6C

Discipline : Physique

Spécialité : Physique Atomique et des collisions

Directeur de thèse : Monsieur Claude DAL CAPPELLO, Professeur

Membres du Jury :

Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examinatrice
Examinatrice

J. LANGLOIS
C. LE SECH
B. JOULAKIAN
M. STAIKU-CASAGRANDE
I. CHARPENTIER

Professeur à l'université de Brest
Professeur à l'université Paris-Sud
Professeur à l'université de Metz
Maître de conférence à l'université Paris-Sud
Chargée de recherche à l'université de Metz



Ahmed EL AZZOUZI
(1953-2001)

« Je dédie ce mémoire à cet homme qui m'a donné le goût du savoir et de la découverte ainsi que la volonté nécessaire, il a été pour moi un précurseur et en ce jour je me dois de lui rendre cet hommage ainsi que tout ce qu'il m'a enseigné. Sans lui, je ne serais pas parvenu où je suis aujourd'hui. Cet Homme est mon père. »

Remerciements

Ce travail a été effectué au sein du laboratoire de physique moléculaire et des collisions à l'Institut de Physique et Electronique de Metz.

Je tiens à remercier mon directeur de thèse Monsieur Claude DAL CAPPELLO pour son soutien régulier, de nos conversations fructueuses, ainsi que sa présence mais aussi son encouragement journalier pendant ces années de doctorat.

Je tiens à remercier Monsieur A. LAHMAM-BENNANI Professeur d'Université de Paris XI qui nous a fourni toutes les données expérimentales avant publication.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur Alain MANGO, ingénieur au Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur de Montpellier et à Mademoiselle Isabelle CHARPENTIER chargée de recherche, pour leur aide dans la partie programmation et exécution des programmes informatiques. Leurs contributions dans ce travail furent indispensables pour l'avancement rapide de ce travail.

J'exprime toute ma reconnaissance et mon profond respect à Monsieur Jacques LANGLOIS, Professeur de l'Université de Brest et à Monsieur Claude LE SECH Professeur à l'Université de Paris Sud XI pour avoir accepté la tâche de rapporteurs.

J'exprime aussi ma gratitude à l'égard de Monsieur Boghos JOULAKIAN, de Mademoiselle Magda STAICU-CASAGRANDE et de Mademoiselle Isabelle CHARPENTIER qui ont accepté de faire partie du jury chargé d'examiner ce travail.

Un grand merci au personnel du laboratoire LPMC, à mes collègues et à mes amis : Nourddine, Hocine, Hassan, Issam, Souad, Mohamed, Ayoub, Marie, Warda, Driss, Allal...pour leur soutien moral et les nombreuses discussions que nous avons eues.

Mes parents, ma femme, mes frères et toute la famille méritent ma plus profonde gratitude pour leur soutien matériel et moral constant. Sans leur aide, il est certain que je n'aurais pas pu réaliser ce travail.

J'ai une dette de reconnaissance également envers tout le personnel de l'entreprise VAGLIO et au PDG Monsieur Serge HEISS qui m'a permis d'évoluer au sein de son entreprise en qualité d'assistant du responsable qualité, je les remercie vivement.



Table des matières

Table des matières

| | |
|------------------------------------|---|
| <i>Introduction générale</i> | 9 |
|------------------------------------|---|

Chapitre I : Eléments de la théorie des collisions

| | |
|--|----|
| <i>I-1- Introduction</i> | 12 |
| <i>I-2- Eléments de la théorie de la diffusion pour la double ionisation</i> | 12 |
| <i>I-3- Les probabilités de transition et la section efficace</i> | 17 |
| <i>I-3-1) La section efficace quadruplement différentielle (S.E.Q_d.D)</i> | 20 |
| <i>I-3-2) La section efficace triplement différentielle (S.E.T.P)</i> | 20 |
| <i>I-3-3) La section efficace doublement différentielle (S.E.D.D)</i> | 20 |
| <i>I-3-4) La section efficace simplement différentielle (S.E.S.D)</i> | 20 |
| <i>I-3-5) La section efficace totale</i> | 21 |
| <i>I-4- Le développement de l'opérateur de diffusion</i> | 21 |
| <i>I-4-1) Les différents mécanismes de la double ionisation</i> | 23 |
| <i>I-5- Les caractéristiques cinématiques du processus de la double ionisation</i> | 27 |
| <i>I-5-1) Géométrie coplanaire symétrique</i> | 27 |
| <i>I-5-2) Géométrie coplanaire asymétrique</i> | 28 |
| <i>a) Mode de l'angle individuel fixé</i> | 28 |
| <i>b) Mode de l'angle individuel mutuel</i> | 28 |
| <i>c) Mode de l'angle mutuel intégré</i> | 29 |
| <i>I-6- Description théorique de l'état final de la cible</i> | 29 |
| <i>I-6-1) Description perturbative du premier ordre</i> | 39 |
| <i>I-6-1-1 : Modèle de l'onde plane</i> | 39 |
| <i>I-6-1-2 : Modèle des ondes coulombiennes</i> | 40 |
| <i>I-6-1-3 : Modèle des ondes coulombiennes orthogonalisées</i> | 41 |
| <i>I-6-1-4 : Modèle 3C</i> | 41 |

| | |
|--|----|
| I-6-1-5 : La méthode CCC..... | 42 |
| I-6-2) Au-delà de la première approximation de Born..... | 43 |
| I-6-2-1 : La deuxième approximation de Born..... | 43 |
| I-6-2-2 : Le modèle 6C..... | 44 |
| I-6-2-3 : Le modèle C4FS..... | 45 |
| I-6-2-4 : Le modèle BBK dans le cadre de la deuxième approximation de Born..... | 48 |
| I-6-2-5 : La théorie de la fonction de Green..... | 50 |
| a) Le développement de la fonction de Green..... | 51 |
| b) Application pour $N=4$ | 53 |
| I-7- Conclusion..... | 54 |

Chapitre II : Etude de la double ionisation de l'hélium à basse énergie d'incidence

| | |
|--|----|
| II-1- Introduction..... | 56 |
| II-2- Le dispositif expérimental..... | 56 |
| II-3- Le modèle théorique..... | 57 |
| II-3-1) La fonction d'onde initiale..... | 58 |
| II-3-2) La fonction d'onde finale..... | 59 |
| II-4- Résultats et interprétations..... | 61 |
| II-5- Cas où $E_i = 1099 \text{ eV}$, $E_d = 1000 \text{ eV}$, $E_1 = E_2 = 10 \text{ eV}$ | 76 |
| II-6- Conclusion..... | 80 |

Chapitre III : Le processus $(e,3-1e)$ pour une cible d'Argon

| | |
|---|----|
| III-1- Introduction..... | 83 |
| III-2- Processus de double ionisation directe en utilisant le mécanisme SO..... | 84 |
| III-2-1) La fonction d'onde initiale..... | 84 |
| III-2-2) L'expression de la section efficace quintuplement différentielle S.E.Q.D..... | 86 |

| | |
|--|---------|
| III-2-3) Les termes d'échange..... | 88 |
| III-2-4) Les états propres..... | 89 |
| a) Les états propres de l'état initial..... | 91 |
| b) Les états propres de l'état final..... | 93 |
| III-2-5) Les sections efficaces partielles..... | 95 |
| III-2-6) Résultats et interprétations..... | 98 |
| a) $E_i = 466 \text{ eV}$ | 100 |
| b) $E_i = 658 \text{ eV}$ | 103 |
| c) $E_i = 956 \text{ eV}$ | 107 |
| III-3- Processus de la double ionisation en tenant compte de la transition Auger..... | 110 |
| III-3-1) Définition de l'effet Auger..... | 111 |
| III-3-2) Expression de la section efficace..... | 111 |
| III-4- Conclusion..... | 114 |
| Conclusion générale | 117 |
| Bibliographie | 120 |
| ANNEXE A : Calcul explicite de la S.E.Q.D pour l'hélium | 125 |
| ANNEXE B : Le calcul explicite du terme f_R | 130 |
| ANNEXE C : Le calcul explicite du terme $\sigma_{000}^{t_A}$ | 134 |
| ANNEXE D : Calcul différentiel en utilisant TAPENADE | 139 |



Introduction générale

Introduction générale

L'étude théorique ou expérimentale de la double ionisation s'avère aujourd'hui difficile. Du point de vue expérimental, on compte trois groupes dans le monde qui sont capables de réaliser des expériences de type $(e,3e)$, consistant à détecter en COINCIDENCE des trois électrons émergents de la collision. (Orsay : Pr. LAHMAM-BENNANI, Heidelberg : J. ULLRICH et College Park : Pr. COPLAN).

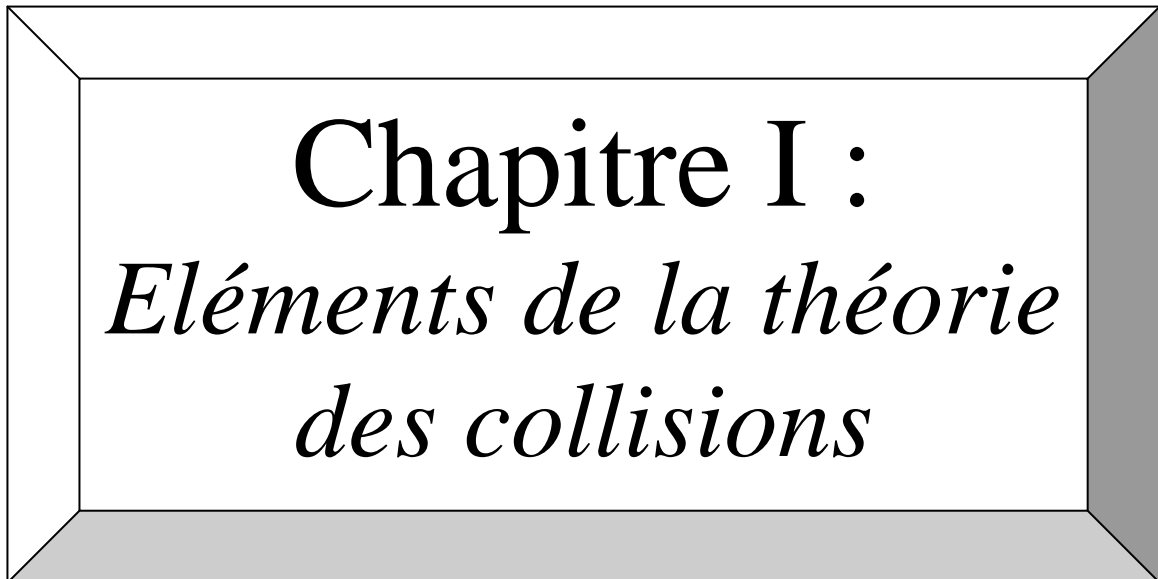
Ces expériences $(e,3e)$ donnent des informations très détaillées sur les mécanismes réactionnels de la double ionisation. Malheureusement, elles demeurent rares et l'on doit souvent avoir recours à des expériences de types $(e,3-1e)$ qui ne détectent en coïncidence que deux des trois électrons émergents.

Du point de vue théorique, nous pouvons dire que deux types d'approche s'affrontent : la première privilégiant la description du double continuum (les deux électrons éjectés dans le champ coulombien de l'ion) par une fonction ayant un comportement asymptotique (modèle de type 3C et 6C). La seconde favorisant la description précise des particules en jeu lorsqu'elles sont proches les unes des autres, tout en négligeant le comportement asymptotique (matrice J, le modèle CCC). La solution serait de relier ces deux approches (matrice J + le modèle 3C) mais la difficulté inhérente à chaque méthodologie fait que cette idée ne s'appliquera pas avant un certain temps.

Ce travail théorique, mené dans le cadre du premier type d'approche, a permis de décrire la fonction d'onde finale représentant les trois électrons émergents de la collision, en particulier pour un nouveau cas où ils ont la même vitesse. Ce cas d'indiscernabilité absolue a exigé un traitement théorique des effets d'échange jamais réalisé et pourra être utilisé avec profit pour des traitements théoriques plus élaborés. Afin de décrire chaque électron dans la voie de sortie de façon équivalente, nous avons utilisé un modèle d'onde coulombienne en prenant compte des effets répulsifs électron-électron par des facteurs de Gamow. Cette description constitue une approximation de la méthode 6C (ayant un bon comportement asymptotique d'une fonction d'onde décrivant les trois électrons émergents dans le champ coulombien d'un noyau).

Ce modèle nous a permis d'interpréter les récentes expériences de type $(e,3e)$ et $(e, 3-1e)$ du groupe du Pr. A. LAHMAM-BENNANI sur la double ionisation de l'hélium et celle de l'argon avec interférence possible avec le processus Auger.

Ce travail est constitué de trois chapitres. Dans le premier, nous expliquons les différentes étapes pour aboutir à la section efficace quintuplement différentielle S.E.Q.D. Après avoir fait le point sur les différents types des sections efficaces différentielles, nous développons l'opérateur de diffusion afin de décrire les différents mécanismes de la double ionisation. Puis, nous décrivons les différentes géométries et cinématiques utilisées expérimentalement. La dernière partie de ce chapitre va être consacrée à décrire théoriquement l'état final d'une cible atomique en introduisant les différentes approches proposées dans le cadre de la première et la deuxième approximation de Born. Nous commençons le deuxième chapitre par une présentation de notre modèle ainsi que son élaboration. Puis, nous utilisons ce modèle pour étudier et analyser les données expérimentales de A. LAHMAM-BENNANI concernant la double ionisation de l'hélium. Enfin, dans le troisième chapitre, nous utilisons notre modèle pour interpréter les dernières expériences de F. CATOIRE sur la double ionisation de l'argon en calculant en détail les amplitudes de transition associées respectivement au mécanisme Shake-Off et au mécanisme Auger.



Chapitre I :
*Eléments de la théorie
des collisions*

Chapitre I :

Eléments de la théorie des collisions

I-1- Introduction :

Dans une première partie de ce chapitre, nous allons développer quelques éléments de la théorie des collisions afin d'aboutir à l'expression explicite de la section efficace quintuplement différentielle nécessaire à la description de la double ionisation et, dans une deuxième partie, nous allons analyser les mécanismes réactionnels de la double ionisation directe et indirecte. Puis, nous décrivons les différentes cinématiques utilisées par les expérimentateurs. Finalement, nous allons décrire et comparer les différents modèles qui étaient proposés pour étudier le double continuum de la double ionisation.

I-2- Eléments de la théorie de la diffusion pour la double ionisation :

Dans ce paragraphe, nous utilisons certains éléments de la théorie des collisions pour décrire le processus de la double ionisation par impact d'une particule chargée (plus particulièrement pour un électron).

Nous considérons la double ionisation par impact électronique d'un atome à plusieurs électrons où l'état initial est représenté par une fonction d'onde : $|\psi_i\rangle$ ayant une énergie ε_i . Les deux électrons qui seront éjectés dans ce processus de double ionisation seront considérés et désignés comme étant les électrons actifs de la cible.

Sous l'effet d'une perturbation extérieure par un faisceau de particules chargées de même énergie (faisceau incident ayant un moment d'impulsion \vec{k}_i relatif au centre de masse de la cible), les deux électrons actifs sont éjectés d'une cible avec les deux moments d'impulsion \vec{k}_1 et \vec{k}_2 . L'électron incident est diffusé avec un moment d'impulsion \vec{k}_d . L'état final de l'ion résiduel est décrit par : $|\psi_f\rangle$ ayant une énergie ε_f . Expérimentalement, il est devenu

possible de décrire le processus de la double ionisation pour des valeurs bien définies des quantités : ε_i , \vec{k}_i , ε_f , \vec{k}_d , \vec{k}_1 et \vec{k}_2 .

Les lois de conservation des énergies et des impulsions s'écrivent sous les formes suivantes :

$$\vec{k}_i = \vec{k}_d + \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_{ion} \quad (\text{I-1})$$

$$E_i = E_d + E_1 + E_2 + E_{ion} + \varepsilon_f \quad (\text{I-2})$$

Les hamiltoniens des deux voies asymptotiques initiale et finale sont donnés par :

$$H_i = h_i + h_a \quad (\text{I-3})$$

$$H_f = h_f + h_c \quad (\text{I-4})$$

Les opérateurs h_i et h_f sont, respectivement, les hamiltoniens de l'atome dans son état fondamental dans la voie initiale et de l'ion résiduel, c'est-à-dire :

$$h_i |\psi_i\rangle = \varepsilon_i |\psi_i\rangle \quad (\text{I-5})$$

$$h_f |\psi_f\rangle = \varepsilon_f |\psi_f\rangle \quad (\text{I-6})$$

h_a est l'hamiltonien du projectile avant la collision, alors que h_c représente l'hamiltonien des fragments dans la voie finale dans la région asymptotique où toutes les particules diffusées sont bien séparées.

Puisqu'on suppose qu'uniquement les états asymptotiques individuels sont déterminés, le potentiel de transition initial V_i et celui de l'état final V_f sont donnés par :

$$V_i = H - H_i = V_{pe_1} + V_{pe_2} + V_{pi} \quad (\text{I-7})$$

$$V_f = H - H_f = V_{pe_1} + V_{pe_2} + V_{e_1e_2} + V_{e_1i} + V_{e_2i} + V_{pi} \quad (\text{I-8})$$

où H est l'hamiltonien total du système, $V_{pe_{1/2}}$ est le potentiel coulombien d'interaction entre le projectile et les deux électrons actifs, V_{pi} est le potentiel d'interaction entre le projectile et

l'ion résiduel, $V_{e_1/2i}$ définit le potentiel de diffusion des électrons éjectés de l'ion résiduel, et $V_{e_1e_2}$ est l'interaction coulombienne entre les deux électrons actifs.

Avant et après l'événement d'ionisation, le système projectile-cible est défini par les vecteurs $|\vec{k}_i, \psi_i\rangle$ et $|\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f\rangle$ où : $H_i|\vec{k}_i, \psi_i\rangle = E_i|\vec{k}_i, \psi_i\rangle$ et $H_f|\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f\rangle = E_f|\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f\rangle$.

La probabilité de transition du système de l'état $|\vec{k}_i, \psi_i\rangle$ vers l'état $|\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f\rangle$ est donnée par l'élément de matrice de diffusion $S_{fi}(\vec{k}_i, \psi_i, \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f)$ qui s'écrit sous la forme suivante :

$$S_{fi}(\vec{k}_i, \psi_i, \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f) = \langle \vec{k}_i, \psi_i | S | \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f \rangle = \langle \Psi^- | \Psi^+ \rangle \quad (\text{I-9})$$

Les vecteurs d'états $|\Psi^\pm\rangle$ pour le système projectile-cible s'écrivent en fonction des états asymptotiques par le moyen des opérateurs de Moller Ω_i^+ et Ω_f^- , c'est-à-dire :

$$|\Psi^+\rangle = \Omega_i^+ |\vec{k}_i, \psi_i\rangle \quad (\text{I-10})$$

$$|\Psi^-\rangle = \Omega_f^- |\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f\rangle \quad (\text{I-11})$$

où :

$$\Omega_i^+ = 1 + G^+ V_i \quad (\text{I-12})$$

$$\Omega_f^- = 1 + G^- V_f \quad (\text{I-13})$$

L'opérateur de Green G^\pm , pour un système à plusieurs particules entièrement corrélé, est la solution de l'hamiltonien H avec les conditions asymptotiques appropriées.

A partir des équations (I-7) et (I-8), on en déduit les équations intégrales suivantes :

$$G^+ = G_i^+ + G_i^+ V_i G^+ \quad (\text{I-14})$$

$$G^- = G_f^- + G_f^- V_f G^- \quad (\text{I-15})$$

Les opérateurs G_i^+ et G_f^- sont les solutions des hamiltoniens H_i et H_f .

En général, les opérateurs de Green satisfont les relations suivantes :

$$(G_i^\pm)^* = G_i^\mp \quad (\text{I-16})$$

$$(G_f^\pm)^* = G_f^\mp \quad (\text{I-17})$$

A partir des trois équations (I-9), (I-10) et (I-11), l'élément de matrice S_{f_i} peut s'écrire sous la forme suivante :

$$S_{f_i}(\vec{k}_i, \psi_i, \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f) = \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | \Omega_f^- \Omega_i^+ | \vec{k}_i \psi_i \rangle \quad (\text{I-18})$$

Cependant, la dynamique complète est décrite par le produit de deux opérateurs qui s'appelle l'opérateur de diffusion S .

L'expression conventionnelle des éléments de la matrice S est déterminée à partir de l'identité suivante :

$$\begin{aligned} & \left\{ \langle \Psi^+(E_i) | \Psi^-(E_f) \rangle - \langle \Psi^+(E_i) | \Psi^+(E_f) \rangle \right\}^* \\ &= \left\{ \langle \Psi^+(E_i) | (\Omega_f^- - \Omega_f^+) | \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f \rangle \right\}^* \\ &= \left\{ \langle \Psi^+(E_i) | [G^-(E_f) - G^+(E_f)] V_f | \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{I-19})$$

A partir de cette équation, la matrice S s'écrit sous la forme suivante :

$$S_{f_i} = \delta_{f,i} + \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | V_f (G^+(E_f) - G^-(E_f)) | \Psi^+(E_i) \rangle \quad (\text{I-20})$$

$$= \delta_{f,i} - i2\pi\delta(E_f - E_i) \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | V_f | \Psi^+ \rangle \quad (\text{I-21})$$

On a introduit $\delta_{f,i} = \langle \Psi^+(E_i) | \Psi^+(E_f) \rangle$, où les indices i et f représentent une série de nombres quantiques qui caractérisent l'état $\langle \Psi^+ |$.

L'expression (I-21) est déduite à partir de l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
[G^+(\mathbf{E}_f) - G^-(\mathbf{E}_f)]|\Psi^+(\mathbf{E}_i)\rangle &= \left[\frac{1}{\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i + i\eta} - \frac{1}{\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i - i\eta} \right] |\Psi^+(\mathbf{E}_i)\rangle \\
&= \frac{-2i\eta}{(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i)^2 + \eta^2} |\Psi^+(\mathbf{E}_i)\rangle \\
&= -i2\pi\delta(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i) |\Psi^+(\mathbf{E}_i)\rangle
\end{aligned} \tag{I-22}$$

Dans cette relation, η est un entier infiniment petit. L'équation (I-22) suit la représentation de la fonction de Dirac : $\delta(x) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{\eta}{\eta^2 + x^2}$

Et on a abouti à une nouvelle forme pour les éléments de la matrice S :

$$S_{f,i} = \delta_{f,i} - i2\pi\delta(\mathbf{E}_f - \mathbf{E}_i) \langle \Psi^- | V_i | \vec{k}_i, \psi_i \rangle \tag{I-23}$$

On peut également définir les éléments de la matrice de transition T_{f_i} par l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
T_{f_i} &= \langle \Psi^- | V_i | \vec{k}_i, \psi_i \rangle = \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | \Omega_f^{-*} V_i | \vec{k}_i, \psi_i \rangle \\
&= \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | V_f \Omega_i^+ | \vec{k}_i, \psi_i \rangle = T_{i_f}
\end{aligned} \tag{I-24}$$

Cette équation peut être développée en termes de fonction de Green en introduisant l'équation (I-12) pour Ω_i^+ , elle devient :

$$T_{i_f} = \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | V_f | \vec{k}_i, \psi_i \rangle + \langle \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \psi_f | V_f G^+ V_i | \vec{k}_i, \psi_i \rangle \tag{I-25}$$

L'équation (I-20) définit l'équation de Lippmann-Schwinger pour les éléments de la matrice de transition.

I-3- Les probabilités de transition et la section efficace :

Les éléments de la matrice S (S_{f_i}) sont une mesure pour l'amplitude de la probabilité de transition. Cependant, la probabilité P_{f_i} pour un processus d'une double ionisation est $|S_{f_i}|^2$. Maintenant, si on va au-delà du domaine du temps en utilisant la relation :

$$2\pi\delta(E_f - E_i) = \int e^{i(E_f - E_i)t} dt \quad (\text{I-26})$$

et en évaluant $P_{f_i} = S_{f_i} S_{f_i}^*$, on arrive, après quelques manipulations élémentaires, au rapport de transition, c'est-à-dire, la probabilité de transition par unité de temps :

$$\frac{dP_{f_i}}{dt} = 2\delta_{f,i} \text{Im}(T_{f_i}) + 2\pi\delta(E_f - E_i) |T_{f_i}|^2 \quad (\text{I-27})$$

$$= 2\pi\delta(E_f - E_i) |T_{f_i}|^2 \quad (\text{I-28})$$

La relation (I-28) est valable pour les processus inélastiques, c'est-à-dire, où $\delta_{f,i} = 0$.

D'habitude, ce qui est mesuré et calculé dans un processus de diffusion est le rapport de transition à partir d'un état initial bien préparé pour un groupe infinitésimal d'états finaux qui est caractérisé par une certaine densité d'états. Dans notre cas, cette densité d'états dans l'espace des impulsions est donnée par : $d^3\vec{k}_d d^3\vec{k}_1 d^3\vec{k}_2$.

D'habitude, on normalise ce rapport de transition à la densité asymptotique du flux de probabilité j_p du projectile incident, et on l'appelle la section efficace quintuplement différentielle $\sigma^{(5)}(\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_i, \psi_i)$. Elle est définie par l'expression suivante :

$$\sigma^{(5)}(\vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_i, \psi_i) = \frac{dP_{f_i}}{dt} j_p^{-1} d^3\vec{k}_d d^3\vec{k}_1 d^3\vec{k}_2 \quad (\text{I-29})$$

$$= (2\pi)^4 v_0^{-1} |T_{f_i}|^2 \delta(E_f - E_i) d^3\vec{k}_d d^3\vec{k}_1 d^3\vec{k}_2 \quad (\text{I-30})$$

v_0 représente la vitesse de projectile incident relative au centre de masse de la cible.

Alternativement, on peut représenter le vecteur d'impulsion \vec{k}_j , $j = \{1, 2, d\}$ en coordonnées sphériques, c'est-à-dire par le module k_j , l'angle polaire θ_j , et l'angle azimutal φ_j en respectant un certain axe choisi. Les vecteurs d'onde k_j sont reliés aux énergies E_j , et l'équation (I-30) devient :

$$\sigma^{(5)}(E_1, E_2, \Omega_d, \Omega_1, \Omega_2) = (2\pi)^4 \mu_{pc}^2 \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} |T_{fi}|^2 dE_1 dE_2 d\Omega_d d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (\text{I-31})$$

μ_{pc} étant le centre de masse du système projectile-cible, il est défini par :

$$\mu_{pc} = \frac{m_p m_c}{m_p + m_c} \quad (\text{I-32})$$

Dans notre cas, le projectile est un électron, donc nous pouvons négliger la masse de l'électron m_p par rapport à la masse de la cible m_c . Et en utilisant le système des unités atomiques, l'expression (I-32) devient :

$$\mu_{pc} \approx 1 \quad (\text{I-33})$$

Et on retrouve l'expression habituelle de la section efficace quintuplement différentielle (S.E.Q.D):

$$\sigma^{(5)}(E_1, E_2, \Omega_d, \Omega_1, \Omega_2) = (2\pi)^4 \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} |T_{fi}|^2 dE_1 dE_2 d\Omega_d d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (\text{I-34})$$

Les éléments $d\Omega_j$ représentent les éléments des angles solides des trois électrons dans le continuum.

Cette section efficace est la plus différentielle qu'on puisse obtenir en tenant compte des lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion. Elle fournit la description la plus détaillée du processus de la double ionisation. Les énergies de l'électron incident et diffusé sont fixées. La

S.E.Q.D dépend de huit paramètres : les énergies des deux électrons éjectés E_1 et E_2 , les angles θ_d , φ_d , θ_1 , φ_1 , θ_2 et φ_2 respectivement pour l'électron diffusé et les deux électrons éjectés.

Donc, une représentation graphique complète est impossible dans un espace à huit dimensions. En plus, elle doit être mesurée dans une expérience de coïncidence au cours de laquelle les énergies et les angles des trois électrons sortants sont mesurés lors d'un processus de double ionisation directe qui est connu sous le nom d'une réaction (e,3e).

Ce genre d'expérience a été réalisé en 1989 lorsque Lahmam-Bennani et ses collaborateurs [Lah89] ont publié pour la première fois les résultats de leurs expériences sur la technique de double et triple coïncidence appliquée à la double ionisation de l'argon afin d'essayer de répondre aux questions suivantes :

- 1- Quelle est la répartition en énergie entre les deux électrons éjectés de la cible qui passent dans le continuum ?
- 2- Est-ce que cette répartition dépend des directions respectives d'émission ?
- 3- Quelle est la distribution angulaire des électrons ainsi que leur corrélation angulaire ?
- 4- Comment les distributions énergétiques et angulaires varient-elles en fonction du transfert d'impulsion ?
- 5- Quel est le processus principal responsable de la double ionisation de la couche externe sous des conditions cinématiques données ?

Par la suite, la même équipe d'Orsay a réalisé trois types d'expérience sur d'autres cibles atomiques à savoir le Krypton ([Dug92],[Lah92]), le Néon [Sch98] et l'Hélium ([Tae98],[Lah03]).

Par ailleurs, l'équipe de Freiburg [Ull97] a développé une autre technique de coïncidence différente de la première baptisée « microscope de la réaction » dont le principe consiste à détecter en coïncidence les deux électrons éjectés et l'ion résiduel formés dans la voie finale dans un espace à trois dimensions, autrement dit, cette technique permet la détermination des énergies de ces particules dans un angle solide de 4π . L'avantage de cette technique par rapport à la première est le grand angle solide de collection d'informations qui est à peu près 70% de 4π au lieu de 7%. Cependant, elle ne donne qu'une image globale du processus de la double ionisation et ne se focalise pas finement sur les détails. Dans ce sens là, les deux techniques restent complémentaires plutôt que compétitives.

Nous pouvons définir également plusieurs types de sections efficaces différentielles :

I-3-1) La section efficace quadruplement différentielle (S.E.Q_d.D) :

Elle se déduit par une intégration simple de la S.E.Q.D sur l'un des angles solides des trois électrons dans la voie finale ou sur l'une des énergies des deux électrons éjectés. Par conséquent, cette section efficace sera moins sensible aux détails des mécanismes de la double ionisation, c'est-à-dire qu'elle va diminuer la quantité d'information qui peut être recueillie. Elle était attribuée à des réactions type (e,3e-1) ([Lah91]₁,[Lah91]₂) pour étudier un processus de double ionisation directe avec détection en coïncidence d'une paire $\{(\bar{e}_d, \bar{e}_1), (\bar{e}_d, \bar{e}_2), (\bar{e}_1, \bar{e}_2)\}$ de deux électrons dans la voie finale sans tenir compte du troisième électron non observé. L'intégration s'effectue sur l'angle solide de ce dernier. Ces expériences ont servi comme outil de prédictions pour les expériences (e,3e) qui sont plus difficiles à réaliser.

I-3-2) La section efficace triplement différentielle (S.E.T.D) :

Elle peut être obtenue par une nouvelle intégration sur la S.E.Q_d.D. Plusieurs cas sont envisageables suivant le choix des paramètres d'intégration.

I-3-3) La section efficace doublement différentielle (S.E.D.D) :

Nous pouvons distinguer dix possibilités de calculer la S.E.D.D en fonction des variables cinématiques disponibles. Par exemple, on peut calculer celle qui dépend des énergies des deux électrons éjectés pour analyser la répartition énergétique entre ces deux derniers.

I-3-4) La section efficace simplement différentielle (S.E.S.D) :

Dans ce cas, il y a cinq cas à prendre en considération. Parmi ceux-ci, nous distinguons le cas où nous pouvons analyser l'influence de la distribution angulaire de l'électron diffusé sur le processus de la double ionisation directe.

I-3-5) La section efficace totale :

Elle se calcule par l'intégration de l'expression (I-34) sur toutes les variables (trois angles solides et deux énergies). Cette section efficace est largement étudiée expérimentalement, et montre que le processus de la double ionisation directe représente à peu près 0,5% de la section efficace correspondant au processus de la simple ionisation.

I-4- Le développement de l'opérateur de diffusion :

Comme c'était indiqué dans le paragraphe précédent, la première quantité qui définit la dynamique d'une collision est l'opérateur de diffusion qui peut être écrit sous la forme suivante :

$$\Omega_f^{-*} \Omega_i^+ = (1 + V_f G^{-*}) (1 + G^+ V_i) = 1 + G^+ V_i + V_f G^{-*} + V_f G_f^{-*} G^+ V_i \quad (\text{I-35})$$

Pour bien définir les différentes voies de la double ionisation, il est utile d'exprimer l'équation (I-35) en séries multiples de diffusion. Ce développement est obtenu par les itérations des équations intégrales de Lippmann-Schwinger des opérateurs de Green.

Les premiers termes du développement sont :

$$\Omega_f^{-*} \Omega_i^+ = I + J + K \quad (\text{I-36})$$

Les termes I , J et K représentent les termes d'ordre supérieur dans ce développement :

$$\begin{aligned} I = & G_i^+ V_{pe_1} + G_i^+ V_{pe_2} + G_i^+ V_{pi_r} + G_i^+ V_{pe_1} G_i^+ V_{pe_2} + G_i^+ V_{pe_1} G_i^+ V_{pi_r} + G_i^+ V_{pe_2} G_i^+ V_{pe_1} + G_i^+ V_{pe_2} G_i^+ V_{pi_r} \\ & + G_i^+ V_{pi_r} G_i^+ V_{pe_1} + G_i^+ V_{pi_r} G_i^+ V_{pe_2} + G_i^+ V_{pe_2} G_i^+ V_{pe_1} G_i^+ V_{pi_r} + G_i^+ V_{pe_2} G_i^+ V_{pi_r} G_i^+ V_{pe_1} \\ & + G_i^+ V_{pi_r} G_i^+ V_{pe_1} G_i^+ V_{pe_2} + G_i^+ V_{pi_r} G_i^+ V_{pe_2} G_i^+ V_{pe_1} \dots \end{aligned} \quad (\text{I-37})$$

$$J = \sum_{i=1}^7 J_i \quad (\text{I-38})$$

$$J_1 = V_{pe_1} G_f^+ + V_{pe_2} G_f^+ + V_{e_1 i_r} G_f^+ + V_{p_i r} G_f^+ + V_{e_1 e_2} G_f^+ + V_{e_2 i_r} G_f^+ + V_{pe_1} G_f^+ V_{pe_1} G_f^+ + V_{pe_2} G_f^+ V_{pe_2} G_f^+ + V_{e_1 e_2} G_f^+ V_{e_1 e_2} G_f^+ + \dots \quad (\text{I-39})$$

$$J_2 = V_{pe_1} G_f^+ V_{p_i r} G_f^+ + V_{pe_1} G_f^+ V_{e_1 i_r} G_f^+ + V_{pe_1} G_f^+ V_{pe_2} G_f^+ + V_{pe_1} G_f^+ V_{e_1 e_2} G_f^+ + V_{pe_1} G_f^+ V_{e_2 i_r} G_f^+ \quad (\text{I-40})$$

$$J_3 = V_{p_i r} G_f^+ V_{pe_1} G_f^+ + V_{p_i r} G_f^+ V_{e_1 i_r} G_f^+ + V_{p_i r} G_f^+ V_{pe_2} G_f^+ + V_{p_i r} G_f^+ V_{e_1 e_2} G_f^+ + V_{p_i r} G_f^+ V_{e_2 i_r} G_f^+ \quad (\text{I-41})$$

$$J_4 = V_{e_1 i_r} G_f^+ V_{pe_1} G_f^+ + V_{e_1 i_r} G_f^+ V_{p_i r} G_f^+ + V_{e_1 i_r} G_f^+ V_{pe_2} G_f^+ + V_{e_1 i_r} G_f^+ V_{e_1 e_2} G_f^+ + V_{e_1 i_r} G_f^+ V_{e_2 i_r} G_f^+ \quad (\text{I-42})$$

$$J_5 = V_{pe_2} G_f^+ V_{pe_1} G_f^+ + V_{pe_2} G_f^+ V_{p_i r} G_f^+ + V_{pe_2} G_f^+ V_{e_1 i_r} G_f^+ + V_{pe_2} G_f^+ V_{e_1 e_2} G_f^+ + V_{pe_2} G_f^+ V_{e_2 i_r} G_f^+ \quad (\text{I-43})$$

$$J_6 = V_{e_1 e_2} G_f^+ V_{pe_1} G_f^+ + V_{e_1 e_2} G_f^+ V_{p_i r} G_f^+ + V_{e_1 e_2} G_f^+ V_{e_1 i_r} G_f^+ + V_{e_1 e_2} G_f^+ V_{pe_2} G_f^+ + V_{e_1 e_2} G_f^+ V_{e_2 i_r} G_f^+ \quad (\text{I-44})$$

$$J_7 = V_{e_2 i_r} G_f^+ V_{pe_1} G_f^+ + V_{e_2 i_r} G_f^+ V_{p_i r} G_f^+ + V_{e_2 i_r} G_f^+ V_{e_1 i_r} G_f^+ + V_{e_2 i_r} G_f^+ V_{pe_2} G_f^+ + V_{e_2 i_r} G_f^+ V_{e_1 e_2} G_f^+ \quad (\text{I-45})$$

$$K = V_{pe_1} G_f^+ G_i^+ V_{pe_1} + V_{pe_1} G_f^+ G_i^+ V_{pe_2} + V_{pe_1} G_f^+ G_i^+ V_{p_i r} + V_{pe_2} G_f^+ G_i^+ V_{pe_1} + V_{pe_2} G_f^+ G_i^+ V_{pe_2} + V_{pe_2} G_f^+ G_i^+ V_{p_i r} + V_{p_i r} G_f^+ G_i^+ V_{pe_1} + V_{p_i r} G_f^+ G_i^+ V_{pe_2} + V_{p_i r} G_f^+ G_i^+ V_{p_i r} + V_{e_1 e_2} G_f^+ G_i^+ V_{pe_1} + V_{e_1 e_2} G_f^+ G_i^+ V_{pe_2} + V_{e_1 e_2} G_f^+ G_i^+ V_{p_i r} + V_{e_1 i_r} G_f^+ G_i^+ V_{pe_1} + V_{e_1 i_r} G_f^+ G_i^+ V_{pe_2} + V_{e_1 i_r} G_f^+ G_i^+ V_{p_i r} + V_{e_2 i_r} G_f^+ G_i^+ V_{pe_1} + V_{e_2 i_r} G_f^+ G_i^+ V_{pe_2} + V_{e_2 i_r} G_f^+ G_i^+ V_{p_i r} + \dots \quad (\text{I-46})$$

Nous remarquons, à partir du nombre de termes dans les équations (I-37) et (I-46), qu'une évaluation numérique exacte des éléments de la matrice S pour la double ionisation est extrêmement difficile, et seulement quelques éléments ont été calculés.

Néanmoins, les développements (I-37) à (I-46) sont tout à fait utiles pour deux raisons : d'une part, dans certains types d'expériences, il est fort probable qu'une partie de ces termes soit prédominante. Afin de désigner les termes les plus importants, nous comparons la

puissance des interactions entre deux particules $\frac{Z_{ij}}{v_{ij}}$ associée aux différents potentiels

coulombiens entre deux particules. Le Z_{ij} est le produit des deux charges des particules i et

j , et v_{ij} est leur vitesse relative. Par exemple, si le projectile est très rapide ayant une charge faible, on peut négliger dans G^\pm (équation (I-35)) l'interaction du projectile avec la cible. Cette situation correspond à la première approximation de Born.

D'autre part, le développement multiple de diffusion (I-37) à (I-46) peut servir à mieux comprendre les processus réactionnels mis en jeu. Autrement dit, tous les mécanismes possibles de la double ionisation sont aisément extraits au moyen des équations (I-37) à (I-46).

I-4-1) Les différents mécanismes de la double ionisation :

La section efficace (I-34), qui est définie dans un espace d'impulsions à neuf dimensions basé sur \vec{k}_d , \vec{k}_1 et \vec{k}_2 , est calculée sous forme d'une somme cohérente de toutes les amplitudes de transition associées aux termes (I-37)-(I-46) qui peut mener à des phénomènes d'interférences. En effet, dans certaines régions dans l'espace d'impulsions, les éléments de matrice de certains termes dans les équations (I-37)-(I-46) peuvent être particulièrement dominants. Dans ce paragraphe, nous choisissons ces termes et déterminons qualitativement les régions de l'espace des impulsions où les mécanismes traduits par ces termes deviennent opérationnels.

Nous devons respecter la contrainte de ne prendre que des énergies d'impact élevées, c'est-à-dire : $E_0 \gg \varepsilon_i$ et $(E_d + E_1 + E_2) \gg \varepsilon_f$.

Dans ce paragraphe, seulement certains termes dans les équations (I-37) à (I-46) seront analysés :

i- L'opérateur unité dans l'équation (I-36) correspond à la partie non diffusée et ne sera pas traité dans ce paragraphe.

ii- Le premier terme (ou le deuxième) dans l'équation (I-37) décrit une collision électron-projectile [figure (I-1)(a)]. Le deuxième électron, qui n'interagit pas directement avec le projectile, est émis au moyen d'un changement de potentiel du à la première collision. Les conditions cinématiques pour que ce processus ait lieu sont : $\vec{k}_1 \approx \vec{k}_i - \vec{k}_d$ et $\vec{k}_{ion} \approx -\vec{k}_2$. Ce processus s'appelle Shake-Off (SO) ([Car92],[Twe92]).

iii- Le troisième terme dans l'équation (I-37) peut être interprété comme étant une diffusion directe du projectile par le noyau (figure (I-1) (b)), suivie par l'éjection double de

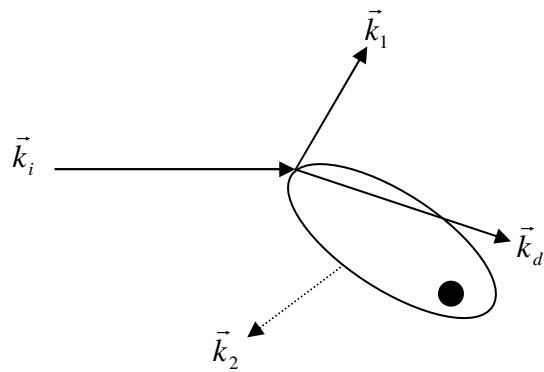
deux électrons de la cible. Les conditions cinématiques pour que ce processus ait lieu sont : $\vec{k}_d \approx \vec{k}_i$, $\vec{k}_{ion} \approx 2\vec{k}_i$ et $\vec{k}_1 \approx \vec{k}_2$. Ce processus peut être considéré comme un double Shake-Off des deux électrons.

iv- Le quatrième et le sixième terme du développement (I-37) sont schématisés dans la figure (I-1) (c). Ces processus sont du second ordre dans le potentiel de diffusion. Après deux collisions binaires entre le projectile et les deux électrons actifs, ces derniers sont éjectés. Les conditions cinématiques pour que ce processus ait lieu sont : $\vec{k}_1 \approx \vec{k}_0 - \vec{k}'_d$, $\vec{k}_{ion} \approx 0$ et $\vec{k}_2 \approx \vec{k}'_d - \vec{k}_d$. Si le projectile a la même masse qu'un électron, on en déduit les conditions suivantes : $\vec{k}_2 \perp \vec{k}_d$, $k_2^2 + k_d^2 = k_d'^2$, $\vec{k}_1 \perp \vec{k}'_d$ et $k_1^2 + k_d'^2 = k_0^2$. Ce mécanisme de la double ionisation à deux étapes s'appelle TS2.

v- Pour le processus de la simple ionisation, la première diffusion entre le projectile et le premier électron (figure(I-1) (c) et (d)) a comme conséquence une crête binaire [Ehr86]. A la direction opposée de cette crête, une autre structure apparaît qui s'appelle la crête de recul qui représente la signature de la diffusion de l'électron éjecté par le noyau [Ehr86]. Dans le cas d'une double ionisation, la crête de recul peut être identifiée en examinant les termes illustrés dans la figure (I-1) (e) et (f).

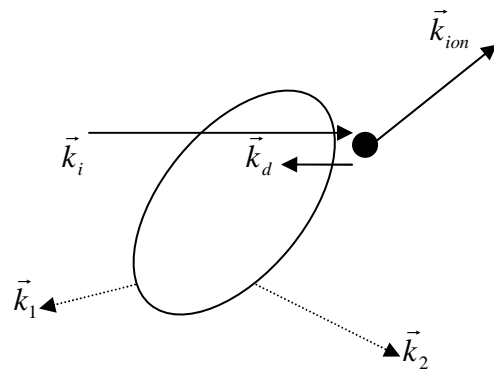
Dans la figure (I-1) (e), l'un des deux électrons atomiques recule loin du noyau après une collision avec le projectile. Le processus de recul peut être facilité principalement par la liaison de l'état initial ou par les interactions dans la voie finale de cet électron avec le noyau. Ensuite, le deuxième électron est éjecté par une simple interaction avec le projectile. Les conditions cinématiques pour que ce processus ait lieu sont respectivement celles de la figure (I-1) (c) et (d) sauf pour $\vec{k}_{ion} \approx -\vec{k}_1$.

$$\underline{\underline{G_i V_{pe_1}}}$$



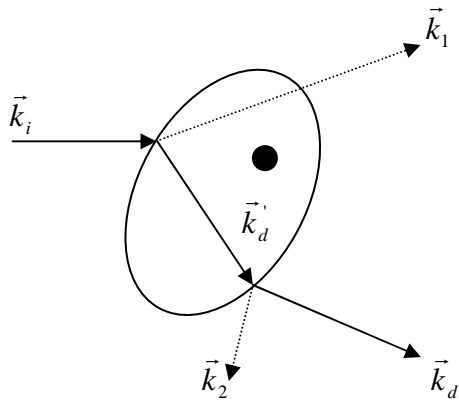
(a)

$$\underline{\underline{G_i V_{pi_r}}}$$



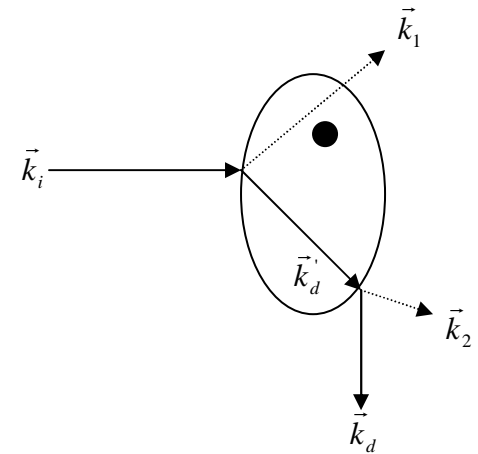
(b)

$$\underline{\underline{G_i V_{pe_2} G_i V_{pe_1}}}$$



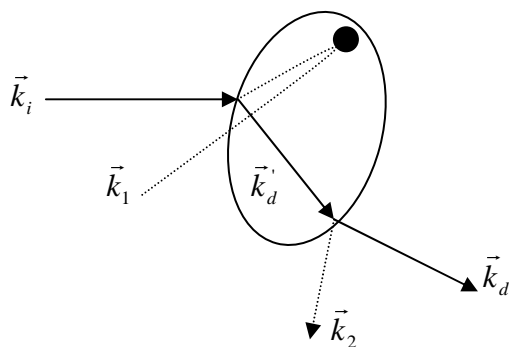
(c)

$$\underline{\underline{G_i V_{pe_2} G_i V_{pe_1}}}$$



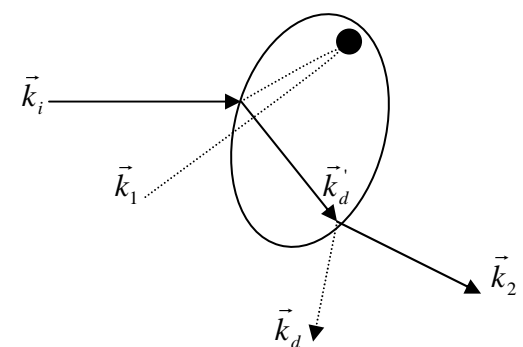
(d)

$$\underline{\underline{G_i V_{pe_2} G_f V_{pe_1}}}$$



(e)

$$\underline{\underline{G_i V_{pe_2} G_f V_{pe_1}}}$$



(f)

Figure (I-1)(a,b,c,d,e,f): Une représentation schématique des mécanismes de double ionisation via les opérateurs de transition traités dans le paragraphe précédent.

$\vec{k}_i, \vec{k}_d, \vec{k}_1$ et \vec{k}_2 représentent les vecteurs d'onde des électrons incident, diffusé et les deux éjectés respectivement.

vi- Dans les figures (I-2) (a) et (c), on schématise quelques mécanismes où la diffusion électron-électron est impliquée. Dans tous ces cas, le projectile diffuse une fois l'un des deux électrons actifs. Cette étape est suivie par une diffusion de cet électron excité par l'autre électron actif et/ou par le noyau menant à la double ionisation. Ce processus à deux étapes s'appelle TS1 et se manifeste sous les conditions suivantes : $\vec{k}_1 \perp \vec{k}_2$ et $\vec{k}_{ion} \approx 0$. En revanche, pour le cas illustré par la figure (I-2) (b), les conditions pour qu'il ait lieu sont : $\vec{k}_1 \perp \vec{k}_2$, $\vec{k}_{ion} \approx -2(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)$ et $\vec{k}_0 + \vec{k}_d = -(\vec{k}_1 + \vec{k}_2)$. Dans la figure (I-2) (c), on rencontre la même situation que la figure (I-2) (a), en effet, l'un des électrons recule loin de l'ion après une simple collision électron-électron. Ainsi, les conditions cinématiques de la figure (I-2) (a) s'appliquent pour la figure (I-2) (c) sauf pour $\vec{k}_{ion} \approx -2\vec{k}_1$.

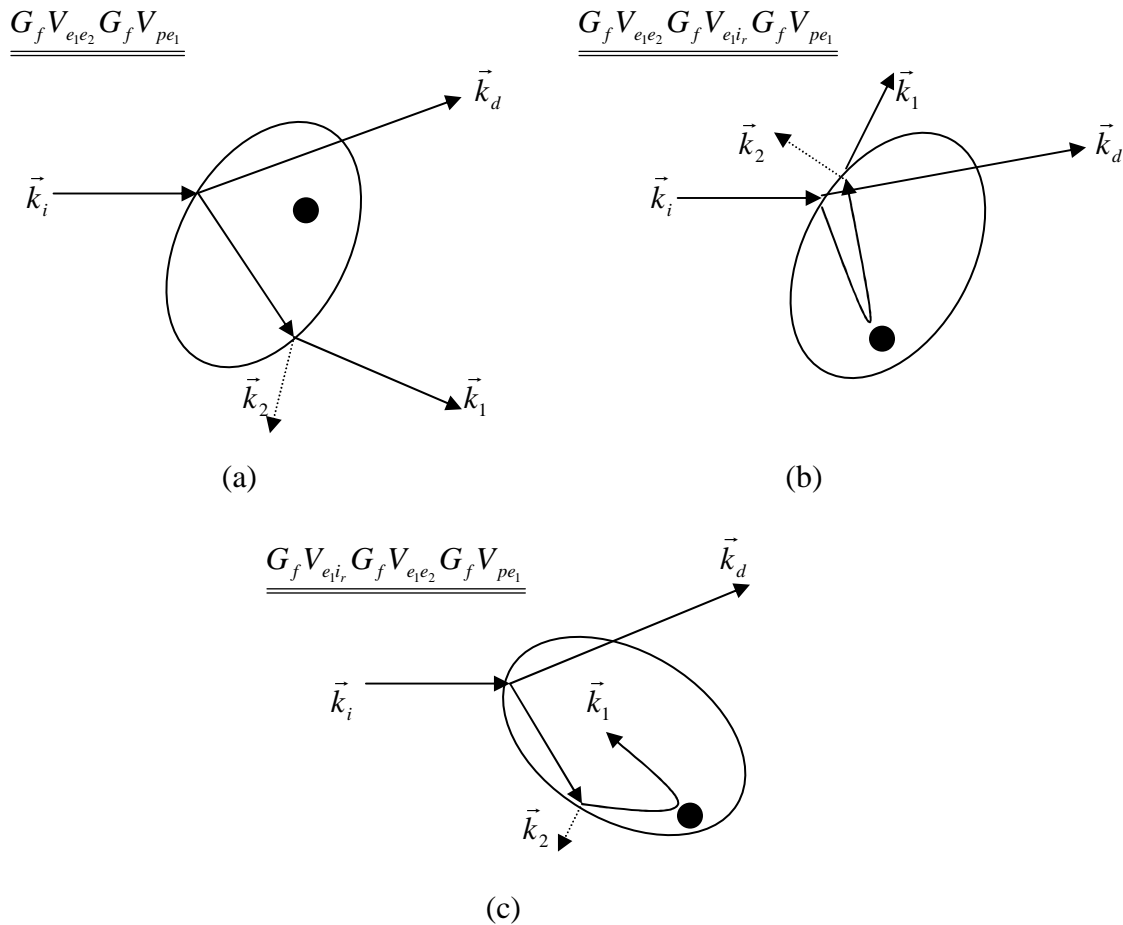


Figure (I-2) : la même que la figure (I-1).

I-5- Les caractéristiques cinématiques du processus de la double ionisation :

Dans ce paragraphe, nous décrivons les différentes conditions cinématiques utilisées dans les expériences. L'équipe d'Orsay a choisi de travailler selon une condition cinématique coplanaire, c'est-à-dire que les trois électrons sortants dans la voie finale sont détectés dans un plan contenant les angles θ_d , θ_1 et θ_2 par rapport à la direction d'incidence, alors que les angles φ_1 et φ_2 valent 0 ou π . Ces électrons sont analysés simultanément par rapport à leur direction et leur énergie (sauf l'électron diffusé). Ce qui permet la détermination de tous les paramètres cinématiques et donne une information claire et détaillée sur le processus de la double ionisation. La cible est considérée dans son état fondamental, et l'énergie de recul de l'ion résiduel est considérée comme négligeable.

Nous pouvons distinguer deux types de géométrie coplanaire : symétrique et asymétrique.

I-5-1) Géométrie coplanaire symétrique :

Ce type d'arrangement spatial est caractérisé par l'éjection des deux électrons de la cible dans des directions symétriques par rapport à la direction d'incidence, autrement dit : $\theta_1 = 2\pi - \theta_2$ (figure (I-3)). Cette symétrie a été utilisée pour plusieurs expériences sur plusieurs cibles atomiques, comme l'argon [EIM97], le néon [Sch98] et l'hélium [Lah99].

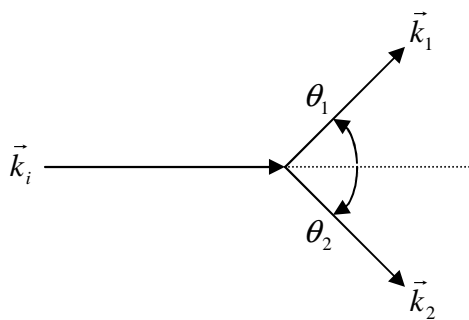


Figure (I-3) : Géométrie coplanaire symétrique.

I-5-2) Géométrie coplanaire asymétrique :

Ce type de géométrie suppose que les vecteurs d'impulsion \vec{k}_i , \vec{k}_d , \vec{k}_1 et \vec{k}_2 se trouvent dans le plan. Dans la voie finale, l'électron incident ayant une énergie E_0 est diffusé avec une énergie E_d , en éjectant deux électrons ayant respectivement des énergies E_1 et E_2 , notons que $E_{1,2} \ll E_d$. L'électron rapide est diffusé sous un angle θ_d qui est fixé pour des petites valeurs, en général, $\theta_d \leq 1.5^\circ$. Pour les deux électrons éjectés, les deux angles d'éjection θ_1 et θ_2 sont soumis à des conditions expérimentales qui les limitent dans les domaines angulaires suivantes : $20^\circ < \theta_1 < 160^\circ$ et $200^\circ < \theta_2 < 340^\circ$.

On distingue trois modes :

a) Mode de l'angle individuel fixé :

Ce mode consiste à fixer un des deux angles θ_1 ou θ_2 des deux électrons éjectés, tout en variant l'autre angle (dans la théorie, de 0 à 2π) dans le sens inverse des aiguilles d'une montre. Cet arrangement cinématique a été utilisé, par exemple, par Lahmam-Bennani et al. [Lah99]₁ [Khe99] pour une cible d'hélium (figure (I-4)).

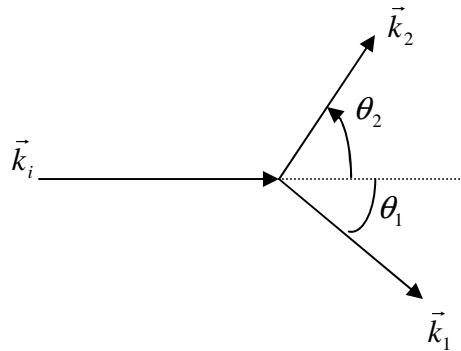


Figure (I-4) : Mode de l'angle individuel fixé (θ_1 fixé)

b) Mode de l'angle individuel mutuel :

Dans ce mode, les directions des électrons éjectés sont déterminées de telle sorte que l'angle mutuel $\theta_{12} = |\theta_1 - \theta_2|$ soit constant. Cet angle est mesuré positivement dans le sens

trigonométrique. Ce type d'arrangement a été utilisé par El Marji et ses collaborateurs pour mesurer la section efficace quintuplement différentielle de la double ionisation de l'argon [EIM97], par Schröter et al. sur une cible du Néon [Sch98], par Taouil et al. [Tao98] puis par Dorn et ses collaborateurs [Dor99] sur une cible d'hélium (figure (I-5)).

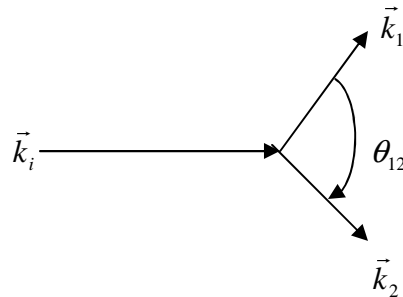


Figure (I-5) : Mode de l'angle individuel mutuel.

c) Mode de l'angle mutuel intégré :

Ce troisième mode consiste à intégrer la SEQD de 0 à π sur toutes les directions individuelles θ_1 ou θ_2 tout en gardant l'angle mutuel θ_{12} constant. La section efficace intégrée ne dépendra que de l'angle mutuel en question.

I-6- Description théorique de l'état final de la cible :

Depuis les années soixante, plusieurs modèles théoriques ont été élaborés afin d'étudier le processus de la double ionisation d'un système atomique par l'impact d'un électron (qu'il soit rapide ou lent), et d'essayer d'interpréter les divers résultats expérimentaux disponibles.

A haute énergie, Mittlemann [Mit66] a supposé que la double ionisation d'un atome par impact électronique peut se produire via deux mécanismes fondamentaux. Dans le premier, l'électron incident interagit avec la cible et éjecte l'un de ses électrons, ensuite, l'un des deux entre en collision avec le deuxième électron cible (mécanisme à deux étapes). Dans le second processus, l'électron incident heurte la cible et éjecte un électron cible, cette première étape a lieu brusquement sur une échelle du temps de l'ordre d'une période atomique. L'ion résiduel

se trouvant dans un état excité a tendance à se relaxer, ce qui entraîne la seconde ionisation (mécanisme 'Shake-Off').

En utilisant l'approximation de Hartree-Fock pour décrire la fonction d'onde de l'atome de l'hélium, il a évalué le rapport entre les sections efficaces de la simple et la double ionisation et a trouvé que ce rapport est indépendant de l'énergie des électrons incidents (il vaut 198). Cette approche était insuffisante pour reproduire les résultats expérimentaux.

Toujours dans le cas de l'hélium, Byron et Joachain [Byr66] ont effectué une étude similaire et ont montré l'importance de la corrélation des deux électrons de la cible sur ce phénomène. Ils ont utilisé des fonctions d'onde de type Hylleraas, Hartree-Fock et hydrogénoïdes pour définir l'état initial de la cible. Ils ont trouvé que si on néglige complètement la corrélation des électrons atomiques dans l'état initial et final, la section efficace de la double ionisation directe est nulle. Et par conséquent, ils en ont déduit que la double ionisation résulte uniquement de la corrélation dans le cadre de la première approximation de Born (PAB). Ils ont aussi conclu que les contributions possibles des ordres supérieurs devraient s'ajouter au terme de premier ordre pour aboutir à des résultats proches de l'expérience.

Dans le même cadre de la PAB, Tweed ([Twe73]₁,[Twe73]₂) a repris le traitement de Rudge et Seaton [Rud65] sur la simple ionisation. Il a évalué les sections totales et partielles de la double ionisation de l'ion H^- , de l'atome de l'hélium et de l'ion Li^+ en utilisant des fonctions d'onde similaires à celles utilisées par Byron et Joachain. Il a montré l'influence du choix de l'angle de diffusion sur la section efficace simplement différentielle SESD par rapport à l'énergie d'incidence qui décroît rapidement avec l'accroissement de celui-ci. A haute énergie, la section efficace totale est dominée par la contribution des petits transferts d'impulsion, et les termes qui correspondent à la seconde approximation de Born (SAB) peuvent être négligés devant les autres termes du premier ordre. Cependant, il a signalé aussi l'influence du choix de la charge effective vue par chaque électron éjecté sur la valeur de la SESD en fonction de leur impulsion.

Neudatchin et ses collaborateurs [Neu77] ont montré que la distribution angulaire des trois électrons dans le continuum pour la double ionisation par impact électronique (ou photonique) est très sensible à la corrélation inter-atomique. Ils ont proposé d'explorer expérimentalement ce processus pour l'atome d'hélium à haute énergie d'incidence en détectant les trois électrons sortants en coïncidence. Ils ont calculé la section SEQD en se basant sur l'approximation de l'onde plane orthogonalisée, avec des électrons incidents de 30 keV dans une cinématique coplanaire symétrique où les deux électrons éjectés ont les mêmes impulsions en module mais sont éjectés dans la direction perpendiculaire à celle du faisceau incident.

Smirnov et al [Smi78] ont effectué un travail similaire à ce dernier en utilisant la même approximation à haute énergie. Ils ont étudié la double transformée de Fourier de l'état initial d'une cible d'hélium pour démontrer le rôle et l'importance de la corrélation électron-électron dans la voie initiale.

Tous les travaux signalés ci-dessus ont été fait au premier ordre. Par ailleurs, McGuire [McG82] a analysé la double ionisation de l'hélium en incluant le mécanisme 'Shake-Off' et le mécanisme à deux étapes 'TS'. Il a trouvé que ces deux mécanismes ont des contributions comparables au voisinage d'une vitesse des électrons incidents de l'ordre de dix fois la vitesse de Bohr ($v_B = 2,2 \cdot 10^9 \text{ cm/s}$). Il a conclu aussi qu'aucun des ces mécanismes ne peut expliquer tout seul la dépendance en énergie observée, en revanche, il faut associer les deux pour en avoir une qui soit raisonnable. Il a montré que la section efficace de la double ionisation est proportionnelle à celle de la simple ionisation dans le cas du mécanisme 'Shake-Off' et que leur rapport est indépendant de la vitesse du projectile. Ce rapport reste sensible à l'interaction électron-électron dans les deux voies initiale et finale. Dans le cas du 'TS', il a déterminé pour la première fois la dépendance en vitesse v du projectile pour le rapport en question qui a un comportement en $\frac{1}{v \ln v}$.

Pour des électrons incidents d'énergie variant de 5 à 10 KeV qui interagissent avec une cible d'hélium, Dal Cappello et Le Rouzo [Dal91] ont étudié le processus en question en décrivant l'électron incident et diffusé par des fonctions d'ondes planes. Ils ont revu trois modèles pour la description de la fonction d'onde dans l'état final :

- i- le modèle de l'onde plane orthogonalisée utilisé par Neudatchin [Neu77] et Smirnov [Smi78] qui est applicable dans le cas où les électrons de la cible s'éjectent avec de très grandes énergies qui justifient leur description en ondes planes.
- ii- le modèle de l'onde coulombienne avec des charges effectives fixes utilisées par Byron [Byr67] qui tient compte des interactions coulombiennes individuelles de chaque électron éjecté avec le noyau dans la voie finale.
- iii- le modèle de l'onde coulombienne avec des charges effectives variables utilisé par Tweed [Twe73]₁. Ce modèle tient compte également de l'interaction coulombienne des deux électrons éjectés via l'introduction des ces charges effectives.

Notons que ce traitement ne tient compte de la corrélation dans l'état initial que d'une manière approximative, en introduisant des fonctions d'onde de type Silverman [Sil60], ce qui

a permis de conclure sur l'importance d'introduire la corrélation radiale et angulaire pour obtenir un bon accord avec l'expérience. Concernant la corrélation angulaire, les auteurs estimaient qu'elle peut être traitée en incluant tout simplement les orbitales p . En revanche, l'introduction partielle de la corrélation dans la voie finale par le moyen des charges effectives variables les a conduit à une SEQD nulle lorsque les deux électrons ont les mêmes énergies et s'éjectent selon la même direction que celle du vecteur du transfert.

Tweed [Twe92] a examiné le double processus dans les collisions électron-hélium en se basant sur la SAB. D'une part, il a indiqué que les contributions des mécanismes à deux étapes dans la double ionisation apparaissent d'une manière significative pour des énergies d'incidence au dessus de 1 keV. D'autre part, il a conclu que le mécanisme 'Shake-Off' dépend de la corrélation dans l'état initial confirmant le résultat déjà donné par Byron. Il reste à signaler que la corrélation angulaire de ce processus est maximale lorsque l'un des électrons est éjecté dans la direction du vecteur du transfert.

Dal Cappello et al [Dal92] ont étudié la distribution angulaire de la double ionisation du krypton par impact électronique à haute énergie d'incidence (5 keV) en se servant d'une approche de calcul *ab initio* dans le cadre de première approximation de Born. Ils ont inclus dans leur modèle une corrélation partielle dans les voies initiale et finale, et ils se sont basés sur le modèle de l'onde coulombienne orthogonalisée à charge effective variable pour la description des électrons éjectés, ils ont utilisé également l'approximation du 'cœur gelé' pour décrire la cible sous forme d'un système atomique à trois corps.

Ils ont obtenu des résultats qui donnent parfois les mêmes ordres de grandeur et allures que les données expérimentales, ils ont observé également un grand décalage du maximum et une surestimation des données expérimentales d'un facteur cinq.

Joulakian et al [Jou92] ont étudié, dans le cadre de la première approximation de Born, la double ionisation de l'hélium atomique par impact d'électrons rapides (5109 eV) en utilisant une fonction d'onde corrélée de type Hylleraas pour décrire la cible [Hyl29], et le formalisme Brauner, Briggs et Klar (BBK) pour décrire le double continuum des deux électrons éjectés. Les auteurs de ce travail ont conclu que l'introduction de la corrélation dans l'état initial de la cible a une grande influence dans le cas d'une équipartition énergétique que dans le cas contraire.

Ils ont trouvé une probabilité nulle quand les deux électrons de la cible s'éjectent dans la même direction avec les mêmes énergies, et ils ont conclu également que la corrélation dans l'état final a un effet plus important que dans l'état initial.

Berakdar et Klar [Ber93] ont étudié la structure de la SEQD de la double ionisation de l'hélium par impact électronique à haute énergie en étudiant les minimums et les maximums de cette section efficace pour les processus $(e,3e)$ et leurs origines dynamiques et cinématiques. Cette étude était effectuée toujours dans le domaine de PAB. Ils ont distingué trois cas :

- i- Premier cas :** ils ont supposé que l'énergie transférée à la cible est faible et que les deux électrons de la cible s'éjectent avec les mêmes énergies mais dans des directions opposées, c'est-à-dire, l'angle entre les deux vecteurs d'onde est de π . Cette situation conduit à l'apparition d'un minimum dans la SEQD (voir chapitre 2).
- ii- Deuxième cas :** ils ont considéré une situation du grand transfert d'impulsion, et ils ont montré que la distribution angulaire des électrons éjectés admet des minimums dans les directions qui sont perpendiculaires à celle du transfert.
- iii- Troisième cas :** la SEQD est nulle lorsque les deux électrons de la cible s'éjectent dans la même direction avec la même énergie, et ceci est dû à la répulsion électron-électron.

Joulakian et Dal Cappello [Jou93] ont étudié les conditions théoriques optimales pour mesurer, dans tout l'espace, la SEQD de la double ionisation de l'hélium par impact électronique (5 keV). Ils ont choisi des fonctions d'onde similaires à celles citées en page précédente par le même auteur. Ils ont trouvé que la forme de la distribution angulaire obtenue pour les différentes fonctions d'onde de l'état initial reste sensiblement la même, sauf au niveau de l'amplitude qui converge vers une valeur limite avec l'augmentation de la corrélation.

Hda et *al* [Hda94] ont choisi d'autres cibles de gaz rares, comme le krypton et l'argon pour étudier la SEQD toujours dans le cadre de la PAB. Ils ont utilisé des fonctions d'onde de type BBK approximé pour décrire l'état final, et l'approximation de 'cœur gelé' pour décrire l'état initial. Cette méthode leur a permis d'obtenir des résultats qualitativement proches des valeurs expérimentales qui diffèrent d'un facteur variant entre 0,33 et 60 selon les cas. Ils ont également montré que la contribution des états 3P de l'ion est très importante et que l'introduction des composantes $4d^2$ est nécessaire.

En 1994, Popov et *al* [Pop94] ont introduit la contribution des mécanismes à deux étapes dans le cadre de la seconde approximation de Born pour étudier la double ionisation de

l'hélium à haute énergie (ils se sont basés sur le traitement de Tweed [Twe73]₁ et sur l'approximation de l'onde plane). Ils ont conclu que le mécanisme 'TS2' est négligeable à haute énergie d'incidence (au voisinage de 5 keV), alors que ce n'était pas le cas pour les mécanismes 'Shake-Off' et 'TS1'. Ils ont trouvé également que, pour une haute énergie de transfert et des énergies relativement hautes des électrons éjectés ($E_1 = E_2 = 500\text{eV}$), la SEQD de 'Shake-Off' de chacun des électrons est concentrée autour de la direction du transfert. Alors que celle du 'TS1' admet un maximum si la somme des impulsions des électrons éjectés est de l'ordre de celle du transfert. Quand les énergies d'éjection valent 100 eV et si nous considérons un faible transfert d'impulsion, la contribution du 'TS1' dans la SEQD devient dominante. D'autre part, quand le transfert d'impulsion est grand et égal à l'impulsion de l'un des électrons éjectés et quand le second a une impulsion faible, la contribution du 'Shake-Off' est dominante. Finalement, ils ont conclu que pour des énergies d'éjection faibles, les contributions de 'Shake-Off' et 'TS1' sont du même ordre et présentent un important effet d'interférence.

Lamy et *al* [Lam94] ont étudié la double ionisation de l'ion H^- et l'hélium atomique à l'aide de PAB. Ils ont montré que la SEQD est plus importante que celle de l'hélium et leurs résultats ont révélé des distributions angulaires différentes. Ils ont utilisé des fonctions d'onde de type Pluinage [Plu51] et de type BBK pour décrire respectivement la cible et le double continuum. En analysant une géométrie coplanaire à haute énergie, ils ont remarqué que pour H^- , la SEQD est maximale dans la direction perpendiculaire au transfert pour des énergies d'éjection égales et lorsque l'un des deux électrons de la cible est éjecté dans la même direction, alors que pour des énergies différentes, le maximum est localisé dans la direction opposée du transfert. Ils ont constaté aussi que la SEQD est plus grande si, d'une part, les énergies d'éjections sont petites, et d'autre part, les deux électrons sont émis avec des énergies différentes. Ils ont évalué également d'un point de vue numérique les différentes directions optimales d'éjection des deux électrons pour les deux cibles.

Dal Cappello et *al* [Dal95] ont calculé les SEQD pour certains gaz rares (Ne, Ar, Kr et Xe) à haute énergie d'incidence (5,5 keV) et à faible transfert d'impulsion et énergies d'éjection des électrons. Ils se sont intéressés à étudier les contributions des différents états des ions résiduels (3P , 1D et 1S) séparément et ont trouvé que l'état 3P joue un rôle important dans la détermination du comportement de la SEQD pour les différentes cinématiques choisies. Dans le cas où les deux électrons éjectés ont la même énergie et quand l'un des deux est éjecté dans la direction du transfert, ils ont trouvé que l'état 3P ne contribue pas dans la

SEQD pour l'éjection du deuxième électron dans la direction inverse du premier, contrairement aux deux états 1D et 1S . Pour des énergies égales (15 eV et 45 eV), ils ont constaté que les SEQD pour le Néon sont grandes par rapport à celles mesurées pour l'Argon, le Krypton et le Xénon. Ils ont estimé aussi les valeurs maximales de ces sections efficaces ainsi que leur positions.

Gupta et Srivastava [Gup95] ont étudié l'effet de la corrélation électron-électron dans l'état fondamental de l'hélium en essayant plusieurs fonctions d'onde. Ils ont montré que la SEQD est sensible à la corrélation dans la voie initiale quand les deux électrons sont éjectés avec des faibles énergies (entre 2 eV et 50 eV) en supposant que des électrons sont détectés à des angles fixes et que leurs énergies varient de telle sorte que la somme des deux soit constante, ou bien l'un des électrons est détecté à un angle fixe qui vaut 90° et l'autre varie pour des énergies fixées.

Srivastava et al [Sri96] ont réalisé une étude similaire à celle effectuée par Gupta [Gup95], ils ont choisi de nouveau les mêmes fonctions d'onde pour décrire l'état fondamental d'une cible d'hélium, ainsi que la fonction utilisée par Tweed et Langlois [Twe87] toujours dans le cadre de la première approximation de Born et du modèle BBK approximé. Ils ont trouvé que lorsque l'un des électrons de faible énergie est éjecté dans la direction du transfert, la contribution angulaire de l'autre électron est très sensible à la corrélation électron-électron dans l'état fondamental de l'hélium en appliquant une cinématique coplanaire (mode de l'angle individuel mutuel).

En étudiant les mécanismes à deux étapes de la double ionisation de la même cible à haute énergie d'incidence (entre 1 keV et 5 keV), El Mkhater [ElM98] et Dal Cappello [Dal98] ont montré que ces mécanismes ne sont pas négligeables pour ce domaine d'énergie. Pour évaluer le second terme de l'approximation de Born, ils ont utilisé dans leurs calculs des fonctions d'onde de type Silverman pour décrire l'état initial de la cible, et de type BBK approximé pour décrire l'état final. A partir de ce formalisme, ils ont conclu que le mécanisme 'TS2' peut expliquer tout seul la symétrie brisée autour de la direction du transfert d'impulsion, sachant que l'un des électrons éjectés est émis dans cette direction. Sa contribution est importante dans le cas où les deux électrons s'éjectent avec la même énergie. Cette symétrie est brisée davantage quand l'énergie d'incidence devient faible. En revanche, le mécanisme 'TS1' est le processus le plus probable pour des énergies d'éjection différentes quand la direction de l'électron éjecté le plus rapide est opposée à celle du transfert d'impulsion.

Afin d'étudier l'influence des conditions cinématiques sur la distribution angulaire de la SEQD de la double ionisation de l'ion H^- dans le cadre de la PAB, Defrance et al [Def99] ont choisi un modèle théorique se basant sur le choix d'une fonction d'onde de type Chandrasekhar [Cha44] pour décrire l'état initial de la cible qui reproduit 63,3% de la valeur de l'énergie de corrélation dans la voie initiale, alors que pour décrire l'état final, ils ont choisi une fonction d'onde type BBK approximé. Ce modèle leur a permis de mettre en évidence les maxima à partir de l'expression analytique de la SEQD quand le vecteur impulsion d'un des électrons éjectés est parallèle ou anti-parallèle par rapport à la direction du transfert, et ceci était valable pour toutes les conditions cinématiques. L'existence d'autres maxima dépendait de ces conditions. Ils ont estimé que le mécanisme 'Shake-Off' peut se produire en deux étapes : d'une part, l'électron incident heurte l'électron le plus fortement lié de H^- et l'éjecte. D'autre part, l'autre électron faiblement lié, se trouvant dans un état qui n'est pas un état propre de l'atome d'hydrogène formé, s'éjecte par un processus de relaxation. Un autre cas est envisageable : le projectile interagit tout d'abord avec l'électron le moins lié et l'éjecte, et la deuxième ionisation est due à l'éjection du deuxième électron fortement lié qui se trouvait dans un état qui n'est pas un état propre de l'hydrogène.

Lahmam-Bennani et ses collaborateurs ont analysé l'origine des minima et maxima dans la contribution angulaire de leurs mesures de la SEQD de la double ionisation de l'hélium [Lah99]₂. Ils se sont basés sur des calculs théoriques utilisant une fonction d'onde de type BBK pour décrire l'état final [Ber97], et des différentes fonctions d'onde pour la description de l'état fondamental de la cible afin de tester l'effet de la corrélation. Ils ont montré que les prédictions de Berakdar et Klar [Ber93] pour les maxima ne sont pas confirmées, mais les positions prévues pour les minima à haute énergie d'incidence et faible transfert d'impulsion le sont. Ainsi, ils ont remarqué qu'un minimum apparaît dans le cas où la résultante des vecteurs d'onde des électrons éjectés est perpendiculaire au transfert d'impulsion.

Dans le cadre de la PAB, Kheifets et al [Khe99] ont réalisé une étude comparative des résultats théoriques par rapport à ceux des expériences effectuées par Taouil et al [Tao98] sur l'hélium atomique à haute énergie d'incidence ($\approx 5,6keV$). Ils ont utilisé la méthode 'Convergent Close Coupling (CCC)' pour décrire l'état final des électrons lents éjectés dans le continuum et des fonctions d'onde de type Hylleraas à vingt termes pour décrire l'état fondamental de la cible. Cette comparaison a montré un accord qualitatif pour le comportement des SEQD, mais quantitativement, la théorie a surestimé les données expérimentales d'un facteur variant de 3 à 14 respectivement pour une répartition équi-

énergétique de 4 eV et 10 eV pour chacun des électrons éjectés. Ils ont expliqué ce désaccord par le fait qu'ils n'ont pas tenu compte des autres mécanismes dans leur formalisme.

C'est la première fois que le modèle CCC fut mis en défaut alors qu'il avait donné jusqu'alors d'excellents accords en double photo-ionisation [Khe98] pour les expériences d'Achler et *al* [Ach01] et celles (absolues) de Bräuning et *al* [Bra98]. Donc plusieurs questions se posent pour expliquer cette divergence des résultats : est-ce dû à l'existence de mécanisme TS2 ? Le mécanisme TS1 étant inclus de façon plus ou moins explicite dans le modèle CCC ? Kheifets [Khe04] a pris en compte le terme de la deuxième approximation de Born en utilisant la relation de fermeture [Gri00]. Ceci lui a permis d'éviter de prendre en compte tous les états intermédiaires possibles. Il trouve effectivement un déplacement de la crête binaire et celle du recul, mais ces effets sont faibles et ne permettent pas de donner un bon accord avec l'expérience.

En 1999, El Ghazouani et *al* [ElG99] ont étudié les effets de la corrélation sur le processus de la double ionisation du Magnésium à haute énergie d'incidence. A l'aide de la PAB, ils ont montré que la corrélation dans l'état initial a une grande influence sur les valeurs des SEQD.

Récemment, Grin et *al* [Gri00] ont calculé les SEQD de la double ionisation de l'hélium pour des énergies d'incidence entre 1 keV et 5keV dans le cadre de la première et la seconde approximation de Born tout en utilisant la relation de fermeture. Par ailleurs, l'état initial était décrit par une fonction d'onde de type Silverman et l'état final par une fonction d'onde de type BBK approximée et orthogonalisée à la première. La comparaison de leur résultats avec les données expérimentales montre parfois un accord qualitatif, mais généralement, il y a un désaccord surtout du point de vue quantitatif car leur résultats sont sous-estimés par l'expérience avec un facteur allant de 70 à 330 selon la cinématique choisie.

Jones et Madison [Jon03] ont étudié le rôle de la fonction d'onde initiale reproduisant l'état fondamental de l'atome de l'hélium en décrivant le double continuum par le modèle BBK et l'état initial par une fonction d'onde de type Hylleraas avec 20 paramètres. Ils ont trouvé que ce type de fonctions ne modifiait pas les résultats obtenus avec une fonction du même type mais avec seulement trois paramètres.

La même question qui était posée pour chercher les raisons de la divergence des résultats expérimentales et théoriques obtenue avec le modèle CCC peut être posée également pour le modèle BBK : **Est-ce dû à l'existence du mécanisme TS2**, le mécanisme TS1 étant inclus de façon plus ou moins explicite dans le modèle BBK ? Ancarani et *al* [Anc05] ont montré que la deuxième approximation de Born utilisée avec BBK ne modifiait pratiquement pas les résultats obtenus avec la première approximation de Born.

Puis Jones et Madison (PRL 2003) trouvèrent un excellent accord avec une fonction d'onde de l'état initial de type Pluvilage (1950). Cette fonction d'onde donne une valeur relativement médiocre de l'énergie ($E = -2.8788$ u.a.). De plus si l'on utilise cette fonction d'onde pour d'autres situations expérimentales (telle que le rapport de la section efficace de double photo-ionisation sur celle de simple photo-ionisation) on arrive à un désaccord flagrant avec l'expérience [Khe04]. Donc on peut *conclure que cet accord est fortuit*. De plus Ancarani et al [Anc04] trouvèrent aussi une autre fonction d'onde, qui n'est pas de type Pluvilage, et qui donnait aussi un excellent accord avec l'expérience tout en fournissant une valeur médiocre pour l'énergie.

Jones et Madison (PRL 2003) utilisèrent le modèle 6C [Mal97] qui prend en compte TOUTES les interactions entre les 3 électrons de la voie finale (le diffusé et les deux éjectés) et l'ion He^{++} . Ce modèle utilise une représentation approchée du problème à 4 corps qui va au-delà de la seconde approximation de Born. Il nécessite une intégration numérique délicate à 9 dimensions. Les résultats de ce modèle ont montré que les différences entre les modèles BBK et 6C étaient minimes. Ce résultat confirme donc ceux de Kheifets [Khe04], d'Ancarani et al [Anc05] de Rasch et al (2002) et contredisent ceux de Choubisa et al (2003) sur l'importance des contributions de l'approximation de Born 2. Il est à remarquer que Choubisa et al ont utilisé un modèle BBK approximé (utilisation du facteur de Gamow).

On peut aussi remarquer que Berakdar [Ber00] a obtenu un bon accord pour 10 des 20 configurations en partant d'une approche basée sur un développement de la fonction de Green. Malheureusement ces résultats, qui contredisent ceux de Jones et Madison sur l'importance des termes de Born 2 (et donc sur l'importance des mécanismes de double ionisation à 2 ou 3 étapes) ne concernent que 10 des 20 situations expérimentales et il est donc difficile de conclure sur l'efficacité de la méthode.

Récemment Zaitsev et al [Zai06] ont montré qu'un calcul effectué avec la matrice J (approche semblable à celle de CCC) donnait les bonnes amplitudes mais déformait les distributions angulaires.

Finalement on peut conclure que l'interprétation de ces mesures expérimentales reste encore non résolu, et que même si l'on ne conclue pas comme Kheifets que *les expériences sont fausses* [Jon05], il serait vraiment très intéressant de les refaire, vu surtout les progrès réalisés dans l'acquisition des données depuis quelques années.

Il est évident que si aucun modèle n'arrive pas à interpréter correctement les résultats obtenus à 5.6 keV et 10 eV il semble bien illusoire d'espérer interpréter ceux à plus basse énergie.

Pour ceux correspondant à 5.6 keV et 4 eV pour chaque électron éjecté le modèle CCC [Keh99] sous-estime les données expérimentales d'un facteur 14. Curieusement Zaitsev et al [Zai06] prédit aussi la bonne amplitude mais toujours en donnant un moins bon accord avec la forme obtenue par les expériences. On peut s'interroger légitimement sur le fait que deux approches basées sur la même méthodologie donnent des résultats aussi différents. Il semble que cela soit dû à une meilleure description des états du continuum dans l'approche de Zaitsev et al [Zai06].

Si maintenant on s'intéresse aux expériences relatives à 1.1 keV [Lah01], les deux modèles CCC et BBK reproduisent grossièrement les distributions angulaires expérimentales. Cependant il est nécessaire d'associer un coefficient multiplicatif différent pour chaque distribution angulaire théorique et de plus les deux modèles théoriques (basés sur l'approximation de Born 1) sont incapables de prédire l'absence de symétrie de la distribution angulaire par rapport à la direction du transfert. Cela indique la nécessité de prendre en compte le mécanisme TS2 et donc d'inclure l'approximation de Born 2. Ceci a été confirmé par Kheifets [Khe04] qui en calculant le terme de Born à l'aide de la relation de fermeture a pu expliquer le déplacement de la crête secondaire observé dans les expériences de Dorn et al [Dor01] dans lesquelles l'énergie incidente est de 2 keV et celle des électrons éjectés de 5 eV. On remarque que le modèle CCC avec le terme de Born 2 ne peut toutefois reproduire l'intensité relative des deux pics observés dans l'expérience.

Il restait donc à confirmer l'importance croissante du mécanisme TS2 (et donc du terme de Born 2) pour des expériences à plus basse énergie. Ainsi Duguet et al (2002) et Lahmam-Bennani et al (2003) ont réalisé de nouvelles expériences relatives pour une énergie incidente de 601 eV. Les résultats peuvent être discutés soit avec BBK avec le terme de Born 2 ou avec le modèle 6C.

1-6-1) Description perturbative du premier ordre :

1-6-1-1 : Modèle de l'onde plane :

Dans ce modèle, les deux électrons éjectés sont décrits par des ondes planes, c'est à dire que l'interaction coulombienne entre chaque électron éjecté et l'ion résiduel est négligeable. Ce modèle n'est valable que si les deux électrons dans la voie finale s'éjectent avec une très grande énergie. Ce modèle a été utilisé par Neudatchin et al. [Neu77], Smirnov et al. [Smi78]

et par Popov et al. [Pop94] afin d'étudier la double transformée de Fourier des fonctions d'ondes des cibles atomiques et moléculaires à haute énergie pour l'étude du processus de la double ionisation que ce soit par un impact d'électrons ou de photons.

Dans ce cas là, l'état final de la cible peut s'écrire sous la forme suivante :

$$|\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle_{He} = \frac{(2\pi)^{-3}}{\sqrt{2}} \left| \exp[i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2)] \pm \exp[i(\vec{k}_2 \vec{r}_1 + \vec{k}_1 \vec{r}_2)] \right\rangle \quad (\text{I-47})$$

Le signe « + » désigne l'état symétrique et le « - » l'état antisymétrique.

I-6-1-2 : Modèle des ondes coulombiennes :

Ce modèle, qui consiste à définir les deux électrons éjectés comme étant deux fonctions d'ondes coulombiennes non corrélées $\varphi_c(\vec{k}_1, \vec{r}_1)$ et $\varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2)$, a été introduit par Byron et Joachain [Byr67] afin d'étudier la section efficace totale de la double ionisation de l'hélium.

Ce modèle représente plusieurs faiblesses, d'une part, il ne tient compte que de l'interaction des électrons éjectés avec l'ion résiduel, alors que la corrélation entre eux, dans la voie finale, est complètement négligée, d'autre part, tout effet d'écran entre ces deux électrons a été ignoré, et par suite, la charge vue par chaque électron sera celle du noyau ($Z = 2$).

L'état final de la cible s'écrit :

$$|\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle_{He} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \varphi_c(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \pm \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_1) \varphi_c(\vec{k}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{I-48})$$

où :

$$\varphi_c(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{\frac{\pi}{2}\eta} \Gamma(1 + i\eta) e^{i\vec{k}\vec{r}} {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})) \quad (\text{I-49})$$

η est le paramètre de Sommerfeld qui est défini par :

$$\eta = \frac{Z}{k} \quad (\text{I-50})$$

$\Gamma(1+i\eta)$ est la fonction Gamma d'Euler complexe et ${}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k} \cdot \vec{r}))$ est une fonction hypergéométrique confluyente. D'après l'expression de la fonction d'onde coulombienne, on peut obtenir une onde plane en prenant $Z = 0$.

I-6-1-3 : Modèle des ondes coulombiennes orthogonalisées :

Afin d'améliorer le modèle précédent, Dal Cappello et Le Rouzo [Dal91] ont introduit la corrélation dans la voie finale d'une manière approximative en supposant que les deux électrons éjectés sont décrits par des fonctions d'ondes coulombiennes à charges effectives variables qui dépendent des angles d'éjections, et que la fonction d'onde de la cible dans la voie finale doit être orthogonale à la fonction d'onde dans la voie initiale puisqu'elles sont solutions du même Hamiltonien (par application de la procédure d'orthogonalisation de Gram-Schmidt).

I-6-1-4 : Modèle 3C :

Ce modèle s'appelle aussi le modèle BBK qui porte les initiales des auteurs (Brauner, Brigs et Klar) qui l'ont conçu pour étudier l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène [Bra89].

Ce modèle consiste à décrire asymptotiquement l'état final de la cible qui se traduit par un produit de deux fonctions d'ondes coulombiennes décrivant l'interaction des deux électrons éjectés avec l'ion résiduel, et d'une fonction hypergéométrique confluyente et d'un facteur de Gamov qui tient compte de la répulsion de ces deux électrons dans la voie finale.

L'état final de la cible peut s'écrire, alors, sous la forme suivante :

$$\left| \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle_{He}^{BBK} = \left| \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle_{He} F_G(k_{12}) {}_1F_1\left(\frac{i}{2k_{12}}, 1, -\frac{i}{2}(k_{12}r_{12} + \vec{k}_{12} \cdot \vec{r}_{12})\right) \quad (I-51)$$

$\left| \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle_{He}$ est la fonction définie dans le paragraphe 1-2, $|\vec{k}_{12}| = |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$ et $|\vec{r}_{12}| = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ sont les termes qui décrivent la corrélation respectivement dans l'espace des configurations et des impulsions.

Le facteur de Gamov est donné par :

$$F_G(k_{12}) = \exp\left(-\frac{\pi}{2k_{12}}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{12}}\right) \quad (\text{I-52})$$

Avec une telle fonction, le calcul de l'amplitude de diffusion devient plus compliqué et plus coûteux du point de vue temps de calcul.

Afin d'éviter ces complications, on ne tient compte généralement que des fonctions d'ondes coulombiennes et du facteur de Gamov ce qui conduit à une fonction d'onde non normalisée et par conséquent, à une comparaison qualitative avec les données expérimentales.

I-6-1-5 : La méthode CCC : the convergent close coupling approach

Cette méthode consiste à évaluer les éléments de la matrice de transition par la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger pour le problème de trois corps coulombiens. Cette approche a été appliquée avec la première approximation de Born seulement, et seul le cas de la double ionisation de l'atome d'hélium par l'impact d'un électron était traité avec cette méthode.

Pour évoluer les éléments de matrice [(I-48),(I-50)], l'opérateur de la transition Born $\exp(i\vec{K}\cdot\vec{r}_{1/2})$ est développé en multipôles où \vec{K} est choisi comme axe de quantification, c'est-à-dire :

$$e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}_{1/2}} = \sqrt{4\pi} \sum_J i^J j_J(Kr_{1/2}) \sqrt{2J+1} Y_{J0}(\vec{r}_{1/2}) \quad (\text{I-53})$$

$Y_{JM}(\vec{r})$ représente une harmonique sphérique standard en fonction de la direction \vec{r} , et J, M sont les nombres quantiques angulaires et leurs projections sur l'axe de quantification.

La section efficace (I-34) exprimée en termes des harmoniques sphériques peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sigma = \frac{8k_d}{k_i} \frac{1}{K^4} \left| \sum_J \sum_{l_1 l_2} \sum_{m_1=-m_2} i^{J-l_1-l_2} Y_{l_1 m_1}(\vec{k}_1) Y_{l_2 m_2}(\vec{k}_2) \begin{pmatrix} l_1 & J & l_2 \\ m_1 & 0 & m_2 \end{pmatrix} e^{i(\delta_{l_1} + \delta_{l_2})} \right|^2 \times (2J+1) (M_{Jl_1 l_2}(K, k_1, k_2) + M_{Jl_2 l_1}(K, k_2, k_1)) \quad (\text{I-54})$$

Les éléments de matrice M_{j_1, j_2} angulaires et indépendants sont calculés au moyen de la technique CCC. Ceci est réalisé par l'extension de l'état final à deux électrons en utilisant des bases intégrables (L^2), et solutions pour la diffusion atomique de l'un des électrons de la cible à partir de la cible une fois ionisée. C'est-à-dire, suite à la perturbation de la cible par le projectile, un des ses électrons a une énergie élevée, il est rediffusé par la cible ionisée et éjecte le second électron. Ce dernier processus est traité comme une étape non perturbative.

Techniquement, les processus de la double ionisation sont décrits comme étant une excitation des pseudo états de l'ion ayant des énergie positives. Dans la voie finale, l'un des électrons éjectés occupe un vrai continuum avec une énergie E_1 et un moment angulaire l_1 , alors que l'autre électron réside dans un état excité de l'ion qui est référencié par l_2 avec l'énergie E_2 .

I-6-2) Au-delà de la première approximation de Born

Le traitement de l'interaction projectile-cible avec la théorie des perturbations de premier ordre (c'est-à-dire avec la première approximation de Born) s'appuie sur des simplifications significatives sur ce qui concerne le besoin de décrire les transitions des deux électrons de la cible. D'ailleurs, les résultats expérimentaux montrent une certaine insuffisance du traitement incluant la première approximation de Born, même pour une haute énergie d'incidence. Donc, et en raison des expériences qui étaient réalisées à basse énergie d'incidence, il fallait élaborer des modèles théoriques qui tiennent compte de l'interaction projectile-cible d'une façon dynamique.

I-6-2-1 : La deuxième approximation de Born :

La deuxième approximation de Born est une extension aux termes d'ordre supérieur de l'opérateur de diffusion. Elle tient compte des interactions successives de l'électron incident avec deux électrons de la cible ([Dal98], [Dal95]).

L'état intermédiaire de l'électron diffusé est décrit par une onde plane. Cet électron interagit avec la cible ionisée que ce soit avec ou sans excitation simultanée. Ce processus correspond parfaitement au mécanisme TS2.

A cause de ces deux interactions successives, la symétrie par rapport au moment du transfert est brisée. Des effets similaires surgissent quand on utilise la deuxième approximation de

Born pour décrire la simple ionisation par impact électronique (le processus (e,2e)) à basse énergie d'incidence [Byr83].

Dans les calculs de Born II utilisés jusqu'ici pour le processus (e,3e), l'état final était décrit par une fonction d'onde de type BBK approximé (produit de deux fonctions d'onde coulombiennes multiplié par la densité d'états correspondante à l'état final de l'interaction entre les deux électrons éjectés) afin de réduire le temps considérable de calcul (Dal Cappello et al ([Dal98], [Dal95])).

Il reste à signaler que la principale difficulté confrontée lors des calculs est l'intégration numérique qui demande beaucoup d'attention.

I-6-2-2 : Le modèle 6C :

Il existe une autre méthode qui va au-delà de la deuxième approximation de Born, elle consiste à évaluer l'élément de matrice (I-24) en utilisant la fonction d'onde qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \approx N \prod_{m>l, j=1}^N \xi_j(\vec{r}_j) \varphi_j(\vec{r}_j) \varphi_{lm}(\vec{r}_{lm}) \quad (\text{I-55})$$

Où :

$$\begin{aligned} \xi_j(\vec{r}_j) &= e^{i\vec{k}_j \cdot \vec{r}_j} \\ \varphi_j(\vec{r}_j) &= {}_1F_1(-i\eta_j, 1, -i(k_j r_j + \vec{k}_j \cdot \vec{r}_j)) \\ \varphi_j(\vec{r}_{lm}) &= {}_1F_1(-i\eta_{lm}, 1, -i(k_{lm} r_{lm} + \vec{k}_{lm} \cdot \vec{r}_{lm})) \end{aligned} \quad (\text{I-56})$$

N étant le facteur de normalisation de la fonction Ψ .

Pour $N=4$ dans la fonction (I-55), cette méthode a été utilisée par Malcherek et al ([Mala97], [Malb97]). Remarquons qu'à partir de la relation (I-55), la fonction d'onde approchée définissant l'état final s'écrit sous forme du produit de six fonctions d'onde coulombiennes (d'où l'appellation 6C) qui décrivent l'électron diffusé et les deux électrons éjectés en tenant compte de leur interaction avec le noyau, ainsi que toutes les interactions entre les trois électrons dans la voie finale. Les quatre particules dans la voie finale (l'électron diffusé, les deux électrons éjectés et l'ion résiduel) sont traitées comme étant

identiques, c'est-à-dire que ce modèle va au-delà de la deuxième approximation de Born. La liaison entre la théorie perturbative et l'utilisation d'une fonction d'onde de type 6C a été bien illustrée avec le formalisme de la fonction de Green [Bera96].

Cette approche représente un seul inconvénient, qui est le temps de calcul considérable nécessaire pour évaluer l'intégrale à neuf dimensions (I-24).

I-6-2-3 : Le modèle C4FS : la diffusion dynamique et les charges effectives

Les problèmes numériques rencontrés lors de l'évaluation de l'équation (I-55) pour N=4 peuvent être évités en effectuant une certaine approximation pour le calcul de l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[H_0 + \sum_{j=1}^N \frac{ZZ_j}{r_j} + \sum_{i,j>i=1}^N \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} - E \right] \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 0 \quad (\text{I-57})$$

Où \vec{r}_j est la position de la particule j , H_0 est l'opérateur de l'énergie cinétique et E est l'énergie totale du système.

En effet, le terme qui empêche la séparation des termes est le potentiel d'interaction entre les particules $\frac{Z_i Z_j}{r_{ij}}$. Si on néglige ce terme, la totalité du problème se réduit à la résolution de

l'équation suivante :

$$\left[H_0 + \sum_{j=1}^N \frac{ZZ_j}{r_j} - E \right] \phi_1(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 0 \quad (\text{I-58})$$

L'équation (I-58) admet une solution exacte. Ainsi, si une méthode d'approximation est développée qui compensera le terme de corrélation $\frac{Z_i Z_j}{r_{ij}}$ dans les potentiels $\frac{Z_j Z}{r_j}$ d'une manière effective et indépendante de point de vue position, l'équation complète de Schrödinger (I-57) peut être résolue par une fonction ayant la forme suivante :

$$\phi_1(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_2) = \prod_{j=1}^N \xi_j(\vec{r}_j) \varphi_j(\vec{r}_j) \quad (\text{I-59})$$

Cette approche était réalisée par la méthode des charges effectives qui était appliquée pour le processus de la double ionisation par impact électronique [Bera96].

Pour le processus (e,3e), l'état final est illustré par trois électrons (un diffusé \vec{k}_d , et deux éjectés \vec{k}_1 et \vec{k}_2) qui interagissent entre eux dans le champ du noyau ayant une charge $Z_T = 2$.

Le potentiel total de l'équation (I-57) se réduit à :

$$-\frac{Z_T}{r_0} - \frac{Z_T}{r_1} - \frac{Z_T}{r_2} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + \frac{1}{r_{12}} = \frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2} + \frac{Z_{12}}{r_{12}} \quad (\text{I-60})$$

Dans cette expression, les charges Z_1 , Z_2 et Z_{12} sont introduites comme étant des fonctions inconnues qui restent à déterminer. Leurs formes fonctionnelles sont spécifiées par une expression linéaire en termes d'interactions de deux particules [Ber96]. Pour que cette expression soit exacte, il faut que les conditions asymptotiques imposées par l'équation (I-57) soient satisfaites.

L'approximation qui rend cette approche favorable pour les calculs numériques est l'hypothèse $r_j \propto k_j$ où $j = \{d,1,2\}$, et qui donne pour les charges effectives :

$$\begin{aligned} Z_1 &= -Z_T - \frac{Z_T k_1}{2k_d} + \frac{k_1}{|\vec{k}_d - \vec{k}_1|} \\ Z_2 &= -Z_T - \frac{Z_T k_2}{2k_d} + \frac{k_2}{|\vec{k}_d - \vec{k}_2|} \end{aligned} \quad (\text{I-61})$$

$$Z_{12} = 1$$

Avec ces charges effectives, on en déduit facilement que les fonctions propres de (I-57) peuvent être décrites, approximativement, par :

$$\Psi(\vec{k}_d, \vec{r}_0, \vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{k}_d \vec{r}_0)} \Phi(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2) \quad (\text{I-62})$$

où :

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3} N e^{i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2)} {}_1F_1(i\alpha_1, 1, -i(k_1 r_1 + \vec{k}_1 \vec{r}_1)) {}_1F_1(i\alpha_2, 1, -i(k_2 r_2 + \vec{k}_2 \vec{r}_2)) \\ \times {}_1F_1(i\alpha_{12}, 1, -i(k_{12} r_{12} + \vec{k}_{12} \vec{r}_{12})) \end{aligned} \quad (\text{I-63})$$

Le facteur de normalisation est défini par :

$$N = e^{-\frac{\pi\alpha_1}{2}} \Gamma(1 - i\alpha_1) e^{-\frac{\pi\alpha_2}{2}} \Gamma(1 - i\alpha_2) e^{-\frac{\pi\alpha_{12}}{2}} \Gamma(1 - i\alpha_{12}) \quad (\text{I-64})$$

On définit les paramètres effectives de Sommerfeld par :

$$\alpha_1 = \frac{Z_1}{k_1}, \quad \alpha_2 = \frac{Z_2}{k_2}, \quad \alpha_{12} = \frac{Z_{12}}{k_{12}} \quad (\text{I-65})$$

où :

$$k_{12} = \|\vec{k}_1 - \vec{k}_2\| \quad (\text{I-66})$$

Puisque les fonctions Z_j où $j = \{d, 1, 2\}$ sont indépendantes, les amplitudes de transition (I-24) se sont simplement réduites aux formes suivantes :

$$\begin{aligned} T_{f_i} &= T_{e1} + T_{e2} + T_d \\ T_{e1} &= \langle \psi^-(\vec{k}_1, \vec{k}_2), \vec{k}_i | V_{pe1} | \vec{k}_i, \psi_i \rangle = -\frac{Z_d}{2\pi^2 K^2} \langle \psi(\vec{k}_1, \vec{k}_2) | e^{iK\vec{r}_1} | \psi_i \rangle \\ T_{e2} &= \langle \psi^-(\vec{k}_1, \vec{k}_2), \vec{k}_i | V_{pe2} | \vec{k}_i, \psi_i \rangle = -\frac{Z_d}{2\pi^2 K^2} \langle \psi(\vec{k}_1, \vec{k}_2) | e^{iK\vec{r}_2} | \psi_i \rangle \\ T_d &= \langle \psi^-(\vec{k}_1, \vec{k}_2), \vec{k}_i | V_{pe2} | \vec{k}_i, \psi_i \rangle = \frac{Z_d}{2\pi^2 K^2} \langle \psi(\vec{k}_1, \vec{k}_2) | 2 | \psi_i \rangle \end{aligned} \quad (\text{I-67})$$

Les amplitudes $T_{e1} \equiv T_{d1}$, $T_{e2} \equiv T_{d2}$ et $T_2 \equiv T_d$ décrivent, respectivement, la diffusion directe du projectile (d) à partir des deux électrons (1,2) de la cible et à partir du noyau. Des événements de diffusions multiples pour le système de quatre particules sont également contenus dans la fonction d'onde dans la voie finale $\Psi(\vec{k}_d, \vec{r}_0, \vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2)$.

A partir des équations (I-61) et (I-63), on remarque que les éléments de matrice de transition T_{f_i} dépendent, dynamiquement, de tous les moments d'impulsion \vec{k}_i , \vec{k}_d , \vec{k}_1 et \vec{k}_2 , c'est-à-dire, quand l'électron incident approche, dans l'espace des vitesses, d'un des deux électrons éjectés, prenons par exemple l'électron éjecté ayant le moment d'impulsion \vec{k}_1 , l'interaction de cet électron avec l'ion résiduel devient répulsive, ce qui veut dire que la charge effective Z_1 donnée par (I-61) devient positive et simule la répulsion électronique entre l'électron diffusé et l'électron éjecté \vec{k}_1 .

La fonction d'onde donnée par l'expression (I-63) s'appelle « la fonction d'onde de l'état final des quatre particules » (en anglais Coulomb four body final state wave function C4FS).

Contrairement à la première approximation de Born, les charges effectives données par les équations (I-61) se réduisent à :

$$Z_1 = -Z = Z_2$$

$$Z_{12} = 1$$

et les éléments de matrice T_{f_i} dépendront uniquement de $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_d$, \vec{k}_1 et \vec{k}_2 .

I-6-2-4 : Le modèle BBK dans le cadre de la deuxième approximation de Born :

Grin et *al* [Grin00] ont développé un modèle théorique afin d'étudier la double ionisation de quelques gaz rares (le Néon, l'Argon, le Magnésium et l'Hélium) en se basant sur une description de type BBK approximée dans le cadre de la deuxième approximation de Born. Ce formalisme consiste à remplacer la troisième fonction d'onde coulombienne qui décrit l'interaction entre les deux électrons éjectés dans le continuum par un facteur de Gamow.

Le second terme de la série de Born s'écrit sous la forme suivante :

$$f_{BornII} = -\frac{1}{8\pi^4} \sum_{j=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{\langle \Psi_{fn} | V' | \Psi_{a,j} \rangle \langle \Psi_{a,j} | V | \Psi_{in} \rangle}{k_i^2 - k_{in}^2 + i\epsilon} d\vec{k}_a \quad (I-68)$$

Dans ce cas là, le système passe initialement par un état intermédiaire $|\Psi_{a,j}\rangle$ du système en utilisant un premier potentiel d'interaction V . Le passage de cet état à l'état final se fait via un

second potentiel d'interaction V' . $k_i^2 - k_{in}^2$ représente l'énergie fournie par l'électron incident pour que le système passe de l'état initial vers un état intermédiaire. On note également que \vec{k}_a est le vecteur d'onde de l'électron incident lorsqu'il se trouve dans l'état intermédiaire.

Le calcul du terme (I-68) présente une grande difficulté puisqu'il demande que l'on décrive tous les états intermédiaires du système. Or, on pourrait simplifier ce problème en considérant que certains états intermédiaires sont très rares et donc ne pas en tenir compte en gardant que ce qui semble le plus probable. Nous pouvons aussi introduire la relation de fermeture bien connue :

$$\sum_{j=0}^{\infty} |\psi_{an,j}\rangle \langle \psi_{an,j}| = 1 \quad (\text{I-69})$$

Ancarani et ses collaborateurs [Anc04] ont introduit pour la première fois le vrai modèle BBK dans le cadre de la seconde approximation de Born. Mais ils ont trouvé qu'il n'y avait pas une grande différence entre ce formalisme et le modèle BBK associé à la première approximation de Born pour une haute énergie d'incidence.

En revanche, si l'on applique cette technique à une faible énergie d'incidence, prenons par exemple l'expérience de Dorn et *al* [Dor03] où l'énergie d'incidence est : $E_i = 500eV$, l'électron incident est diffusé avec une énergie $E_d = 411eV$ et suivant la direction $\theta_d = -20^\circ$. Les deux électrons éjectés ont la même énergie $E_1 = E_2 = 5eV$.

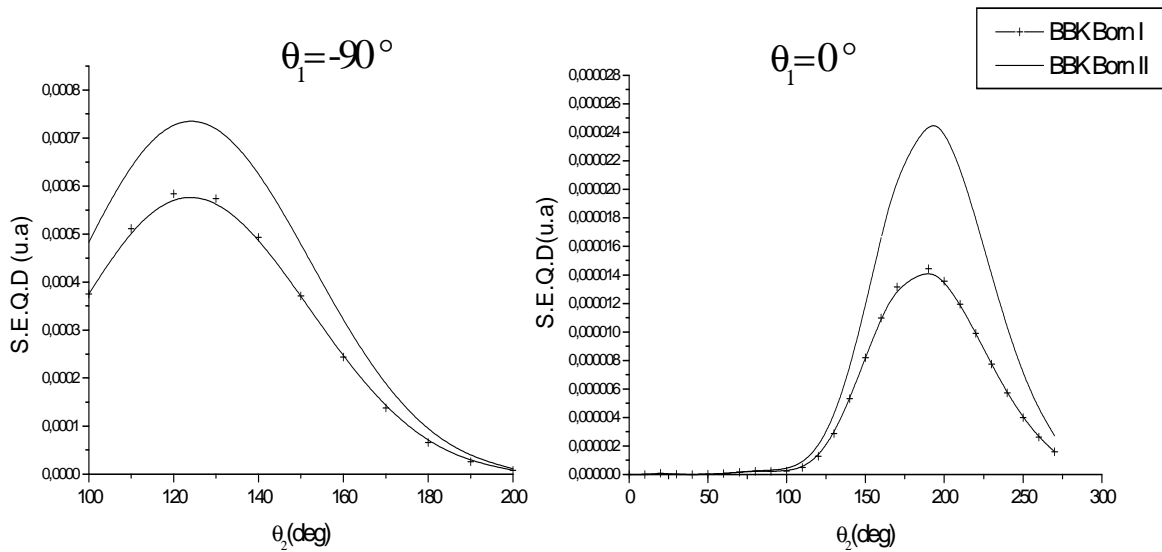


Figure (I-6) : La S.E.Q.D de la double ionisation d'une cible d'hélium par impact d'un électron (expérience de Dorn et al) en décrivant le double continuum par une fonction d'onde de type BBK dans le cadre de la deuxième approximation de Born.

Dans ce cas là, on ne remarque pas le déplacement habituel du pic du en général au effets de l'introduction du terme de second ordre. Par contre, on constate que l'introduction du ce terme influe l'amplitude de la SEQD. Ce modèle reste inexploitable à cause du temps de calcul.

I-6-2-5 : La théorie de la fonction de Green :

Toutes les méthodes décrites au dessus s'appliquent pour le processus de la double ionisation en évaluant les fonctions d'onde pour les électrons excités et en calculant les éléments de la matrice de transition. Ces théories conviennent pour des systèmes comportant quelques particules dans la voie finale, mais elles deviennent inappropriées pour des systèmes à grand nombre de particules à cause de l'importance de la complexité des fonctions d'onde qui comportent une quantité importante de particules [équation (I-55)].

Pour ce genre de système, c'est-à-dire à la limite thermodynamique, des nouveaux phénomènes macroscopiques apparaissent, comme les modes collectifs, les transitions de phase et les propriétés thermodynamiques. Alors que certaines propriétés macroscopiques sont exclusivement définies pour des grands systèmes infinis avec une densité constante, il

s'avère que le début de ces comportements macroscopiques peut être observé dans les systèmes finis [Ber02]. Donc, il est pratique de développer une approche qui est, conceptuellement et pratiquement applicable pour les systèmes finis, comme un système à quatre particules, et qui donne un schéma exploitable pour le traitement des systèmes avec un grand nombre de particules interagissant entre elles.

Cette approche est la fonction de Green.

a) Le développement de la fonction de Green :

Considérons un système non relativiste constitué de N particules qui interagissent entre eux via des potentiels v_{ij} .

Le potentiel total s'écrit sous la forme suivante :

$$U^{(N)} = \sum_{j>i=1}^N v_{ij} \quad (\text{I-70})$$

Les potentiels v_{ij} sont quelconques.

La fonction $U^{(N)}$ satisfait les relations de récurrences suivantes :

$$U^{(N)} = \frac{1}{N-2} \sum_{j=1}^N u_j^{(N-1)} \quad (\text{I-71})$$

$$u_j^{(N-1)} = \frac{1}{N-3} \sum_{k=1}^{N-1} u_k^{(N-2)}, \quad j \notin [1, N-1] \quad (\text{I-72})$$

Où $u_j^{(N-1)}$ représente le potentiel total d'un système à $N-1$ particules interagissant entre elles et vu de la particule j .

Il a été montré [Ber00] en utilisant un opérateur algébrique, que les deux relations de récurrence (I-71) et (I-72) sont reflétées dans des relations similaires pour l'opérateur total de Green $G^{(N)}$ et l'opérateur transition $T^{(N)}$:

$$T^{(N)} = \sum_{j=1}^N T_j^{(N-1)} \quad (\text{I-73})$$

$$T_j^{(N-1)} = \tilde{u}_j^{(N-1)} + T^{(N)} G_0 \tilde{u}_j^{(N-1)} \quad (\text{I-74})$$

$\tilde{u}_j^{(N-1)}$ représente les potentiels scalaires qui sont définis par :

$$\tilde{u}_j^{(N-1)} = \frac{u_j^{(N-1)}}{N-2} \quad (\text{I-75})$$

Les opérateurs $T^{(N)}$ sont liés à l'opérateur de transition $t_j^{(N-1)}$ d'un système à $N-1$ particules qui interagissent via un potentiel scalaire $\tilde{u}_j^{(N-1)}$, c'est-à-dire :

$$t_j^{(N-1)} = \tilde{u}_j^{(N-1)} + \tilde{u}_j^{(N-1)} G_0 t_j^{(N-1)} \quad (\text{I-76})$$

et on peut les écrire sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} T_1^{(N-1)} \\ T_2^{(N-1)} \\ \vdots \\ T_{N-1}^{(N-1)} \\ T_N^{(N-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1^{(N-1)} \\ t_2^{(N-1)} \\ \vdots \\ t_{N-1}^{(N-1)} \\ t_N^{(N-1)} \end{pmatrix} + [K^{(N-1)}] \begin{pmatrix} T_1^{(N-1)} \\ T_2^{(N-1)} \\ \vdots \\ T_{N-1}^{(N-1)} \\ T_N^{(N-1)} \end{pmatrix} \quad (\text{I-77})$$

L'élément $[K^{(N-1)}]$ représente l'opérateur matriciel et il est donné par :

$$[K^{(N-1)}] = \begin{pmatrix} 0 & t_1^{(N-1)} & t_1^{(N-1)} & \cdots & t_1^{(N-1)} \\ t_2^{(N-1)} & 0 & t_2^{(N-1)} & \cdots & t_2^{(N-1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ t_{N-1}^{(N-1)} & \cdots & t_{N-1}^{(N-1)} & 0 & t_{N-1}^{(N-1)} \\ t_N^{(N-1)} & \cdots & t_N^{(N-1)} & t_N^{(N-1)} & 0 \end{pmatrix} \cdot G_0 \quad (\text{I-78})$$

L'équation (I-72) montre que $t_j^{(N-1)}$ peut s'exprimer en termes d'opérateurs de transition de $N-2$ sous systèmes en interaction. On peut écrire :

$$t_j^{(N-1)} = \sum_{k \neq j}^{N-1} T_k^{(N-2)} \quad (\text{I-79})$$

où les opérateurs $T_K^{(N-2)}$ sont déduits de l'équation (I-77) en remplaçant N par $N-1$.

A partir de la relation : $G^{(N)} = G_0 + G_0 T^{(N)} G_0$, on conclue que l'opérateur de Green pour le système à N particules s'écrit sous la forme suivante :

$$G^{(N)} = G_0 + \sum_{j=1}^N G_j^{(N-1)} \quad (\text{I-80})$$

Les opérateurs $G_j^{(N-1)}$ sont reliés aux opérateurs de Green $g_j^{(N-1)}$ du système où seulement $N-1$ particules sont corrélées au moyen de $\tilde{u}_j^{(N-1)}$. Cette relation s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} G_1^{(N-1)} \\ G_2^{(N-1)} \\ \vdots \\ G_{N-1}^{(N-1)} \\ G_N^{(N-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1^{(N-1)} - G_0 \\ g_2^{(N-1)} - G_0 \\ \vdots \\ g_{N-1}^{(N-1)} - G_0 \\ g_N^{(N-1)} - G_0 \end{pmatrix} + [\tilde{K}^{(N-1)}] \begin{pmatrix} G_1^{(N-1)} \\ G_2^{(N-1)} \\ \vdots \\ G_{N-1}^{(N-1)} \\ G_N^{(N-1)} \end{pmatrix} \quad (\text{I-81})$$

$$\text{Où :} \quad [\tilde{K}^{(N-1)}] = G_0 [K^{(N-1)}] G_0^{-1} \quad (\text{I-82})$$

Donc, on en déduit que si l'opérateur de Green pour un système de $N-1$ particules est connu, alors l'opérateur de Green pour un système à N particules peut être déduit en résolvant un ensemble de N équations intégrales qui sont linéaires et couplées (équations (I-77) et (I-81)).

b) Application pour $N = 4$:

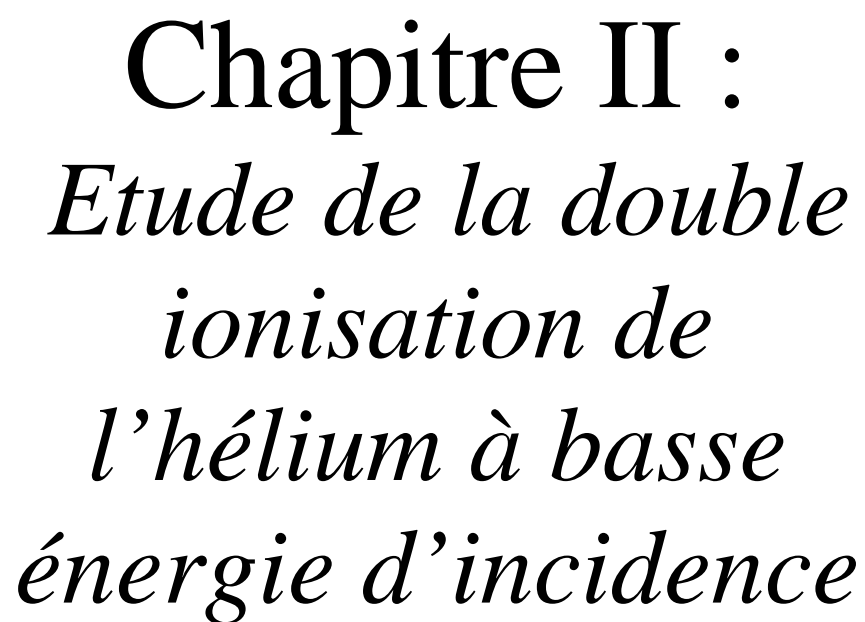
On applique cette approche pour un système à quatre particules. L'équation (I-81) devient :

$$G^{(4)} = \sum_{j=1}^4 g_j^{(3)} - 3G_0 \quad (\text{I-83})$$

Le terme $g_j^{(3)}$ représente l'opérateur de Green pour trois particules en interaction vue par la particule j . On considère qu'il est connu sous une forme approximative. Par exemple, pour le modèle 3C ou le C4FS, l'hamiltonien du système à trois particules se réduit à une somme de trois hamiltoniens commutatifs $h_k^{(2)}$ pour seulement deux particules en interactions (la particule k étant libre).

I-7- Conclusion :

Nous avons vu, d'une manière globale, certaines généralités et certains modèles concernant l'étude du processus de la double ionisation d'une cible atomique, ainsi que le traitement dynamique de quatre particules chargées dans le continuum. Le défi que les théoriciens ont relevé est de définir et de concevoir des fonctions d'onde qui décrivent les états excités et les états du continuum lors d'un processus d'ionisation. Ces fonctions doivent être absolument orthogonales à l'état initial. Ce traitement reste indispensable pour des collisions à basse énergie d'incidence où les effets des termes d'ordre supérieur de l'approximation de Born restent très importants.



Chapitre II :
*Etude de la double
ionisation de
l'hélium à basse
énergie d'incidence*

Chapitre II :

Etude de la double ionisation de l'hélium à basse énergie d'incidence

II-1- Introduction :

Notre but est d'appliquer un modèle proche de 6C pour l'étude de la double ionisation de l'hélium. Ce modèle prend en compte toutes les interactions entre les 4 particules (l'électron diffusé, les deux électrons éjectés et le noyau) tout en tenant compte des effets répulsifs électron-électron par des facteurs de Gamow, ce qui permet de remplacer une intégrale à 9 dimensions par une intégrale à 4 dimensions.

Notre modèle utilise les facteurs de Gamow et par conséquent ne peut pas donner la valeur correcte de la section efficace différentielle, mais ce n'est pas un inconvénient majeur ici puisque les expériences à 600 eV sont obtenues sur une échelle relative.

II-2- Le dispositif expérimental :

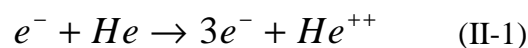
Les expériences ont été réalisées à une énergie d'incidence faible, 601 eV, et les électrons sont éjectés avec une même énergie de 11 eV, l'électron incident est diffusé avec une énergie de 500 eV et sous un angle de 1.5° . Les données ont été obtenues en employant un spectromètre (e,3e) qui était conçu et mis au point pour ces expériences, utilisant les techniques de multi-analyse et multi-détection, et basé sur un double analyseur toroïdal recueillant les deux électrons éjectés dans la presque totalité du plan de collision, tout en préservant l'information angulaire à l'arrivée sur les détecteurs sensibles en position. L'installation expérimentale et la procédure ont été soigneusement décrites (Duguet et *al* 1998). Le faisceau des électrons incidents traverse avec un angle droit le faisceau du gaz cible. L'électron diffusé est analysé dans un analyseur cylindrique et détecté sous un angle

fixe de 1.5° qui correspond au vecteur du moment de transfert avec la norme $K = 0.61$ ua et sous la direction $\theta_K = -15^\circ$. Les électrons éjectés sont collectés par des analyseurs toroïdaux dans le plan de collision (géométrie coplanaire) défini par l'électron incident et l'électron diffusé sur les intervalles angulaires $20^\circ \leq \theta_1 \leq 160^\circ$ et $200^\circ \leq \theta_2 \leq 340^\circ$ alors que $\varphi_1 = \varphi_2 = 0$ ou π , l'angle mutuel $\theta_{12} = \theta_1 - \theta_2$ pouvant être utilisé. On considère dans tout ce qui suit le cas des expériences entièrement différentielles avec une cinématique complètement déterminée (à part le spin et les sous niveaux magnétiques), où tous les trois électrons dans la voie finale sont simultanément analysés en direction et en énergie et donc détectés en coïncidences. Ceci nous permet de déterminer l'état d'énergie de l'ion après la collision, c'est à dire connaître les orbitales à partir desquelles les électrons sont éjectés. Mais le prix à payer pour cela est l'utilisation des techniques de multi-coïncidences qui rendent ces expériences bien plus difficiles que celles correspondant à la simple ionisation (e,2e). L'addition d'un angle solide supplémentaire de détection pour le troisième électron, $\Delta\Omega$, a pour résultat une réduction de l'efficacité globale de collection par un facteur $\frac{\Delta\Omega}{4\pi}$. Par conséquent, la section efficace de double ionisation est en général de deux ordres de grandeur plus petite que celle de la simple ionisation. Ceci implique deux contraintes principales sur la conception d'une expérience (e,3e) : l'accomplissement d'une grande luminosité sans dégrader trop l'énergie et les résolutions angulaires, et la nécessité d'employer des techniques de multi-détection pour réduire le temps nécessaire d'accumulation.

Tous les angles sont comptés dans le sens des aiguilles d'une montre commençant à partir de la direction du faisceau incident. Les résolutions d'énergie pour les électrons éjectés sont fixées à $\Delta E_1 = \Delta E_2 = \pm 2$ eV lorsque les énergies de résolution des électrons incident et diffusé sont : $\Delta E_i = \pm 1$ eV et $\Delta E_d = \pm 1.5$ eV respectivement. Les résolutions angulaires sont $\Delta\theta_d = \pm 0.02^\circ$ (électron diffusé) et $\Delta\theta_1 = \Delta\theta_2 = \pm 4^\circ$ (électrons éjectés). La résolution résultante du moment est $\Delta K = 0.006$ ua.

II-3- Le modèle théorique :

Nous étudions la double ionisation de l'hélium selon la réaction suivante:



La section efficace quintuplement différentielle est donnée par :

$$\frac{d^5 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_d dE_1 dE_2} = \sigma^{(5)} = \frac{k_1 k_2 k_d}{k_i} |M|^2 \quad (\text{II-2})$$

où $d\Omega_d$, $d\Omega_1$ et $d\Omega_2$ sont, respectivement, les éléments des angles solides pour les électrons diffusés et les deux éjectés. dE_1 et dE_2 représentent les intervalles d'énergie pour les deux électrons éjectés. $\vec{k}_i, \vec{k}_d, \vec{k}_1$ et \vec{k}_2 sont, respectivement, les vecteurs d'onde des électrons incident, diffusé, le premier éjecté et le deuxième éjecté.

L'élément de matrice M s'écrit suivant la relation suivante :

$$M = \frac{1}{2\pi} \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{II-3})$$

Ψ_i est la fonction d'onde de l'état initial de la cible et Ψ_f celle de l'état final.

V représente l'interaction entre l'électron incident et la cible ($Z = 2$) :

$$V = -\frac{Z}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \quad (\text{II-4})$$

II-3-1) La fonction d'onde initiale :

L'état initial, qui contient l'électron incident et les deux électrons de la cible, est décrit par le produit de deux fonctions d'onde, la première pour l'électron incident et la deuxième pour ceux de la cible :

$$|\Psi_i\rangle = \left| \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0) \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II-5})$$

L'électron incident est décrit par une onde plane avec \vec{r}_0 son vecteur position, et l'état fondamental des deux électrons de la cible ayant les vecteurs positions \vec{r}_1 et \vec{r}_2 sera décrit par une fonction d'onde de type Hylleraas donnée par Bonham et Kohl (1966) :

$$\varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N_0 \left[\left(\exp(-ar_1 - br_2) + \exp(-ar_2 - br_1) \right) c_0 + (b_1 + b_2 \exp(-\gamma r_{12})) \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \right] \quad (\text{II-6})$$

N_0 est le facteur de normalisation et r_{12} la distance électron-électron. L'énergie de l'état initial de l'atome de l'hélium donnée par cette fonction est : $E = -2.903$ u.a. Notons que dans tous les modèles considérés dans ce chapitre, on a utilisé la même fonction d'onde initiale (celle de Bonham et Kohl 1966).

II-3-2) La fonction d'onde finale :

Le modèle 6C (Malcherek et Briggs 1977 [Mal97], Götz et al 2003 [Got03]) nécessite le calcul d'une intégrale à neuf dimensions. Afin de réduire le temps de calcul et étudier toutes les distributions angulaires, on tient compte de la répulsion électron-électron par l'utilisation de trois facteurs de Gamow.

Tous les électrons dans la voie finale sont décrits par des fonctions d'ondes coulombiennes. Chaque facteur de Gamow tient compte de l'interaction coulombienne entre deux électrons de l'état final :

$$\langle \Psi_f | = \left\langle N \chi(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi(\vec{k}_d - \vec{k}_1) \phi(\vec{k}_d - \vec{k}_2) \phi(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \exp\left(i(\vec{k}_d \cdot \vec{r}_0 + \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)\right) \right\rangle \quad (\text{II-7})$$

avec :

$$\chi(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \prod_{i=0}^2 {}_1F_1\left(i\alpha_i, 1, -i(\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i + k_i r_i)\right) \quad (\text{II-8})$$

et la constante N est donnée par :

$$N = \frac{1}{(2\pi)^3} \exp\left(\frac{\pi}{2}(\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2)\right) \Gamma(1 - i\alpha_0) \Gamma(1 - i\alpha_1) \Gamma(1 - i\alpha_2) \quad (\text{II-9})$$

et :

$$\begin{aligned} \phi(\vec{k}_d - \vec{k}_1) &= \exp\left(\frac{-\pi\alpha_{01}}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha_{01}) \\ \phi(\vec{k}_d - \vec{k}_2) &= \exp\left(\frac{-\pi\alpha_{02}}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha_{02}) \\ \phi(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) &= \exp\left(\frac{-\pi\alpha_{12}}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha_{12}) \end{aligned} \quad (\text{II-10})$$

où :

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{Z_0}{k_d}, \alpha_1 = \frac{Z_1}{k_1}, \alpha_2 = \frac{Z_2}{k_2} \\ \alpha_{01} &= \frac{1}{|\vec{k}_d - \vec{k}_1|}, \alpha_{02} = \frac{1}{|\vec{k}_d - \vec{k}_2|}, \alpha_{12} = \frac{1}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \end{aligned} \quad (\text{II-11})$$

Les charges effectives Z_0 , Z_1 et Z_2 peuvent être fixées à la valeur de la charge nucléaire ($Z=2$), ou peuvent varier selon les travaux de Berakdar [Ber96] et Zhang [Zha00] pour les collisions

(e,2e). Pour le moment, si on tient compte de la répulsion électronique entre deux électrons dans l'état final et si on vérifie la condition de Rudge [Rud68] :

$$\frac{Z_0}{k_d} + \frac{Z_1}{k_1} + \frac{Z_2}{k_2} = \frac{2}{k_d} + \frac{2}{k_1} + \frac{2}{k_2} - \frac{1}{|\vec{k}_d - \vec{k}_1|} - \frac{1}{|\vec{k}_d - \vec{k}_2|} - \frac{1}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \quad (\text{II-12})$$

Une solution possible (mais elle n'est pas unique) est :

$$\begin{aligned} Z_0 &= 2 - \frac{k_d^2}{(k_d + k_1)|\vec{k}_d - \vec{k}_1|} - \frac{k_d^2}{(k_d + k_2)|\vec{k}_d - \vec{k}_2|} \\ Z_1 &= 2 - \frac{k_1^2}{(k_d + k_1)|\vec{k}_d - \vec{k}_1|} - \frac{k_1^2}{(k_1 + k_2)|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \\ Z_2 &= 2 - \frac{k_2^2}{(k_d + k_2)|\vec{k}_d - \vec{k}_2|} - \frac{k_2^2}{(k_1 + k_2)|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \end{aligned} \quad (\text{II-13})$$

Le calcul de l'élément de matrice (II-3) nécessite l'utilisation de la méthode bien connue de Roy et al [Roy80] qui réduit une intégrale à six dimensions à une intégrale numérique unidimensionnelle.

Par l'utilisation de la relation :

$$\exp(-\gamma r_{12}) = \frac{\gamma}{\pi^2} \iiint \frac{d\vec{p}}{(p^2 + \gamma^2)} \exp(i\vec{p} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)) \quad (\text{II-14})$$

Nous réduisons l'intégrale à neuf dimensions de (II-3) à une intégrale numérique à quatre dimensions.

Si nous tenons compte aussi de tous les effets d'échange, l'amplitude directe f s'écrit sous la forme suivante :

$$f = \langle k_d(0) k_1(1) k_2(2) | V | k_i(0) \varphi(1, 2) \rangle \quad (\text{II-15})$$

et les amplitudes d'échange g et h sont :

$$g = \langle k_d(1) k_1(0) k_2(2) | V | k_i(0) \varphi(1, 2) \rangle \quad (\text{II-16})$$

$$h = \langle k_d(1) k_1(2) k_2(0) | V | k_i(0) \varphi(1, 2) \rangle \quad (\text{II-17})$$

Où $k_j(i)$ représente la fonction d'onde décrivant l'électron i , $\varphi(1,2)$ est l'état initial de l'hélium.

Et la section efficace différentielle est donnée par :

$$\sigma^{(5)} = \frac{k_1 k_2 k_d}{k_i} \left(\frac{1}{2} (f + h - 2g)(f^* + h^* - 2g^*) + \frac{3}{2} (f - h)(f^* - h^*) \right) \quad (\text{II-18})$$

Le calcul explicite de l'expression (II-18) est exposé dans l'annexe A.

Cette expression correspond exactement à celle trouvée par Schulz [Sch73] pour l'ionisation de l'hélium par impact électronique. Dans notre cas, le processus de capture décrit par Schulz est substitué par un processus d'une deuxième ionisation.

Afin d'effectuer une comparaison assez complète, nous incluons dans notre discussion les résultats de la deuxième approximation de Born (sans échange) par l'application de l'approximation de la fermeture [Grin00] comme dans Lahmam-Bennani et al (2003) mais en utilisant une fonction d'onde initiale fortement corrélée de Bonham et Kohl (1966) (expression (II-6)). Dans ce modèle, l'électron diffusé était décrit par une onde plane alors que les deux électrons éjectés étaient décrits par deux fonctions d'onde coulombiennes. L'interaction entre les deux électrons éjectés était prise en compte par un facteur de Gamow. Ce modèle était capable de reproduire (comme CCC ou BBK) l'allure des résultats expérimentaux [Grin00]. Quand on utilise la première approximation de Born, ce modèle donne un bon accord dans le cas de la double ionisation des gaz rares pour une énergie d'incidence élevée (Dal Cappello et al 1995 [Dal95]). Finalement, nos modèles utilisent toujours la même fonction d'onde initiale (Bonham et Kohl 1966).

II-4- Résultats et discussion :

L'expérience à 601 eV était, jusqu'ici, étudiée brièvement dans un article (Rapid Communication [Lah03]). Les auteurs ont montré que la deuxième approximation de Born était nécessaire pour expliquer le déplacement du pic situé autour $\theta_1 = 280^\circ$ et $\theta_2 = 50^\circ$. Malheureusement, le modèle utilisé par les auteurs n'a pas expliqué la position du pic situé autour de $\theta_1 = 230^\circ$ et $\theta_2 = 90^\circ$. Ils ont juste discuté une distribution angulaire relative à $\theta_1 = 280^\circ$ et ont trouvé un bon accord entre leur traitement de Born II et les données expérimentales dans ce cas.

La figure (II-1) montre la section efficace expérimentale de la (e,3e) double ionisation de l'hélium en fonction de θ_1 et θ_2 .

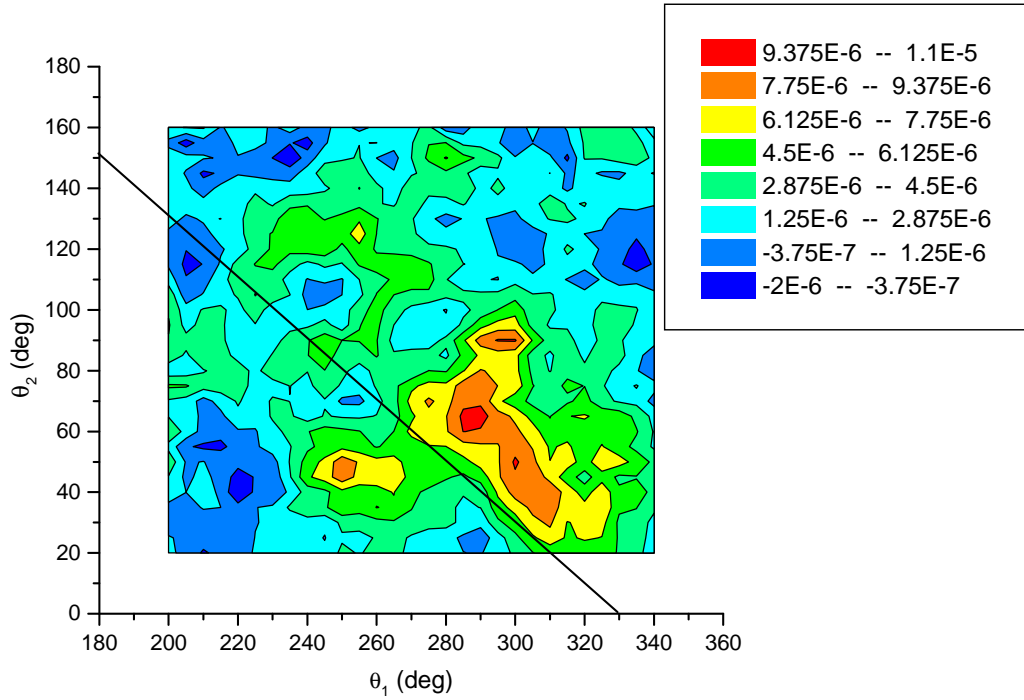


Figure (II-1) : La projection sur le plan de diffusion de l'intensité de la section efficace expérimentale quintuplement différentielle (S.E.Q.D) de la double ionisation de l'hélium par impact électronique en fonction de θ_1 et θ_2 . La symétrie due à la première approximation de Born est représentée par le segment sur la figure.

Les données expérimentales ne montrent aucune symétrie par rapport à n'importe quelle direction, c'est-à-dire, que $\theta_{\vec{k}}$ n'est pas une direction favorable pour l'éjection.

La symétrie due à la première approximation de Born correspond à l'éjection symétrique des deux électrons par rapport au vecteur transfert \vec{K} selon la relation suivante :

$$\theta_1 - \theta_K = -(\theta_2 - \theta_K) \quad (\text{II-19})$$

Elles montrent aussi une très forte dissymétrie de l'ensemble de la distribution dans le plan de diffusion de la section efficace.

On remarque la présence de plusieurs maximums : le plus important du point de vue amplitude est situé autour de $\theta_2 = 60^\circ$ et $\theta_1 = 280^\circ$. En plus, on note l'apparence de trois nouvelles crêtes, deux des trois sont situées dans un côté par rapport à l'axe de symétrie, bien qu'elles ne sont pas symétriques et elles se situent autour de $\theta_2 = 45^\circ$ et $\theta_1 = 250^\circ$ et autour de

$\theta_2 = 90^\circ$ et $\theta_1 = 290^\circ$, alors que la troisième crête apparaît plus au moins le long de cet axe et autour de $\theta_2 = 40^\circ$ et $\theta_1 = 300^\circ$.

On note que les deux électrons éjectés sont émis préférentiellement dans deux groupes qui apparaissent comme deux crêtes, disposés autour de $\theta_1 = 115^\circ$ et $\theta_2 = 240^\circ$ pour le premier groupe qui s'appelle « le groupe arrière », et autour de $\theta_1 = 45^\circ$ et $\theta_2 = 270^\circ$ pour le deuxième groupe qui s'appelle « le groupe avant ».

A partir de ces données, on peut définir un « demi plan avant » défini par : $0 < \theta_1 < 90^\circ$ et $\theta_2 > 270^\circ$, et un « demi plan arrière » défini par : $90^\circ < \theta_1 < 180^\circ$ et $180^\circ \leq \theta_2 < 270^\circ$.

Du point de vue expérimental, l'éjection dans le « demi plan avant » est plus importante que dans le « demi plan arrière », alors que notre modèle montre un comportement inverse de la distribution angulaire en favorisant une éjection dans le « demi plan arrière », même si l'émission dans le « demi plan avant » reste significative. Ce que montre la figure (II-2).

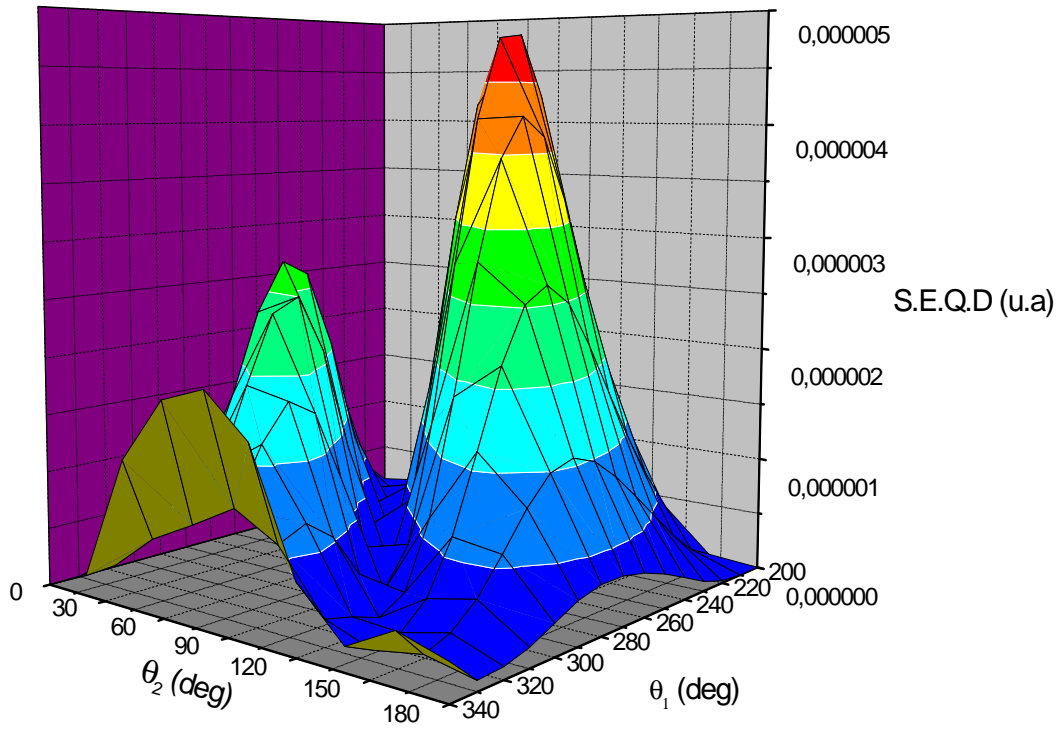


Figure (II-2) : Représentation des variations de la S.E.Q.D de la double ionisation de l'hélium en fonction des angles d'éjections des deux électrons θ_1 et θ_2 , dans une diffusion coplanaire, avec les même conditions cinématiques que dans la figure (II-1).

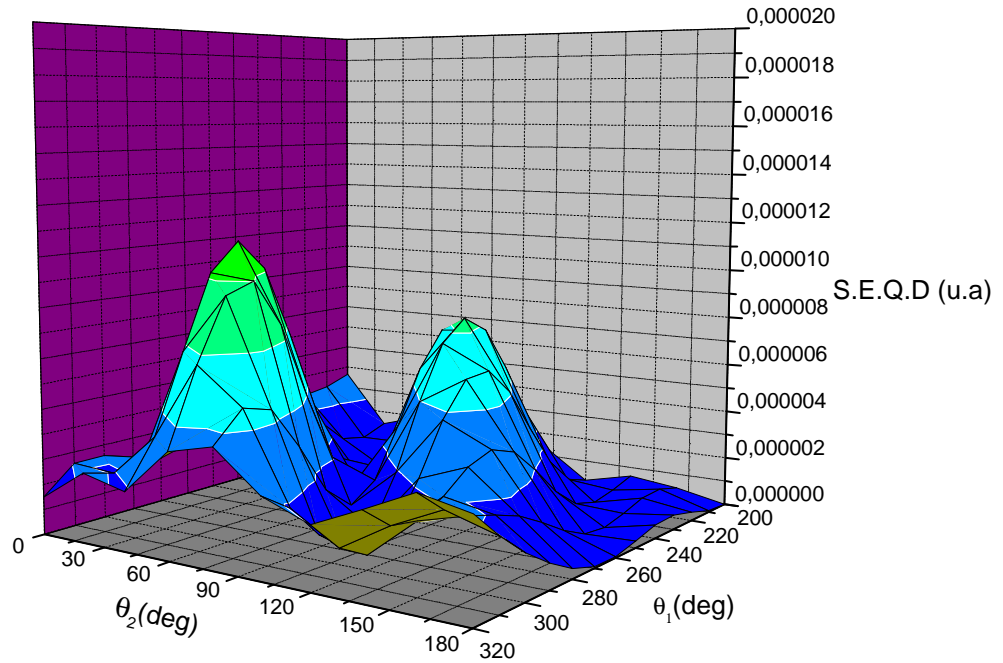


Figure (II- 3) : Môme situation que la figure (II-2) mais pour des charges effectives variables.

En revanche, l'introduction des charges effectives dépendantes inverse le comportement de la S.E.Q.D par rapport au cas précédent où $Z_0 = Z_1 = Z_2 = 2$, puisqu'elle favorise l'émission dans le « demi plan avant ». Nous remarquons aussi que l'introduction de ces charges corrige l'amplitude des deux pics de la contribution angulaire et elles donnent des valeurs de la S.E.Q.D proches à celles données par l'expérience.

On peut lier les structures présentes dans la S.E.Q.D au moment de recul k_{ion} défini par :

$$\begin{aligned} \vec{k}_{ion} &= \vec{k}_i - \vec{k}_d - \vec{k}_1 - \vec{k}_2 & (II-20) \\ &= \vec{K} - \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \end{aligned}$$

Dans cette expérience, les énergies E_j et les moments $k_j = \sqrt{2E_j}$, $j \in \{i, d, 1, 2\}$ sont mesurés, donc k_{ion} est directement déduit de l'équation (II-20).

Par analogie avec la simple ionisation par impact électronique, la section efficace doit être maximale quand le moment du transfert \vec{K} donné par le projectile est très petit et directement

et complètement absorbé par les deux électrons éjectés, c'est-à-dire quand $k_{ion} = 0$, les conditions cinématiques correspondantes sont localisées sur la « sphère de Bethe » [Ber03].

Tout en tenant compte du fait que les données expérimentales sont relatives, l'existence des trois crêtes supplémentaires permet d'identifier trois régions angulaires où les effets d'ordre supérieur devraient être importants.

Notre but est de discuter avec plus de détails toutes les distributions angulaires en utilisant notre modèle qui va au-delà de la deuxième approximation de Born. Ce modèle consiste à traiter tous les électrons de l'état final comme des fonctions coulombiennes et à tenir compte de toutes les interactions entre ces électrons, alors que le modèle utilisé par Lahmam-Bennani et al [Lah03] consiste à décrire l'électron diffusé par une onde plane qui était supposé interagir deux fois avec la cible. D'autre part, tous les effets d'échange sont pris en compte et on utilise une fonction d'onde précise pour l'état initial. A titre de comparaison avec les données discutées dans ce que va suivre, on introduit deux versions du modèle 6C approximé (A6C), avec les charges effectives Z_0 , Z_1 et Z_2 fixées ou variables. Cette comparaison est aussi faite avec le modèle de Born II utilisé par Lahmam-Bennani et al [Lah03].

Comme l'électron diffusé est rapide (comparé avec la vitesse de l'électron éjecté), l'échange entre l'électron rapide et les électrons lents peut être négligé et les deux facteurs de Gamow (entre l'électron rapide et ceux qui sont lents) peuvent être remplacés par 1. Mais le paramètre Z_0/k_d dans la fonction d'onde coulombienne pour l'électron diffusé n'est pas négligeable et on note ici quelques différences dans les résultats quand l'électron diffusé est décrit par une fonction coulombienne au lieu d'une onde plane.

La structure des distributions angulaires peut être analysée avec les règles de sélection [Ber03]. A partir de ces règles, on peut déduire l'apparition de certains minimums qui correspondent aux cas suivants :

(a) $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2$, $[k_1 \cos \theta_1 = -k_2 \cos \theta_2]$. Ce minimum est dû à la parité de la fonction d'onde décrivant les deux électrons éjectés. Dans la double photo ionisation, ce minimum devient nul.

(b) $\vec{k}_1 \cdot \vec{K} = 0$ et $\vec{k}_2 \cdot \vec{K} = 0$, $[k_i \cos \theta_1 - k_d \vec{k}_d \cdot \vec{k}_1 = 0$ et $k_i \cos \theta_2 - k_d \vec{k}_d \cdot \vec{k}_2 = 0]$. Ce minimum est le point 0 dans la distribution angulaire des électrons éjectés quand leur énergie est très importante. Dans notre cas, ce minimum est le même que celui donné par (a) car $\vec{k}_1 = \vec{k}_2$ est physiquement impossible.

(c) $\vec{k}_1 = \vec{k}_2$, $[k_2 \cos \theta_2 = k_1 \cos \theta_1]$. Ce minimum est dû à la répulsion électronique.

(d) $(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \cdot \vec{K} = 0$, $[k_1(k_i \cos \theta_1 - k_d \vec{k}_d \cdot \vec{k}_1) = -k_2(k_i \cos \theta_2 - k_d \vec{k}_d \cdot \vec{k}_2)]$. Dans ce cas-ci la transition optique est interdite ayant pour résultat l'apparition d'un minimum.

Toutes les distributions angulaires correspondent aux figures 1-29. Les positions des minimums cités au-dessus sont indiquées par des flèches marquées a, b, c, d correspondant aux minimums (a)-(d).

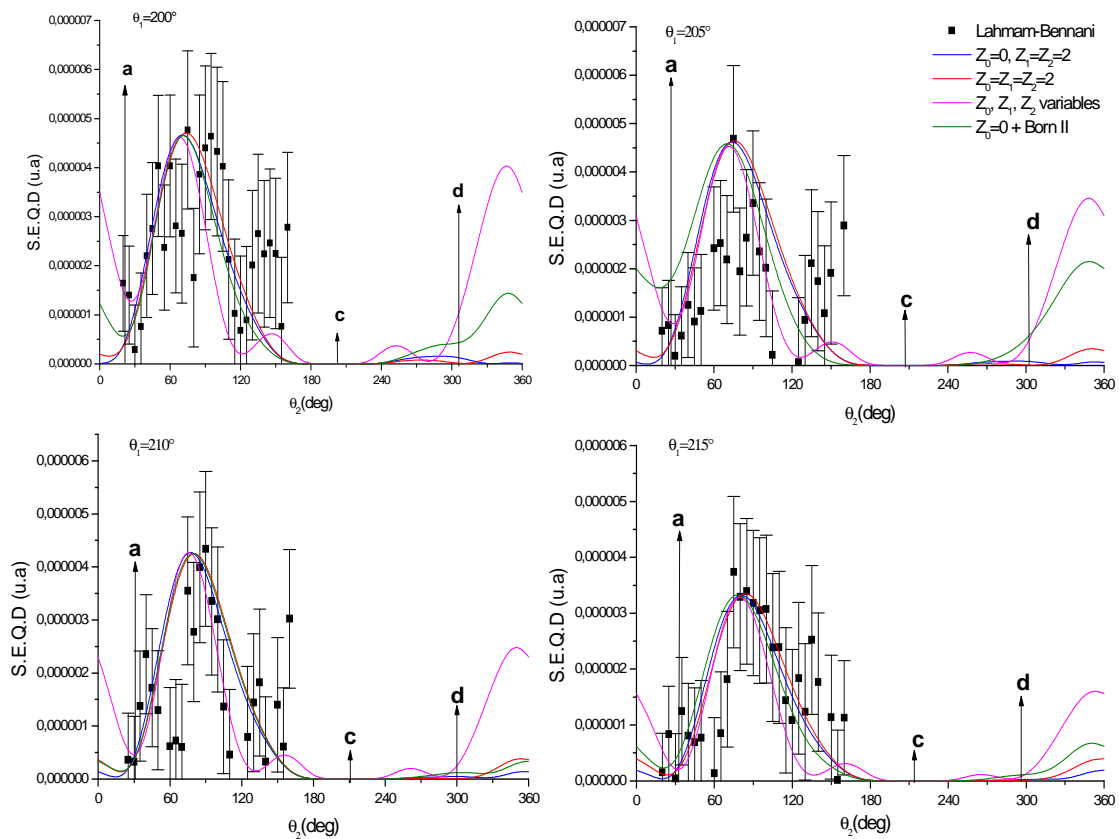


Figure (II-4) : Distribution angulaire pour la double ionisation de l'hélium. L'angle de diffusion est $\theta_d = 1,5^\circ$. L'énergie d'incidence est 601 eV, les électrons éjectés sont détectés avec des énergies égales $E_1 = E_2 = 11$ eV. Le premier électron est détecté sous un angle fixe (ici $\theta_1 = 200^\circ, 205^\circ, 210^\circ, 215^\circ$) alors que le deuxième est détecté sous un angle variable θ_2 . Les données expérimentales sont absolues, donc les résultats théoriques sont multipliés par un facteur de normalisation qui dépend chaque fois du maximum des données expérimentales pour chaque angle de détection du premier électron éjecté.

En tenant compte de ces règles de sélection, on note les points suivants :

(i)

Le premier minimum (a) est souvent observé (de 200° à 310°) dans les données expérimentales et dans tous les modèles théoriques, bien qu'on puisse noter que ce minimum est généralement décalé pour des valeurs inférieures de θ_2 dans les résultats de la seconde approximation de Born. Mais quand un électron est éjecté le long de la direction du moment du transfert (ou près de cette direction, de 310° à 340°), ce minimum (a) disparaît et devient un maximum dans les données expérimentales et les modèles théoriques. L'existence du minimum (a) est liée à une réminiscence de la règle optique qui interdit aux deux électrons sortants d'un processus de double photo ionisation à émerger 'dos à dos' en raison de la symétrie de la paire d'électrons dans l'état final. Par conséquent, cette limite optique ici est largement violée quand un électron est éjecté plus ou moins le long de \vec{K} , indiquant qu'une part significative des contributions non-dipolaires se produit, et confirmant une conclusion précédente (Lahmam-Bennani et al 2000) que la limite dipolaire est atteinte différemment pour différentes directions d'éjection, à une énergie d'impact et pour un moment de transfert donné à la cible.

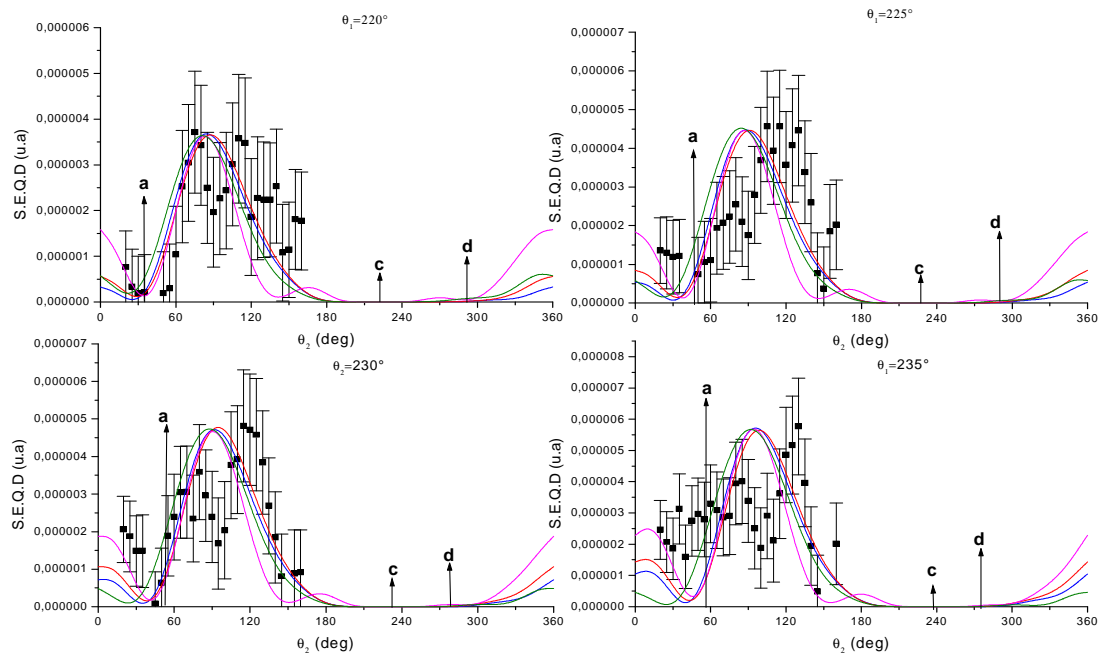


Figure (II-5): Même situation que dans la figure (2-4), pour $\theta_1 = 220^\circ, 225^\circ, 230^\circ, 235^\circ$.

(ii)

Le minimum donné par (b) est trouvé seulement pour la distribution angulaire correspondant à $\theta_l = 255^\circ$. Dans cette situation particulière (deux électrons sont éjectés le long d'une direction perpendiculaire à la direction du moment du transfert), ce minimum est exactement le même que celui donné par (a). Les modèles théoriques ainsi que les données expérimentales reproduisent bien ces minimums (a) et (b).

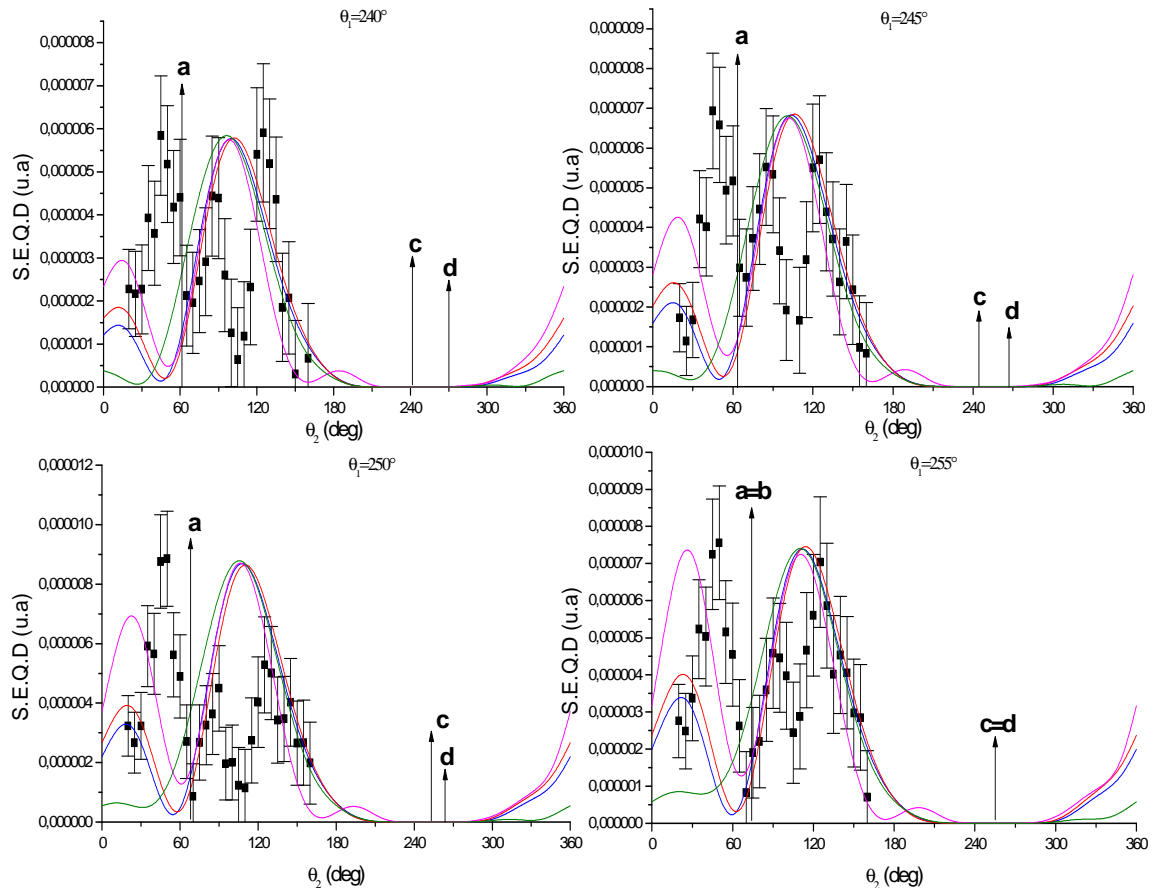


Figure (II-6) : Même situation que dans la figure (II-4) pour $\theta_1 = 240^\circ, 245^\circ, 250^\circ, 255^\circ$

(iii)

Le minimum (c), du à la répulsion électronique entre les deux électrons éjectés, est toujours reproduit par les théories. Ceci est facile à expliquer car tous les modèles théoriques employés ici incluent les facteurs de Gamow qui imposent une SEQD nulle quand deux électrons sont éjectés dans la même direction et ayant la même énergie. Nous pouvons noter qu'un tel facteur n'est pas employé dans le modèle CCC. Ce minimum se situe toujours dans une gamme angulaire non accessible aux expériences, du à la contrainte expérimentale de détecter les deux électrons éjectés dans les demi-plans opposés.

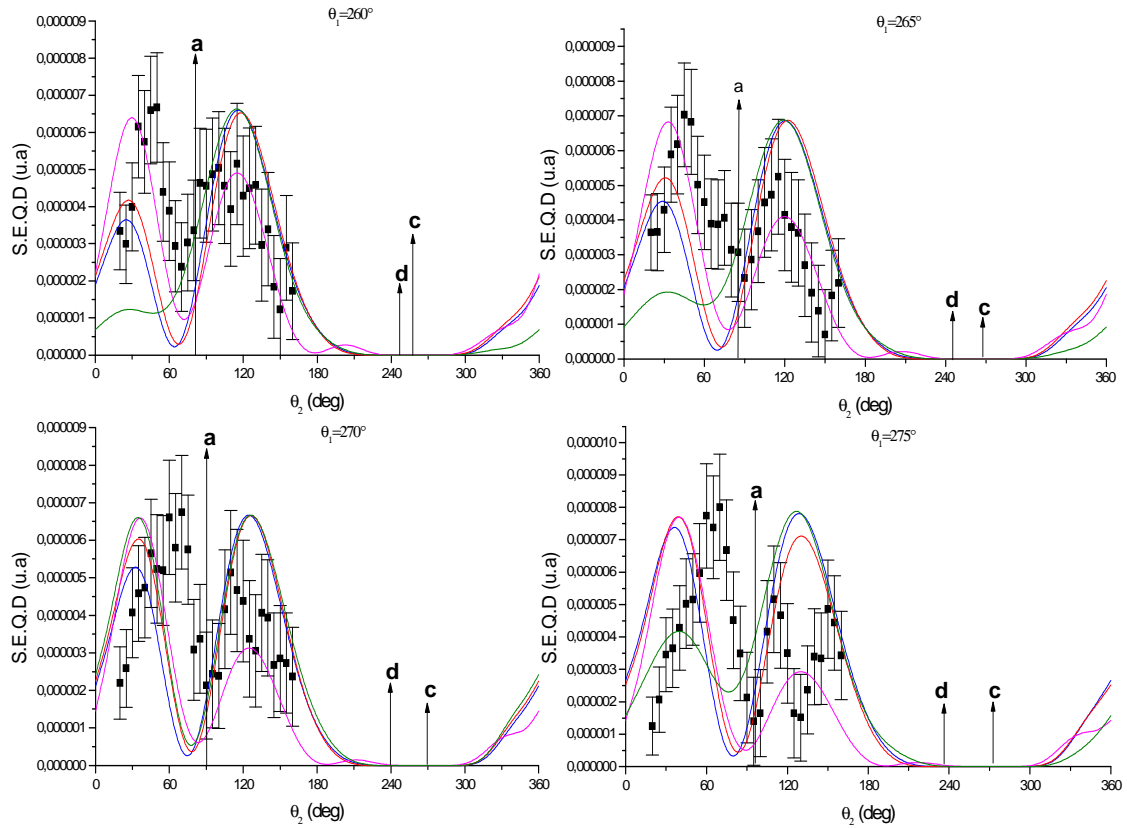


Figure (II-7) : Môme situation que dans la figure (II-4) pour $\theta_1 = 260^\circ, 265^\circ, 270^\circ, 275^\circ$.

(iv)

Le comportement du minimum (d) est plus ou moins semblable à celui de (a). Quand on varie θ_1 de 200° à 340° , les minimums se déplacent tous les deux l'un vers l'autre balayant une large gamme angulaire. A $\theta_1 = 255^\circ$, les minimums (a) et (b) d'une part, et (c) et (d) d'autre part coïncident parfaitement. Par conséquent, autour de cette valeur de θ_1 , dans l'intervalle 240° - 270° , un minimum profond est observé dans tous les résultats théoriques, mais il est difficile de s'assurer que son existence correspond au minimum (c) ou (d), ou à tous les deux. Pour des grandes et petites valeurs de θ_1 , dans les intervalles 215° - 235° et 275° - 300° , ce minimum (d) est reproduit par la théorie, surtout les résultats obtenus par la seconde approximation de Born, comme le cas du minimum (a). À des valeurs plus grandes de θ_1 , de 305° à 340° , c'est le cas où un électron est éjecté le long du moment du transfert, le minimum (d) devient un maximum. Ce maximum est bien reproduit par la théorie (particulièrement les cas 335° et 340°). Aussi, malgré le fait que le minimum (d) n'est pas

dans la gamme angulaire expérimentalement accessible, les données montrent certainement une tendance qui tend à confirmer l'existence d'un maximum plutôt qu'un minimum à cette position. Cette observation d'un maximum au lieu d'un minimum prévu par la règle de sélection est semblable à l'observation faite pour le minimum (a), et elle aboutit à la même conclusion : ces deux minimums sont liés à la limite optique, qui est fortement violée quand la direction d'éjection d'un électron est plus ou moins le long du moment du transfert.

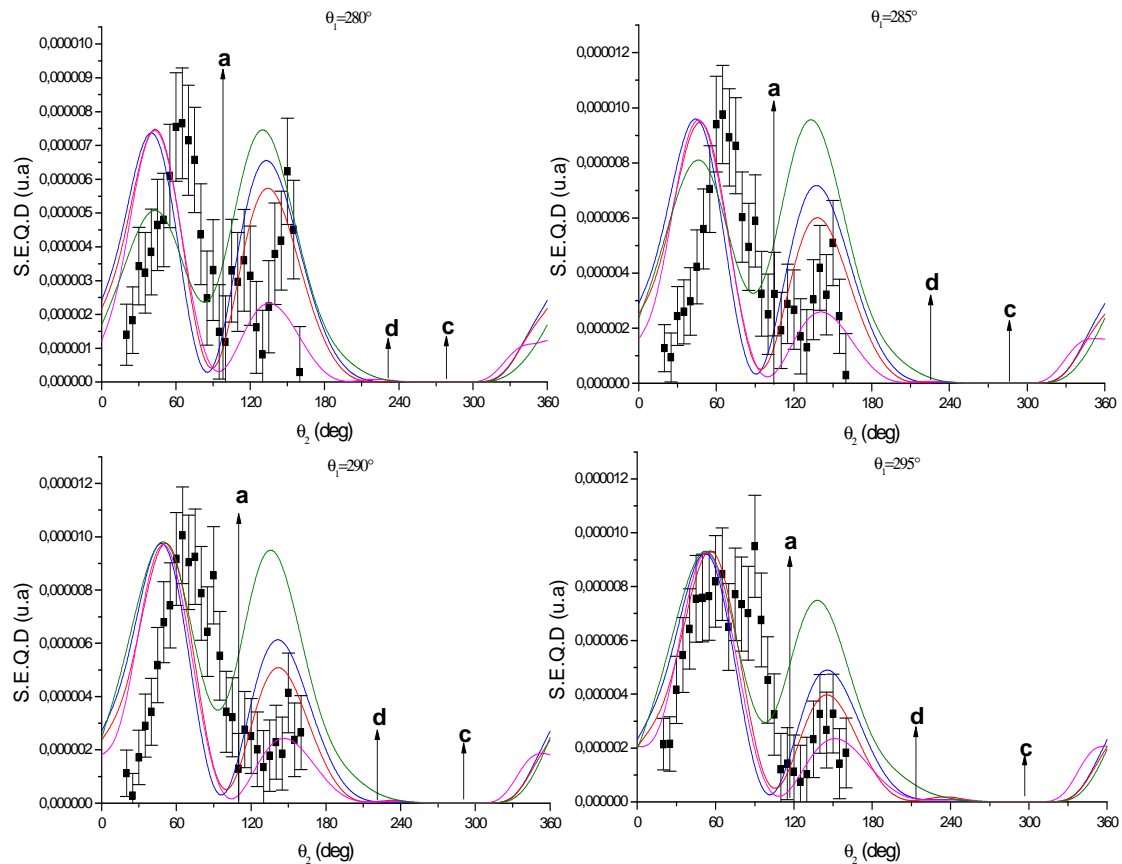


Figure (II-8): Même situation que pour la figure (II-4) avec $\theta_1 = 280^\circ, 285^\circ, 290^\circ, 295^\circ$.

Par conséquent, comme première conclusion, la structure de la SEQD est bien expliquée par les minimums (a) et (c) sauf dans le cas où un électron est détecté le long d'une direction près du moment du transfert.

Maintenant, si l'on analyse en détail les distributions angulaires, nous pouvons en définir plusieurs groupes. Le premier groupe constitué de 11 distributions angulaires (de 255° à 305°) qui représentent la même structure : un premier pic localisé à 45° - 60° et un deuxième localisé à 110° - 140° où le minimum (a) est parfaitement reproduit. Généralement, le modèle A6C

avec des charges effectives angulaires dépendantes reproduit le bon rapport des amplitudes des deux pics beaucoup mieux que les trois autres modèles qui surestiment l'amplitude du deuxième pic (voir la distribution angulaire à 290°). Nous pouvons noter que la seconde approximation de Born (avec l'utilisation d'une bonne fonction d'onde initiale) surestime largement le second pic. Aucun des modèles considérés ne peut reproduire exactement la position du premier pic : on observe en effet un grand décalage entre les expériences et la théorie (voir par exemple $\theta_1 = 270^\circ$, qui montre un changement progressif d'un décalage positif à $\theta_1 = 255^\circ$ à un décalage négatif à $\theta_1 = 305^\circ$ et aucun décalage à $\theta_1 = 295^\circ$ - 300°).

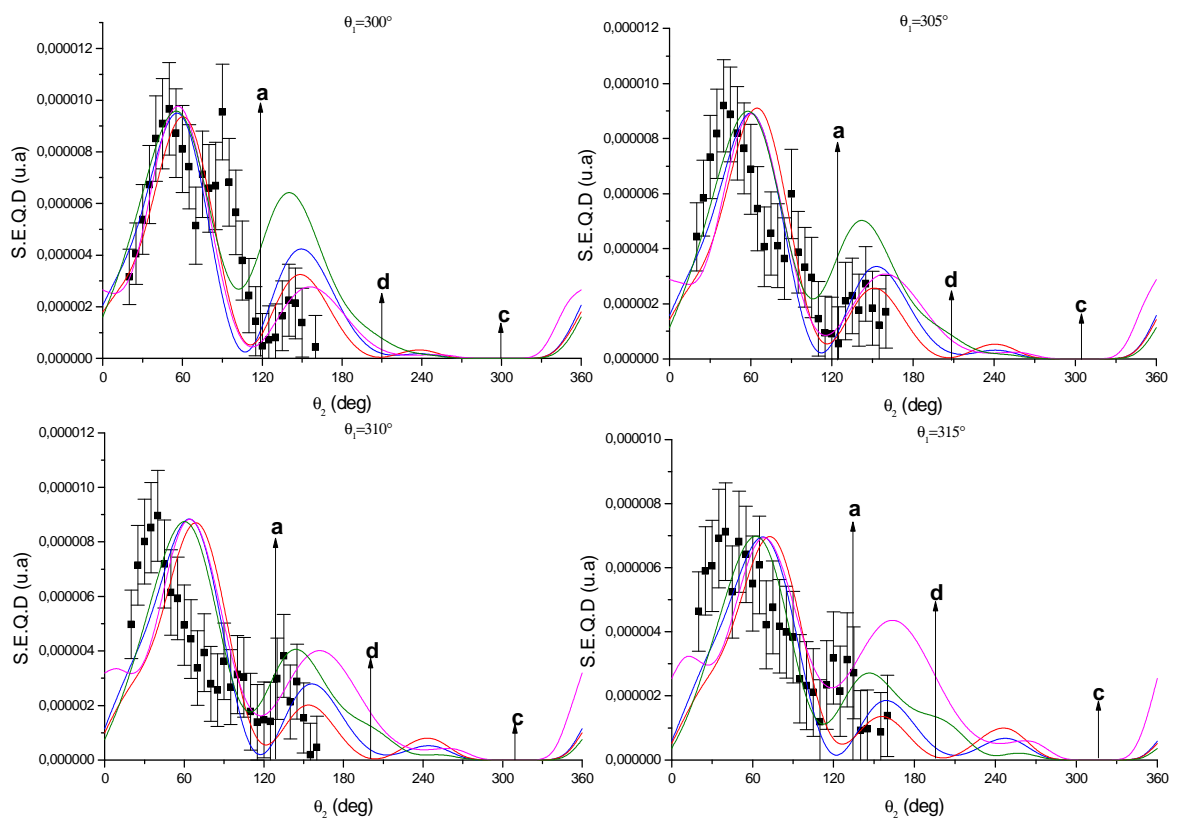


Figure (II-9): Même situation que pour la figure (II-4) avec $\theta_1 = 300^\circ, 305^\circ, 310^\circ, 315^\circ$.

Le second groupe constitué de 7 distributions angulaires (de 310° à 340°) représente une situation où le minimum (a) n'est pas reproduit. Dans ce cas, le modèle utilisant la seconde approximation de Born donne globalement un accord plus ou moins satisfaisant avec les données expérimentales. Par contre, le modèle A6C avec des charges effectives variables surestime l'amplitude du second pic (localisé à 160°), mais c'est le seul modèle théorique qui

présente un premier pic structuré ressemblant à la structure observée dans les données expérimentales. Néanmoins, le premier pic à 50° n'est pas bien décrit par aucune théorie.

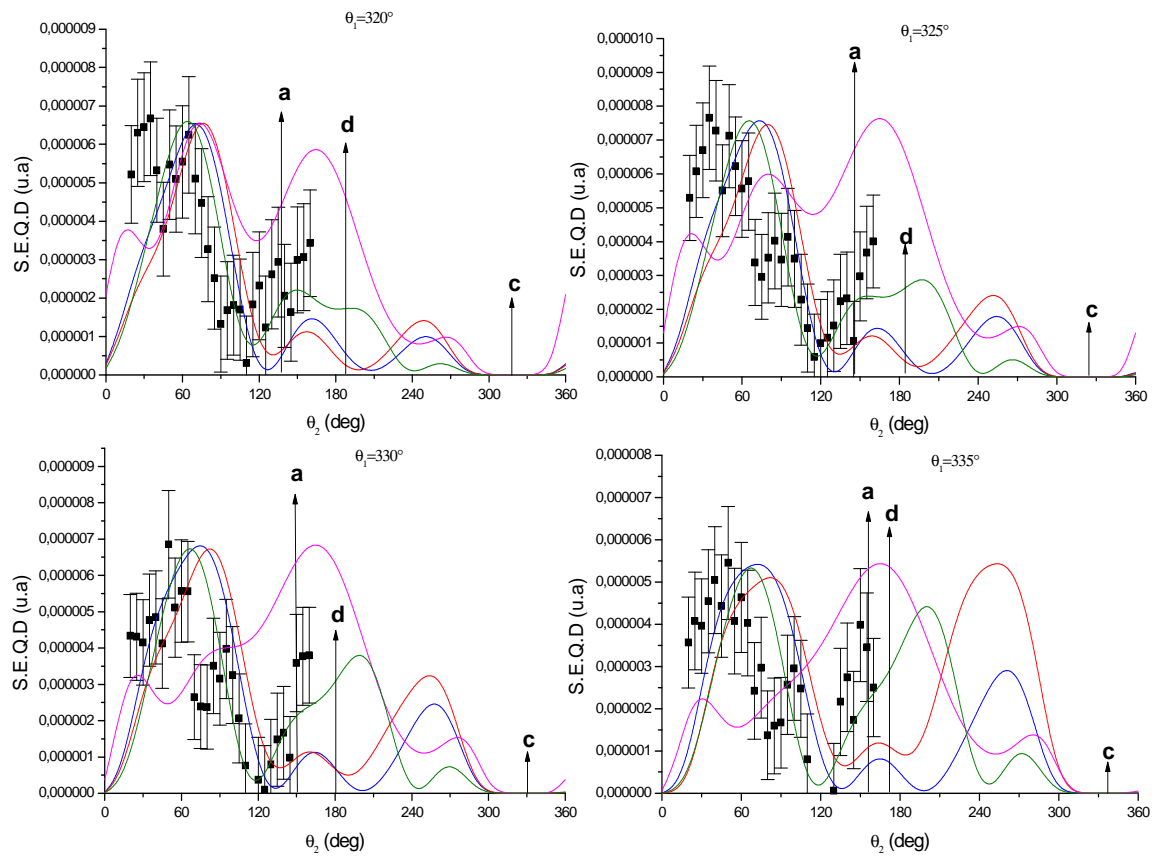


Figure (II-10): Même situation que pour la figure (II-4) avec $\theta_1 = 320^\circ, 325^\circ, 330^\circ, 335^\circ$.

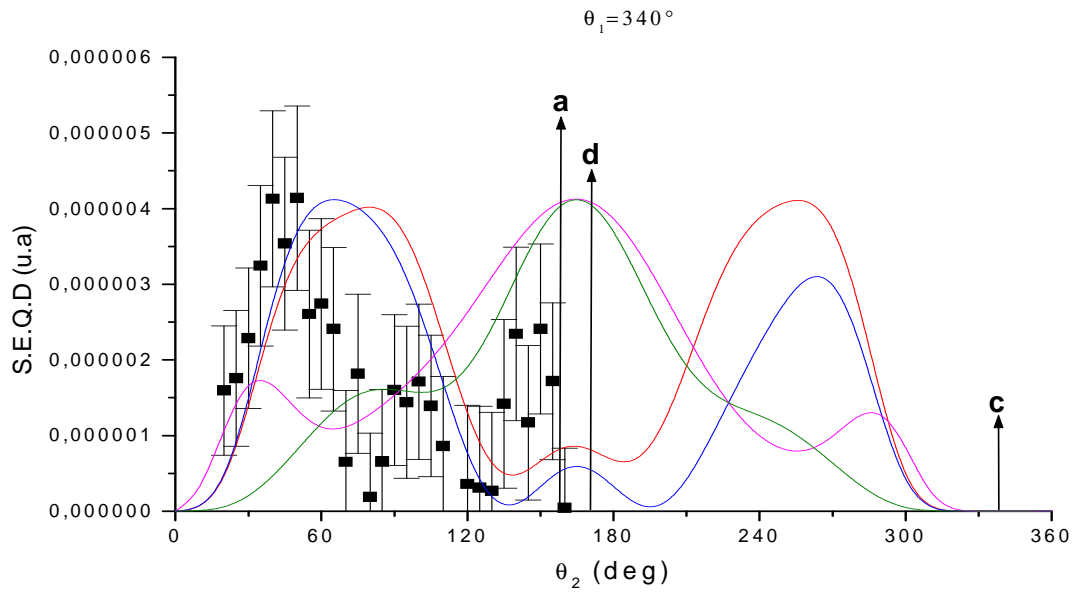


Figure (II-11) : Même situation que pour la figure (II-4) avec $\theta_1 = 340^\circ$.

Maintenant, nous considérons un troisième groupe constitué de 11 distributions angulaires (de 200° à 250°). Le minimum (a) est bien présent dans les modèles théoriques ainsi que dans les données expérimentales. L'accord entre la théorie et l'expérience n'est pas bon ici en général. Les amplitudes des pics ne sont pas bien reproduites et le premier pic à 50° (voir $\theta_1 = 245^\circ$) n'est pas décrit par aucune théorie aussi bien que le minimum observé dans les données expérimentales à 110° (voir $\theta_1 = 240^\circ$).

Nous étudions maintenant le cas où l'un des électrons éjectés est détecté le long de la direction du moment du transfert \vec{K} , alors que le deuxième éjecté est détecté sous un angle variable.

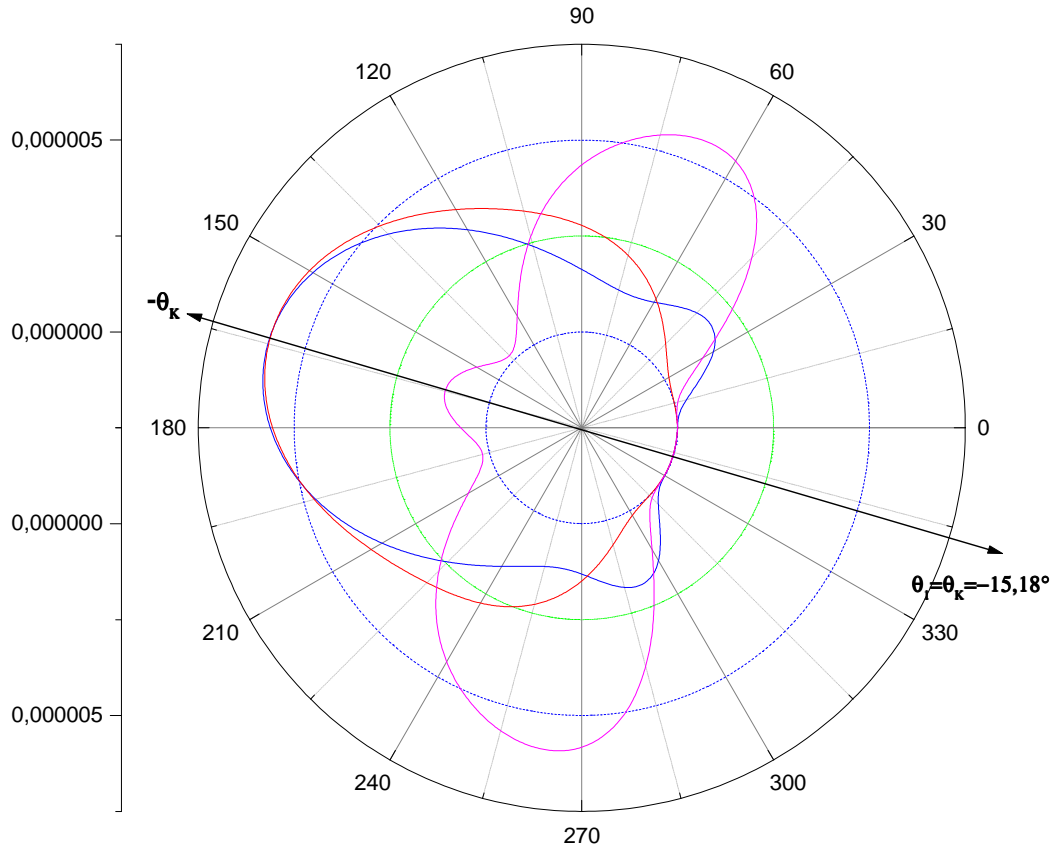


Figure (II-12) : La SEQD en unité atomique pour la double ionisation de l'hélium pour les mêmes conditions cinématiques que pour la figure (II-4). Le premier électron éjecté est détecté le long de la direction du moment de transfert. La SEQD est tracée dans les coordonnées polaires en fonction de la direction \vec{k}_2 du deuxième électron éjecté. La courbe bleue représente le modèle où l'électron diffusé est décrit par une onde plane, la courbe rouge représente les résultats de notre modèle avec des charges effectives fixes $Z_0 = Z_1 = Z_2$ alors que la courbe rose représente les résultats du même modèle avec des charges effectives variables.

Dans le cas du modèle où l'électron diffusé est décrit par une onde plane, la distribution angulaire est symétrique par rapport à la direction du moment de transfert. Cette conclusion était déjà établie pour les gaz rares ([Lah97],[Maj97]).

Par contre, et à cause de la forte corrélation de la fonction d'onde finale de notre modèle, cette symétrie est brisée par rapport à la direction du transfert \vec{K} .

II-5- Cas où $E_i = 1099$ eV, $E_d = 1000$ eV, $E_1 = E_2 = 10$ eV :

Nous allons maintenant appliquer notre modèle avec charges effectives fixes et des charges effectives variables pour une autre cinématique de la double ionisation de l'hélium. L'énergie d'impact est $E_0 = 1099$ eV, l'électron diffusé est détecté sous un angle fixe $\theta_d = +1.10^\circ$, avec une énergie de $E_d = 1000$ eV (qui correspond à un moment de transfert fixe, $K = 0.45$ u.a, dans la direction $\theta_K = -21.6^\circ$). Les deux électrons éjectés ont une même énergie, $E_1 = E_2 = 10$ eV, et ils sont détectés dans les deux demi plans opposés, c'est-à-dire, $20^\circ < \theta_1 < 160^\circ$ et $200^\circ < \theta_2 < 340^\circ$.

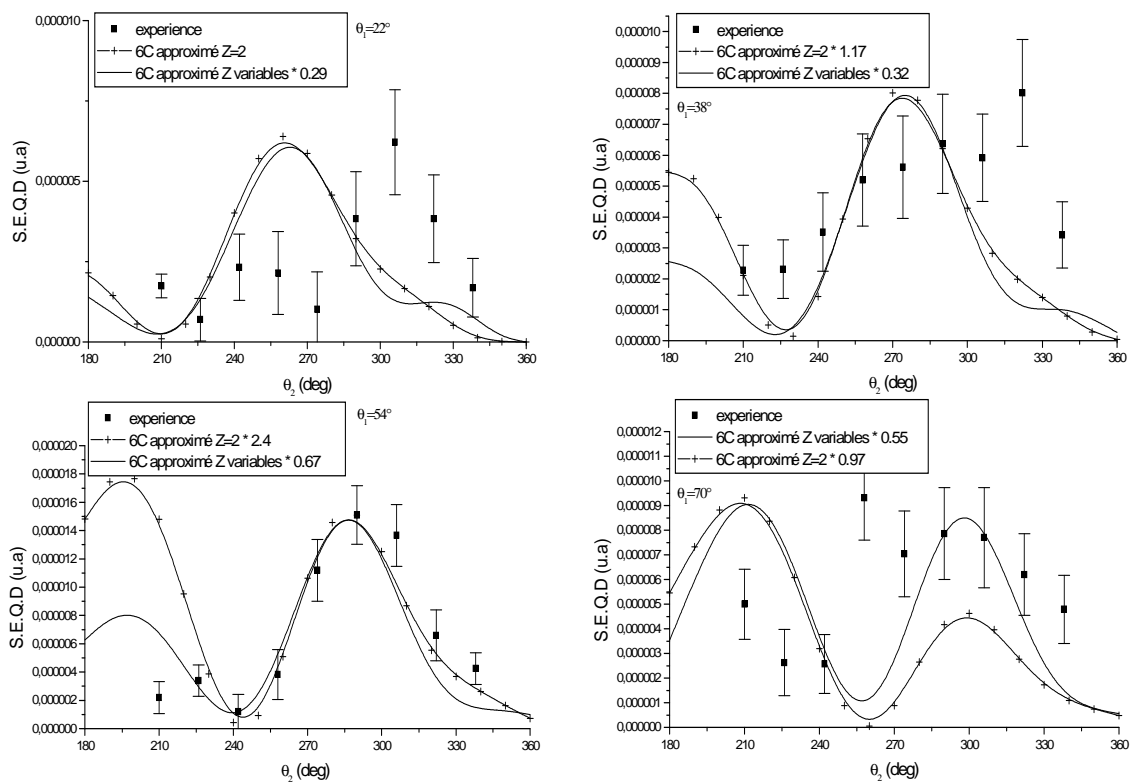


Figure (II-13) : comparaison de nos résultats avec les données expérimentales pour la cinématique $E_0 = 1099$ eV, $E_d = 1000$ eV, $E_1 = E_2 = 10$ eV et $\theta_d = 1.1^\circ$. La S.E.Q.D théorique est normalisée par rapport à l'expérience. Le premier électron éjecté est détecté sous un angle fixe : $\theta_1 = 22^\circ, 38^\circ, 54^\circ, 70^\circ$

Ces résultats étaient analysés avec deux modèles, le modèle CCC et le modèle C4FS par Lahmam-Bennani et al [Lah01]. Ils étaient interprétés également par Nebdi [Neb00] en introduisant les mécanismes SO, TS1 et TS2, et par Grin [Grin00] en utilisant un modèle de BBK approximé comportant la contribution de la deuxième approximation de Born.

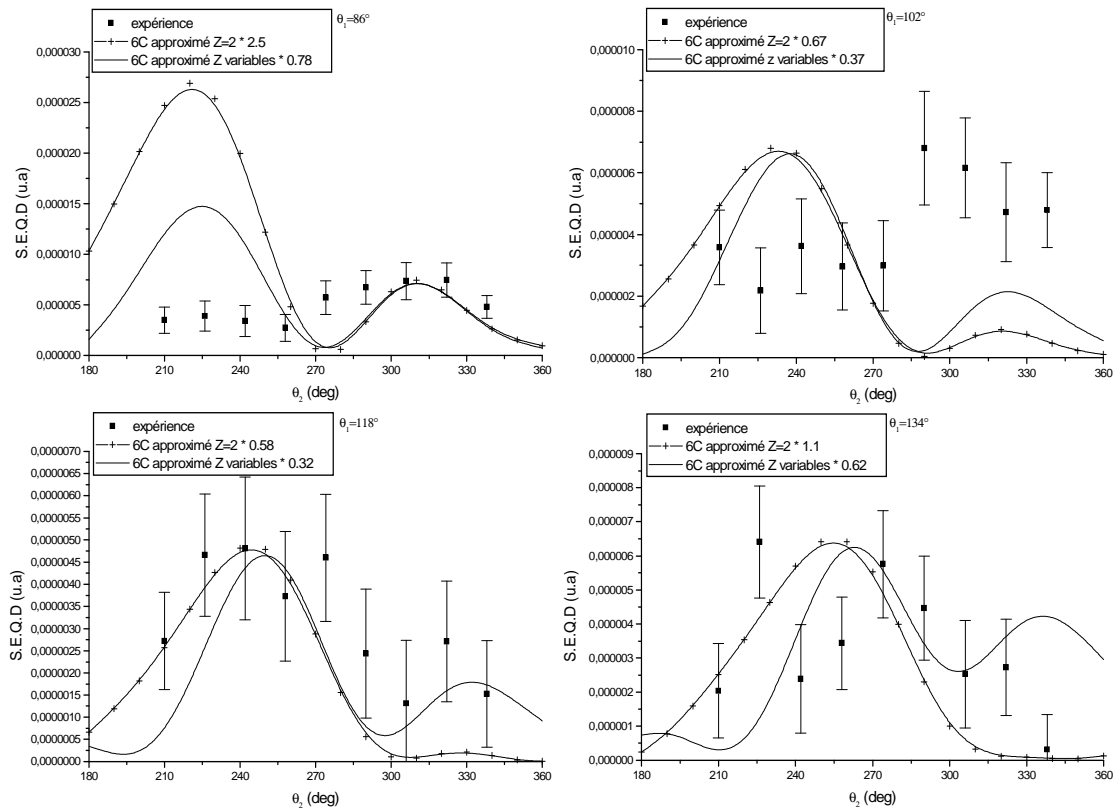


Figure (II-14) : Même situation que pour la figure (II-13) avec $\theta_1 = 86^\circ, 102^\circ, 118^\circ, 134^\circ$.

Nos résultats théoriques sont normalisés par rapport aux résultats expérimentaux.

Nous pouvons distinguer trois cas de figures :

a) $\theta_1 = 322^\circ, 338^\circ$: ce cas correspond à l'éjection de l'électron supposé fixe dans « le demi plan avant » par rapport à la direction du transfert \vec{K} . On remarque l'existence d'un troisième lobe dans la direction opposée de la direction de l'électron fixe. Ce lobe est bien reproduit par notre modèle avec des charges effectives fixes et avec un facteur multiplicatif de quatre par rapport à l'expérience. Ce pic est attribué à l'émission dos-à-dos due aux contributions non dipolaires [Ber93]. Notons que seul le modèle CCC était capable de reproduire ce lobe, alors

que les modèles 3C et C4FS ainsi que notre modèle avec des charges effectives variables produisent un petit lobe suivant la même direction.

b) $\theta_1 = 150^\circ, 134^\circ$: ce cas correspond à l'éjection de l'électron fixe dans « le demi plan arrière » par rapport à la direction du transfert \vec{K} . Les modèles A6C avec des charges effectives variables, 3C et C4FS prédisent un lobe dans la direction opposée à la direction du premier électron éjecté supposé fixe. Là aussi, ceci montre clairement la contribution des termes non dipolaires.

Dans le cas particulier où l'un des électrons éjectés est détecté le long de la direction $+\vec{K}$ ou $-\vec{K}$, sous ces conditions, Dal Cappello et al [Cap91] ont montré que certains modèles incluant la première approximation de Born donnent une distribution angulaire symétrique par rapport $\pm\vec{K}$. Les modèles CCC, 3C et C4FS ont bien prédit ce comportement. Par contre, notre modèle ainsi que le modèle incluant la deuxième approximation de Born présentent une dissymétrie par rapport à la direction du transfert \vec{K} .

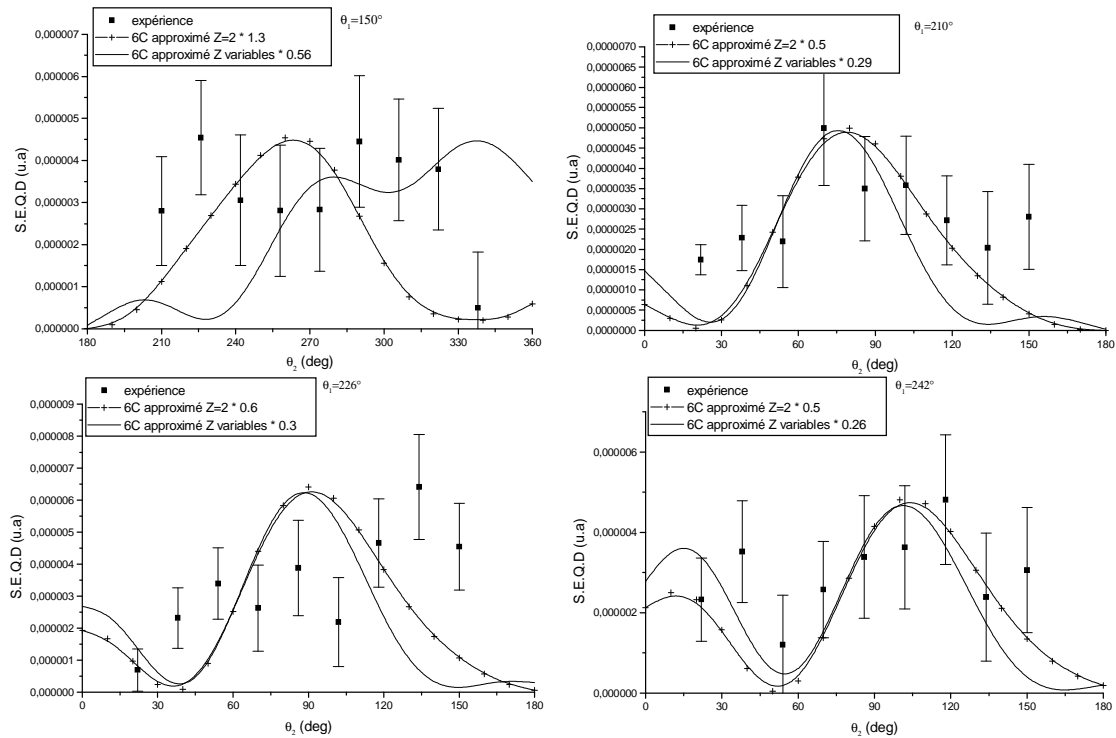


Figure (II-15) : Même situation que pour la figure (II-13) avec

$$\theta_1 = 150^\circ, 210^\circ, 226^\circ, 242^\circ.$$

Remarquons que pour les différents angles d'éjection, nos résultats sont, en général, en bon accord qualitatif et quantitatif avec les résultats expérimentaux puisque les facteurs de normalisation ne sont pas aussi importants que dans le cas des modèles CCC, 3C, C4FS, ou le modèle BBK approximé de Grin.

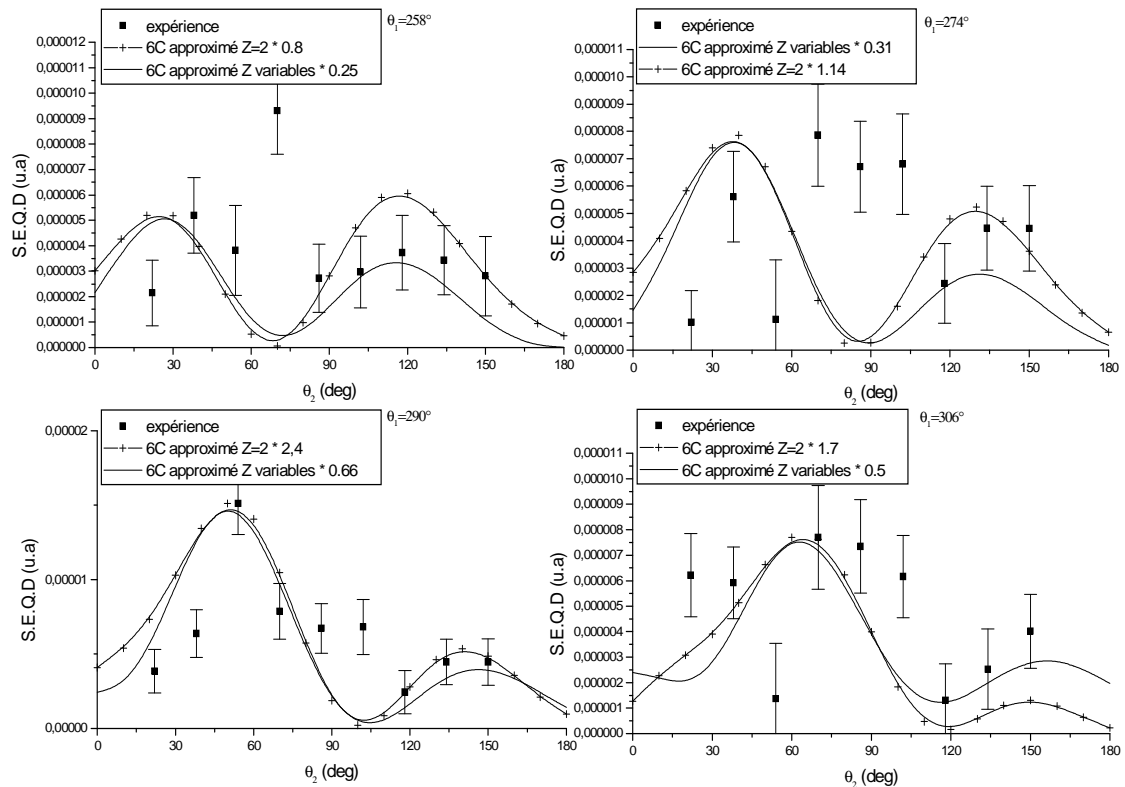


Figure (II-16) : Même situation que pour la figure (II-13) avec

$$\theta_1 = 258^\circ, 274^\circ, 290^\circ, 306^\circ .$$

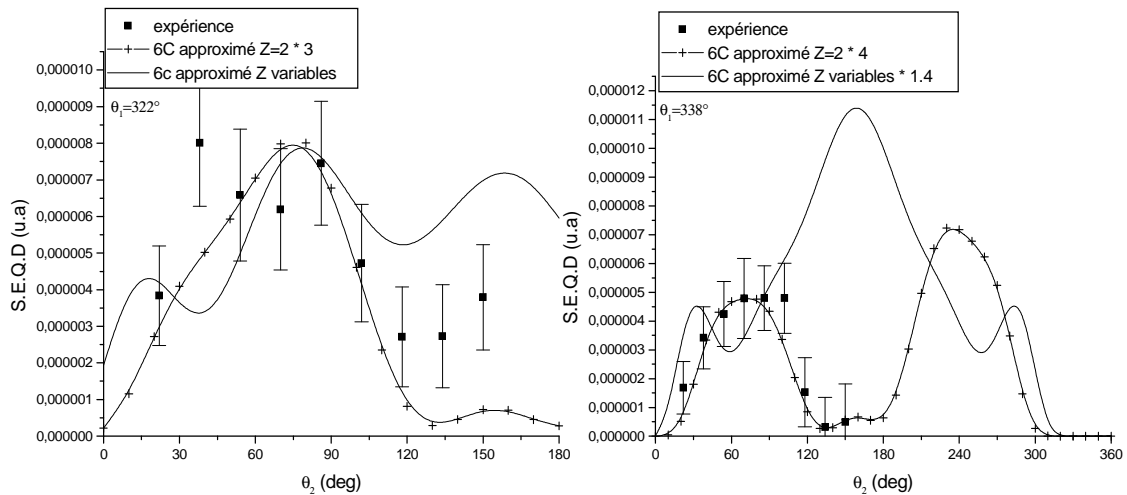


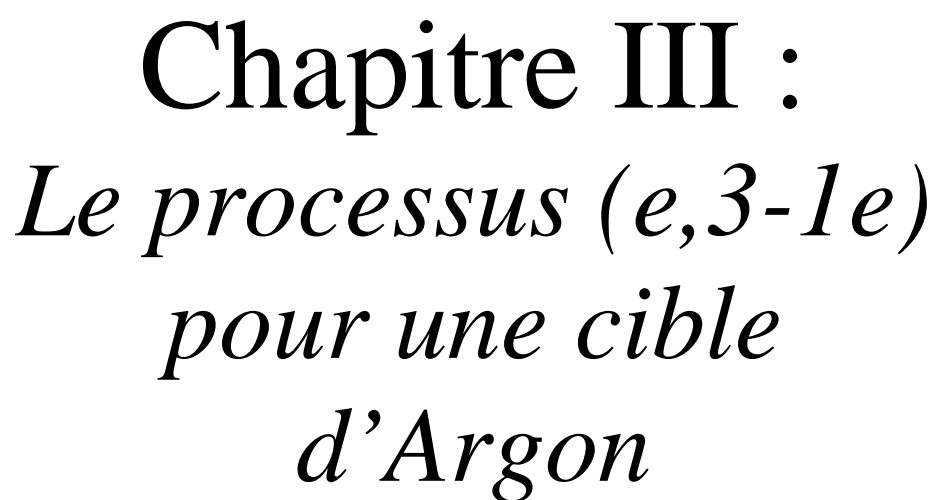
Figure (II-17) : Même situation que pour la figure (II-13) avec $\theta_1 = 322^\circ, 338^\circ$.

L'utilisation des charges effectives variables qui dépendent des directions de diffusion et d'éjection introduit, en quelque sorte, une correction à la fonction d'onde décrivant l'état final de la cible via la corrélation électron-électron dans le continuum. Cet effet consiste à corriger l'amplitude d'un pic de la S.E.Q.D sans apporter une influence sur sa position, par exemple pour $\theta_1 = \{70^\circ, 306^\circ, 274^\circ \dots\}$, l'introduction de ces charges augmentent l'amplitude du deuxième pic de la S.E.Q.D d'un facteur deux approchant le résultat fourni par les données expérimentales.

II-6- Conclusion :

Un traitement qui dépasse la deuxième approximation de Born avec l'utilisation d'une fonction d'onde initiale fortement corrélée a été développé pour étudier toutes les distributions angulaires pour les expériences (e,3e) mesurées pour une énergie d'incidence de 601 eV. Ces distributions angulaires ont été analysées à l'aide des règles de sélection. Le modèle utilisé ici est capable de reproduire une partie significative des données expérimentales mais des désaccords substantiels demeurent en particulier pour le décalage du premier pic qui n'est expliqué par aucune théorie même celles qui emploient la deuxième approximation de Born. Il y a aussi des désaccords concernant les amplitudes des pics entre les théories et l'expérience. Le modèle A6C avec des charges effectives variables donne un

bon accord avec les données du premier groupe des distributions angulaires (de 255° à 305°), alors que le modèle utilisant la seconde approximation de Born donne un bon accord avec les données du second groupe des distributions angulaires (de 310° à 340°). On peut conclure qu'aucun modèle jusqu'ici n'est capable d'expliquer toutes les caractéristiques des distributions angulaires mesurées pour cette énergie d'incidence (601 eV) même si une partie de la structure est bien décrite. Ceci souligne la complexité du mécanisme de la double ionisation par impact électronique par rapport à l'ionisation simple, et souligne la nécessité de réaliser plus d'expériences sous diverses conditions cinématiques (spécialement à une basse énergie d'incidence) et de poursuivre les efforts théoriques pour une meilleure compréhension de ce problème.



Chapitre III :
*Le processus $(e, 3-1e)$
pour une cible
d'Argon*

Chapitre III :

Le processus (e,3-1e) pour une cible d'Argon

III-1- Introduction :

Dans ce chapitre, nous étudions la double ionisation d'une cible d'argon dans le cas où l'électron diffusé et les deux électrons éjectés peuvent avoir la même énergie. Nous utilisons le modèle A6C pour décrire le double continuum.

Cette cible a fait objet de plusieurs études :

Hda et *al* [Hda94] ont utilisé un modèle se basant sur la description de l'électron diffusé par une onde plane dans le cadre de la première approximation de Born. Ce modèle a réussi à reproduire la forme mais pas l'amplitude de la distribution angulaire des premières expériences (e,3e) réalisées par Lahmam-Bennani et *al* [Lah89]. Ce modèle décrit chaque électron éjecté par une onde coulombienne, et la répulsion entre chacun d'eux par un facteur de Gamow. Ce modèle a été appliqué pour d'autres expériences réalisées à haute énergie d'incidence [ELM97], mais les auteurs ont observé un désaccord avec la théorie. Ils ont estimé que cette divergence résulte du fait que ce modèle ne tient pas compte des mécanismes incluant le second terme de l'approximation de Born, comme le mécanisme à deux étapes TS2. La présence de ce mécanisme se remarque par la présence d'une rupture de la symétrie de la distribution angulaire par rapport à la direction du vecteur de transfert d'impulsion quand l'un des électrons éjectés est émis suivant cette direction. Ce phénomène a été observé dans les expériences de El Marji et *al* [ELM97], et il n'était pas reproduit par ce modèle qui a tenu compte des mécanismes SO et TS1. Le même problème se produit encore une fois pour les deux dernières expériences de Jia et *al* [Jia02] et Jia et *al* [Jia03] où le modèle décrit au-dessus n'a pas réussi à reproduire toutes les données expérimentales.

Cooper et Van Boeyen [Coo04] ont utilisé un modèle théorique employant les ondes distordues dans le cadre de la première approximation de Born qui a fourni un meilleur accord avec les expériences. Leur modèle consiste à décrire tous les électrons (incident, diffusé et les deux éjectés) par des ondes distordues. Bien que le modèle des ondes distordues ait été appliqué dans le cadre du premier ordre de l'approximation de Born, la symétrie prédite par cette approximation est brisée car l'électron diffusé est décrit par une onde distordue qui tient compte continûment de l'interaction avec l'ion résiduel. Cependant, ce modèle ne reproduit pas les données expérimentales à un faible moment de transfert [Jia03], car le mécanisme TS2 qui implique une double interaction entre l'électron diffusé et la cible n'est que partiellement inclus.

Nous utilisons notre modèle A6C afin d'étudier les expériences de Catoire et *al* [Cat04] qui ont effectué des expériences de type (e,3-1e) sur une cible d'Argon atomique où seulement deux électrons parmi les trois dans la voie finale sont détectés en coïncidence. Ce genre d'expérience a été réalisé par Lahmam-Bennani [Lah91]₁, et El Mkhater et ses collaborateurs [EIM96] ont calculé pour la première fois les sections efficaces quadruplement différentielles dans le cadre de la première approximation de Born. En adoptant l'approximation du « cœur gelé » pour décrire la cible dans son état fondamental, et le modèle de l'onde coulombienne avec des charges effectives fixes pour la description de l'état final, ces auteurs n'ont pu expliqué qu'une partie de ces résultats.

Il reste à signaler que notre modèle est incapable de donner la valeur absolue correcte de la section efficace différentielle, mais dans les cas étudiés ici, cela ne présente pas d'inconvénient puisque les expériences de Catoire et *al* sont relatives.

III-2- Processus de double ionisation directe en utilisant le mécanisme SO :

III-2-1) La fonction d'onde initiale :

L'état initial du système contient un électron incident et six électrons de la couche 3p de l'atome de l'Argon. Cet état peut être décrit par le produit une fonction d'onde plane décrivant l'électron incident et une fonction d'onde pour les six électrons de la cible. On peut l'écrire tel que :

$$|\Psi_i\rangle = |\varphi(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\psi_i(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)\rangle \quad (\text{III-1})$$

On s'intéresse à l'éjection de deux électrons de valence, et il est raisonnable de supposer que les électrons dans le noyau ionique doublement chargé n'interviennent pas dans le processus d'ionisation ([Cop04], [Hda94]). Dans ce cas, l'expression (III-1) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$|\Psi_i\rangle = |\phi(\vec{k}_i, \vec{r}_0)\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \quad (\text{III-2})$$

où les deux électrons actifs ayant respectivement les vecteurs positions \vec{r}_1 et \vec{r}_2 sont ceux qui vont être éjectés après la collision. C'est l'approximation du « cœur gelé ».

On décrit l'état fondamental des deux électrons actifs de l'atome d'argon dans la voie initiale par une fonction de Clementi et Roetti [Cli74] qui est de type Hartree-Fock. Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$|\psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle = |\phi_{3p}(\vec{r}_1)\phi_{3p}(\vec{r}_2)\rangle \quad (\text{III-3})$$

Où :

$$\phi_{3p}(\vec{r}) = A_{2p} r Y_1^m(\theta, \varphi) \epsilon_{2p}^{3/2} e^{-\epsilon_{2p} r} + \sum_{i=1}^7 A_{4pi} r^3 Y_1^m(\theta, \varphi) \epsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\epsilon_{4pi} r} \quad (\text{III-4})$$

Cette fonction est une combinaison linéaire des orbitales 2p et 4p. r , θ et φ sont les coordonnées sphériques d'un électron de l'orbitale 3p. $Y_1^m(\theta, \varphi)$ représente l'harmonique sphérique décrivant la partie angulaire de la fonction d'onde.

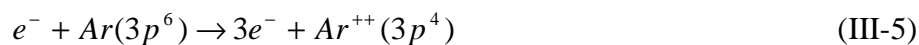
Les différentes composantes de cette fonction sont données dans le tableau suivant :

| <u>Coefficients</u> | <u>Valeurs numériques</u> |
|---------------------|---------------------------|
| \mathcal{E}_{2p} | 9 |
| \mathcal{E}_{4p1} | 15 |
| \mathcal{E}_{4p2} | 11.9644 |
| \mathcal{E}_{4p3} | 8.7924 |
| \mathcal{E}_{4p4} | 6.3011 |
| \mathcal{E}_{4p5} | 3.4327 |
| \mathcal{E}_{4p6} | 1.9409 |
| \mathcal{E}_{4p7} | 1.0309 |
| A_{2p} | -0.18072 |
| A_{4p1} | -0.01234 |
| A_{4p2} | 0.02183 |
| A_{4p3} | -0.12559 |
| A_{4p4} | 0.10518 |
| A_{4p5} | 0.58041 |
| A_{4p6} | 0.46149 |
| A_{4p7} | 0.02249 |

Tableau (III-1) : valeurs numériques des coefficients présents dans la fonction de Clementi et Roetti représentant l'orbitale 3p.

III-2-2) L'expression de la section efficace quintuplement différentielle S.E.Q.D :

On étudie la double ionisation de l'Argon selon la réaction suivante :



La section efficace quintuplement différentielle (S.E.Q.D) est donnée par la relation suivante [ELM96] :

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\Omega_d dE_1 dE_2} = \sigma^{(5)} = \frac{k_1 k_2 k_d}{k_i} \sum_{i=1}^{15} |M_i|^2 \quad (\text{III-6})$$

Où $d\Omega_d$, $d\Omega_1$ et $d\Omega_2$ sont, respectivement, les éléments des angles solides des électrons diffusé et les deux éjectés, et dE_1 et dE_2 représentent les intervalles d'énergie pour les deux électrons éjectés.

Les vecteurs \vec{k}_i , \vec{k}_d , \vec{k}_1 et \vec{k}_2 sont, respectivement, les vecteurs d'onde des électrons incident, diffusé, le premier et le deuxième éjecté.

La sommation sur l'indice i considère tous les quinze états de l'ion Ar^{++} dans l'état final correspondant aux quinze possibilités de la distribution de quatre électrons sur la couche $3p^4$, neuf de ces états correspondent à l'état 3P de l'ion Ar^{2+} , cinq pour l'état 1D et un pour l'état 1S .

L'élément de matrice M_i s'écrit sous la forme suivante :

$$M_i = -\frac{1}{2\pi} \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{III-7})$$

$|\Psi_i\rangle$ représente la fonction d'onde de l'état initial du système, $\langle \Psi_f |$ est celle de l'état final et V est le potentiel d'interaction entre l'électron incident et la cible. L'utilisation de l'approximation du « cœur gelé » va nous permettre de réduire le nombre des électrons de la cible à prendre en compte à six électrons, et on peut écrire l'expression (III-7) sous la forme suivante :

$$M_i = -\frac{1}{2\pi} \langle \Psi_f | -\frac{6}{r_0} + \sum_{i=1}^6 \frac{1}{r_{0i}} | \Psi_i \rangle \quad (\text{III-8})$$

Et en introduisant l'équation (III-3), l'équation (III-8) devient :

$$M_i = -\frac{1}{2\pi} \langle \Psi_f | -\frac{2}{r_0} + \sum_{i=1}^2 \frac{1}{r_{0i}} | \phi_{3p}(\vec{r}_1) \phi_{3p}(\vec{r}_2) \rangle \quad (\text{III-9})$$

Les charges effectives Z_0 , Z_1 et Z_2 des trois électrons sortants dans la voie finale peuvent être fixées à la valeur de la charge de l'ion Ar^{++} $Z=2$, ou elles peuvent être variables ([Ber96], [Zha00], [EIA05]). Pour le calcul de l'expression (III-9), nous avons utilisé la méthode de Roy et *al* [Roy80] qui réduit une intégrale à six dimensions à une simple intégration numérique comportant la fonction hypergéométrique ${}_2F_1$.

III-2-3) Les termes d'échange :

En raison du fait que les électrons sortants dans la voie finale peuvent avoir la même énergie, il est nécessaire de prendre en compte les processus d'échange. Par conséquent, les trois électrons doivent être décrits de la même manière.

Schulz [Sch73] a montré qu'il est possible d'inclure le processus où l'électron incident n'est pas diffusé mais éjecté dans le calcul de la section efficace différentielle de la simple ionisation de l'hélium. Nous pouvons appliquer la méthode utilisée par Schulz dans le cas de la double ionisation de l'argon.

Les états représentatifs de ces trois électrons sortants doivent être des vecteurs propres de l'opérateur S^2 . La fonction d'onde de l'argon doit être un vecteur propre de l'opérateur L^2 de cet atome. Finalement, la fonction d'onde du système des trois électrons sortants doit être antisymétrique en respectant les échanges entre ces électrons.

Pour chaque transition, nous devons prendre des vecteurs d'onde qui tiennent compte des contraintes discutées ci-dessus, et toutes les amplitudes peuvent s'écrire sous les formes suivantes :

$$\begin{aligned} f &= \langle k_d(0)k_1(1)k_2(2) | V | k_i(0)\phi_{3p}(1)\phi_{3p}(2) \rangle \\ f_d &= \langle k_d(0)k_2(1)k_1(2) | V | k_i(0)\phi_{3p}(1)\phi_{3p}(2) \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-10})$$

$$\begin{aligned} g &= \langle k_1(0)k_d(1)k_2(2) | V | k_i(0)\phi_{3p}(1)\phi_{3p}(2) \rangle \\ g_d &= \langle k_1(0)k_2(1)k_d(2) | V | k_i(0)\phi_{3p}(1)\phi_{3p}(2) \rangle \end{aligned} \quad (\text{III-11})$$

$$\begin{aligned}
h &= \langle k_2(0)k_d(1)k_1(2) | V | k_i(0)\phi_{3p}(1)\phi_{3p}(2) \rangle \\
h_d &= \langle k_2(0)k_1(1)k_d(2) | V | k_i(0)\phi_{3p}(1)\phi_{3p}(2) \rangle
\end{aligned}
\tag{III-12}$$

L'équation (III-10) représente l'amplitude directe alors que les équations (III-11) et (III-12) représentent celle de l'échange. $k_j(i)$, où $j = \{d,1,2\}$ et $i = \{0,1,2\}$, représente la fonction d'onde décrivant un des trois électrons.

III-2-4) Les états propres :

Le processus de la double ionisation étudié dans ce chapitre consiste à éjecter deux électrons de la couche électronique 3p qui contient six électrons. Il existe alors $C_6^2 = 15$ façons pour les décrire (les deux électrons actifs de la cible). En effet, on obtient les quinze états suivants :

$$\begin{aligned}
m_1 = m_2 = 1 & : A_1 = |p_1 \overline{p_1}| \\
m_1 = m_2 = -1 & : A_2 = |\overline{p_{-1}} p_{-1}| \\
m_1 = m_2 = 0 & : A_3 = |p_0 \overline{p_0}| \\
m_1 = 0, m_2 = 1 & : \begin{cases} A_4 = |\overline{p_0} p_1| \\ A_5 = |p_1 p_0| \\ A_6 = |\overline{p_1} p_0| \\ A_7 = |p_1 \overline{p_0}| \end{cases} \\
m_1 = -1, m_2 = 1 & : \begin{cases} A_8 = |\overline{p_{-1}} p_1| \\ A_9 = |p_{-1} p_1| \\ A_{10} = |\overline{p_{-1}} p_1| \\ A_{11} = |p_{-1} \overline{p_1}| \end{cases} \\
m_1 = -1, m_2 = 0 & : \begin{cases} A_{12} = |\overline{p_0} p_{-1}| \\ A_{13} = |p_0 p_{-1}| \\ A_{14} = |\overline{p_0} p_{-1}| \\ A_{15} = |p_0 \overline{p_{-1}}| \end{cases}
\end{aligned}
\tag{III-13}$$

m_1 et m_2 désignent les moments magnétiques des deux électrons actifs de la couche 3p de l'Argon. Nous déterminons le moment orbital total L et le moment total de spin S en utilisant les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned}
 S^2 &= s_1^2 + s_2^2 + s_{1+}s_{2-} + s_{1-}s_{2+} + 2s_{1z}s_{2z} \\
 L_z |n, l, m\rangle &= m |n, l, m\rangle \\
 L_{\pm} |n, l, m\rangle &= \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |n, l, m \pm 1\rangle
 \end{aligned} \tag{III-14}$$

Finalement, nous trouvons les états suivants :

i- L'état 1S ($L=0$) : $B_1 = \frac{A_3 + A_{10} - A_{11}}{\sqrt{3}}$, $M_L = 0$, $M_S = 0$.

ii- Les états 3P ($L=1$) : $B_2 = \frac{A_6 + A_7}{\sqrt{2}}$, $M_L = 1$, $M_S = 0$.

$$B_3 = \frac{A_{10} + A_{11}}{\sqrt{2}}, M_L = M_S = 0.$$

$$B_4 = \frac{A_{15} + A_{14}}{\sqrt{2}}, M_L = -1, M_S = 0.$$

$$B_5 = A_5, M_L = M_S = 1.$$

$$B_6 = A_4, M_L = 1, M_S = -1.$$

$$B_7 = A_9, M_L = 0, M_S = 1.$$

$$B_8 = A_8, M_L = 0, M_S = -1.$$

$$B_9 = A_{13}, M_L = -1, M_S = 1.$$

$$B_{10} = A_{12}, M_L = M_S = -1.$$

iii- Les états 1D ($L=2$) : $B_{11} = A_1$, $M_L = 2$, $M_S = 0$.

$$B_{12} = A_2, M_L = -2, M_S = 0.$$

$$B_{13} = \frac{A_6 - A_7}{\sqrt{2}}, M_L = 1, M_S = 0.$$

$$B_{14} = \frac{A_{14} - A_{15}}{\sqrt{2}}, M_L = -1, M_S = 0.$$

$$B_{15} = \frac{A_{10} - A_{11} + 2A_3}{\sqrt{2}}, M_L = M_S = 0. \tag{III-15}$$

a) Les états propres de l'état initial :

Maintenant, nous avons quinze déterminants 2×2 auxquels nous ajoutons la contribution de l'électron incident ayant un spin haut $|+\rangle$ par exemple. Nous commençons par étudier le déterminant de type $|p_1 p_0\rangle$, l'état initial peut donc être écrit sous la forme suivante :

$$|\psi_i^{(1)}\rangle = \begin{vmatrix} k_i(0) & k_i(1) & k_i(2) \\ p_1(0) & p_1(1) & p_1(2) \\ p_0(0) & p_0(1) & p_0(2) \end{vmatrix}$$

Cet état est un vecteur propre de l'opérateur S^2 associé à la valeur propre $\frac{15}{4}$.

Si maintenant nous considérons le déterminant $|p_1 \bar{p}_0\rangle$ auquel nous associons l'état initial suivant :

$$|\psi_i^{(2)}\rangle = |k_i p_1 \bar{p}_0\rangle = \begin{vmatrix} k_i(0) & k_i(1) & k_i(2) \\ p_1(0) & p_1(1) & p_1(2) \\ \bar{p}_0(0) & \bar{p}_0(1) & \bar{p}_0(2) \end{vmatrix}$$

Ce vecteur n'est pas un vecteur propre de S^2 . Nous pouvons considérer également les deux états suivants : $|\psi_i^{(3)}\rangle = |k_i \bar{p}_1 p_0\rangle$ et $|\psi_i^{(4)}\rangle = |\bar{k}_i p_1 p_0\rangle$ qui ne sont pas aussi des vecteurs propres de S^2 . Le but est de trouver des états propres pour S^2 sous forme de combinaisons linéaires des trois états $|\psi_i^{(2)}\rangle$, $|\psi_i^{(3)}\rangle$ et $|\psi_i^{(4)}\rangle$. En appliquant l'opérateur S^2 sur ces trois vecteurs, nous aboutissons aux formules suivantes :

$$\begin{aligned} S^2 \psi_i^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[T_1 \left(\frac{7}{4} u_1 + u_4 + u_2 \right) + T_2 \left(\frac{7}{4} u_2 + u_1 + u_4 \right) + T_4 \left(\frac{7}{4} u_4 + u_1 + u_2 \right) \right] \\ S^2 \psi_i^{(3)} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[T_1' \left(\frac{7}{4} u_1 + u_4 + u_2 \right) + T_2' \left(\frac{7}{4} u_2 + u_1 + u_4 \right) + T_4' \left(\frac{7}{4} u_4 + u_1 + u_2 \right) \right] \\ S^2 \psi_i^{(4)} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left[T_1'' \left(\frac{7}{4} u_1 + u_4 + u_2 \right) + T_2'' \left(\frac{7}{4} u_2 + u_1 + u_4 \right) + T_4'' \left(\frac{7}{4} u_4 + u_1 + u_2 \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{III-16})$$

Où :

$$\begin{aligned} u_0 &= |+++ \rangle & u_1 &= |+-+ \rangle & u_2 &= |-++ \rangle & u_3 &= |--+ \rangle \\ u_4 &= |++- \rangle & u_5 &= |+-- \rangle & u_6 &= |-- - \rangle & u_7 &= |--- \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_1 &= p_1 p_0 \bar{k}_i - \bar{k}_i p_0 p_1 & T_2 &= p_0 \bar{k}_i p_1 - p_0 p_1 \bar{k}_i & T_4 &= \bar{k}_i p_1 p_0 - p_1 \bar{k}_i p_0 \\
T_1' &= \bar{k}_i p_1 p_0 - p_0 p_1 \bar{k}_i & T_2' &= p_1 p_0 \bar{k}_i - p_1 \bar{k}_i p_0 & T_4' &= p_0 \bar{k}_i p_1 - \bar{k}_i p_0 p_1 \quad (\text{III-17}) \\
T_1'' &= p_0 \bar{k}_i p_1 - p_1 \bar{k}_i p_0 & T_2'' &= \bar{k}_i p_1 p_0 - \bar{k}_i p_0 p_1 & T_4'' &= p_1 p_0 \bar{k}_i - p_0 p_1 \bar{k}_i
\end{aligned}$$

Nous remarquons à partir de (III-17) que :

$$\begin{aligned}
T_1' + T_1'' &= T_2 + T_4 & T_1 + T_1'' &= T_2' + T_4' & T_1 + T_1' &= T_2'' + T_4'' \\
T_2' + T_2'' &= T_1 + T_4 & T_2 + T_2'' &= T_1' + T_4' & T_2 + T_2' &= T_1'' + T_4'' \\
T_4' + T_4'' &= T_1 + T_2 & T_4 + T_4'' &= T_1' + T_2' & T_4 + T_4' &= T_1'' + T_2''
\end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
S^2 \psi_i^{(2)} &= \frac{7}{4} \psi_i^{(2)} + \psi_i^{(3)} + \psi_i^{(4)} \\
S^2 \psi_i^{(3)} &= \frac{7}{4} \psi_i^{(3)} + \psi_i^{(2)} + \psi_i^{(4)} \\
S^2 \psi_i^{(4)} &= \frac{7}{4} \psi_i^{(4)} + \psi_i^{(2)} + \psi_i^{(3)}
\end{aligned}$$

Nous obtenons finalement la même matrice que pour les états propres finaux $\psi_f^{(1)}$, $\psi_f^{(2)}$ et $\psi_f^{(4)}$.

Donc les vecteurs propres sont :

$$\begin{aligned}
\varphi_i^{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_i^{(2)} + \psi_i^{(3)} + \psi_i^{(4)}) \\
\varphi_i^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_i^{(2)} - \psi_i^{(4)}) \\
\varphi_i^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} &= \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_i^{(2)} - 2\psi_i^{(3)} + \psi_i^{(4)})
\end{aligned}$$

La même étude peut se faire pour les deux familles de déterminants de Slater $|p_1 p_{-1}|$ et $|p_{-1} p_0|$.

En revanche, les trois états initiaux $\psi_i^{(13)} = |k_i p_1 \bar{p}_0|$, $\psi_i^{(14)} = |k_i p_0 \bar{p}_0|$ et $\psi_i^{(15)} = |k_i p_{-1} \bar{p}_{-1}|$ sont des vecteurs propres de S^2 associés à la valeur propre $\frac{3}{4}$.

b) Les états propres de l'état final :

Nous allons appliquer l'opérateur S^2 sur les vecteurs spin u_i où $i = 1, \dots, 7$, nous trouvons :

$$\begin{aligned} S^2 u_0 &= \frac{15}{4} u_0 & S^2 u_1 &= \frac{7}{4} u_1 + u_2 + u_4 \\ S^2 u_2 &= \frac{7}{4} u_2 + u_1 + u_4 & S^2 u_3 &= \frac{7}{4} u_3 + u_5 + u_6 \\ S^2 u_4 &= \frac{7}{4} u_4 + u_1 + u_2 & S^2 u_5 &= \frac{7}{4} u_5 + u_3 + u_6 \\ S^2 u_6 &= \frac{7}{4} u_6 + u_3 + u_5 & S^2 u_7 &= \frac{15}{4} u_7 \end{aligned}$$

Donc u_0 et u_7 sont vecteurs propres de S^2 avec $S = 3/2$ et $M_S = \pm 3/2$. Nous pouvons choisir une base $A = \{u_1, u_2, u_4\}$ tel que :

$$S^2 \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{4} & 1 & 1 \\ 1 & \frac{7}{4} & 1 \\ 1 & 1 & \frac{7}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_4 \end{pmatrix}$$

Cette matrice admet deux valeurs propres :

○ $\lambda = \frac{15}{4}$ valeur propre simple associée au vecteur propre : $v_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_4)$ pour $S = \frac{3}{2}$

et $M_S = \frac{1}{2}$.

○ $\lambda = \frac{3}{4}$ valeur propre double associée aux deux vecteurs propres : $v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1 - u_4)$ et

$v_4 = \frac{1}{\sqrt{6}}(u_1 - 2u_2 + u_4)$ pour $S = \frac{1}{2}$ et $M_S = \frac{1}{2}$.

Nous pouvons trouver la même chose en partant d'une autre base $B = \{u_3, u_5, u_6\}$:

○ $\lambda = \frac{15}{4}$ valeur propre simple associée au vecteur propre : $v_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}(u_3 + u_5 + u_6)$ pour

$S = \frac{3}{2}$ et $M_S = -\frac{1}{2}$.

○ $\lambda = \frac{3}{4}$ valeur propre double associée aux deux vecteurs propres : $v_5 = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_3 - u_6)$ et

$$v_6 = \frac{1}{\sqrt{6}}(u_3 - 2u_5 + u_6) \text{ pour } S = \frac{1}{2} \text{ et } M_S = -\frac{1}{2}.$$

Les deux états $\varphi_f^{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} = |k_i(0)k_1(1)k_2(2)\rangle$ $\left(S = \frac{3}{2}, M_S = \frac{3}{2}\right)$ et $\varphi_f^{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} = |\bar{k}_i(0)\bar{k}_1(1)\bar{k}_2(2)\rangle$

$\left(S = \frac{3}{2}, M_S = -\frac{3}{2}\right)$ sont des vecteurs propres de l'opérateur S^2 .

Nous allons procéder comme pour les états propres initiaux. Nous considérons les états $\psi_f^{(1)} = |k_i(0)\bar{k}_1(1)k_2(2)\rangle$, $\psi_f^{(2)} = |\bar{k}_i(0)k_1(1)k_2(2)\rangle$ et $\psi_f^{(4)} = |k_i(0)k_1(1)\bar{k}_2(2)\rangle$, nous aboutissons après application de l'opérateur S^2 à l'équation suivante :

$$S^2 \begin{pmatrix} \psi_f^{(1)} \\ \psi_f^{(2)} \\ \psi_f^{(4)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{4} & 1 & 1 \\ 1 & \frac{7}{4} & 1 \\ 1 & 1 & \frac{7}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_f^{(1)} \\ \psi_f^{(2)} \\ \psi_f^{(4)} \end{pmatrix}$$

Et nous en déduisons les vecteurs propres :

$$\varphi_f^{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_f^{(1)} + \psi_f^{(2)} + \psi_f^{(4)})$$

$$\varphi_f^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_f^{(1)} - \psi_f^{(4)})$$

$$\varphi_f^{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_f^{(1)} - 2\psi_f^{(2)} + \psi_f^{(4)})$$

De même pour les états $\psi_f^{(3)} = |\bar{k}_i(0)\bar{k}_1(1)k_2(2)\rangle$, $\psi_f^{(5)} = |k_i(0)\bar{k}_1(1)\bar{k}_2(2)\rangle$ et

$\psi_f^{(6)} = |\bar{k}_i(0)k_1(1)\bar{k}_2(2)\rangle$. Finalement, nous aboutissons aux huit états propres de l'état final de l'ion Ar^{2+} :

$$\varphi_f^{\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)} = |k_i(0)k_1(1)k_2(2)\rangle$$

$$\varphi_f^{\left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right)} = |\bar{k}_i(0)\bar{k}_1(1)\bar{k}_2(2)\rangle$$

$$\varphi_f^{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_f^{(1)} + \psi_f^{(2)} + \psi_f^{(4)})$$

$$\varphi_f^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_f^{(1)} - \psi_f^{(4)})$$

$$\varphi_f^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_f^{(1)} - 2\psi_f^{(2)} + \psi_f^{(4)})$$

$$\varphi_f^{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\psi_f^{(3)} + \psi_f^{(5)} + \psi_f^{(6)})$$

$$\varphi_f^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_f^{(3)} - \psi_f^{(6)})$$

$$\varphi_f^{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{6}} (\psi_f^{(3)} - 2\psi_f^{(5)} + \psi_f^{(6)})$$

III-2-5) Les sections efficaces partielles :

- L'état $|p_1 p_0\rangle$ (triplet 3P , $S = \frac{3}{2}$, $M_S = 1$) : l'amplitude de transition peut s'écrire sous

la forme suivante :

$$M^{\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right); \left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)} = \left\langle \varphi_f^{\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)} \left| V \right| \psi_i^{(1)} \right\rangle = f - f_d - g + g_d + h - h_d$$

D'où l'expression de la section efficace correspondante :

$$\sigma^{\left(5\right)\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} (f - f_d - g + g_d + h - h_d) (f^* - f_d^* - g^* + g_d^* + h^* - h_d^*)$$

- A partir des deux états $|p_1 \bar{p}_0\rangle$ et $|\bar{p}_1 p_0\rangle$, nous pouvons construire l'état propre B_{13}

(singulet 1D) qui correspond au vecteur propre de l'opérateur S^2 : $\psi_i^{(16)} = \frac{\psi_i^{(2)} - \psi_i^{(3)}}{\sqrt{2}}$

$\left(S = \frac{1}{2}, M_S = \frac{1}{2}\right)$. Dans ce cas, pour cet état propre initial, il y a deux amplitudes de

transition, en effet :

$$M_1^{\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_f^{(1)} - \psi_f^{(4)} | V | \psi_i^{(16)} \rangle = \frac{1}{2} (-2f - 2f_d + g + g_d + h + h_d)$$

$$M_2^{\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right); \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \psi_f^{(1)} - 2\psi_f^{(2)} + \psi_f^{(4)} | V | \psi_i^{(16)} \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} (-g - g_d + h + h_d)$$

La section efficace correspondante peut donc s'écrire sous la forme suivante :

$$\sigma^{(5)\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{4}(-2f - 2f_d + g + g_d + h + h_d)(-2f^* - 2f_d^* + g^* + g_d^* + h^* + h_d^*) \\ + \frac{3}{4}(-g - g_d + h + h_d)(g^* - g_d^* + h^* + h_d^*) \end{array} \right]$$

Nous pouvons également construire l'état $\psi_i^{(17)} = \frac{\psi_i^{(2)} + \psi_i^{(3)}}{\sqrt{2}}$ associé à l'état propre B_2

(triplet 3P). Nous appliquons l'opérateur S^2 sur $\psi_i^{(17)}$:

$S^2 \psi_i^{(17)} = \frac{11}{4} \psi_i^{(17)} + \sqrt{2} \psi_i^{(4)}$. Or : $S^2 \psi_i^{(4)} = \frac{7}{4} \psi_i^{(4)} + \sqrt{2} \psi_i^{(17)}$, donc, nous pouvons considérer la matrice représentative de S^2 dans la base $\{\psi_i^{(4)}, \psi_i^{(17)}\}$ qui peut s'écrire sous la forme suivante :

$$S^2 \begin{pmatrix} \psi_i^{(4)} \\ \psi_i^{(17)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{4} & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & \frac{11}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i^{(4)} \\ \psi_i^{(17)} \end{pmatrix}$$

Ce système admet les deux vecteurs propres suivants :

- $\psi_i^{(18)} = \frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_i^{(2)} + \psi_i^{(3)} - 2\psi_i^{(4)})$, $S = \frac{1}{2}$, $M_S = \frac{1}{2}$, associé à la valeur propre $\frac{3}{4}$.
- $\psi_i^{(19)} = \frac{1}{\sqrt{3}}(\psi_i^{(2)} + \psi_i^{(3)} + \psi_i^{(4)})$, $S = \frac{3}{2}$, $M_S = \frac{1}{2}$, associé à la valeur propre $\frac{15}{4}$.

A partir de l'état propre $\psi_i^{(18)}$, nous pouvons écrire deux amplitudes de transition :

$$M_1^{\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right);\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_f^{(1)} - \psi_f^{(4)} | V | \psi_i^{(18)} \rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} (g - g_d + h - h_d)$$

$$M_2^{\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right);\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)} = \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \psi_f^{(1)} - 2\psi_f^{(2)} + \psi_f^{(4)} | V | \psi_i^{(18)} \rangle = \frac{1}{2} (2f - 2f_d + g - g_d - h + h_d)$$

Par conséquent, la section efficace correspondante est :

$$\sigma^{(5)\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{4}(2f - 2f_d - h + h_d + g - g_d)(2f^* - 2f_d^* - h^* + h_d^* + g^* - g_d^*) \\ + \frac{3}{4}(g - g_d + h - h_d)(g^* - g_d^* + h^* - h_d^*) \end{array} \right]$$

En suivant la même technique, nous trouverons les autres sections efficaces :

- Pour les vecteurs associés aux états B_{11} et B_{12} (singulet¹ D) :

$$\sigma^{(5)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left[\frac{1}{2} (h + g - 2f) (h^* + g^* - 2f^*) + \frac{3}{2} (h - g) (h^* - g^*) \right]$$

- Pour les vecteurs associés à l'état B_1 (singulet¹ S) :

Nous considérons les amplitudes directes et d'échanges suivantes :

$$\begin{aligned} f_1 &= \langle k_d(0)k_1(1)k_2(2) | V | k_i(0)p_1(1)p_{-1}(2) \rangle \\ f_d &= \langle k_d(0)k_2(1)k_1(2) | V | k_i(0)p_1(1)p_{-1}(2) \rangle \\ f_0 &= \langle k_d(0)k_1(1)k_2(2) | V | k_i(0)p_0(1)p_0(2) \rangle \\ g_1 &= \langle k_1(0)k_d(1)k_2(2) | V | k_i(0)p_1(1)p_{-1}(2) \rangle \\ g_d &= \langle k_1(0)k_2(1)k_d(2) | V | k_i(0)p_1(1)p_{-1}(2) \rangle \\ g_0 &= \langle k_1(0)k_d(1)k_2(2) | V | k_i(0)p_0(1)p_0(2) \rangle \\ h_1 &= \langle k_2(0)k_d(1)k_1(2) | V | k_i(0)p_1(1)p_{-1}(2) \rangle \\ h_d &= \langle k_2(0)k_1(1)k_d(2) | V | k_i(0)p_1(1)p_{-1}(2) \rangle \\ h_0 &= \langle k_2(0)k_d(1)k_1(2) | V | k_i(0)p_0(1)p_0(2) \rangle \end{aligned}$$

Donc, la section efficace de cet état est donnée par l'expression suivante :

$$\sigma^{(5)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left[\begin{aligned} &\frac{1}{6} (-h_1 - h_d - g_1 - g_d + 2f_1 + 2f_d + h_0 + g_0 - 2f_0) \\ &\times (-h_1^* - h_d^* - g_1^* - g_d^* + 2f_1^* + 2f_d^* + h_0^* + g_0^* - 2f_0^*) \\ &+ \frac{1}{2} (-h_1 - h_d + g_1 + g_d + h_0 - g_0) (-h_1^* - h_d^* + g_1^* + g_d^* + h_0^* - g_0^*) \end{aligned} \right]$$

- Pour l'état B_{15} (singulet¹ D) :

$$\sigma^{(5)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left[\begin{aligned} &\frac{1}{12} (h_1 + h_d + g_1 + g_d - 2f_1 - 2f_d + 2h_0 + 2g_0 - 4f_0) \\ &\times (h_1^* + h_d^* + g_1^* + g_d^* - 2f_1^* - 2f_d^* + 2h_0^* + 2g_0^* - 4f_0^*) \\ &+ \frac{1}{4} (h_1 + h_d - g_1 - g_d + 2h_0 - 2g_0) (h_1^* + h_d^* - g_1^* - g_d^* + 2h_0^* - 2g_0^*) \end{aligned} \right]$$

Afin de pouvoir comparer les résultats de notre modèle avec les sections efficaces quadruplement différentielles qui correspondent aux expériences (e,3-1e) de Catoire et al [Cat04], nous devons intégrer la relation (III-6) par rapport à l'angle solide $d\Omega_d$ de l'électron le plus rapide dans le cas où on ne détecterait qu' « un électron éjecté 1 » et « un électron

éjecté 2 » (sauf pour le cas où $E_i = 466\text{eV}$, dans ce cas, l'énergie de l'électron diffusé serait $E_d = 13\text{eV}$).

Dans le cas où tous les électrons sortants dans la voie finale auraient la même énergie, nous ne pouvons pas distinguer l'électron diffusé du premier électron éjecté ou le deuxième éjecté. C'est pour cela que les effets d'échange doivent être inclus dans notre traitement théorique. Finalement, nous notons que la section efficace (III-6) doit être symétrique par rapport à la direction d'incidence $\theta_1 + \theta_2 = 360^\circ$ puisque les deux électrons détectés sont complètement indiscernables.

III-2-6) Résultats et interprétations :

D'une manière générale, et pour un état final donné (un état parmi les quinze états possibles de Ar^{2+}), ce n'est pas possible de dire si la double ionisation résulte d'une double ionisation directe de l'orbitale 3p, ou d'un processus indirect qui consiste à une ionisation simple de l'orbitale 2p suivie par une relaxation électronique menant à l'émission d'un électron Auger. Par conséquent, l'interférence entre ces deux processus (double ionisation directe et processus Auger) peut se produire pour chacun des cas considérés concernant les énergies d'incidence. Cependant, si la double ionisation directe domine le processus Auger (ou l'inverse), la structure des résultats expérimentaux peut être attribuée au processus dominant seulement.

Dans les trois cas considérés, d'une part, les distributions angulaires expérimentales montrent des crêtes secondaires qui sont situées approximativement dans les mêmes positions et indépendamment de l'énergie d'incidence. D'autre part, l'émission Auger se produit en deux étapes indépendantes, c'est-à-dire que la relaxation de la cible n'a aucun rapport avec la création de la première crête, et par conséquent, ce processus est indépendant de l'énergie d'incidence. Donc, en adoptant cette hypothèse, les crêtes secondaires peuvent être attribuées au processus Auger.

En utilisant la mécanique classique qui est justifiée par le fait que les deux électrons ont une énergie élevée, nous pouvons donner une explication de la crête située à $(\theta_1 = 50^\circ, \theta_2 = 310^\circ)$ pour $E_i = 466\text{ eV}$ et à $(\theta_1 = 60^\circ, \theta_2 = 300^\circ)$ pour $E_i = 956\text{ eV}$.

En effet, considérons un électron incident e_0 qui va interagir avec un système de deux électrons stationnaires (e_1, e_2) . Le système de deux équations de conservation d'énergie et d'impulsion ne peut pas être résolu dans le cas général, cependant, dans notre cas, nous

avons $k_{e_1} = k_{e_2}$, et les deux électrons éjectés émergent sous le même angle par rapport à la direction d'incidence mais dans les demi-plans opposés de l'espace, c'est-à-dire : $\theta_1 + \theta_2 = 360^\circ$. La loi de conservation des impulsions s'écrit sous la forme suivante :

$$\vec{k}_0 = \vec{k}_d + \vec{k}_1 + \vec{k}_2 \quad (\text{III-17})$$

En projetant cette relation sur la direction de \vec{k}_0 et sachant que $\theta_d = 0$ ou π , l'angle θ_1 peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\cos(\theta_1) = \frac{k_0 \pm k_d}{2k_1} \quad (\text{III-18})$$

Donc, et à partir de la relation (III-24), nous trouvons $\theta_1 = 51^\circ$ pour $E_i = 466$ eV et $\theta_d = 0^\circ$, cette valeur de θ_1 est proche de celle de l'expérience ($\theta_1^{\text{exp}} = 50^\circ$). De même pour $E_i = 956$ eV, dans ce cas là, $\theta_1 = 73^\circ$ alors que $\theta_1^{\text{exp}} = 60^\circ$.

La situation est plus compliquée pour $E_i = 658$ eV. En effet, l'interférence entre les deux processus peut se produire comme pour les autres énergies d'incidence, mais l'interférence de l'échange doit être particulièrement forte pour ce cas car on ne peut pas distinguer les électrons, chacun ayant la même énergie. D'un point de vue expérimental, toutes les paires possibles formées à partir des trois électrons sortants peuvent être détectées. En effet, nous pouvons avoir les paires suivantes : $(e_{\text{Auger}}, e_{\text{éjecté}})$, $(e_{\text{Auger}}, e_{\text{diffusé}})$ et $(e_{\text{éjecté}}, e_{\text{diffusé}})$. Les deux premières paires proviennent nécessairement du processus Auger, alors que la troisième ne peut pas être détectée quand $E_i = 956$ eV et 466 eV puisqu'un de ces deux électrons n'a pas l'énergie correcte de 205 eV. Par contre, pour le cas $E_i = 658$ eV, la détection de cette paire est possible en tenant compte d'un processus de simple ionisation (e,2e) de la couche 2p. La contribution de cette paire s'additionne à celles des deux autres paires pour avoir la section efficace correspondant au processus (e,3-1e) pour $E_i = 658$ eV.

Nous pouvons également considérer l'axe de symétrie défini par $\theta_1 = \theta_2$. La section efficace est nulle suivant cet axe à cause de la répulsion coulombienne qui interdit aux deux électrons identiques l'émission dans la même direction.

Nous allons analyser en détail les résultats obtenus pour chaque énergie d'incidence considérée dans ce chapitre :

a) $E_i = 466 \text{ eV}$:

Dans ce cas, l'électron non détecté a une faible énergie de 13 eV. La contribution angulaire expérimentale (figure (III-1)) est fortement dominée par une crête principale dans le « demi-plan avant » localisé à $(\theta_1 = 50^\circ, \theta_2 = 310^\circ)$.

Notre modèle reproduit cette crête principale (mais qui est un peu décalée) à $(\theta_1 = 36^\circ, \theta_2 = 325^\circ)$ (figure (III-2)). La crête secondaire à $(\theta_1 = 120^\circ, \theta_2 = 240^\circ)$ donnée par notre modèle est aussi présente dans l'expérience. Nous constatons également la présence d'une troisième crête secondaire de faible intensité à $(\theta_1 = 160^\circ, \theta_2 = 200^\circ)$, mais cette région angulaire n'est pas accessible dans l'expérience.

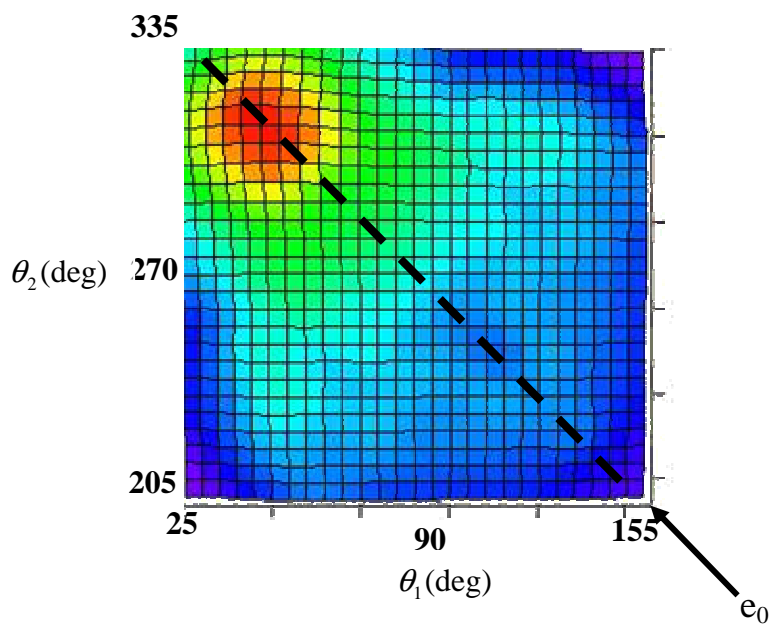


Figure (III-1) : La contribution angulaire expérimentale de la détection de deux électrons en coïncidence et ayant la même énergie 205 eV en fonction de θ_1 et θ_2 pour une énergie d'incidence de 466 eV.

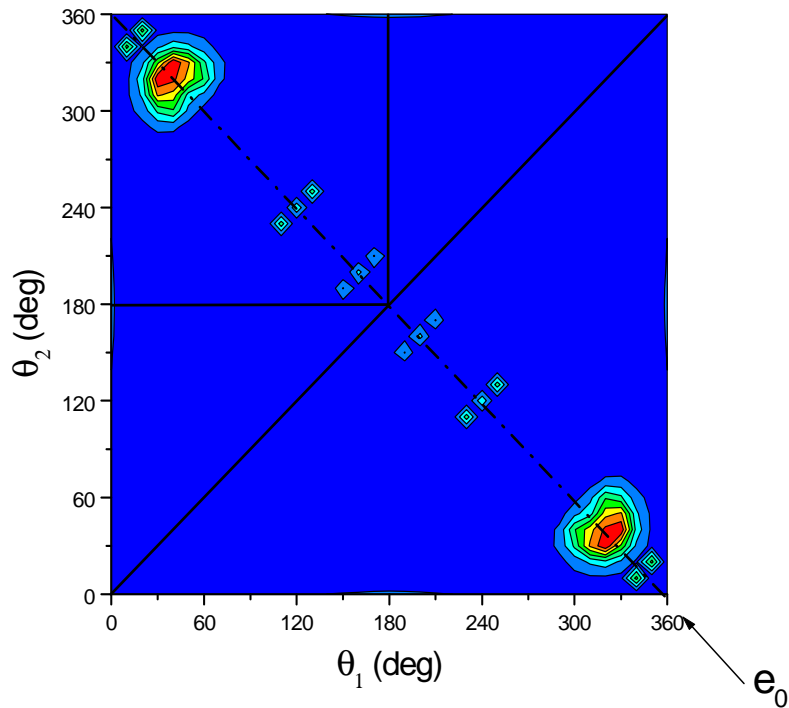


Figure (III-2) : La section efficace quadruplement différentielle dans le plan de diffusion du processus $(e,3e-1)$ pour l'Argon à une énergie d'incidence de 466 eV. La ligne continue représente l'axe de symétrie $\theta_1 = \theta_2$ alors que l'autre ligne représente l'axe de symétrie $\theta_1 + \theta_2 = 360^\circ$.

En général, nous avons un bon accord entre les résultats théoriques et ceux de l'expérience, ce qui confirme la nature de la collision à cette énergie d'incidence (une collision binaire) et indique que le processus Auger aussi bien que les mécanismes TS1 et TS2 sont probablement négligeables.

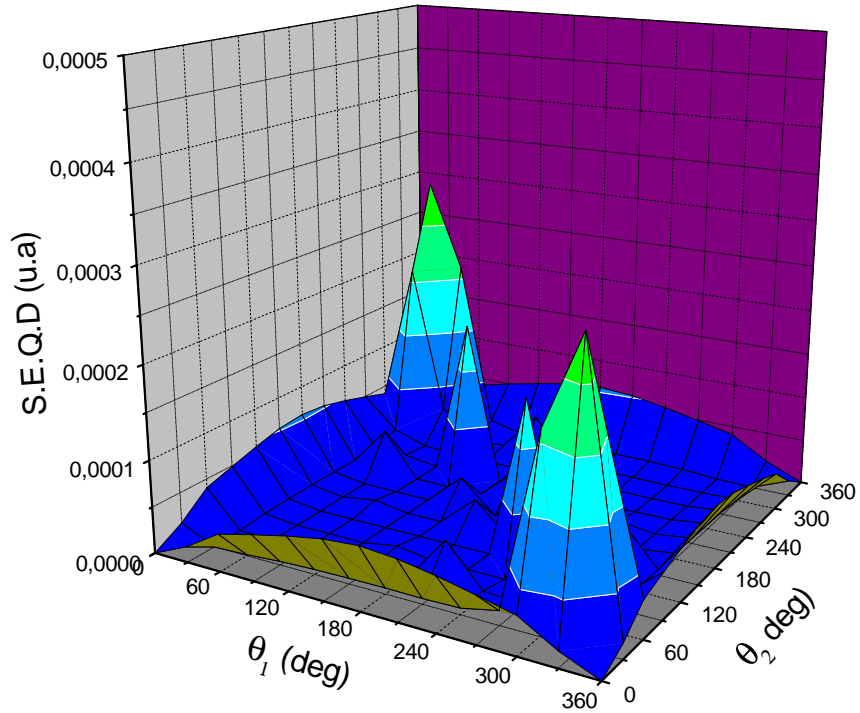


Figure (III-3) :Même situation que pour la figure (III-2).

Afin de comprendre la structure de la section efficace et l'origine des maximums dans les figures (III-2) et (III-3), il est instructif d'étudier l'évolution de l'amplitude du moment de recul $|\vec{k}_{Ar^{2+}}| = |\vec{k}_i - \vec{k}_d - \vec{k}_1 - \vec{k}_2|$ de l'ion résiduel Ar^{2+} . La section efficace d'une collision de type binaire doit être maximale sous les conditions cinématiques de Bethe quand l'impulsion de recul de l'ion est petite ou nulle. La figure (III-4) représente l'évolution de l'impulsion de recul de l'ion Ar^{2+} en fonction de θ_1 et θ_2 pour $\theta_d = \varphi_d = 0^\circ$. Dans tout le domaine des combinaisons angulaires (θ_1, θ_2) , nous constatons deux positions où le moment de recul tend vers zéro. Ceci correspond à l'émission des deux électrons éjectés symétriquement par rapport à la direction d'incidence.

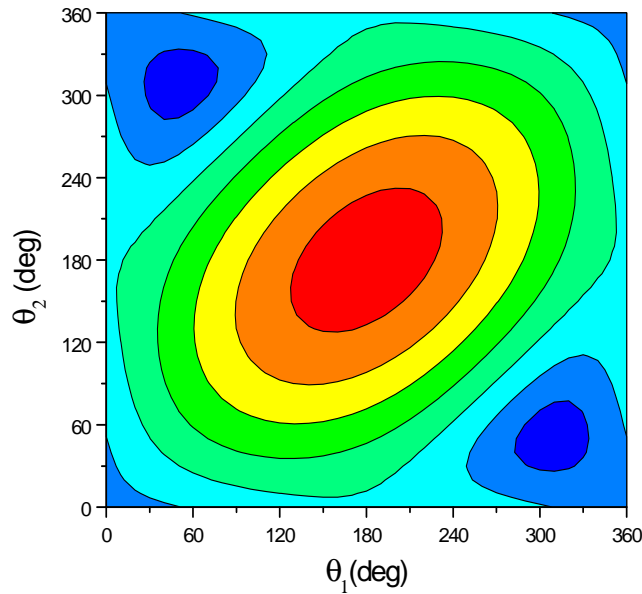


Figure (III-4) : l'évolution du moment de recul de l'ion Ar^{2+} en fonction de des deux angles d'éjection θ_1 et θ_2 pour $E_1 = E_2 = 205$ eV et $\theta_d = \varphi_d = 0^\circ$.

En comparant les deux figures (III-2) et (III-4), nous remarquons que les positions des maximums dans la section efficace quadruplement différentielle correspondent parfaitement aux minimums observés sur la figure (III-4). Nous notons que l'allure de la variation du moment de recul reste invariante par rapport à la variation des deux angles de l'électron non détecté θ_b et φ_d . En conclusion, à cette énergie d'incidence, il est probable que le mécanisme Shake-Off est prédominant par rapport au processus Auger.

b) $E_i = 658$ eV :

Nous pouvons considérer dans ce cas un nouveau processus possible puisque nous ne détectons que deux électrons parmi les trois sortants dans la voie finale. Il s'agit d'un processus de simple ionisation de type (e,2e) de la couche 2p. La contribution de ce processus s'ajoute d'une manière incohérente à celles d'une double ionisation directe et d'un processus Auger.

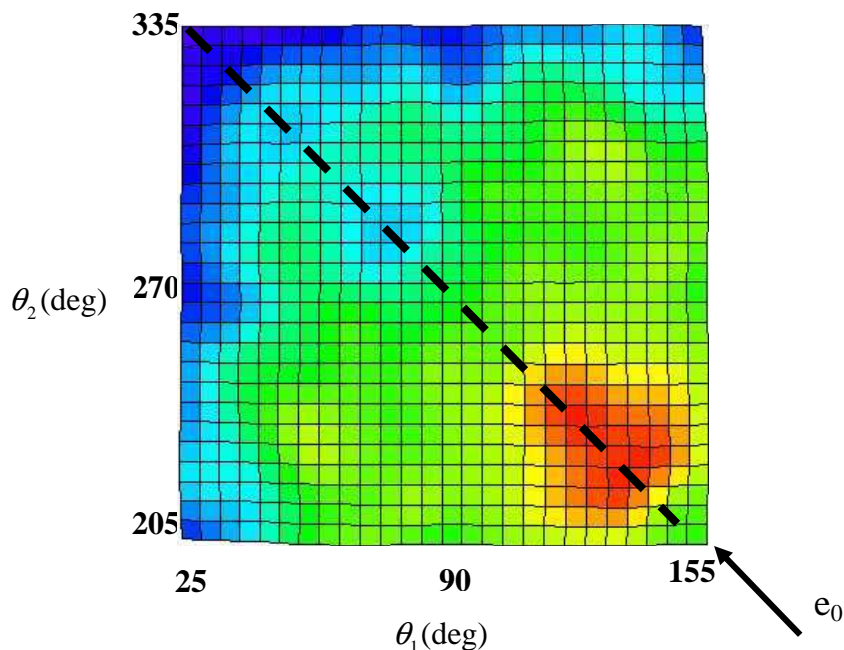


Figure (III-5) : Même situation que pour la figure (III-1) avec pour $E_i = 658 \text{ eV}$.

La figure (III-5) montre l'existence d'une crête principale située à $(\theta_1 = 120^\circ, \theta_2 = 240^\circ)$ et de deux crêtes secondaires situées à $(\theta_1 = 60^\circ, \theta_2 = 240^\circ)$ et $(\theta_1 = 120^\circ, \theta_2 = 300^\circ)$. Notre modèle reproduit une crête principale située à $(\theta_1 = 25^\circ, \theta_2 = 330^\circ)$ mais il est incapable de reproduire celle de l'expérience ou les secondaires (figure (III-6)). Nous pouvons attribuer la crête principale dans la figure (III-5) à un processus de simple ionisation de type $(e, 2e)$ de la couche électronique 2p. Pour vérifier cette hypothèse, nous utiliserons un modèle se basant sur la description des deux électrons sortants dans la voie finale par des fonctions d'ondes coulombiennes. Nous tenons compte de la répulsion entre ces deux électrons par un facteur de Gamow. Nous observons que la section efficace calculée pour le mécanisme $(e, 2e)$ fournit une probabilité maximale pour que les deux électrons s'éjectent « dos à dos », de préférence dans la configuration $(\theta_1(\theta_2) = 0^\circ, \theta_2(\theta_1) = 180^\circ)$. Nous remarquons aussi la présence d'une autre intensité autour de la direction $(\theta_1 \approx 45^\circ, \theta_2 \approx 315^\circ)$ qui correspond aux conditions cinématiques de Bethe et qui traduisent une interaction binaire entre le projectile et la cible suivie par l'émission de deux électrons ayant la même énergie (figure (III-8)).

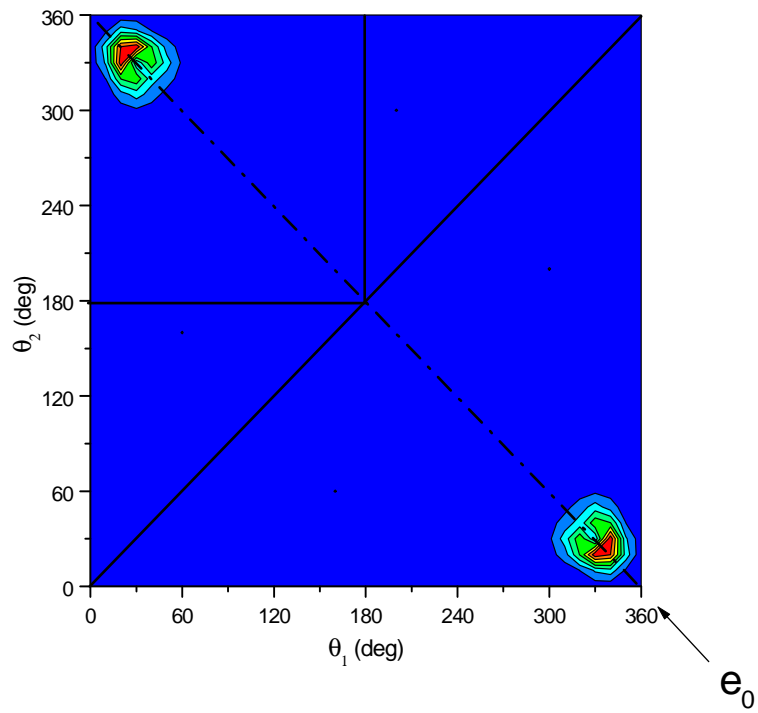


Figure (III-6) : La contribution angulaire théorique représentée dans le plan de diffusion pour $E_i = 658 \text{ eV}$.

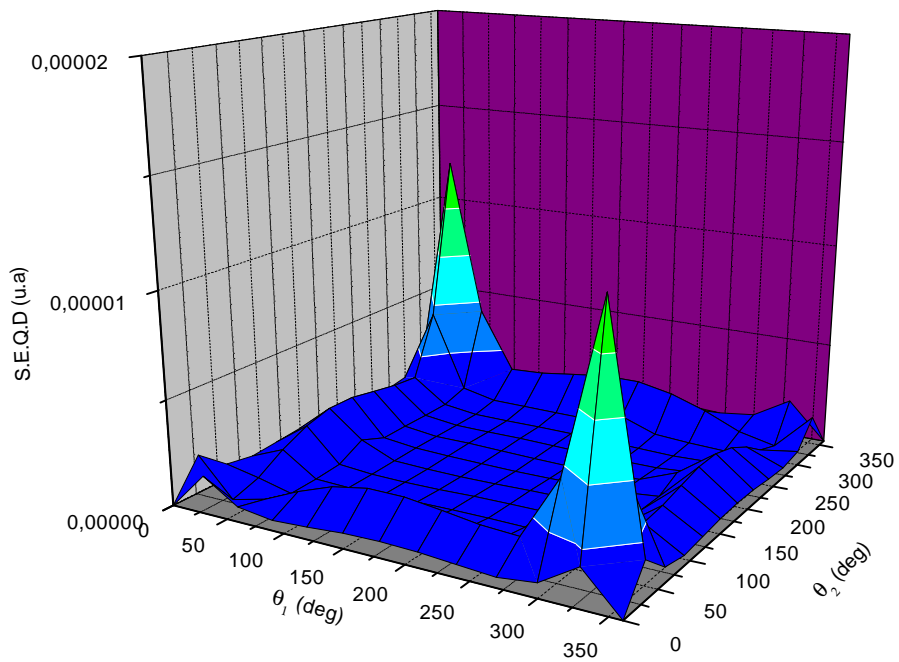


Figure (III-7) : Même situation que pour la figure (III-6).

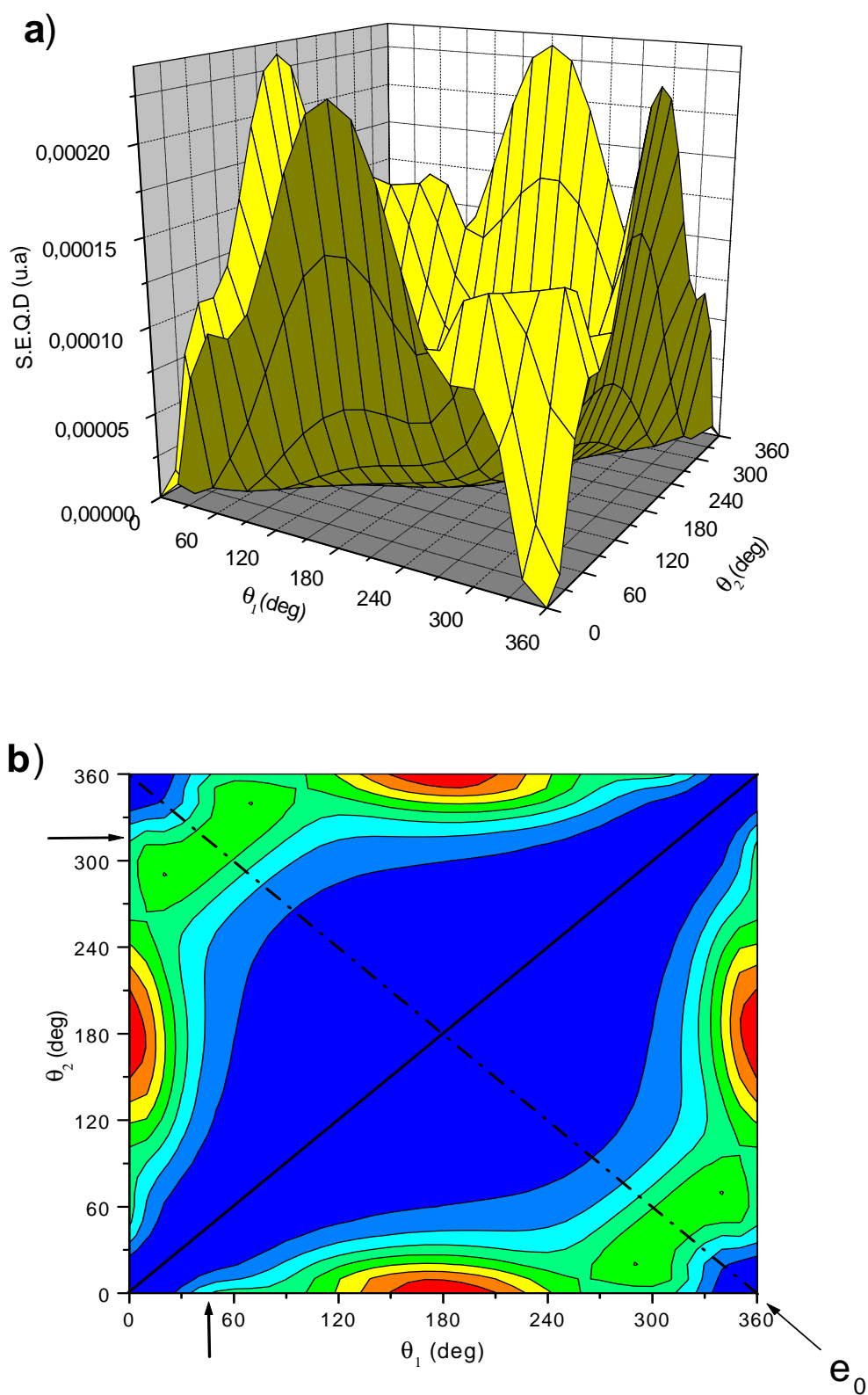


Figure (III-8)(a,b) : Contribution angulaire théorique du processus $(e,2e)$ sur la couche $2p$ de l'Argon pour $E_i = 658$ eV.

Cependant, ces prédictions théoriques n'ont aucune contrepartie dans les résultats expérimentaux de la figure (III-5). Autrement dit, le processus (e,2e) considéré sur la couche électronique 2p n'est pas assez fort pour qu'il soit révélé d'une manière significative dans les données expérimentales. Nous pouvons aussi supposer que la crête principale et les deux crêtes secondaires dans la figure (III-5), qui ne sont pas reproduites par notre modèle théorique, pourraient être attribuées au processus Auger et/ou les mécanismes TS1 et TS2 pour la double ionisation qui ne sont pas introduits dans notre modèle. Il est intéressant de noter la symétrie du problème à cette énergie d'incidence. En effet, il n'y a que deux électrons qui sont détectés expérimentalement à $\theta_1 = -120^\circ$ (où $\theta_1 = 60^\circ$) et $\theta_1 = +120^\circ$ par rapport à la direction d'incidence. Donc, bien que le troisième électron ne soit pas détecté, nous pourrions spéculer de l'argument de symétrie qu'il apparaisse probablement dans une « direction avant » autour de $\theta_1 = 0^\circ$, de sorte que les trois électrons doivent former un triangle équilatéral ($0^\circ, \pm 120^\circ$). C'est une configuration qui maximalise leur répulsion coulombienne.

c) $E_i = 956 \text{ eV}$:

Nous allons examiner maintenant la situation où l'énergie de l'électron incident est 956 eV. Dans ce cas là, l'électron non observé est le plus rapide (503 eV) et peut être considéré comme étant l'électron diffusé même si les processus d'échange ne doivent pas être négligeables.

La distribution angulaire expérimentale (figure (III-9)) se constitue de quatre crêtes : une crête dans le « demi-plan avant » autour de $(\theta_1 = 60^\circ, \theta_2 = 300^\circ)$, une deuxième dans le « demi-plan arrière » autour de $(\theta_1 = 100^\circ, \theta_2 = 260^\circ)$, et deux crêtes secondaires à $(\theta_1 = 60^\circ, \theta_2 = 240^\circ)$ et à $(\theta_1 = 120^\circ, \theta_2 = 300^\circ)$.

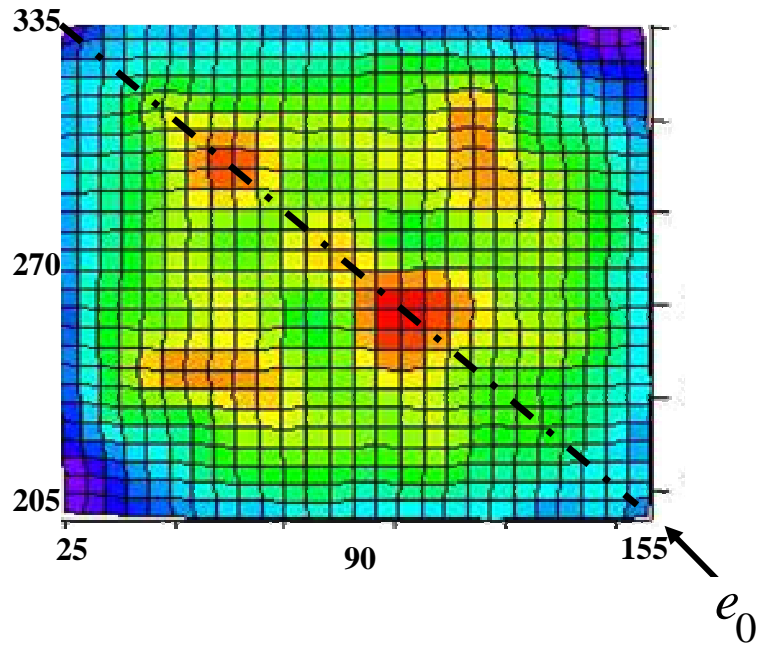


Figure (III-9) : Même situation que pour la figure (III-1) mais pour $E_i = 956 \text{ eV}$.

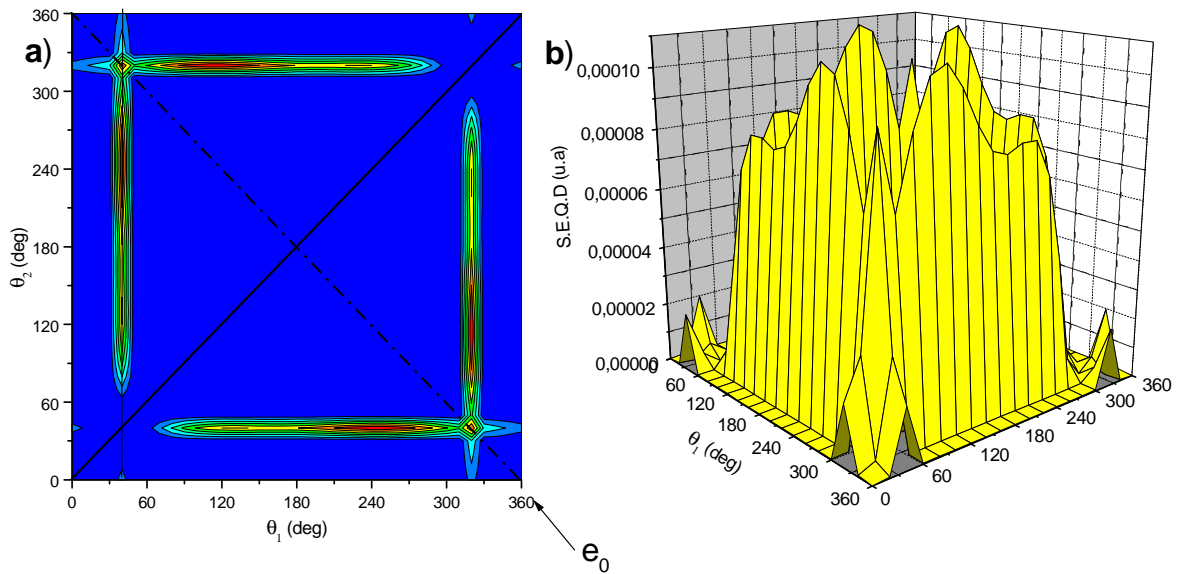


Figure (III-10)(a,b) : La contribution angulaire théorique du processus $(e, 3e-1)$ pour $E_i = 956 \text{ eV}$.

En revanche, la section efficace théorique montre quelques différences par rapport à celle de l'expérience (figure (III-10)). Elle comporte deux régions correspondant à un électron éjecté dans une région angulaire étroite autour de $\pm (30^\circ - 40^\circ)$, le deuxième électron s'éjecte dans

une zone plus large. En utilisant un modèle qui consiste à décrire les deux électrons éjectés comme étant des ondes coulombiennes et l'électron diffusé par une onde plane en tenant compte de répulsion électronique entre les deux électrons éjectés par l'introduction d'un facteur de Gamow et en se situant dans le cadre de la première approximation de Born (figure (III-11)), nous constatons que la contribution angulaire est dominée par une crête principale à $(\theta_1 = 40^\circ, \theta_2 = 320^\circ)$. Avec le modèle A6C, nous retrouvons ces crêtes mais avec des amplitudes différentes. Une autre différence entre ces deux modèles théoriques apparaît : nous notons la présence des deux crêtes secondaires à $(\theta_1 = 120^\circ, \theta_2 = 320^\circ)$ et à $(\theta_1 = 40^\circ, \theta_2 = 240^\circ)$ dans le modèle A6C.

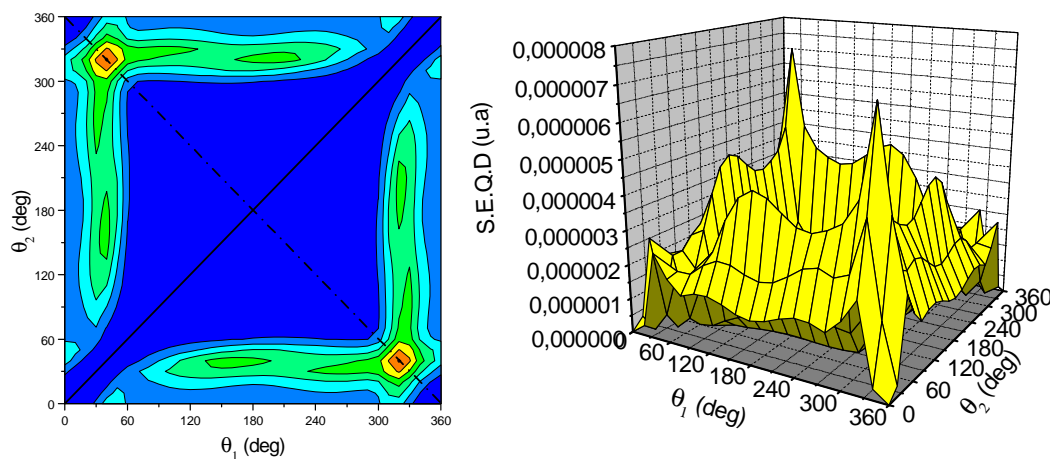
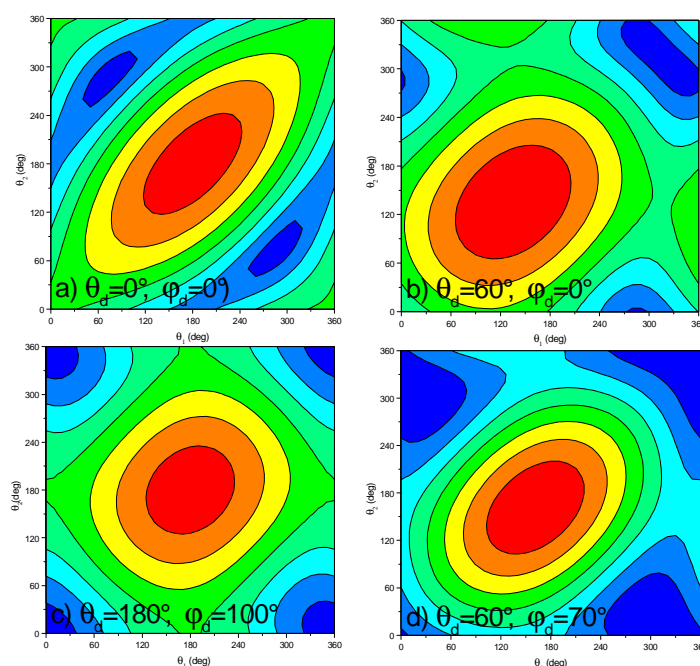


Figure (III-11) : La contribution angulaire théorique du processus $(e, 3e-1)$ sur une cible d'Argon en utilisant le modèle de deux fonctions d'ondes coulombiennes.

Cependant, ces deux modèles sont incapables de reproduire les données expérimentales. Les faiblesses de ces deux modèles théoriques viennent du fait que nous avons introduit seulement une double ionisation directe de l'Argon en utilisant le processus Shake-Off. En particulier, nous n'avons pas inclus les autres mécanismes à deux étapes comme les mécanismes TS1 et TS2 [Twe92].

Nous pouvons faire appel pour cette énergie d'incidence à l'évaluation du moment de recul de l'ion résiduel (figure (III-12)).



Figure(III-12) : La variation du moment de recul de l'ion résiduel Ar^{++} en fonction de des angles d'éjection θ_1 et θ_2 .

A partir de la figure (III-12), nous remarquons que l'évaluation du moment de recul de l'ion résiduel Ar^{++} après la collision confirme nos résultats théoriques et une partie des données expérimentales. En effet, les minimums observés concernant l'évaluation du moment de recul dans le domaine de l'émission correspondent parfaitement aux positions des crêtes (la principale et les deux secondaires) dans les résultats théoriques et expérimentaux. En revanche, la deuxième crête principale observée dans les données expérimentales qui correspond à une émission dans le « demi-plan arrière » n'est pas reproduite sur le plan de l'évaluation du moment de recul pour n'importe quelle valeur des angles de l'électron diffusé (non détecté). En conclusion, un mécanisme de double ionisation directe est insuffisant pour reproduire et expliquer toutes les données expérimentales et les origines de toutes les crêtes observées.

III-3- Processus de la double ionisation en tenant compte de la transition Auger :

III-3-1) Définition de l'effet Auger :

Les électrons Auger sont des électrons émis lors de la désexcitation d'un atome, dans notre cas, il s'agit de l'atome de l'Argon. Ce phénomène a été découvert en 1923 par Lise Meitner mais c'est Pierre Auger qui s'est également intéressé au phénomène quelques années plus tard qui lui a donné son nom. Lorsqu'un atome est bombardé par des projectiles de forte énergie, un électron de la couche profonde est éjecté et l'atome est dans un état excité. Il se désexcite par une transition électronique, un électron périphérique descend et vient occuper la place laissée vide. Cette transition provoque l'émission d'énergie qui peut prendre deux formes possibles : un photon X, c'est la fluorescence X, ou l'éjection d'un électron périphérique, c'est un électron Auger.

III-3-2) Expression de la section efficace :

Le processus Auger peut être décrit par un mécanisme à deux étapes : la première étape consiste en une simple ionisation de la couche 2p de l'atome de l'Argon qui peut être considérée comme un processus (e,2e). En utilisant un modèle de deux fonctions d'onde coulombiennes dans le cadre de la première approximation de Born, l'amplitude de transition peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sigma^{(e,2e)} = \left\langle \Psi_f^1 \left| -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} \right| \Psi_i \right\rangle \quad (\text{III-19})$$

Où 0 désigne l'électron incident (et le diffusé) et 1 l'électron éjecté.

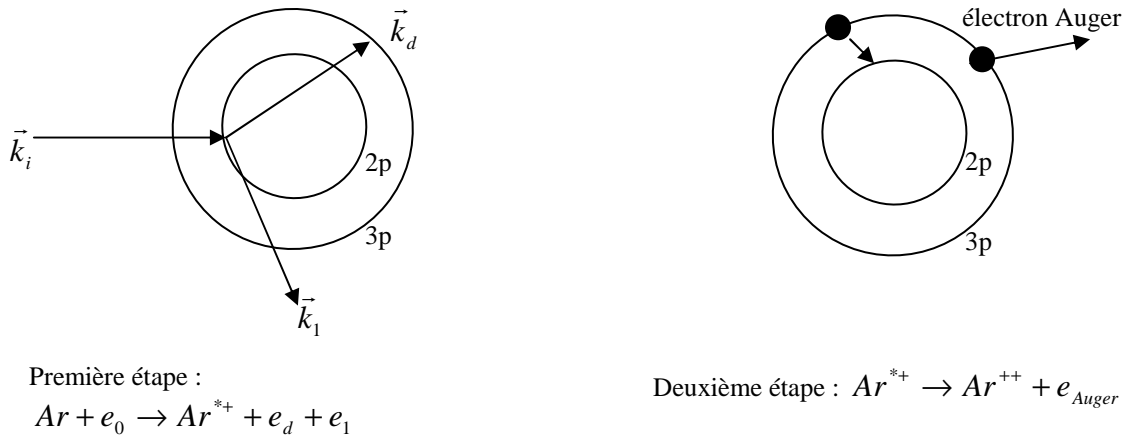


Figure (III-1) : Schéma d'un processus Auger dans le cas d'une cible d'Argon.

L'état initial est décrit par une fonction d'onde de type Clementi pour un électron actif de la couche 2p qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\phi_{2p}(\vec{r}) = B_{2p} r Y_1^m(\theta, \varphi) \epsilon_{2p}^{3/2} e^{-\epsilon_{2p} r} + \sum_{i=1}^7 B_{4pi} r^3 Y_1^m(\theta, \varphi) \epsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\epsilon_{4pi} r} \quad (\text{III-20})$$

et une onde plane pour l'électron incident. Les valeurs numériques des coefficients B_{2p} et B_{4pi} sont données par le tableau suivant :

| <u>Coefficients</u> | <u>Valeurs numériques</u> |
|---------------------|---------------------------|
| B_{2p} | 0.64951 |
| B_{4p1} | 0.01298 |
| B_{4p2} | 0.02669 |
| B_{4p3} | 0.28421 |
| B_{4p4} | 0.12881 |
| B_{4p5} | 0.00219 |
| B_{4p6} | 0.00008 |
| B_{4p7} | -0.00002 |

Tableau (III-2) : valeurs numériques des coefficients présents dans la fonction de Clementi et Roetti représentant l'orbitale 2p.

L'état final est représenté par le produit de deux fonctions d'onde coulombiennes décrivant les deux électrons sortants dans la voie finale et du facteur de Gamow qui tient compte de la répulsion coulombienne entre eux.

La deuxième étape du processus qui consiste en un réarrangement électronique avec éjection d'un autre électron de la couche 3p peut être décrite par l'expression suivante :

$$\sigma^{tA} = \langle \Psi_f | \frac{1}{r_{12}} | \Psi_f^1 \rangle \quad (\text{III-21})$$

L'état $|\Psi_f^1\rangle$ décrit les deux électrons (1 et 2) de l'ion Ar^+ impliqués dans cette réaction, l'électron 1 est celui qui est le responsable de la transition de la couche 3p à la couche 2p. $\langle\Psi_f|$ est l'état final du processus Auger qui est décrit par le produit d'une fonction d'onde d'un électron de la couche 2p et une fonction d'onde coulombienne qui décrit l'électron Auger.

Finalement, la section efficace globale du processus Auger s'écrit sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \sigma^{Auger} = \sigma^{(e,2e)} \sigma^{t_A} = & \left\langle \varphi_c(\vec{k}_d, \vec{r}_0) \varphi_c(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi(\vec{k}_d - \vec{k}_1) \left| -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} \right| \phi_{2p}(r_1) e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_0} \right\rangle \\ & \times \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_{2p}(r_1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_{3p}(r_1) \phi'_{3p}(r_2) \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{III-22})$$

φ_c est une fonction d'onde coulombienne et $\phi(\vec{k}_d - \vec{k}_1)$ est le facteur de Gamow.

Le terme σ^{t_A} peut être calculé au moyen de la technique de Roy [Roy80] en réduisant l'intégrale à six dimensions à une simple intégration par rapport à une seule variable.

Nous pouvons considérer une forme générale du terme σ^{t_A} , elle peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} f_R = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^{-cr_1}}{r_1} \frac{e^{-\lambda r_{12}}}{r_{12}} \frac{e^{-ar_2}}{r_2} e^{i\vec{p}\vec{r}_1} e^{i\vec{v}\vec{r}_2} e^{i\vec{u}\vec{r}_1} e^{i\vec{v}\vec{r}_2} e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}_2} {}_1F_1(i\alpha_2, 1, i(\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 + k_2 r_2)) e^{\pi\alpha_2} \frac{\Gamma(1-i\alpha_2)}{(2\pi)^{3/2}} \\ = 16\pi^2 \Gamma(1-i\alpha_2) \frac{e^{\pi\alpha_2}}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{dv}{\sigma_0(v)} \left[1 - \frac{\sigma_1(v)}{\sigma_0(v)} \right]^{-i\alpha_2} \quad \text{où } \alpha_2 = \frac{Z_2}{k_2} \end{aligned}$$

Les expressions explicites de $\sigma_0(v)$ et $\sigma_1(v)$ sont données dans l'annexe B. \vec{p} , \vec{w} , \vec{u} et \vec{v} sont des vecteurs quelconques.

Prenons par exemple le cas suivant :

$$\sigma_{000}^{t_A} = \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_{2p0}(\vec{r}_1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_{3p0}(\vec{r}_1) \phi_{3p0}(\vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{III-23})$$

En remplaçant ϕ_{2p} et ϕ_{3p} par leurs expressions dans (III-23), nous obtenons un premier terme du développement qui peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\sigma_{000}^{t_A^1} = \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) A_{2p} r_1 e^{-\varepsilon_{2p} r_1} Y_1^0(\theta_1, \varphi_1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| B_{2p} r_1 e^{-\varepsilon_{2p} r_1} Y_1^0(\theta_1, \varphi_1) B_{2p} r_2 e^{-\varepsilon_{2p} r_2} Y_1^0(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \quad (\text{III-24})$$

Or : $Y_1^{0*}(\theta_1, \varphi_1) Y_1^0(\theta_1, \varphi_1) = \frac{1}{4\pi} + \frac{1}{\sqrt{5\pi}} Y_2^0(\theta_1, \varphi_1)$. Donc, en introduisant dans (III-24), le

terme $\sigma_{000}^{t_A^1}$ devient:

$$\begin{aligned} \sigma_{000}^{t_A^1} = & A_{2p} B_{2p}^2 \frac{1}{4\pi} \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| (r_1^2 e^{-2\varepsilon_{2p} r_1}) r_2 e^{-\varepsilon_{2p} r_2} Y_1^0(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \\ & + A_{2p} B_{2p}^2 \frac{1}{\sqrt{5\pi}} \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| (r_1^2 Y_2^0(\theta_1, \varphi_1) e^{-2\varepsilon_{2p} r_1}) r_2 e^{-\varepsilon_{2p} r_2} Y_1^0(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \end{aligned}$$

Sachant que : $Y_2^0(\theta_1, \varphi_1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta_1 - 1)$, nous pouvons écrire le terme $\sigma_{000}^{t_A^1}$ comme une combinaison linéaire des dérivées partielles du terme f_R qui est facile à calculer. Donc nous aboutissons à l'expression suivante :

$$\sigma_{000}^{t_A^1} = \frac{A_{2p} B_{2p}^2}{4\pi} \frac{\partial^5 f_R}{\partial^3 c \partial a \partial w_z} + \frac{A_{2p} B_{2p}^2}{\sqrt{5\pi}} \frac{\partial^5 f_R}{\partial c \partial a \partial^2 p_z \partial w_z}$$

Le calcul explicite du terme $\sigma_{000}^{t_A^1}$ sera donné dans l'annexe C.

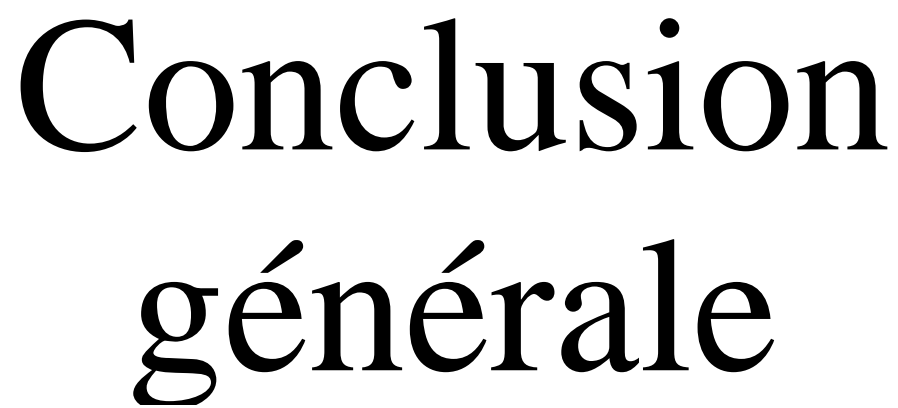
Le calcul des termes du à l'effet Auger peut aussi s'effectuer en utilisant un développement en ondes partielles. Mais ce type de développement ne permet pas une utilisation future du modèle BBK. C'est pour cette raison que nous avons adopté la méthodologie décrite ci-dessus.

III-4- Conclusion :

Nous avons développé un nouveau modèle pour calculer la section différentielle quadruplement différentielle pour la double ionisation d'une cible atomique d'argon par impact électronique basé essentiellement sur le mécanisme Shake-Off. Ce modèle peut être considéré comme étant au delà de la deuxième approximation de Born puisqu'il tient compte de toutes les interactions continues entre les électrons sortants dans la voie finale (les deux éjectés et le diffusé) et l'ion résiduel Ar^{++} . Nous avons inclus, et d'une façon globale, tous les effets d'échange qui s'avèrent indispensables quand les électrons sortants ont la même énergie. Nous avons comparé nos résultats avec les expériences récentes de type (e,3-1e) de Catoire et al [Cat04], et nous avons trouvé un bon accord dans le cas où l'énergie incidente

est de 466 eV. Pour les deux autres cas où l'énergie incidente vaut 658 eV et 956 eV, notre modèle s'avère incapable d'expliquer toutes les données expérimentales. La prise en compte du processus Auger et des mécanismes à deux étapes TS1 et TS2 sera sûrement nécessaire pour la compréhension des résultats expérimentaux, mais ce développement nécessite un temps de calcul considérable, et l'exploitation des résultats reste impossible actuellement (il nous a fallu sept mois de calculs intensifs pour reproduire les (e,3-1e) en tenant compte juste du mécanisme Shake-Off).

Du point de vue expérimental, il serait indispensable de pouvoir réaliser des expériences (e,3e) qui nous permettraient de confronter plus facilement les résultats de notre modèle A6C incluant les mécanismes Shake-Off, TS1 et TS2 ainsi que la contribution due à l'effet Auger. Ces expériences de type (e,3e) sont en cours de réalisation grâce à la présence d'un nouveau analyseur toroïdal.



Conclusion générale

Conclusion générale

Nous avons développé au cours de ce travail une approche théorique fondée sur une description du double continuum par une fonction ayant le bon comportement asymptotique. Dans le cas de la double ionisation de l'hélium, nous avons pu prédire en général la position des maxima et des minima sans toutefois donner une valeur correcte de l'amplitude de chaque section efficace différentielle. Notre modèle décrit partiellement les résultats expérimentaux, mais s'avère insuffisant pour prendre en compte toutes les données expérimentales. Nous avons constaté que les résultats théoriques trouvés en introduisant les charges effectives dynamiques pour les trois électrons sortants dans la voie finale sont nettement meilleurs par rapport à ceux donnés par l'utilisation des charges effectives fixes, et ils montrent le même comportement de la S.E.Q.D expérimentale. Il resterait à y inclure les termes d'ordre 2 du développement de Born correspondant aux mécanismes TS1 et TS2 qui semblent être insuffisamment pris en compte dans notre modèle A6C. Nous avons utilisé une excellente base de fonction d'onde pour décrire l'état initial et les états excités de l'atome d'hélium. Les calculs relatifs aux mécanismes TS1 et TS2 n'en seront que plus facilités.

Dans le cas de la double ionisation de l'argon et du processus Auger notre modèle A6C ne permet d'interpréter qu'une partie des résultats expérimentaux. A une énergie d'incidence de 466 eV, notre approche donne un très bon accord avec l'expérience en incluant une collision de type Shake-Off de la couche 3p. Pour les deux autres énergies d'incidence, l'accord avec les données expérimentales reste relativement bon. Nous n'avons pas pu inclure la contribution de l'effet Auger (calculs en cours) ainsi que les contributions des mécanismes TS1 et TS2 (calculs difficilement réalisables actuellement). Il est à remarquer que c'est une fonction de type Hartree-Fock (Clémenti) qui a été utilisée. Il s'agirait dans un premier temps, de refaire nos calculs avec une fonction de type interaction de configuration puis de prendre en compte l'effet Auger, et enfin d'y inclure les 2 mécanismes TS1 et TS2. Sans oublier de les effets d'échange dans le cas de l'effet Auger.

Nous pourrions s'interroger pourquoi en 20 ans de recherche dans ce domaine, on n'est toujours pas capable d'interpréter correctement une expérience de double ionisation d'un atome. Mais, il faut se souvenir que récemment une expérience de simple ionisation de

l'hélium avec excitation de l'ion résiduel (Loweret al 2006) a montré l'insuffisance de tous les modèles théoriques utilisés jusqu'à présent avec succès. Donc tant que ce problème ne sera pas complètement résolu, il est certainement illusoire de croire résoudre le problème complexe de la double ionisation ;

Le mérite de ce travail aura été d'appliquer un nouveau modèle plus sophistiqué que les précédents en y incluant parfaitement les effets d'échange pour la double ionisation directe d'un atome constitué de gaz rare mais qui s'avère encore insuffisant pour décrire toutes les données expérimentales.

Ce travail montre que l'interprétation des expériences de type $(e,3e)$ ou $(e,3-1e)$ est loin d'être terminée.

Bibliographie

Bibliographie

- [Ach01]: Achler M, Mergel V, Spielberger L, Dörner R, Azuma Y et Schmidt-Böcking H, J. Phys. B34, 965, 2001
- [Anc04] : Ancarani L, Montagnese T et Dal Cappello C, Phys. Rev. A 70, 012711 (2004)
- [Anc05] :2005, Ancarani U, Montagnese T et Dal Cappello C Int. Conference electron and photon impact ionization and related topics, edited by B. Piraux, IOP Publishing
- [Ber93]: J. Berakdar and H. Klar, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 26 (1993) 4219
- [Bera96]: J. Berakdar, Phys. Lett. A 220 (1996) 237, Phys. Rev. A 55 (1997) 1994
- [Ber96]: Berakdar J 1996 Phys. Rev. A 53 2314
- [Ber97]: J. Berakdar, Phys. Rev. A 55 (1997) 1994
- [Ber00]: J. Berakdar, Phys. Rev. Lett. 85 (2000) 4036
- [Ber02]: J. Berakdar, from few body scatterings to phase transitions in the series Recent Research Development in Physics, Vol 2, Transworld Research Network, Trivandrum, 2002, ISBN 81-7895-024-3
- [Ber03] : J. Berakdar, A. Lahmam-Bennani and C. Dal Cappello, Physics Reports 374 (2003)
- [Bra89]: M. Brauner, J.S. Briggs, H. Klar, J. Phys. B 22 (1989) 2265
- [Bra98]: Bräuning et al 1998, J Phys B 31,5149
- [Byr67]: F. W. Byron Jr and C. J. Joachain, 1967 Phys. Lett. 24 A, 617
- [Byr83]: F. W. Byron Jr, C. J. Joachain and B. Piraux, Phys. Rev. Lett. 9 (1983) 427
- [Cap91]: C. Dal Cappello and H. Le Rouzo 1991 Phys. Rev. A 43 1395
- [Car92]: T.A. Carlson, M.O. Krause, Phys. Rev. A 140 (1965) 1057
- [Cha44]: S. Chandrasekhar, Astrophys. J. 100 (1944) 176
- [Coo04]: Cooper J. W. and Van Boeyen R. W. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 37 (2004) L77
- [Dal91] : C. Dal Cappello and H. Le Rouzo, 1991, Phys. Rev. A 43, 1395
- [Dal92] : C. Dal Cappello, J. Langlois, M. C. Dal Cappello, B. Joulakian, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet and R. Tweed, Z. Phys. D 23 (1992) 389
- [Dal95] : Dal Cappello C, Hda H and Roy A C 1995 Phys. Rev. A 51 3735
- [Dal98]: C. Dal Cappello, R. EL Mkhater and P. A. Hervieux, Phys. Rev. A R693 (1998)
- [Def99]: P. Defrance, T. M. Kereselidze, Z. S. Machavariani and J. V. Mebonia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 32 (1999) 2227
- [Dor99]: A. Dorn, R. Moshhammer, C. D. Schröter, T. J. M. Zouros, W. Schmitt, H. Kollmus, R. Mann and J. Ullrich, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 2496

[Dor01] : A. Dorn, A. Kheifets, C.D. Schroter, B. Najjari, C. Hohl, R. Moshhammer, Phys. Rev. Lett. 86 (2001) 3755

[Dug92]: A. Duguet and A. Lahmam-Bennani, Z. Phys. D 23 (1992) 383

[Ehr86] : H. Ehrhardt, K. Jung, G. Knoth, P. Schlemmer, Z. Phys. D 1 (1986) 3

[EIA05]: Elazzouzi S., Dal Cappello C., Lahmam-Bennani A. and Catoire F. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 38 (2005) 1

[ElG99]: S. E. El Ghazouani, P. A. Hervieux, C. Dal Cappello and J. Langlois, J. Phys. IV France 9, Pre6-101 (1999)

[ElM96] : El Mkhater R, Dal Cappello C, Lahmam-Bennani A and Popov Y, 1996, J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. 29 1101

[ElM97]: B. El Marji, C. Schröter, A. Duguet, A. Lahmam-Bennani, M. Lecas and L. Spielberger, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (1997) 3677

[ElM98]: R. EL Mkhater and C. Dal Cappello, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 31 (1998) 301

[Got03]: Gotz J R, Walter M and Briggs J S 2003 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36 L77

[Grin00] : Grin M, C. Dal Cappello, R. El Mkhater and J. Rasch, 2000, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 33 131

[Gup95]: S. Gupta and M. K. Srivastava, Phys. Rev. A 52 (1995) 2083

[Hda94] : H. Had, C. Dal Cappello and J. Langlois, Z. Phys. D 29 (1994) 25

[Hyl29] : E. A. Hylleraas, Z. Phys. 54 (1929) 347

[Jia03]: Jia C. C., Lahmam-Bennani A., Dal Cappello C., Duguet A. and Avaldi L. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 36 (2003) L17

[Jon03]: 2003, p.70, S Jones and D.H. Madison correlation and polarization in photonic, electronic and atomic collisions edited by G.H. Hanne et al, American Institute of physics

[Jon05] : Jones S., Madison D.H. et Macek, J.H. NIMB 241 (2005), 73

[Jou92]: B. Joulakian, C. Dal Cappello and M. Brauner, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 (1992) 2863

[Jou93]: B. Joulakian and C. Dal Cappello, Phys. Rev. A 47 (1993) 3788

[Khe98]: Kheifets et Bray 1998, Phys. Rev. Lett. 81,4588

[Khe99]: A. Kheifets, I. Bray, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet and I. Taouil, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 32 (1999) 5047

[Khe04]: A. Kheifets, 2004, Phys Rev A 69, 032712

[Khe04]: Kheifets A, Bray I, Phys Rev A 69, 050701(R) (2004)

[Lam94]: P. Lamy, C. Dal Cappello, B. Joulakian and C. Le Sech, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27 (1994) 3559

- [Lah89] : A. Lahmam-Bennani, C. Dupré and A. Duguet, Phys. Rev. Lett. 63 (1989) 1582
- [Lah91]₁ : A. Lahmam-Bennani, H. Ehrhardt, C. Dupré and A. Duguet, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24 (1991) 3645
- [Lah91]₂ : A. Lahmam-Bennani, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24 (1991) 2401
- [Lah92]: A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, A. M. Grisogono and M. Lecas, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 (1992) 2873
- [Lah97]: A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, B. El Majri, C. Schröter, and L. Spielberger, in Proceedings of the European Conference on Coincidence Studies of Electron and Photo Impact Ionization (Belfast), edited by C. T. Whelan and H. R. J. Walters (Plenum, London, 1997).
- [Lah99]: A. Lahmam-Bennani, communication privée (1999)
- [Lah99]₁ : A. Lahmam-Bennani, I. Taouil, A. Duguet, M. Lecas, L. Avaldi, and J. Berakdar Phys. Rev. A 59 (1999) 3548
- [Lah99]₂: A. Lahmam-Bennani, I. Taouil, A. Duguet, M. Lecas, L. Avaldi and J. Berakdar, Phys. Rev. A 59 (1999) 3548
- [Lah01]: A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, M N. Gaboriaud, I. Taouil, M. Lecas, A. Kheifets, J. Berakdar and C. Dal Cappello, J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys. 34 (2001) 3073-3087
- [Lah03]: Lahmam-Bennani A, Duguet A, Dal Cappello C, Nebdi H and Piraux B 2003 Phys. Rev. A 67 10701
- [Maj97]: B. El Majri, C. Schröter, A. Duguet, A. Lahmam-Bennani, M. Lecas, and L. Spielberger, J. Phys. B 30, 3677 (1997).
- [Mal97] : A. W. Malcherek, J.S. Briggs, J. Phys. B 30 (1997) 4419
- [Mala97]: A. W. Malcherek, J. S. Briggs, J. Phys. B 30 (1997) 4419
- [Malb97] : A. W. Malcherek, J. M. Rost and J. S. Briggs, Phys. Rev. A 55 (1997) R3979
- [McG82]: J.H. McGuire, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 1153
- [Mit66]: M. H. Mittleman, Phys. Rev. Lett. 16 (1966) 498
- [Neb00]: Nebdi H 2000, thèse de doctorat, université Catholique de Louvain
- [Neu77]: V. G. Neudatchin, Y. F. Smirnov, A. V. Pavlitchenkov and V. G. Levin, Phys. Lett. A 64, 31 (1977)
- [Plu51] : P. Pluvinaige, J. Phys. Radium 12 (1951) 789
- [Pop94]: Yu. V. Popov, C. Dal Cappello, B. Joulakian and N. M. Kuzmina, 1994 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27, 1599
- [Roy80]: Roy A, Roy K and Sil N C 1980 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 13 3443
- [Rud68]: Rudge M 1968 Rev. Mod. Phys. 40 564

- [Sch73]: Schulz M J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 6 2580
- [Sch98]: C. Schröter, B. El Marji, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, M. Lecas and L. Spielberger, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 31 (1998) 131
- [Sil60] : J. N. Silverman, O. Platas and F. A. Matsen, J. Chem. Phys. 32 (1960) 1402
- [Smi78]: Y. F. Smirnov, A. V. Pavlitchenkov, V. G. Levin and V. G. Neudatchin, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 11, 3587 (1978)
- [Sri96]: M. K. Srivastava, S. Gupta and Dal Cappello, Phys. Rev. A 53 (1996) 4104
- [Tao98]: I. Taouil, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet and L. Avaldi, Phys. Rev. Lett. 81 (1998) 4600
- [Twe73]₁ : R. J. Tweed, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 6 (1973) 259
- [Twe87]: R. J. Tweed and J. Langlois, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 20 (1987) 5213
- [Twe92]: R.J. Tweed, Z. Phys. D 23 (1992) 309
- [Ull97]: J. Ullrich, R. Moshhammer, R. Dörner, O. Jagutzki, V. Mergel, H. Schmidt-Böcking and L. Spielberger, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (1997) 2917
- [Zai06]: Zaitsev S.A., Knyr V.A., Popov Y. V. et Lahmam-Bennani A. soumis à Phys Rev. Lett
- [Zha00]: Zhang S., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 33 3545

Annexe A

ANNEXE A :
Calcul explicite de la S.E.Q.D

Nous considérons la double ionisation de l'atome de l'hélium par l'impact d'un électron. Le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible s'écrit sous la forme suivante :

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

Où r_0 représente la position du projectile par rapport à la cible, r_{01} et r_{02} représentent les distances entre le projectile et les deux électrons éjectés.

L'état initial sera un déterminant unique de Slater, nous pouvons supposer que l'électron incident possède un spin haut (1/2), s'il possède un spin bas (-1/2), le résultat sera identique.

$$D_0 = \left| \begin{array}{ccc} \phi_i \phi_1 \bar{\phi}_2 \\ \phi_i(0) & \phi_i(1) & \phi_i(2) \\ \phi_1(0) & \phi_1(1) & \phi_1(2) \\ \bar{\phi}_2(0) & \bar{\phi}_2(1) & \bar{\phi}_2(2) \end{array} \right| = \frac{1}{\sqrt{6}} \left| \begin{array}{ccc} \phi_i(0) & \phi_i(1) & \phi_i(2) \\ \phi_1(0) & \phi_1(1) & \phi_1(2) \\ \bar{\phi}_2(0) & \bar{\phi}_2(1) & \bar{\phi}_2(2) \end{array} \right| \quad (\text{A-2})$$

Nous considérons les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} S_z \alpha &= \frac{\hbar}{2} \alpha \\ S_z \beta &= -\frac{\hbar}{2} \beta \\ S_+ \alpha &= S_- \beta = 0 \\ S_+ \beta &= \hbar \alpha \\ S_- \alpha &= \hbar \beta \\ S^2 &= S_- S_+ + \hbar S_z + S_z^2 \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

où : α est le spin haut et β est le spin bas.

Puisque nous travaillons dans un système d'unités atomiques, nous pouvons considérer : $\hbar = 1$.

Nous appliquons ces opérateurs sur D_0 :

$$S_z D_0 = \frac{1}{2} D_0, S_z^2 = \frac{1}{4} D_0, S_- D_0 = \left| \bar{\phi}_1 \phi_1 \bar{\phi}_2 \right|, S_- S_+ D_0 = D_0 \text{ et } S^2 D_0 = \frac{3}{4} D_0 \left(S = \frac{1}{2}, M_s = \frac{1}{2} \right)$$

L'état final sera : $D_0' = \left| \phi_d \phi_{k_1} \bar{\phi}_{k_2} \right|$.

En appliquant les opérateurs (A-3) sur l'état D_0' , nous obtiendrons :

$$\begin{aligned} S_z D_0' &= \frac{1}{2} D_0', S_z^2 D_0' = \frac{1}{4} D_0', S_- D_0' = \left| \bar{\phi}_d \phi_{k_1} \bar{\phi}_{k_2} \right| + \left| \phi_d \bar{\phi}_{k_1} \phi_{k_2} \right| \\ S_+ S_- D_0' &= 2D_0' + D_1' + D_2', \text{ où : } D_1' = \left| \bar{\phi}_d \phi_{k_1} \phi_{k_2} \right| \text{ et } D_2' = \left| \phi_d \bar{\phi}_{k_1} \phi_{k_2} \right| \\ S^2 D_0' &= \frac{7}{4} D_0' + D_1' + D_2' \\ S^2 D_1' &= \frac{7}{4} D_1' + D_0' + D_2' \\ S^2 D_2' &= \frac{7}{4} D_2' + D_0' + D_1' \end{aligned}$$

Et la matrice S^2 s'écrit sous la forme suivante :

$$S^2 \begin{pmatrix} D_0' \\ D_1' \\ D_2' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{4} & 1 & 1 \\ 1 & \frac{7}{4} & 1 \\ 1 & 1 & \frac{7}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_0' \\ D_1' \\ D_2' \end{pmatrix} \quad (\text{A-4})$$

Les valeurs propres de cette matrice sont :

➤ $\lambda = \frac{3}{4}$: qui admet deux vecteurs propres ($S = \frac{1}{2}, M_s = \frac{1}{2}$):

$$D_0'' = \frac{1}{\sqrt{2}} (D_0' - D_1') \text{ et } D_1'' = \frac{1}{\sqrt{6}} (D_0' + D_1' - 2D_2')$$

➤ $\lambda = \frac{15}{4}$: que nous pouvons associer au vecteur propre suivant ($S = \frac{3}{2}, M_s = \frac{1}{2}$):

$$D_2'' = \frac{1}{\sqrt{3}} (D_0' + D_1' + D_2')$$

L'élément de matrice M [expression (II-3)] peut s'écrire sous la forme suivante :

$$M = M_0 + M_1 + M_2$$

$$\text{où : } M_0 = \langle D_0'' | V | D_0 \rangle, M_1 = \langle D_1'' | V | D_0 \rangle \text{ et } M_2 = \langle D_2'' | V | D_0 \rangle.$$

Maintenant, nous allons développer l'expression de l'état D_0'' :

$$D_0'' = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{6}} \left[\begin{array}{ccc} \phi_d(0) & \phi_d(1) & \phi_d(2) \\ \phi_{k_1}(0) & \phi_{k_1}(1) & \phi_{k_1}(2) \\ \phi_{k_2}(0) & \phi_{k_2}(1) & \phi_{k_2}(2) \end{array} \right] - \left[\begin{array}{ccc} \bar{\phi}_d(0) & \bar{\phi}_d(1) & \bar{\phi}_d(2) \\ \bar{\phi}_{k_1}(0) & \bar{\phi}_{k_1}(1) & \bar{\phi}_{k_1}(2) \\ \bar{\phi}_{k_2}(0) & \bar{\phi}_{k_2}(1) & \bar{\phi}_{k_2}(2) \end{array} \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{6}} \left[\begin{array}{l} \phi_d(0)(\phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(2)\alpha(1)\beta(2) - \phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(1)\alpha(2)\beta(1))\alpha(0) \\ - \phi_d(1)(\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(2)\alpha(0)\beta(2) - \phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(0)\alpha(2)\beta(0))\alpha(1) \\ + \phi_d(2)(\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(1)\alpha(0)\beta(1) - \phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(0)\alpha(1)\beta(0))\alpha(2) \\ - \phi_d(0)(\phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(2)\alpha(1)\alpha(2) - \phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(1)\alpha(1)\alpha(2))\beta(0) \\ + \phi_d(1)(\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(2)\alpha(0)\alpha(2) - \phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(0)\alpha(0)\alpha(2))\beta(1) \\ - \phi_d(2)(\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(1)\alpha(0)\alpha(1) - \phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(0)\alpha(0)\alpha(1))\beta(2) \end{array} \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2} \sqrt{6}} \left[\begin{array}{l} \phi_d(0)\phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(2)(\alpha(0)\alpha(1)\beta(2) - \beta(0)\alpha(1)\alpha(2)) \\ + \phi_d(0)\phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(1)(\beta(0)\alpha(1)\alpha(2) - \alpha(0)\beta(1)\alpha(2)) \\ - \phi_d(1)\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(2)(\alpha(0)\alpha(1)\beta(2) - \alpha(0)\beta(1)\alpha(2)) \\ - \phi_d(1)\phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(0)(\alpha(0)\beta(1)\alpha(2) - \beta(0)\alpha(1)\alpha(2)) \\ + \phi_d(2)\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(1)(\alpha(0)\beta(1)\alpha(2) - \alpha(0)\alpha(1)\beta(2)) \\ + \phi_d(2)\phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(2)(\alpha(0)\alpha(1)\beta(2) - \beta(0)\alpha(1)\alpha(2)) \end{array} \right]$$

En développant l'expression de l'état D_0 de la même manière que l'état D_0'' et en les introduisant dans l'expression de M_0 , nous arrivons à la formule suivante :

$$M_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(f + h - 2g)$$

Où :

$$f = \langle \phi_d(0)\phi_{k_1}(1)\phi_{k_2}(2) | V | \phi_i(0)\phi_1(1)\phi_2(2) \rangle$$

$$g = \langle \phi_d(1)\phi_{k_1}(0)\phi_{k_2}(2) | V | \phi_i(0)\phi_1(1)\phi_2(2) \rangle$$

$$f = \langle \phi_d(1)\phi_{k_1}(2)\phi_{k_2}(0) | V | \phi_i(0)\phi_1(1)\phi_2(2) \rangle$$

De la même façon, pour le développement de M_0 , nous établirons les expressions de M_1 et M_2 :

$$M_1 = \sqrt{\frac{3}{2}}(f - h), \quad M_2 = 0$$

D'où l'expression finale de la section différentielle quintuplement différentielle de la double ionisation de l'hélium :

$$\sigma^{(5)} = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} |M_0 + M_1 + M_2|^2 = \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left[\frac{1}{2}(f + h - 2g)(f^* + h^* - 2g^*) + \frac{3}{2}(f - h)(f^* - h^*) \right]$$

Annexe B

ANNEXE B :

Le calcul explicite du terme f_R

Nous considérons une expression générale de Roy sous la forme suivante :

$$f_R(c, a, \lambda, \vec{u}, \vec{p}, \vec{v}, \vec{w}, \vec{k}, Z_1) = \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \frac{e^{-cr_0}}{r_0} \frac{e^{-ar_1}}{r_1} \frac{e^{-\lambda r_{01}}}{r_{01}} e^{i\vec{p}\vec{r}_0} e^{i\vec{u}\vec{r}_0} e^{i\vec{w}\vec{r}_1} e^{i\vec{v}\vec{r}_1} \frac{e^{-i\vec{k}_1\vec{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \\ \times {}_1F_1(i\alpha_1, 1, i(k_1 r_1 + \vec{k}_1 \vec{r}_1)) \times e^{\pi\alpha_1} \Gamma(1 - i\alpha_1)$$

où ${}_1F_1$ est une fonction hypergéométrique confluyente, Γ est la fonction Gamma et $\alpha_1 = \frac{Z_1}{k_1}$

est le paramètre de Semmerfeld. $\vec{u}, \vec{p}, \vec{v}$ et \vec{w} sont des vecteurs quelconques.

Nous utilisons la formule suivante pour ${}_1F_1$:

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

Donc l'expression de f_R devient :

$$f_R = \frac{\Gamma(1) \times e^{\pi\alpha_1} \Gamma(1 - i\alpha_1)}{(2\pi)^{3/2} \Gamma(1 - i\alpha_1) \Gamma(i\alpha_1)} \int_0^1 t^{i\alpha_1-1} (1-t)^{-i\alpha_1} e^{ik_1 r_1 t} e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1 t} dt \\ \times \int \frac{e^{-cr_0}}{r_0} \frac{e^{-ar_1}}{r_1} \frac{e^{-\lambda r_{01}}}{r_{01}} e^{i(\vec{p}+\vec{u})\vec{r}_0} e^{i(\vec{w}+\vec{v})\vec{r}_1} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1} d\vec{r}_0 d\vec{r}_1$$

Nous pouvons également utiliser la formule suivante :

$$\frac{e^{-\lambda r_{01}}}{r_{01}} = \frac{1}{2\pi} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 + \lambda^2} e^{i\vec{q}\vec{r}_0} e^{-i\vec{q}\vec{r}_1}$$

D'où :

$$f_R = \underbrace{\left[\frac{1}{2\pi} \frac{e^{\pi\alpha_1}}{(2\pi)^{3/2} \Gamma(i\alpha_1)} \right]}_A \int_0^1 dt \times t^{i\alpha_1-1} (1-t)^{-i\alpha_1} \int \frac{d\vec{q}}{q^2 + \lambda^2} \int d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 e^{i(\vec{q}-\vec{q}_0)\vec{r}_0} \frac{e^{-\mu_0 r_0}}{r_0} e^{-i(\vec{q}-\vec{q}_1)\vec{r}_1} \frac{e^{\mu_1 r_1}}{r_1}$$

Avec :

$$\begin{aligned}
\mu_0 &= c \\
\mu_1 &= a - ik_1 t \\
\vec{q}_0 &= -\vec{P} = -\vec{p} - \vec{u} \\
\vec{q}_1 &= \vec{k}_1(t-1) + \vec{W} = \vec{k}_1(t-1) + \vec{w} + \vec{v}
\end{aligned}$$

Puis, nous intégrons sur $d\vec{r}_0$ et $d\vec{r}_1$:

$$f_R = 16\pi^2 A \int_0^1 dt \times t^{i\alpha_1-1} (1-t)^{-i\alpha_1} \int \frac{d\vec{q}}{(q^2 + \lambda^2) \times ((\vec{q} - \vec{q}_1)^2 + \mu_1^2) \times ((\vec{q} - \vec{q}_0)^2 + \mu_0^2)}$$

La formule de Lewis donne :

$$\int \frac{d\vec{q}}{(q^2 + \lambda^2) \times ((\vec{q} - \vec{q}_1)^2 + \mu_1^2) \times ((\vec{q} - \vec{q}_0)^2 + \mu_0^2)} = 2\pi^2 \int_0^\infty \frac{dv}{\alpha v^2 + 2\beta v + \gamma}$$

où α , β et γ sont donnés par :

$$\begin{aligned}
\alpha \times \gamma &= [(\vec{q}_1 - \vec{q}_0)^2 + (\mu_1 + \mu_0)^2] \times [q_1^2 + (\lambda + \mu_1)^2] \times [q_0^2 + (\lambda + \mu_0)^2] \\
\beta &= \lambda [(\vec{q}_1 - \vec{q}_0)^2 + (\mu_1 + \mu_0)^2] + \mu_0 [q_1^2 + \mu_1^2 + \lambda^2] + \mu_1 [q_0^2 + \mu_0^2 + \lambda^2]
\end{aligned}$$

Et nous choisissons α et β tel que :

$$\begin{aligned}
\alpha &= [(\vec{q}_1 - \vec{q}_0)^2 + (\mu_1 + \mu_0)^2] \\
\gamma &= [q_1^2 + (\lambda + \mu_1)^2] \times [q_0^2 + (\lambda + \mu_0)^2]
\end{aligned}$$

Et nous posons : $\alpha v^2 + 2\beta v + \gamma = \sigma_0(v) - t\sigma_1(v)$

$\sigma_0(v)$ et $\sigma_1(v)$ peuvent s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
\sigma_0(v) &= A_0 v^2 + B_0 v + C_0 \\
\sigma_1(v) &= A_1 v^2 + B_1 v + C_1
\end{aligned}$$

Où :

$$\begin{aligned}
A_0 &= k_1^2 + (\vec{W} + \vec{P})^2 - 2.\vec{k}_1(\vec{W} + \vec{P}) + (c + a)^2 \\
B_0 &= 2.\lambda.A_0 + 2.c.[k_1^2 + W - 2.\vec{W}.\vec{k}_1 + a^2 + \lambda^2] + 2.a.[P^2 + c^2 + \lambda^2] \\
C_0 &= [P^2 + (\lambda + c)^2][k_1^2 + W^2 - 2.\vec{W}.\vec{k}_1 + (\lambda + a)^2] \\
A_1 &= 2.k_1^2 - 2.\vec{k}_1.(\vec{W} + \vec{P}) + 2.i.k_1.(c + a) \\
B_1 &= 2.\lambda.A_1 + 2.c.[2.k_1^2 - 2.\vec{W}.\vec{k}_1 + 2.i.a.k_1] + 2.i.k_1.[P^2 + c^2 + \lambda^2] \\
C_1 &= [P^2 + (\lambda + c)^2][2.k_1^2 - 2.\vec{W}.\vec{k}_1 + 2.i.k_1.(\lambda + a)]
\end{aligned}$$

Après une intégration sur la variable t , nous trouvons l'expression finale de f_R telle que :

$$f_R = 16 \pi^2 \frac{e^{\pi\alpha_1} \Gamma(1 - i\alpha_1)}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty \frac{dv}{\sigma_0(v)} \left[1 - \frac{\sigma_1(v)}{\sigma_0(v)} \right]^{-i\alpha_1}$$

Actuellement, nous sommes arrivés à pousser la dérivation de cette expression jusqu'à l'ordre six dans n'importe quelle direction et à l'ordre neuf dans trois directions différentes.



Annexe C

ANNEXE C :

Le calcul explicite du terme $\sigma_{000}^{t_A}$

Nous rappelons que le terme $\sigma_{000}^{t_A}$ s'écrit sous la forme suivante :

$$\sigma_{000}^{t_A} = \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_{2p0}(\vec{r}_1) \middle| \frac{1}{r_{12}} \middle| \phi_{3p0}(\vec{r}_1) \phi_{3p0}(\vec{r}_2) \right\rangle \quad (C-1)$$

Nous rappelons aussi les expressions des deux fonctions d'onde ϕ_{2p} et ϕ_{3p} :

$$\phi_{2p0}(\vec{r}) = B_{2p} r Y_1^0(\theta, \varphi) \varepsilon_{2p}^{3/2} e^{-\varepsilon_{2p} r} + \sum_{i=1}^7 B_{4pi} r^3 Y_1^0(\theta, \varphi) \varepsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\varepsilon_{4pi} r} \quad (C-2)$$

$$\phi_{3p0}(\vec{r}) = A_{2p} r Y_1^0(\theta, \varphi) \varepsilon_{2p}^{3/2} e^{-\varepsilon_{2p} r} + \sum_{i=1}^7 A_{4pi} r^3 Y_1^0(\theta, \varphi) \varepsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\varepsilon_{4pi} r} \quad (C-3)$$

Nous allons maintenant remplacer (C-2) et (C-3) dans (C-1), nous trouvons l'expression suivante :

$$\sigma_{000}^{t_A} = \left\langle \varphi_c(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \left[\underbrace{B_{2p} r_1 Y_1^0 \varepsilon_{2p}^{3/2} e^{-\varepsilon_{2p} r_1}}_{I_1} + \underbrace{\sum_{i=1}^7 B_{4pi} r_1^3 Y_1^0 \varepsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\varepsilon_{4pi} r_1}}_{I_2} \right] \middle| \frac{1}{r_{12}} \right. \\ \left. \left[\underbrace{A_{2p} r_1 Y_1^0 \varepsilon_{2p}^{3/2} e^{-\varepsilon_{2p} r_1}}_{I_3} + \underbrace{\sum_{i=1}^7 A_{4pi} r_1^3 Y_1^0 \varepsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\varepsilon_{4pi} r_1}}_{I_4} \right] \left[\underbrace{A_{2p} r_2 Y_1^0 \varepsilon_{2p}^{3/2} e^{-\varepsilon_{2p} r_2}}_{I_5} + \underbrace{\sum_{i=1}^7 A_{4pi} r_2^3 Y_1^0 \varepsilon_{4pi}^{7/2} e^{-\varepsilon_{4pi} r_2}}_{I_6} \right] \right\rangle$$

Nous développons cette expression et nous prenons le premier terme $I_1 \times I_3 \times I_5$:

$$I_1 \times I_3 \times I_5 = N_1' \eta_1 + N_2' \eta_2$$

où :

$$\eta_1 = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}_2}}{r_{12}} {}_1F_1(i\alpha_2, 1, (\vec{k}_2 \vec{r}_2 + k_2 r_2)) Y_1^0(2) r_1^2 r_2 e^{-2\varepsilon_{2p} r_1} e^{-\varepsilon_{2p} r_2}$$

$$\eta_2 = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}_2}}{r_{12}} {}_1F_1(i\alpha_2, 1, (\vec{k}_2 \vec{r}_2 + k_2 r_2)) Y_2^0(1) Y_1^0(2) r_1^2 r_2 e^{-2\varepsilon_{2p} r_1} e^{-\varepsilon_{2p} r_2}$$

$$N_1' = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{4\pi(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) A_{2p}^2 B_{2p}$$

$$N_2' = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{\sqrt{5\pi}(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) A_{2p}^2 B_{2p}$$

$$Y_1^{0*}(1) Y_1^0(1) = \frac{1}{4\pi} + \frac{1}{\sqrt{5\pi}} Y_2^0(1)$$

Le but est d'écrire $I_1 \times I_3 \times I_5$ sous forme des dérivées partielles du terme générale f_R calculé dans l'annexe B :

$$\begin{aligned} \eta_1 &= i\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\frac{\partial^3}{\partial^3 c} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R \\ \eta_2 &= -i\frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \left(\frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial}{\partial c} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \eta_1 \end{aligned} \quad \text{où : } \begin{cases} c = 2\varepsilon_{2p} \\ a = \varepsilon_{2p} \\ w_z = -k_{2z} = -r_2 \cos \theta_2 \\ p_z = r_1 \cos \theta_1 \end{cases}$$

Nous procédons de la même manière pour les autres termes du développement :

$$I_1 \times I_3 \times I_6 = N_2^1 \beta_1 + N_2^2 \beta_2$$

$$N_2^1 = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{4\pi(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) A_{2p} B_{2p}$$

$$N_2^2 = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{\sqrt{5\pi}(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) A_{2p} B_{2p}$$

$$\beta_1 = i\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left(\frac{\partial^3}{\partial c^3} \frac{\partial}{\partial w_z} \prod_{i=1}^7 \frac{\partial^3}{\partial a_i^3} \right) f_R$$

$$\beta_2 = -i\frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \left(\frac{\partial}{\partial c} \frac{\partial}{\partial w_z} \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \prod_{i=1}^7 \frac{\partial^3}{\partial a_i^3} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \beta_1$$

$$\text{où : } \begin{cases} c = 2\varepsilon_{2p} \\ a_i = \varepsilon_{4pi} \\ w_z = -k_{2z} \\ p_z = 0 \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}_1 \times \mathbf{I}_4 \times \mathbf{I}_5 &= N_2^1 \gamma_1 + N_2^2 \gamma_2 \\
\gamma_1 &= i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \left(\frac{\partial^5}{\partial c_i^5} \frac{\partial}{\partial w_z} \frac{\partial}{\partial a} \right) f_R \\
\gamma_2 &= -i \frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \left(\frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial}{\partial w_z} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial^3}{\partial c_i^3} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \gamma_1
\end{aligned}
\quad \text{où : } \begin{cases} c_i = \varepsilon_{4pi} + \varepsilon_{2p} \\ a = \varepsilon_{2p} \\ w_z = -k_{2z} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}_1 \times \mathbf{I}_4 \times \mathbf{I}_6 &= N_3^1 \kappa_1 + N_3^2 \kappa_2 \\
N_3^1 &= \frac{e^{\pi\alpha_2}}{4\pi(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) B_{2p} \\
N_3^2 &= \frac{e^{\pi\alpha_2}}{\sqrt{5\pi}(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) B_{2p} \\
\kappa_1 &= i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 A_{4pj} \left(\frac{\partial^5}{\partial c_i^5} \frac{\partial^3}{\partial a_j^3} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R \\
\kappa_2 &= -i \frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 A_{4pj} \left(\frac{\partial^3}{\partial c_i^3} \frac{\partial^3}{\partial a_j^3} \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \kappa_1
\end{aligned}
\quad \begin{cases} c_i = \varepsilon_{4pi} + \varepsilon_{2p} \\ a_j = \varepsilon_{4pj} \\ w_z = -k_{2z} \end{cases}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{I}_2 \times \mathbf{I}_3 \times \mathbf{I}_5 &= N_3^1 \lambda_1 + N_3^2 \lambda_2 \\
N_3^1 &= \frac{e^{\pi\alpha_2}}{4\pi(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) A_{2p}^2 \\
N_3^2 &= \frac{e^{\pi\alpha_2}}{\sqrt{5\pi}(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1-i\alpha_2) A_{2p}^2 \\
\lambda_1 &= i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{i=1}^7 B_{4pi} \left(\frac{\partial^5}{\partial c_i^5} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R \\
\lambda_2 &= -i \frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \sum_{i=1}^7 B_{4pi} \left(\frac{\partial^3}{\partial c_i^3} \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \lambda_1
\end{aligned}
\quad \begin{cases} c_i = \varepsilon_{4pi} + \varepsilon_{2p} \\ a = \varepsilon_{2p} \\ w_z = -k_{2z} \end{cases}$$

$$I_2 \times I_3 \times I_6 = N_4^1 \rho_1 + N_4^2 \rho_2$$

$$N_4^1 = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{4\pi(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1 - i\alpha_2) A_{2p}$$

$$N_4^2 = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{\sqrt{5\pi}(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1 - i\alpha_2) A_{2p}$$

$$\rho_1 = i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 B_{4pj} \left(\frac{\partial^5}{\partial c_i^5} \frac{\partial^3}{\partial a_j^3} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R$$

$$\rho_2 = -i \frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 B_{4pj} \left(\frac{\partial^3}{\partial c_i^3} \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial^3}{\partial a_j^3} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \rho_1$$

$$\begin{cases} c_i = \varepsilon_{4pi} + \varepsilon_{2p} \\ a_j = \varepsilon_{4pj} \\ w_z = -k_{2z} \end{cases}$$

$$I_2 \times I_4 \times I_5 = N_4^1 \vartheta_1 + N_4^2 \vartheta_2$$

$$\vartheta_1 = i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 B_{4pj} \left(\frac{\partial^7}{\partial c_{ij}^7} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R$$

$$\vartheta_2 = -i \frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 B_{4pj} \left(\frac{\partial^5}{\partial c_{ij}^5} \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \vartheta_1$$

$$\begin{cases} c_{ij} = \varepsilon_{4pi} + \varepsilon_{4pj} \\ a = \varepsilon_{2p} \\ w_z = -k_{2z} \end{cases}$$

$$I_2 \times I_4 \times I_6 = N_5^1 \xi_1 + N_5^2 \xi_2$$

$$N_5^1 = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{4\pi(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1 - i\alpha_2)$$

$$N_5^2 = \frac{e^{\pi\alpha_2}}{\sqrt{5\pi}(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1 - i\alpha_2)$$

$$\xi_1 = i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 B_{4pj} \sum_{k=1}^7 B_{4pk} \left(\frac{\partial^7}{\partial c_{ij}^7} \frac{\partial^3}{\partial a_k^3} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R$$

$$\xi_2 = -i \frac{8\pi}{3\sqrt{15}} \sum_{i=1}^7 A_{4pi} \sum_{j=1}^7 B_{4pj} \sum_{k=1}^7 B_{4pk} \left(\frac{\partial^5}{\partial c_{ij}^5} \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \frac{\partial^3}{\partial a_k^3} \frac{\partial}{\partial w_z} \right) f_R - \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \xi_1$$

$$\begin{cases} c_{ij} = \varepsilon_{4pi} + \varepsilon_{4pj} \\ a_k = \varepsilon_{4pk} \end{cases}$$

Annexe D

ANNEXE D

Calcul différentiel en utilisant TAPENADE

Afin de calculer l'expression (III- 24), nous avons essayé un logiciel sur Internet pour la différentiation automatique qui se fait d'une façon analytique. Ce logiciel s'appelle TAPENADE.

Nous pouvons dire que la méthode la plus utilisée pour dériver est la dérivation numérique en utilisant une formule telle que :

$$f'(X) = \frac{f(X+h) - f(X)}{h}$$

h est un réel infiniment petit et f une fonction quelconque.

Cette technique reste valable et surtout fiable jusqu'à l'ordre 4 de dérivation, au delà, nous remarquons des divergences avec la dérivée analytique.

Le logiciel TAPENADE consiste à donner des dérivés analytiques d'une fonction P en différentiant toutes les variables de cette fonction. Précisément, lorsque le programme original prend une valeur v , le programme différentiel prend une valeur additionnelle dv , qui est le différentiel de v . D'ailleurs, lorsque le programme original effectue certaines opérations, le programme différentiel effectue des opérations additionnelles incluant les valeurs différentiées.

Par exemple, si le programme original exécute l'instruction suivante aux variables a , b et c :

$$a = bc + c$$

Le programme différentiel doit exécuter des opérations additionnelles aux variables a , b et c et à leur différentiel da , db et dc tel que :

$$da = db * c + b * dc + dc$$

Donc, les dérivées sont calculées analytiquement en utilisant les formules de dérivation des opérations élémentaires.

Ce logiciel est très pratique quand nous voulons dériver une fonction à plusieurs variables seulement par rapport à une seule variable, dans ce cas, nous pouvons calculer des dérivées jusqu'à un ordre infini.

En revanche, si nous voulons dériver cette fonction par rapport à plusieurs variables, l'exploitation des résultats demeure très délicate à cause des notations utilisées par le logiciel, ce qui limite son utilisation à des dérivées juste dans une seule ou au maximum dans deux directions.

| <u>Programme original</u> | <u>Programme différentiel</u> |
|---|--|
| <pre> SUBROUTINE P(f, a, b, c) IMPLICIT NONE REAL*8 a, b, c, f f = a + b*c + c END </pre> | <pre> SUBROUTINE P_D(f, fd, a, ad, b, bd, c, cd) IMPLICIT NONE REAL*8 a, ad, b, bd, c, cd, f, fd fd = ad + bd*c + b*cd + cd f = a + b*c + c END </pre> |

Les quantités : ad, bd, cd et fd sont les différentielles des variables a, b, c et f respectivement.

Si nous voulons dériver une deuxième fois par rapport à n'importe quelle variable, il suffit de prendre le programme P_D comme programme original et le dériver dans la direction souhaitée.

Pour plus d'informations, consultez : <http://www-sop.inria.fr/tropics/>