



Double ionisation des gaz rares par impact électronique

Hassane Hda

► To cite this version:

Hassane Hda. Double ionisation des gaz rares par impact électronique. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1994. Français. NNT : 1994METZ011S . tel-01776053

HAL Id: tel-01776053

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01776053>

Submitted on 24 Apr 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 DE METZ

THESE
présentée
pour obtenir
le titre de docteur ès sciences physiques
par

HASSANE HDA

Sujet: **DOUBLE IONISATION DES GAZ RARES PAR
IMPACT ELECTRONIQUE**

Soutenue le 15 Mars 1994 devant la commission d'examen

C.LE SECH
J.LANGLOIS
B.STEBE
J.HANSEN
C.DAL CAPPELLO

(Rapporteur)
(Rapporteur)

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	1994 033 S
Cote	S/M ₃ 94/11
Loc	Magasin

VB79379

D₂

Remerciements

Le présent travail a été effectué au laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions de l'Université de Metz dont je remercie le directeur CLAUDE TAVARD de m'y avoir accueilli et d'avoir fait part de ses remarques constructives sur mon travail.

Je remercie vivement CLAUDE DAL CAPPELLO qui m'a accueilli au sein de son équipe et qui a bien voulu diriger ce travail, en mettant à ma disposition les moyens pour le mener à bien. Je lui exprime ma profonde reconnaissance pour les encouragements, les orientations, le suivi, la confiance et l'aide qu'il n'a cessé de m'accorder tout au long de cette étude.

Mes remerciements vont également à CLAUDE LE SECH Professeur à l'Université de Paris-Sud et JACQUES LANGLOIS Professeur à l'Université de Brest qui ont bien voulu accepter d'être les rapporteurs.

Je remercie également BERNARD STEBE et JOCELYN HANSEN Professeurs à l'Université de Metz d'avoir bien voulu accepter de faire partie du jury de cette thèse.

J'ai souvent profité, aussi, des précieuses suggestions de BOGHOS JOULAKIAN ce dont je lui suis particulièrement reconnaissant.

Je ne pourrai non plus oublier mes collègues du laboratoire et notamment H. HAFID, B. NEJJARI, M. ROETH et P. LAMY, je leur exprime ma

sincère et amicale gratitude pour l'atmosphère de sympathie à laquelle ils ont participé.

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

PLAN

CHAPITRES

Pages

<u>INTRODUCTION</u>	1
----------------------------------	---

<u>A - GENERALITES</u>	3
-------------------------------------	---

.....1 - Les corrélations électroniques.....	5
.....2 - Eléments théoriques.....	7
.....3 - Section efficace.....	11
.....4 - Approximation de Born.....	14
.....5 - Force d'oscillateur généralisée.....	17
.....6 - Les mécanismes réactionnels de la double ionisation.....	20
..... Références.....	27

B - DETERMINATION DE LA SECTION EFFICACE DIFFERENTIELLE DE DOUBLE IONISATION

.....1 - Section efficace quintuplement différentielle.....	29
.....2 - Modèles OPW, CW et OCW.....	32
.....3 - Modèle BBK.....	39
.....4 - Description de l'état initial (np^6).....	46
.....5 - Calcul de l'élément de matrice.....	51
.....Références.....	56

C - RESULTATS

.....1 - Historique.....	58
.....2 - Etude de l'importance de la corrélation dans l'état final.....	59
.....3 - Interprétation des expériences (e,3e).....	67
.....a - Cas du krypton ($E_1 + E_2 = 30 \text{ eV}$).....	67
.....b - Cas du krypton ($E_1 + E_2 = 90 \text{ eV}$).....	72
.....c - Cas du krypton ($E_1 + E_2 = 120 \text{ eV}$).....	81
.....d - Cas de l'argon ($E_1 + E_2 = 30 \text{ eV}$).....	81
.....e - Cas du néon.....	89
.....f - Etude en fonction de l'angle de diffusion.....	89
.....4 - Obtention des meilleures conditions expérimentales.....	97
D - <u>CONCLUSION</u>.....	116
..... - Références.....	117

E - ANNEXES

.....1 - Annexe A.....	118
.....2 - Annexe B.....	121
.....3 - Annexe C.....	127

INTRODUCTION

La double ionisation des atomes par impact électronique a connu un très grand intérêt ces dernières années. Les premières expériences (e,3e) réalisées en 1989 par Lahmam-Bennani et col.^[1] ont montré que l'on dispose maintenant d'un outil performant qui permet de mettre en évidence la corrélation électronique et de connaître les détails du mécanisme de double ionisation. Ces expériences (e,3e), réalisées sur l'argon puis sur le krypton^[2,3], consistent à détecter en coïncidence les deux électrons éjectés et l'électron diffusé. Ces événements de triple coïncidence sont évidemment très faibles et il est maintenant urgent de construire un modèle théorique afin de pouvoir guider les expérimentateurs dans leurs choix expérimentaux. Les premières études théoriques ont été réalisées par Byron et Joachain^[4] en 1967, Smirnov et col.^[5] et Neudatchin et col.^[6] en 1979. Mais ce sont les récents travaux de Dal Cappello et col.^[7,8] et Joulakian et col.^[9] qui ont montré pour la première fois l'importance d'une bonne description du double continuum.

La connaissance des effets de corrélations contenus dans la dynamique des électrons qui s'échappent de la cible après la collision constitue un défi permanent en physique atomique et moléculaire. L'étude de la double ionisation par impact électronique est très intéressante car l'éjection simultanée des deux électrons est interdite quand on applique le modèle des particules indépendantes et dépend donc fortement de la corrélation électron-électron. Dans ce travail, seule la double ionisation des gaz rares par impact électronique est envisagé, mais le développement théorique utilisé ici peut s'étendre à d'autres cas, en particulier à celui de la double photoionisation et à la double ionisation par impact d'ions chargés.

Expérimentalement la double ionisation est un phénomène moins probable que la simple ionisation. Le rapport $\frac{\sigma^{2+}}{\sigma^{+}}$ des sections efficaces de la double à la simple ionisation est autour de 0.5% pour l'atome de l'hélium quand l'énergie de la particule incidente est de 5 keV. Ce rapport augmente (par un facteur de 10) quand l'argon ou le krypton est utilisé comme cible au lieu de l'atome d'hélium^[10]. La première investigation expérimentale déterminait ce rapport^[10-12] en fonction de l'énergie incidente. La section efficace partiellement différentielle fut donc étudiée^[13,14].

Dans le type d'expérience réalisé par Lahmam-Bennani sur la mesure des sections efficaces différentielles de double ionisation de l'argon et du krypton, les trois électrons sont détectés en coïncidence en direction et en énergie (un électron diffusé et les deux électrons éjectés),

ou plus simplement deux électrons qui sont détectés en coïncidence; on parle d'expériences $(e,(3-1)e)$. Le type d'expérience $(e,3e)$ est le meilleur moyen pour étudier les processus de double ionisation. Malheureusement la faible énergie de résolution actuelle ne permet pas de distinguer les différents états de l'ion.

Plusieurs hypothèses ont été émises pour expliquer les mécanismes de la double ionisation. Le premier mécanisme est le Shake-off (S.O) considéré par Byron et Joachain^[4] (1967) et Tweed^[15] en 1973. L'électron incident interagit avec la cible et éjecte un électron, le second électron quitte la cible à cause de changement du potentiel effectif. Carlson et Krause^[16] ont proposé deux autres mécanismes dans le cas d'un impact électronique (ou photonique). Dans un premier cas la particule incidente interagit successivement avec les deux électrons de la cible et les éjecte un par un, c'est le mécanisme Two-step 2 (TS2). Dans un second cas la particule incidente éjecte un électron, qui à son tour entre en collision avec un deuxième électron de la cible et l'éjecte, c'est le mécanisme TS1. Ces deux mécanismes contribuent d'une façon appréciable pour des énergies incidentes inférieures à 1 keV^[17,18]. Lorsque le projectile est très rapide (5 keV), celui-ci est décrit par une onde plane, et les deux mécanismes TS1 et TS2 seront négligés.

Ce travail constitue un prolongement des travaux de Dal Cappello. Le modèle que nous avons construit inclue la corrélation dans l'état initial (les différents états de l'ion sont 3P , 1S , 1D) et la corrélation dans l'état final en utilisant le modèle de Brauner-Briggs-Klar approximé^[19,20] (B.B.K). Le point essentiel de ce travail est de confronter notre modèle basé sur le formalisme B.B.K à toutes les expériences $(e,3e)$ existant à ce jour (à l'exception des expériences très récentes où l'effet Auger est prédominant).

A - GENERALITES:

Cette partie constitue un rappel des notions élémentaires de théorie des collisions appliquée au problème étudié dans cette thèse: La double ionisation par impact électronique. Pour cela il nous faut envisager les aspects théoriques d'une collision à deux corps (un électron projecile et un atome cible).

Dans une description temporelle le processus du choc fait intervenir successivement une première phase où les deux corps sont isolés, puis une deuxième phase où s'établit une interaction à laquelle succède la phase finale.

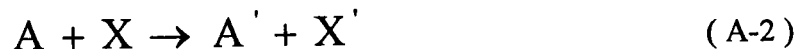
Supposons donc que deux particules complexes ou non, A et X entrent en collision. En général trois sortes d'effets peuvent être observés

a - Les particules sont simplement déviées sans changement de leur état quantique interne respectif



C'est la diffusion élastique.

b- Elles sont déviées avec modification de leur état quantique interne (ce changement peut être un simple renversement de spin ou une ionisation dans notre cas); elles émergent par exemple dans les états A' et X' respectivement



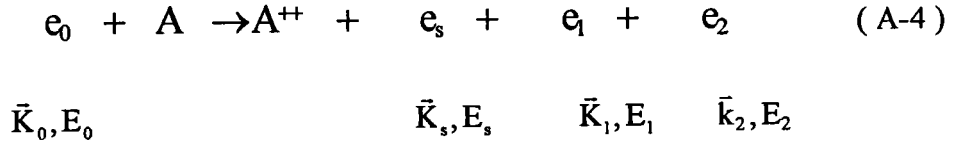
C'est la diffusion inélastique.

c - les particules A et X échangent au cours de la collision un certain nombre de particules élémentaires qui les composent ou, plus généralement le système (A+X) se scinde en deux particules différentes ou plus:



C'est une collision de réarrangement.

Le processus collision qu'on se propose d'étudier est un processus d'ionisation directe par impact électronique de couches externes de cibles atomiques ou moléculaires considérées comme immobiles. Ce processus est représenté symboliquement par l'équation suivante:



E_0, E_s, E_1, E_2 sont respectivement les énergies cinétiques de l'électron incident, diffusé et éjectés.

Les quantités de mouvements de l'électron incident, diffusé et éjectés sont notées respectivement $\bar{K}_0, \bar{K}_s, \bar{K}_1$ et \bar{K}_2

La conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement nous donnent les deux relations suivantes:

$$E_0 = E_s + E_1 + E_2 + E_i^{++} \quad (A-5)$$

$$\bar{k}_0 = \bar{K}_s + \bar{K}_1 + \bar{K}_2 + \bar{q} \quad (A-6)$$

Où E_i^{++} est l'énergie de la double ionisation et \bar{q} est la quantité de mouvement de recul de l'ion résiduel. Ces processus de collision sont également caractérisés par le transfert d'impulsion (ou de quantité de mouvement):

$$\bar{K} = \bar{K}_0 - \bar{K}_s \quad (A-7)$$

Bien que le but de ce travail soit l'étude de la double ionisation il est intéressant d'évoquer rapidement les collisions de type (e,2e). Ces collisions sont en fait des collisions de simple ionisation où l'électron diffusé et l'électron éjectés sont détectés en coïncidence. Les premières expériences (e,2e) ont été réalisées dès 1969, simultanément et indépendamment par Amaldi et col.^[21], et, Ehrhardt et col.^[22]. Les premiers auteurs utilisent pour cible un film de carbone et mirent en évidence la possibilité de déterminer la densité d'impulsion

électronique $p(p)$ de la cible. Ehrhardt et ses collaborateurs réalisèrent ces expériences sur une cible d'hélium et observèrent une structure en double lobe dans la répartition spatiale des électrons éjectés. Depuis^[23,24], ces expériences (e,2e) ont été développées par de nombreux groupes et étendues à une grande variété de cibles atomiques et moléculaires.

Ce travail constitue en quelque sorte une suite aux collisions (e,2e) puisqu'il se réfère aux expériences (e,3e): l'électron diffusé et les deux électrons éjectés sont détectés en coïncidence.

Sur le plan théorique, la description du processus de collisions par impact électronique dépend en général des énergies mises en jeu durant la collision, mais aussi de la grandeur du transfert d'impulsion \vec{K} à la cible. La difficulté de résoudre qu'approximativement l'équation de Schrödinger d'un système à N corps, conduit à des solutions approchées basées sur des approximations physiques. C'est le cas du processus qui nous intéresse particulièrement ici: celui de la double ionisation directe par impact électronique qui exige un traitement théorique spécifique.

L'étude théorique de l'ionisation d'un atome ou d'une molécule n'est qu'un cas particulier du problème général de l'évaluation de la section efficace de transition d'un état initial à un état final d'un système sous l'action d'une perturbation.

Dans le cas de l'ionisation il s'agit de la transition d'un ou plusieurs électrons de leur état initial, défini par son énergie et éventuellement un ensemble de nombres quantiques, à un état final du continuum également défini par son énergie. Le transfert d'énergie s'opérant pendant l'interaction correspond à la perte d'énergie subie par l'électron incident au cours du choc.

1 - Les corrélations électroniques:

Les corrélations inter-électroniques vont jouer un rôle très important dans les processus de double ionisation et pour cette raison il est nécessaire de les définir de manière précise.

Le type de corrélation qui intervient de la manière la plus fondamentale dans les collisions qui nous intéressent est celle qui existe entre les électrons de l'atome cible. C'est ce qu'on peut appeler la corrélation structurelle. Il s'agit des interactions coulombiennes entre les électrons de l'atome, exprimées par des potentiels de la forme $\frac{1}{r_{ij}}$, qui rendent impossible la

détermination exacte de l'équation de Schrödinger pour tout atome possédant au moins deux électrons. La structure de ces atomes ne peut donc être décrite que par des approximations, et l'étude de la corrélation structurelle consiste à produire des solutions approchées qui prennent en compte ces termes $\frac{1}{r_{ij}}$.

Une fonction d'onde effectivement non corrélée se limiterait dans le cas de l'hélium à un produit de deux fonctions radiales 1s et de la fonction de spin. On peut ainsi définir l'énergie de corrélation (structurelle) comme étant la différence entre l'énergie de l'état fondamental d'un atome (ou d'une molécule) calculée avec une fonction d'onde dite "corrélée" et l'énergie calculée avec une fonction de type Hartree-Fock. Ce critère de l'énergie de corrélation ne juge évidemment que très partiellement de la qualité globale d'une fonction d'onde. Les expériences (e, 2e) ont montré que deux fonctions d'ondes de même qualité au regard de ce critère donnaient des sections efficaces différentielles très différentes. Les expériences (e,3e) devraient accroître de façon considérable la sensibilité à la qualité de la fonction d'onde utilisée.

Le deuxième aspect sous lequel interviennent des corrélations inter-électroniques est directement lié à la collision proprement dite et concerne les interactions entre les électrons libres d'une part, et ces électrons et le centre atomique d'autre part. Avant la collision, il s'agit des interactions entre l'électron incident et l'atome, les effets en étant une polarisation de celui-ci et une distorsion de l'état de l'électron incident qui n'est plus une onde plane. A haute énergie ces effets sont cependant négligeables, beaucoup plus importantes sont les conséquences des interactions après la collision, la répulsion coulombienne des électrons émergeant de l'atome et de l'action de l'ion résiduel sur ces électrons. La première sera surtout présente dans la double ionisation. En effet lors d'une ionisation produite par un électron incident rapide, on retrouve également après la collision un électron rapide que l'on peut designer comme l'électron incident ayant été diffusé, les termes d'échanges avec les électrons lents étant très faibles, par conséquent ce n'est que dans la double ionisation que l'effet de la répulsion coulombienne entre les deux électrons éjectés lents sera important. La répulsion entre l'électron rapide diffusé et les électrons lents est négligeable. L'action de l'ion résiduel sur ces électrons est également plus importante dans les processus de double ionisation que dans les processus de simple ionisation, la charge de l'ion étant doublée.

On emploie souvent le terme de corrélations dans l'état initial (respectivement dans l'état final) pour designer la corrélation structurelle présenté avant la collision (respectivement après la collision). La description de l'état final tenant compte de cette corrélation s'avère

en fait avoir une influence très forte sur l'amplitude des sections efficaces calculées, surtout pour les sections efficaces différentielles en angle et en énergie.

2 - Eléments théoriques

Il s'agit d'une description théorique de la collision à haute énergie entre un électron incident et un atome cible. Trois phases sont donc à envisager:

a - Phase initiale:

On considère qu'on a deux sous-système isolés et chacun d'eux vérifie l'équation de Schrödinger séparément:

$$H_0\psi_0 = E_0\psi_0 \quad (2-1a)$$

$$H_1\psi_1 = E_1\psi_1 \quad (2-2a)$$

H_0 et H_1 sont les hamiltoniens, E_0 et E_1 sont les énergies et ψ_0 et ψ_1 sont les fonctions propres des deux sous-systèmes respectivement le projectile et l'atome cible.

$$\psi_0 = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} g_0 e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_0} \quad (2-3a)$$

$$\psi_1 = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} g_1 e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \quad (2-4a)$$

Le mouvement de chacun des deux sous-systèmes est caractérisé par l'onde plane normalisée. g_0 et g_1 représentent les fonctions qui décrivent l'aspect interne des deux sous-systèmes (spin, structure électronique etc....).

La fonction d'onde décrivant le système entier à l'état initial est le produit des deux fonctions d'ondes données par les équations (2-3a) et (2-4a):

$$\psi_i = \frac{1}{(2\pi)^3} g_0 g_i e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_0} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i} \quad (2-5a)$$

$$(H_0 + H_1)\Psi_i = K\Psi_i = (E_0 + E_1) = E_i \Psi_i \quad (2-6a)$$

L'état du système (électron + cible) est décrit à tout instant par la fonction d'onde $\Phi(t)$ obéissant à l'équation de Schrödinger dépendant du temps:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = K\Phi(t) \quad (2-7a)$$

La résolution de cette équation différentielle du premier ordre est relativement simple et conduit à:

$$\Phi(t) = e^{\left(\frac{-iKt}{\hbar}\right)} \Psi_i \quad (2-8a)$$

b - Phase d'interaction:

On a l'hamiltonien $K = H_1 + H_2$ et l'énergie potentielle d'interaction $H = K + V$. Pour trouver les fonctions d'ondes on doit résoudre l'équation suivante:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H\Psi(t) \quad (2-1b)$$

$$\Psi(t) = e^{\left[\frac{-i(t+t_0)H}{\hbar}\right]} \Psi(-t_0) \quad (2-2b)$$

à l'état $-t_0$ le système était caractérisé par $\Phi(-t_0)$ donc la fonction d'onde pendant la phase d'interaction s'écrit:

$$\Psi(t) = e^{\left[\frac{-i(t+t_0)H}{\hbar}\right]} e^{\left(\frac{iE_0 K}{\hbar}\right)} \Psi_i(t) \quad (2-3b)$$

qu'on peut écrire sous la forme:

$$\Psi(t) = e^{\left(\frac{-it}{\hbar}H\right)} U(0, -t_0) \Psi_i(t) \quad (2-4b)$$

U est l'opérateur évolution qui se traduit par l'expression suivante:

$$U(t, -t_0) = 1 - \int_{-t_0}^t dt' U(t, t') V(t') \quad (2-5b)$$

l'équation ci-dessus nous conduit à:

$$\Psi(t) = e^{\left(\frac{-it}{\hbar}H\right)} \Gamma^+ \quad (2-6b)$$

Où $\Gamma^+ = U(0, -t_0) \Psi_i = \Psi_i - \frac{i}{\hbar} \int_{-t_0}^0 dt' U(0, t') V(t') \Psi_i \quad (2-7b)$

$$\Gamma^+ = \Psi_i - \frac{i}{\hbar} \int_{-t_0}^0 dt' e^{\left(\frac{it'}{\hbar}H\right)} V(t') e^{\left(\frac{it'}{\hbar}K\right)} \Psi_i \quad (2-8b)$$

On peut faire tendre $-t_0$ vers $-\infty$ pour une portée finie de $V(t')$, ceci revient ^[25] à la définition de la solution $\Gamma^+(i\eta)$ généralisant la solution Γ^+ :

$$\Gamma^+(i\eta) = \Psi_i - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\left(\frac{it'}{\hbar}H\right)} V(t') e^{\left[\frac{it'}{\hbar}(K+i\eta)\right]} \Psi_i \quad (2-9b)$$

$$\Gamma^+(i\eta) = \Psi_i - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{\left[\frac{it'}{\hbar}(H-E_i-i\eta)\right]} V(t') \Psi_i \quad (2-10b)$$

finalement:

$$\Gamma^+(i\eta) = \Psi_i + (E_i - H + i\eta)^{-1} V \Psi_i \quad (2-11b)$$

$(E_i - H + i\eta)^{-1}$ représente la fonction de Green pour l'hamiltonien H , l'introduction de η étant physiquement équivalente à une représentation de comportement des paquets d'ondes associés au système.

C - Phase finale:

Dans cette phase et avec une étude similaire à celle réalisée précédemment on trouve une expression analogue à celle trouvée dans la phase initiale, il suffit de changer Ψ_i par Ψ_f .

$$\Phi(t) = e^{\left(\frac{-it}{\hbar}K\right)} \Psi_f \quad (2-1c)$$

On introduit les matrices S et T souvent appelées matrices d'Heisenberg et de diffusion et qui servent à coupler les états initiaux aux états finaux. Soit Ψ_i^+ une fonction d'onde indépendante de temps telle que:

$$\Psi_i^+ = \lim_{\eta \rightarrow 0} \Psi_i(i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left(1 + (E_i - H + i\eta)^{-1} V\right) \Psi_i \quad (2-2c)$$

En utilisant la formule de décomposition $\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A}$ la fonction de Green pour l'hamiltonien H devient:

$$\frac{1}{E - H + i\eta} = \frac{1}{E - K + i\eta} \left(1 + V \frac{1}{E - H + i\eta}\right) \quad (2-3c)$$

$$\text{D'où} \quad \Psi_i^+ = \Psi_i + (E_i - K + i\eta)^{-1} \left(V + V(E_i - H + i\eta)^{-1} V\right) \Psi_i \quad (2-4c)$$

$$\Psi_i^+ = \Psi_i + (E_i - K + i\eta) T \Psi_i \quad (2-5c)$$

Nous pouvons donner une définition formelle de T tel que:

$$T = V + V(E_i - H + i\eta)^{-1} V \quad (2-6c)$$

Dans cette définition de T , E_i joue le rôle d'un simple paramètre. En pratique T n'intervient le plus souvent que par des éléments de matrices entre ondes libres d'énergie E , et plus particulièrement entre ondes planes d'énergie E , notons que certaines propriétés de la matrice T découlent directement des propriétés caractéristiques de l'hamiltonien H qui gouverne la collision. On définit un autre opérateur S comme étant:

$$S \Psi_i = U(t, -t_0) \Psi_i \quad (2-7c)$$

$$S \Psi_i = e^{\left[\frac{i\hbar}{\hbar} (K - E_i) \right]} \Psi_i + \left[\sum_f \int \right] \frac{e^{i(E_f - E_i)}}{E_i - E_f + i\eta} \Psi_f \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \quad (2-8c)$$

L'opérateur S est appelé matrice de diffusion, ou simplement matrice S ; il a été introduit par Heisenberg. Cette matrice est caractéristique des collisions d'énergie E et ses éléments sont définis comme ceux de T entre états d'énergie E . Finalement:

$$\langle \Psi_f | S | \Psi_i \rangle = \delta(f, i) - 2\pi \delta(E_f - E_i) \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \quad (2-9c)$$

Ceci constitue la relation qui lie les matrices de transitions S et T , la fonction de dirac $\delta(E_f - E_i)$ assure la conservation de l'énergie.

3 - Section efficace

Contrairement à ce qui est connu dans la théorie de l'électron libre, l'ionisation est un processus inélastique, il n'existe pas de relation univoque entre l'énergie et l'angle d'éjection de l'électron ; il existe toutefois une corrélation entre ces deux quantités, en effet pour une valeur donnée de l'énergie d'éjection l'angle d'éjection peut prendre les valeurs entre 0^0 et 180^0 , mais chacune de ces valeurs est pondérée par une probabilité qui dépend de l'énergie d'éjection considérée.

Dans certains cas, il est possible d'associer à chaque valeur de l'énergie d'éjection une valeur de l'angle d'éjection la plus probable, qui peut être approximativement déduite des lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion. En fait, le processus de collision est caractérisé par la section efficace. La section efficace est le rapport du nombre de particules diffusées par unité de temps, d'angle solide aux flux de particules incidentes traversant l'unité de surface de la cible, c'est une grandeur homogène à une surface.

Pour définir sans ambiguïté une section efficace se rapportant à une collision, il est important de bien préciser les conditions initiales de la collision, c'est-à-dire les états quantiques et les vitesses des deux particules. Dans les conditions d'expérimentations, l'une des vitesses est nulle, celle de l'atome cible par exemple, ceci revient à bombarder une cible pratiquement au repos avec un faisceau d'électron, on peut relier les sections efficaces dans le système de laboratoire aux sections efficaces dans le système du centre de masse.

a - Section efficace totale

Compte tenu des relations précédentes la probabilité de trouver le système dans l'état Ψ_f est:

$$P_f(t) = \left| \langle \Psi_f | S | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-1a)$$

Cette quantité tend vers la constante P_f pour t très grand, et en utilisant la relation (2-9c) reliant S et T on aboutit à:

$$P_f = 4\pi^2 \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (3-2a)$$

Le flux de la particule incidente est définie comme étant égal à:

$$F = \int \frac{d\vec{r}}{(2\pi)^3} \int \frac{v dt}{(2\pi)^3} \quad (3-3a)$$

La section efficace totale relative à une transition s'écrit:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{fi}}{F} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v} \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-4a)$$

$v = \frac{\hbar k_o}{\mu}$ représente la vitesse de l'électron incident et μ la masse réduite du système, qui correspond approximativement à la masse de l'électron incident, la conservation de l'impulsion est automatiquement satisfaite lorsque la masse de noyau est très grande devant celle de l'électron. Il est important de noter que la section efficace de diffusion est définie pour une transition entre deux états non dégénérés notamment en orientation de la particule diffusé, on aura alors:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4 m}{\hbar^2 k_i} \int d\bar{k}_s \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-5a)$$

b - Section efficace différentielle:

Elle est associée à la probabilité de trouver des particules d'impulsions \bar{k}_s diffusées sous un angle solide $d\Omega_s$ et compte tenu de $d\bar{k}_s = k_s^2 dk_s d\Omega_s$, la section efficace différentielle par unité d'angle solide de la particule diffusée s'écrit:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4 m}{\hbar^2 k_o} \int k_s^2 dk_s \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-1b)$$

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_o} \int k_s^2 dk_s \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \delta\left(\frac{k_s^2}{2} - \frac{k_o^2}{2} + \epsilon_s - \epsilon_o\right) \quad (3-2b)$$

Ici ϵ_s, ϵ_o représentent respectivement l'énergie totale de la cible dans l'état initial et final, $\frac{k_s^2}{2}, \frac{k_o^2}{2}$ sont les énergies cinétiques de l'électron incident avant et après choc autrement dit de l'électron incident et de l'électron diffusé. Un autre résultat découle de la formule

précédente: la section efficace doublement différentielle en angle et en énergie de la particule diffusée qui est associée à la perte d'énergie.

$$\sigma_{i \rightarrow f}^2 = \frac{(2\pi)^4 m k_s}{\hbar^2 k_0} \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-3b)$$

On a vu précédemment que les états finaux sont dégénérés par rapport à l'orientation des directions de la particule diffusée, mais aussi dégénérés par rapport à l'orientation des directions de la particule éjectée, la section efficace doublement différentielle devient alors:

$$\sigma_{i \rightarrow f}^2 = \frac{(2\pi)^4 m k_s}{\hbar^2 k_i} \int \delta(E_f - E_i) d\vec{k}_i \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-4b)$$

A ce résultat correspond une section efficace triplement différentielle et quadruplement différentielle:

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_s d(\frac{k_s^2}{2}) d\Omega_i} = \frac{(2\pi)^4 m k_s}{\hbar^2 k_0} \int k_i^2 dk_i \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-5b)$$

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_s d(\frac{k_s^2}{2}) d\Omega_i d(\frac{k_i^2}{2})} = \frac{(2\pi)^4 m k_s k_i}{\hbar^2 k_0} \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (3-6b)$$

4 - Approximation de Born

Le calcul des sections efficaces différentielles de diffusion peut s'effectuer soit à partir de la définition de l'opérateur de transition T soit à partir du théorème optique, dans les deux cas ce calcul présente un certain nombre de difficultés que l'on évite par un traitement de type perturbation.

Dans l'approximation de Born l'électron incident d'une part et l'atome cible d'autre part sont traités comme deux sous-systèmes indépendants avant et après la collision. Cette séparation a été bien justifiée à haute énergie^[25,26] parce que l'interaction de l'électron incident et de l'électron cible est soudaine. De plus après la collision on trouve un électron rapide pratiquement insensible au potentiel produit par les autres partenaires de la collision. Pour les potentiels coulombiens cette approximation consiste finalement à considérer la vitesse de l'électron incident grande comparée à celles des électrons de la cible qui subissent le choc, ces derniers pouvant être considérés comme immobiles pendant l'intervalle de temps nécessaire à la traversée de la cible. La collision est donc considérée comme un problème stationnaire où chaque sous-système passe de l'un de ses états propres à un autre.

La présence de l'hamiltonien H rend difficile le calcul des éléments de matrice. La formulation de Born^[27] conduit à un développement de T qui contient évidemment V :

$$T = V + VG^0V + VG^0VG^0V + \dots \quad (4-1)$$

V est l'énergie potentielle d'interaction entre les deux sous-systèmes qui pourra être considérée comme une perturbation à haute énergie. G^0 étant l'opérateur de Green.

La première approximation de Born consiste à ne retenir que le premier terme de ce développement.

$$T = V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{r} - \sum_{\mu=1}^N \frac{1}{|r - r_{\mu}|} \right) \quad (4-2)$$

Z désigne le numéro atomique, r est la distance électron - noyau, $\vec{r} - \vec{r}_{\mu}$ étant la distance électron - électron.

Compte tenu de cette première approximation de Born la section efficace quadruplement différentielle s'écrit sous la forme:

$$\sigma^4 = 2\pi^4 \frac{k_f k_i}{k_0} \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (4-3)$$

Comme l'énergie d'impact E_i est très grande, l'électron incident et l'électron diffusé de haute énergie seront décrit par des ondes planes:

$$\Psi_i = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}_0 \vec{r}) \Phi_i(\text{cible}) \quad (4-4)$$

$$\Psi_f = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}_f \vec{r}) \Phi_f(\text{ion}, \vec{k}_1) \quad (4-5)$$

Φ_i (cible) et Φ_f (ion, \vec{k}_1) représentent les fonctions d'ondes antisymétriques décrivant l'état de la cible avant et après collision dans la région asymptotique, loin du potentiel V .
Si on utilise la transformation de Bethe^[28] (un calcul détaillé sera donné par la suite) la section efficace différentielle devient:

$$\sigma^4 = \frac{k_s k_1}{k_0 K^4} \delta(E_f - E_i) \left| \left\langle \Phi_f \left| Z - \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k}_f \vec{r}_j) \right| \Phi_i \right\rangle \right|^2 \quad (4-6)$$

Le calcul de cette expression ne pose pas de problème lorsque les expressions des fonctions d'ondes des états initial et final sont explicitement connues, les effets relativistes, qui se manifestent aux vitesses élevées des électrons seront négligés. Le terme $\frac{4}{K^4}$ est la section efficace de Rutherford rendant compte de la diffusion d'un électron par un électron libre et initialement au repos, la prise en compte d'échanges éventuels entre électron diffusé - électron éjecté pourrait consister en l'utilisation de la formule de Mott^[29] en place de celle de Rutherford. Les termes d'ordres supérieurs du développement de Born s'écrivent sans difficulté à partir de l'expression de T , si on prend le second terme par exemple:

$$T = VG_0 V \quad (4-7)$$

On voit bien que ce terme montre les effets successifs d'interactions potentielles V .

5 - Force d'oscillateur généralisée

Le concept de force d'oscillateur permet d'expliquer l'intensité des raies des spectres d'absorption d'un système atomique. Il caractérise les transitions dipolaires observables entre deux états i et f

$$f_{i \rightarrow f} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_f^0 - E_i^0) \left| \left\langle \Psi_f \left| \sum_{j=1}^N \vec{r}_j \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \quad (5-1)$$

cette quantité vérifie la relation de Reiche-Thomas-Kuhn^[30-32]

$$\left[\sum \int \right] f_{i \rightarrow f} = N \quad (5-2)$$

où la sommation est étendue à tous les états de spectre discret et continu. En physique atomique, il arrive souvent de remplacer les éléments de matrice de transition $\langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle$ décrivant la dynamique de la collision par un facteur légèrement différent qui est la force d'oscillateur généralisée introduite initialement par Bethe^[29]:

$$F_{i \rightarrow f} = \frac{2m}{\hbar^2 K^2} (E_f^0 - E_i^0) \left| \left\langle \Psi_f \left| \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k}\vec{r}_j) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \quad (5-3)$$

et qui vérifie la règle de somme de Bethe dont Bohr^[33] avait soupçonné l'existence dès 1913 en se basant sur des arguments classiques: dans une collision rapide invoquant un système à N particules, l'énergie absorbée par le système est la même que celle absorbée par N particules libres; Bohr a alors supposé que ceci devrait rester vrai comme moyenne statistique dans un système quantique et sa validité est liée à la première approximation de Born.

$$\left[\sum \int \right] F_{i \rightarrow f} = N \quad (5-4)$$

La règle de somme de Bethe est une généralisation de celle de Reiche - Thomas - Kuhn, qui correspond à la limite $K \rightarrow 0$. Elle est utilisée pour mettre sur une échelle absolue des spectres expérimentaux. Toutefois cette règle de somme de Bethe n'est valable que si:

- les effets d'échange électronique sont négligeables, mais des conditions expérimentales peuvent être choisies de manière à garder très petite la correction d'échange.
- La sommation en (6 - 3) est effectuée à transfert d'impulsion K constant.

Pour les transitions vers les états excités du continuum, la perte d'énergie n'est plus quantifiée, mais peut prendre continûment toutes les valeurs supérieures au premier seuil d'ionisation, il est plus commode de définir la densité de force généralisée par unité d'intervalle de perte d'énergie ΔE :

$$\frac{dF_{i \rightarrow f}}{d\Delta E} = \left[\sum \int \right] \frac{2m}{\hbar^2 K^2} (E_f^0 - E_i^0) \left| \left\langle \Psi_f \left| \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k}\vec{r}_j) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \Delta E) \quad (5-5)$$

la fonction de Dirac δ assure la conservation d'énergie. Dans le cadre de la première approximation de Born, il est important de noter que la section efficace doublement différentielle (4-4 b) est proportionnelle à $\frac{dF}{d\Delta E}$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s d(\frac{k_s^2}{2})} = \frac{(2\pi)^4 m k_s}{\hbar^2 k_0} \left[\sum \int \right] \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (5-6)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s d(\frac{k_s^2}{2})} = \left(\frac{2}{a_0} \right)^2 \frac{k_s \hbar^4}{k_0 K^2 2m^2 (E_f^0 - E_i^0)} \frac{dF}{d\Delta E} \quad (5-7)$$

$$E_i = E_i^0 + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

$$E_f = E_f^0 + \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m} \quad (5-8)$$

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_s^2}{2m}$$

$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ est le rayon de Bohr qui est égale à 1 (en unité atomique), la relation précédente (5-7) s'écrit donc:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega, d(\frac{k_s^2}{2})} = \frac{K^2}{2(E_f^0 - E_i^0)} \frac{k_s}{k_0} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \frac{dF}{d\Delta E} \quad (5-9)$$

$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R = \frac{4}{K^4}$ est la section efficace de Rutherford. La relation (5-9) ne tient compte ni des interactions d'échanges, dues à l'indiscernabilité entre l'électron incident et l'électron cible ni des effets relativistes, la formule relativiste donnant la section efficace de diffusion inélastique a été donné par Bethe^[34] pour des transferts d'impulsions $K \gg 1$.u.a, une analyse détaillée des effets relativistes sur l'interaction d'échange a été faite par Moller^[35]; Bonham et Tavard^[36] ont montré que dans le cas où les effets relativistes et d'échange restaient faibles, la force d'oscillateur généralisée pouvait s'écrire:

$$\frac{dF}{d\Delta E} = \frac{E}{K^2} \frac{k_0}{k} \frac{k_0}{k_s} \frac{(K^2 - E^2/4c^2)}{1 - E\sqrt{1-\beta^2}/2c^2} \frac{1}{F_{ex}^{Rel}} \frac{d\sigma}{d\Omega d\Delta E} \quad (5-10)$$

où F_{ex}^{Rel} représente la correction d'échange relativiste. Les forces d'oscillateurs généralisées possèdent certains propriétés intéressantes comme l'avaient montré certains auteurs ^[37,38,39].

$$S(\lambda, k) = \frac{2m}{\hbar^2} \left[\sum \int \right] \frac{(\Delta E)^{\lambda+1}}{k^2} \left| \left\langle \Psi_f \left| \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k}\vec{r}_j) \right| \Psi_i \right\rangle \right|^2 \delta(E - \Delta E) \quad (5-11)$$

Avec $E = E_f^0 - E_i^0$, ainsi $S(-1, K)$ est relié directement à la section efficace différentielle d'ordre 1.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s} = \frac{4k_s}{k_0 K^4} S(-1, K) \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (5-12)$$

6 - Mécanismes réactionnels

Le travail de Lahmam-Bennani et col^[40] était motivé par plusieurs questions concernant la dynamique de processus de la double ionisation:

- a - Comment l'énergie est répartie entre les deux électrons éjectés ?
- b - Quelle est la distribution angulaire des électrons éjectés ?
- c - Quel est le processus principal responsable de la double ionisation ?
- d - Comment varie la distribution angulaire et l'énergie avec le transfert impulsional ?

La modeste énergie de résolution actuelle ne permet pas de distinguer les différents états finaux de l'ion. Les résultats obtenus sur le krypton (par Duguet et col.^[3] (1991)) ne montrent aucune structure typée de la distribution angulaire des sections efficaces quintuplement différentielles. En particulier la direction du transfert d'impulsion \vec{K} ne constitue plus une direction préférentielle pour l'éjection d'un électron, contrairement à ce qui se passe pour une ionisation simple.

Plusieurs hypothèses sont proposées pour expliquer les mécanismes de la double ionisation. Dans les premiers calculs de Tweed^[15], Byron et Joachain^[4] l'électron ou photon projectile interagit avec et éjecte seulement un des électrons de l'atome cible, le second électron quitte l'atome à cause du changement de potentiel effectif. Ce processus de premier ordre est similaire au modèle " Shake-off "^[41] où les réarrangements de la cible intervenant après éjection du premier électron sont responsables de l'éjection de second électron. L'hamiltonien atomique se transforme en hamiltonien ionique, et l'état de l'électron n'est plus un état propre, mais une superposition cohérente d'état ionique et il y a donc une probabilité de transition non - nulle de l'électron vers chacun de ces états, y compris ceux du continuum. Ces probabilités se calculent toutes simplement à partir du recouvrement entre

la fonction d'onde de l'état initial de l'électron et celles des états de l'ion^[42-45]. Il s'agit clairement d'un processus à deux étapes, une ionisation primaire puis "shake-off " deux étapes indépendantes, sans interaction, ni de l'électron incident ni du premier électron éjecté avec le deuxième. Du point de vue énergétique cependant, l'énergie perdue par l'électron incident est nécessaire pour une seconde ionisation, doit être transmis d'une manière ou de l'autre à l'électron "shake-off", puisque l'état initial ϕ_2^i du second électron n'est pas orthogonal à l'état final ϕ_2^f de continuum $\langle \phi_2^f | \phi_2^i \rangle \neq 0$. L'amplitude de probabilité pour la double ionisation par shake-off est donnée^[4,46,47] par:

$$a_{so} = i \int \exp[i(E_f - E_i)t] \langle \phi_1^f | V | \phi_1^i \rangle \langle \phi_2^f | \phi_2^i \rangle dt \quad (6-1)$$

La section efficace σ^{ii} de la double ionisation est proportionnelle à la section efficace σ^i de la simple ionisation^[48].

$$R = \frac{\sigma^{ii}}{\sigma^i} = \left| \langle \phi_2^f | \phi_2^i \rangle \right|^2 \quad (6-2)$$

Ce rapport est indépendant de l'impulsion du projectile, cependant il a été montré^[4,48,49] que R est très sensible à la corrélation électron - électron contenue dans les deux fonctions d'ondes décrivant l'état initial et l'état final. Cette description a prouvé son efficacité à prédire l'intensité de la double ionisation pour les gaz rares, sous l'effet du rayonnement X, comme l'ont prouvé les travaux de Carlson^[16,44,50,51]. Ces travaux ont également montré aussi que pour l'hélium ou pour les couches externes des autres gaz rares, le shake-off ne pouvait guère rendre compte que d'environ 25% de l'ionisation double totale.

Un autre mécanisme a alors été proposé par Carlson et Krause^[16] dans le cas d'un impact électronique (ou impact photonique). Dans un premier cas la particule incidente éjecte un électron de l'atome cible, qui à son tour entre en collision avec et éjecte le deuxième électron [TS1]. Dans un deuxième cas la particule incidente interagit successivement avec les deux électrons de la cible en les éjectant un par un [TS2]. Ce sont ces deux mécanismes two-step qui contribuent de façon appréciable pour des énergies inférieures à 1 keV^[17,18].

Si la probabilité d'ioniser l'électron 1 (2) est $P_1(P_2)$, à ce moment la probabilité d'ioniser les électrons est le produit des deux probabilité $P_1 \times P_2$, et la probabilité pour la double ionisation dans le processus two-step est donné par^[4,46,47]:

$$a_{TS} = i \left\{ \int_0^\infty \exp[i(E_f - E_i)t] \langle \phi_2^f | v | \phi_2^i \rangle dt \right\} \left\{ i \int_0^\infty \exp[i(E_f - E_i)t] \langle \phi_1^f | v | \phi_1^i \rangle dt \right\} \quad (6-3)$$

L'amplitude des contributions de second ordre doit être ajoutée à l'amplitude de processus de premier ordre, le premier mécanisme [S.O] est de premier ordre, dans le potentiel de l'interaction entre le projectile et la cible. Le deuxième mécanisme [T.S] est de second ordre résultant des corrélations de courte portée dans l'état final [l'ion résiduel plus les deux électrons éjectés]. Une question qui se pose est: parmi ces deux mécanismes cités ci-dessus lequel est le plus important ? Mc Guire a estimé l'importance de chaque contribution dans le cas du calcul des sections efficaces de double ionisation de l'atome d'hélium. Notons bien qu'il est nécessaire d'être prudent pour appliquer sa conclusion aux sections efficaces multiplement différentielles à cause de la possibilité d'effets d'interférences. On peut avoir une idée de l'évolution des différents mécanismes en fonction de l'énergie de la particule incidente et donc estimer quelle devrait être la cause prépondérante de la double ionisation aux hautes énergies. Les sections efficaces de la double collision doivent décroître très vite avec l'énergie incidente^[52]. La section efficace calculée pour le mécanisme shake-off doit se comporter comme une section efficace de simple ionisation multipliée par un terme essentiellement indépendant de l'énergie^[48]; elle doit décroître également aussi avec l'énergie, mais de façon beaucoup moins rapide que la section efficace calculée pour les mécanismes two-step. Ceci a été expliqué par Mc Guire^[17] qui a proposé une description des sections efficaces totales de la double ionisation de l'hélium à partir de ces deux mécanismes (fig. 6-1), réussissant à reproduire plus au moins les grandes tendances des données en fonction de l'énergie de l'électron incident. Dans nos calculs le projectile est très rapide (5 keV) et dans ce cas le mécanisme shake-off semble dominant et doit l'emporter sur le two-step (qui reste malgré tout prépondérant d'après Carlson^[53] à basse énergie).

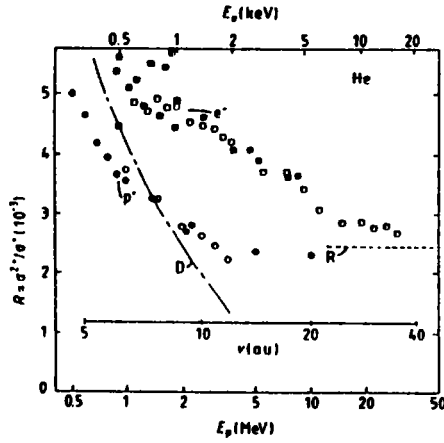


Fig. 6-1 Rapport des sections efficaces de la double ionisation à la simple ionisation en fonction de la vitesse des particules incidentes (protons et électrons)

Lahmam-Bennani et col.^[54] ont donné également une description qualitative des mécanismes réactionnels des collisions (e,(3-1)e) où l'électron diffusé n'est pas détecté, on ne connaît ni l'énergie, ni la quantité de mouvement cédées à l'atome cible. On se place dans le cas où les deux électrons éjectés sont rapides $E_{b,c} = 75\text{eV}$ et $E_{c,b} = 155\text{eV}$ (figures 6-2a; 6-2b). La direction de l'électron incident est au long de l'axe vertical, θ_c indique la direction fixe de l'électron c, l'électron b est détecté à des angles variables.

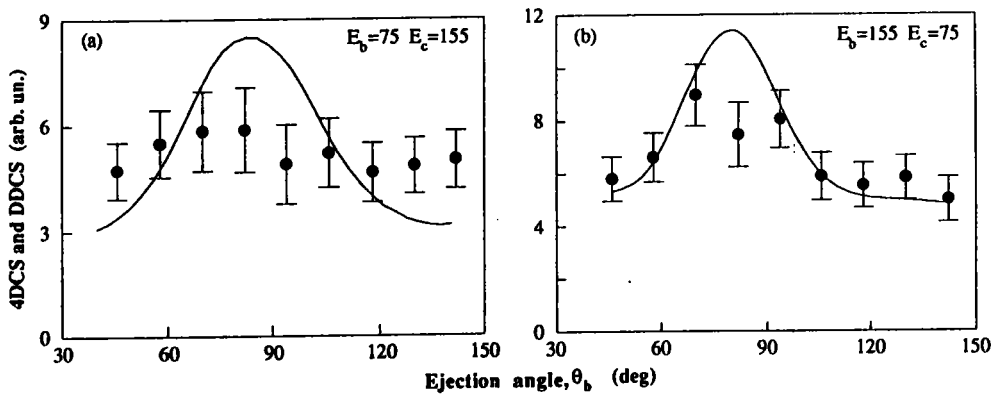


Figure 6-2 section efficace quadruplement différentielle (cercles fermés) et doublement différentielle (trait continu) (en u.a) de l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_b du deuxième électron . Les énergies des deux électrons éjectés sont (a) $E_b = 75\text{ eV}$ et $E_c = 155\text{ eV}$; (b) $E_b = 155\text{ eV}$ et $E_c = 75\text{ eV}$. Ici $\theta_c = 255^\circ$.

Si on raisonne en terme de shake-off, l'un des électrons est ionisé primordialement avec toute l'énergie, tandis que le second électron est émis en une seconde étape avec une faible énergie les figures 6-(3a), (3b) présentent un lobe binaire mais pas de lobe de recul à cause de la rapidité de l'électron incident et de l'électron éjecté. On a deux cas, selon que l'électron diffusé (a) est émis à droite (a_R) ou à gauche (a_L) de la direction de l'électron incident \vec{k}_0 . La première ionisation est similaire à une simple ionisation résultant d'un électron diffusé très rapide qui n'est pas détecté et d'un électron éjecté de 155 eV. La seconde ionisation due à la relaxation de l'atome montre une distribution angulaire isotropique de l'électron éjecté à 75 eV. Donc quand l'électron diffusé n'est pas détecté, les deux diagrammes 6-(3a), (3b) sont à considérer. Si l'électron de 75 eV est détecté à θ_c fixe, la distribution angulaire de la section efficace quadruplement différentielle de l'électron de 155 eV est donnée par la figure 6-(3b) avec un pic à $\sim 80^\circ$. Alternativement si l'électron de 155 eV est détecté à θ_c fixe, la distribution angulaire de la section efficace quadruplement différentielle est isotropique (figure 6-(3a)). Les deux cas qu'on vient de citer correspondent à la figure 6-2.

La similitude entre la distribution de la section efficace doublement et quadruplement différentielle donnée par la figure 6-(2b), soutient fortement l'argument que l'électron de 155 eV est éjecté dans un processus de simple ionisation, ce qui n'est pas le cas de l'électron 75 eV (fig. 6-(2a)). Donc on peut conclure que le mécanisme S.O est le responsable de l'observation faite sur les figures 6-(2a, 2b).

Il découle de cette conclusion qu'il faudrait répéter les mesures données en figure 6-2 pour différentes valeurs de θ_c . La section efficace serait le produit des sections efficaces de la simple ionisation. La distribution angulaire donnée par la figure 6-2 liée à la figure 6-3(b) doit être indépendante de θ_c pour l'électron de 75 eV à cause de l'isotropie de l'électron S.O.

Dans le mécanisme TS2 (figures 6-3(c)-(f)); le résultat de la première ionisation ($e, 2e$) dans le domaine des énergies intermédiaires et élevées est un électron diffusé (a_i), un électron éjecté de 155 eV (fig. 6-3(c) et 3(d)) ou de 75 eV (fig. 6-3(e) et 3(f)). L'électron a_i est diffusé soit à gauche de la direction \vec{k}_0 (fig. 6-3(c), 3(e)) soit à droite (fig. 6-3(d) et 3(f)). Dans le second processus ($e, 2e$) l'électron a_i joue le rôle de l'électron incident qui va être diffusé soit à gauche soit à droite de la direction de a_i (a_L ou a_R) en causant l'émission de l'électron de 75 eV (fig. 6-3(c), 3(d)) ou de 155 eV (fig. 6-3(e), 3(f)). Pour les mêmes raisons l'électron issu du second processus apparaît tout simplement en un faible lobe binaire étiqueté L (ou R) relative à a_L (ou a_R).

Quand l'électron (a) n'est pas détecté, les quatre diagrammes auront lieu simultanément. Cependant, lorsque l'électron de 155 eV est détecté à une valeur de θ_c fixé, les diagrammes 6-3(d) et 3(e) ne peuvent pas correspondre à la figure 6-2(a). Ceci parce qu'il n'y a pas

d'électron de 155 eV dans la direction de θ_c en 6-3(d) et pas d'électron de 75 eV dans la direction opposée en 6-3(e). De même les diagrammes 6-3(c) et 3(f) ne peuvent pas correspondre à 6-2(b).

Finalement, si l'électron de 155 eV ou de 75 eV est détecté à θ_c fixé, la distribution de l'autre électron présente un pic à $\sim 80^\circ - 90^\circ$. Ce cas correspond à la figure 6-2(b) mais contredit la mesure de la distribution donnée en figure 6-2(a). On conclut que le mécanisme TS2 est à exclure ici.

Dans le mécanisme TS1, la première ionisation ($e, 2e$) produit un électron diffusé très rapide (a_L ou a_R , figures 6-3(g) et 3(h)) et un électron intermédiaire (b_i) éjecté avec une énergie $E_{b_i} = 155 + 75 + E^{2+} - E^+ = 257$ eV, qui apparaît en un lobe binaire faible. Cet électron (b_i) joue le rôle d'un électron incident pour le second processus d'ionisation ($e, 2e$) qui va être diffusé à droite ou à gauche de la direction de (b_i) avec une énergie 155 eV ($155L$ ou $155R$), causant l'éjection de l'électron de 75 eV. Par conséquent on doit s'attendre à des distributions larges des électrons (a) et (b_i), et surtout les deux électrons dans l'état final doivent être éjectés dans le même demi-plan. En effet, le diagramme 6-3(g) peut correspondre à la distribution de la figure 6-2(a) mais avec une faible probabilité, mais il ne peut pas correspondre à la figure 6-2(b) puisque l'électron de 75 eV n'est pas éjecté dans le demi-plan d'observation. De même le diagramme 6-3(h) ne peut correspondre à la distribution 6-2(a) car l'électron de 155 eV n'est pas émis dans la direction d'observation, mais peut contribuer à la figure 6-2(b) avec une faible probabilité.

On conclue que les conditions cinématiques choisies par Lahmam-Bennani excluent le mécanisme TS1. Ceci ne veut pas dire que ce mécanisme est à exclure définitivement, mais le choix de la détection des deux électrons dans demi-plans opposés sélectionne peut être les différents mécanismes.

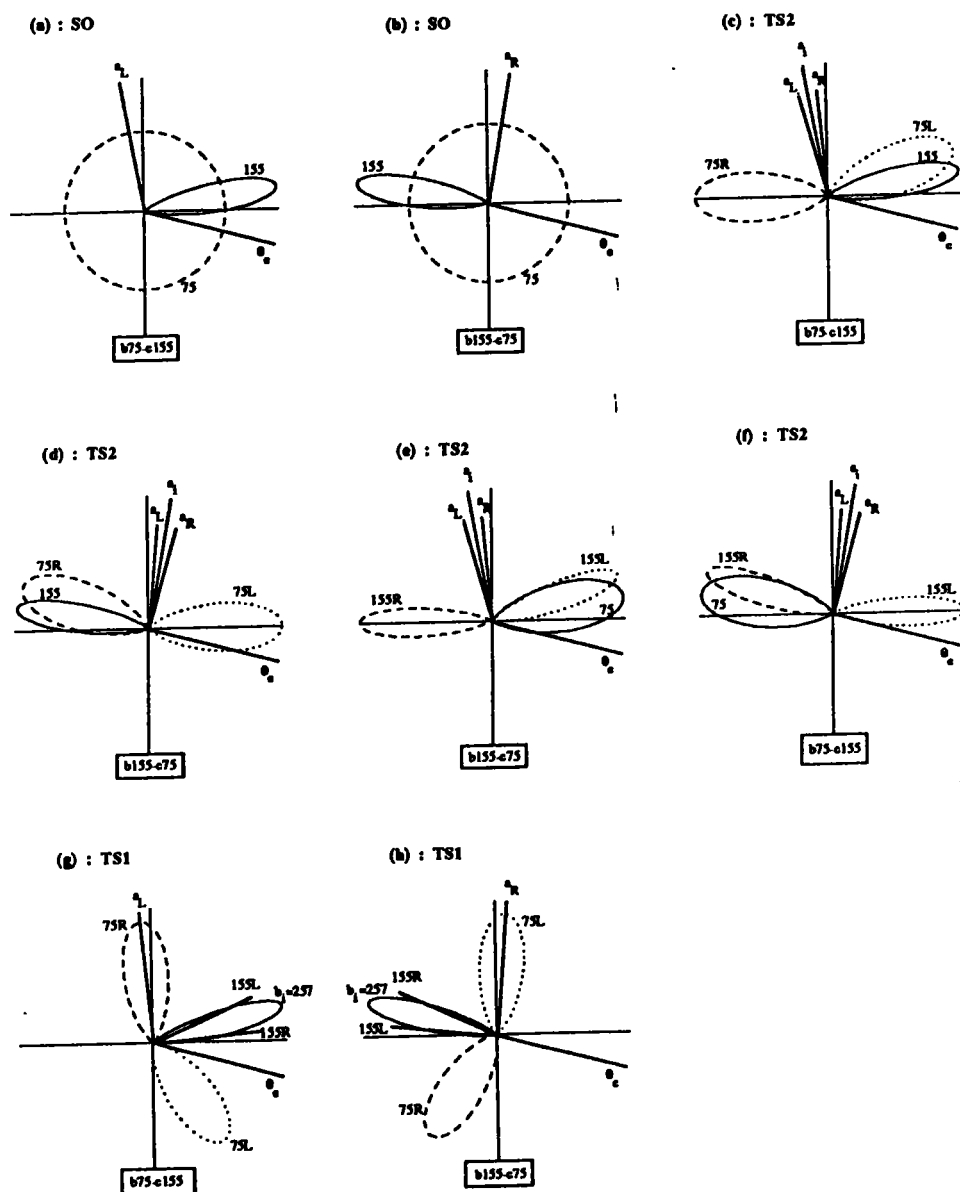


Figure 6-3 diagrammes des différents mécanismes de la double ionisation correspondant à la figure 6-2 . (a) , (b) est le mécanisme shake-off; (c)-(f) est le processus de la double collision (TS2); (g),(h) est le processus de la double collision (TS1).

— distribution de l'électron éjecté issu de la première ionisation, l'électron diffusé correspondant est a_i (a intermédiaire) pour TS2 et a_L (a left) ou a_R (a right) pour S.O et TS1.

--- ; distribution produite par la seconde ionisation

REFERENCES :

- 1- A.Lahmam-Bennani, C.Dupré, A.Duguet, Phys.Rev.Lett. **63**, 1582 (1989)
- 2- A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, A.M.Grisogono, M.Lecas, J.Phys.B, At.Mol.Opt.Phys **25**, 2873-2884 (1992)
- 3- A.Duguet, A.Lahmam-Bennani, Z.Phys.D, Atoms, Molecules and Clusters **23**, 383-388 (1992)
- 4- F.W.Byron, Jr, C.J.Joachain, Phys.Rev.A **164**, 1 (1967)
- 5- F.Smirnov.Yu, A.V.Pavlitchenkov, V.G.Levin, V.G.Neudatchin, J.Phys.B, At.Mol.phys. **20**, 3587 (1978)
- 6- V.G.Neudatchin, N.P.Yudin, F.A Zhivopistsev, Phys.Stat.Sol.(B) **95**, 39 (1979)
- 7- C.Dal Cappello , H.Le.Rouzo , Phys.Rev.A **43** , 1395 (1991)
- 8- C.Dal Cappello, J.Langlois, M.C.Dal.Cappello, B.Joulakian, A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, R.J.Tweed, Z.Phys.D.Atoms, Molecules and Clusters **23**, 389-396 (1992)
- 9- B.Joulakian , C.Dal Cappello , Phys.Rev.A , **47** , 3788 , 1993
- 10- P.Nagy, A.Skutlatz, V.Schmidt, J.Phys.B **13**, 1249 (1980)
- 11- L.H.Anderson, P.H.Velplund, H.Knudsen, S.P.Moller, A.H.Sorensen, Phys.Rev.A **36**, 3612 (1987)
- 12- M.B.Shah, D.S.Elliot, P.Mc Callion, H.B.Gilbody, J.Phys.B **21**, 2751 (1988)
- 13- R.Hippler, K.Saeed, A.J.Duncan, H.Kleinpoppen, Phys.Rev.A **30**, 3328 (1984)
- 14- M.AChaudry, A.J.Duncan, R.Hippler, H.Kleinpoppen, Phys.Rev.A **39**, 530 (1989)
- 15- R.J.Tweed, J.Phys.B **6**, 398 (1973)
- 16- T.A.Carlson, M.O.Krause, Phys.Rev **140**, A1057 (1965)
- 17- J.H.Mc Guire.Phys.Rev.Lett.**49**, 1153 (1982)
- 18- J.H.Mc Guire.J.Phys.B **17**, L 779 (1984)
- 19- M.Brauner , H.Klar , J.S.Briggs , Z.Phys , Atoms , Molecules and Clusters **11** , 257 (1989)
- 20- M.Brauner , J.B.Briggs , H.Klar , J.Phys.B.At.Mol.Phys **22** , 2265 (1989)
- 21- U Amaldi; A.Egidi, R.Marconero et G.Pizzella, Rev.Sci.Instrum **40**, 1001 (1969)
- 22- H.Ehrhardt, M. Schulz, T.Tekaet et K.William, Phys.Rev.Lett.**22**, 89 (1969)
- 23- K.T.Leung, C.E.Brion, J.Elect.Spect.and.Rela.Phenom **35**, 327 (1985)
- 24- H.Ehrhardt, K.Jung, G.Knoth and P.Schlemmer, Z.Phys.D **1**, 3 (1986)
- 25- R .Jost and A.Pais, Phys.Rev **82**, 840 (1951)
- 26- W.Kohn, Rev.Mod.Phys **26**, 292 (1954)
- 27- M.Born, Z.Phys **37**, 863 (1926)

- 28- A.Bethe, Ann. Physik 37, 863 (1930)
- 29- N.F.Mott, Proc. Roy, Soc. Lond, A126, 259 (1930)
- 30- F.Reiche, W. Thomas, Z.Physik 34, 510 (1925)
- 31- W.Thomas, naturwissenschaften 13, 627 (1925)
- 32- W.Kuhn, Z.Physik 33, 408 (1925)
- 33- N.Bohr, phil.mag, 25, 10, 1913
- 34- H.Bethe, Z.Physik, 76,293 (1932)
- 35- C.Moller, Ann.Physik, 33, 408 (1913)
- 36- R.A.Bonham, C.Tavard, J.Chem.Phys 59, 4691 (1973)
- 37- M.Inokuti, Rev.Mod.Phys 43, 297 (1971)
- 38- U.Fano, J.W.Cooper, Rev.Mod.phys 40, 441 (1968)
- 39- I.Waller, D.R.Hartree, Proc.roy Soc A.124, 119 (1929)
- 40- A.Lahmam-Bennani, Alain.Duguet, paper presented at ICPEAC XVII, Brisbane, July 1991 sections
- 41- R.J.Tweed, Z; Phys.D, Atoms and Clusters 23, 309 (1992)
- 42- T.A.Carlson, and Jr.C.W.Nestor, Phys.Rev.A 8, 2887 (1973)
- 43- M.O.Krause, and T.A.Carlson.Phys.Rev 149, 52 (1966)
- 44- M.O.Krause, and T.A.Carlson.Phys.Rev 158, 18 (1967)
- 45- A.E S Green, phys.Rev 86, 1646 (1957)
- 46- M.H Mittleman, phys.Rev.Lett. 16, 498, 779 (1966)
- 47- F.W.Byron and C.J.Joachain, Phys.Rev.Lett., 16, 1139 (1966)
- 48- J.H.Mc Guire and L.Weaver, Phys.Rev A 16, 41 (1977)
- 49- M.R.C.Mc Dowell and J.P.Coleman, introduction to the theory of ion-atom collisions (North-Holland, Amsterdam, 1970), pp.337-339
- 50- T.A.Carlson, M.O.Krause, Phys.Rev 137A, 1655 (1965)
- 51- M.O.Krause, T.A.Carlson and R.D.Dismukes.Phys.Rev 170, 37 (1968)
- 52- M.H.Mittleman, Phys.Rev.Lett. 16, 840 (1966)
- 53- T.A.Carlson, Phys.Rev 156, 42 (1967)
- 54- A.Lahmam-Bennani, H.Ehrardt, C.Dupré, J.Phys.B 24, 2645 (1991)

B- DETERMINATION DE LA SECTION EFFICACE DIFFERENTIELLE DE DOUBLE IONISATION.

1- Section efficace quintuplement différentielle:

On utilise des ondes planes pour décrire l'électron incident et l'électron diffusé, la section efficace quintuplement différentielle (en angles solides et en énergies de l'électron diffusé et des deux électrons éjectés) dans le cadre de l'approximation de Born s'écrit^[1]:

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 d\left(\frac{k_1^2}{2}\right) d\left(\frac{k_2^2}{2}\right)} = \frac{4k_s k_1 k_2}{k_i K^2} (|M|^2) \quad (\text{B 1-1})$$

Considérons un atome à N électrons, l'élément de matrice est tel que :

$$M = \left\langle \Psi_f(1, \dots, N) \left| \frac{-N}{r} + \sum_{j=1}^N \frac{1}{|r - r_j|} \right| \Psi_i(1, \dots, N) \right\rangle \quad (\text{B 1-2})$$

r_j est la position du jème électron. Les deux fonction d'ondes initiale et finale peuvent être écrites de la façon suivante:

$$\Psi_i = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \Phi_i(\text{cible}) \quad (\text{B 1-3})$$

$$\Psi_f = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \Phi_f(\text{ion}, \vec{k}_1, \vec{k}_2) \quad (\text{B 1-4})$$

Où Φ_i (cible) et Φ_f (ion résiduel + 2 électron éjectés) représentent les fonctions d'ondes antisymétriques décrivant l'état de la cible avant et après la collision dans la région asymptotique loin du potentiel d'interaction V .En utilisant la transformation de Bethe^[2].

$$\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r} \frac{\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} = \frac{1}{k^2} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \quad (\text{B 1-5})$$

l'élément de matrice devient alors:

$$M = \frac{1}{k} \left\langle \Phi_f \left| -N + \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right| \Phi_i \right\rangle \quad (\text{B 1-6})$$

Cet élément de matrice représente une transition de l'état initial discret à un double continuum d'énergie, par conséquent la section efficace quintuplement différentielle s'écrit:

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 d\left(\frac{k_1^2}{2}\right) d\left(\frac{k_2^2}{2}\right)} = \frac{4k_s k_1 k_2}{k_i K^4} \left| \left\langle \Phi_f \left| -N + \sum_{j=1}^N \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right| \Phi_i \right\rangle \right|^2 \quad (\text{B 1-7})$$

La double ionisation des atomes de couche complète comme le krypton ($4p^6$) est un problème difficile, la résolution exacte de l'équation de Schrodinger est impossible et l'on est donc obligé de faire un certain nombre d'approximations .

La première approximation consiste à ne tenir compte que des six électrons de la couche ($4p^6$) pour le krypton car deux d'entre eux vont être directement concernés dans le processus de la double ionisation. L'élément de matrice s'écrit alors:

$$M = \frac{1}{K} \left\langle \Phi_f(1, \dots, 6) \left| -6 + \sum_{j=1}^6 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right| \Phi_i(1, \dots, 6) \right\rangle \quad (\text{B 1-8})$$

Les fonctions $\Phi_i(1, \dots, 6)$ et $\Phi_f(1, \dots, 6)$ sont des déterminants de Slater (6×6).

La deuxième approximation consiste à supposer que les fonctions d'ondes radiales utilisées pour la description de l'ion krypton ($4p^4$) sont les mêmes que les fonctions d'ondes radiales décrivant les électrons dans l'état initial de l'atome de krypton neutre, les deux approximations sont connues sous le nom de l'approximation du coeur gelé.

$$M = \left\langle \Phi_i(1,2)\Phi_i(3,\dots,6) \middle| -6 + \sum_{j=1}^6 \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_j) \middle| \Phi_f(1,2)\Phi_{ion}(3,\dots,6) \right\rangle \quad (B 1-9)$$

L'écriture ci-dessus vient du fait qu'on a décomposé la fonction $\Phi_i(1, \dots, 6)$ décrivant l'état initial en deux fonctions $\Phi_i(1,2)$ et $\Phi_i(3, \dots, 6)$ décrivant respectivement les deux électrons dans l'état excité et les quatre électrons dans l'état fondamental. On a supposé aussi que la fonction d'onde finale peut être décomposée en deux fonctions $\Phi_f(1,2)$ et $\Phi_{ion}(3, \dots, 6)$ décrivant respectivement les deux électrons éjectés dans le double continuum et l'ion résiduel ($4p^4$). On peut faire agir le moment de spin S sur $\Phi_f(1,2)$ mais on ne peut pas faire agir le moment orbital L , car les deux électrons éjectés sont dans des continuums d'énergies. On pourra donc parler d'état singulet ou triplet pour caractériser l'état de spin sans préciser l'état de moment angulaire. La fonction d'onde décrivant l'ion $\Phi_{ion}(3, \dots, 6)$ reste pratiquement inchangée par rapport à $\Phi_i(3, \dots, 6)$.

Si on suppose que l'ion krypton est dans un état triplet P , on a donc une fonction de spin symétrique:

$$\alpha(1)\alpha(2), \quad \beta(1)\beta(2) \quad \text{ou} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(1)\alpha(2) + \beta(1)\beta(2))$$

La fonction d'onde Φ_f serait obligatoirement dans un état triplet de spin, et la multiplication de ces deux fonctions d'ondes conduit à une fonction à spin symétrique, et puisque $\Phi_i(3, \dots, 6)$ et $\Phi_{ion}(3, \dots, 6)$ sont supposées identiques, $\Phi_i(3, \dots, 6)$ serait aussi dans un état triplet P et pour aboutir à une fonction à spin symétrique $\Phi_i(1,2)$ serait obligatoirement dans un état triplet de spin.

$$M = \left\langle \Phi_i(1,2)\Phi_i(3,\dots,6) \middle| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} \middle| \Phi_f(1,2)\Phi_{ion}(3,\dots,6) \right\rangle$$

$$+\langle \Phi_i(1,2) | \Phi_f(1,2) \rangle \langle \Phi_i(3,\dots,6) | e^{i\vec{k}\vec{r}_3} + \dots + e^{i\vec{k}\vec{r}_6} - 6 | \Phi_{ion}(3,\dots,6) \rangle \quad (B\ 1-10)$$

où les parties radiales de $\Phi_{ion}(3,\dots,6)$ et de $\Phi_i(3,\dots,6)$ sont constituées d'un produit de fonctions de type Slater:

$$\begin{aligned} I &= \langle \Phi_i(3,\dots,6) | e^{i\vec{k}\vec{r}_3} + \dots + e^{i\vec{k}\vec{r}_6} - 6 | \Phi_{ion}(3,\dots,6) \rangle \\ &= \langle \varphi_3(\vec{r}_3) \dots \varphi_6(\vec{r}_6) | e^{i\vec{k}\vec{r}_3} + \dots + e^{i\vec{k}\vec{r}_6} - 6 | \varphi_3(\vec{r}_3) \dots \varphi_6(\vec{r}_6) \rangle \end{aligned} \quad (B\ 1-11)$$

Pour un transfert d'impulsion pas trop élevé $\langle \varphi_j(\vec{r}_j) | \exp(i\vec{k}\vec{r}_j) | \varphi_j(\vec{r}_j) \rangle \approx 1$ et finalement l'élément de matrice devient:

$$M = \langle \Phi_i(1,2) | \exp(i\vec{k}\vec{r}_1) + \exp(i\vec{k}\vec{r}_2) - 2 | \Phi_f(1,2) \rangle \quad (B\ 1-12)$$

Le problème se réduit donc à un problème à deux électrons actifs.

2 - Modèles O.P.W , C.W et O.C.W

En se basant sur la conclusion de l'étude de Mc Guire^[3], Dal Cappello et Le Rouzo^[4] ont calculé la distribution angulaire pour l'hélium (fig. 7-2,3,4), dans le cadre du mécanisme shake-off, en utilisant différentes fonctions pour décrire l'état initial:

- La fonction d'onde de Hartree - Fock de Clementi et de Roetti^[5] :

$$\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi(\vec{r}_1) \phi(\vec{r}_2) \quad (B\ 2-1)$$

$$\phi(r) = \sum_{i=1}^5 A_i \Phi_i^1(r) \quad \Phi_i^1(r) = \left(\frac{\epsilon^3}{\pi} \right)^{1/2} \exp(-\epsilon r) \quad (B\ 2-2)$$

Cette fonction ne contient aucune corrélation radiale et angulaire par définition.

- **La fonction de Silverman, Platas, et Matsen [S P M 1]** ^[6] qui inclue les corrélations radiales (elle rend compte de 33% de l'énergie de corrélation)

$$\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N[\phi^{1s}(\vec{r}_1)\phi^{1s}(\vec{r}_2) + \phi^{1s}(\vec{r}_1)\phi^{1s}(\vec{r}_2)] \quad (\text{B 2-3})$$

- une autre fonction donnée par les mêmes auteurs [S P M 2] ^[6] qui inclue les corrélations angulaires et radiales (l'orbitale p) (80 % de l'énergie totale de corrélation .)

- Finalement la fonction de Tweed et Langlois ^[7] qui inclue les corrélations radiales et angulaires (orbitales p et d) (94 % de l'énergie totale de corrélation).

Pour l'état final Dal Cappello et Le Rouzo ont utilisé trois fonctions d'ondes:

a - modèle des ondes planes orthogonalisées (O P W) ^[8,9].

La fonction d'onde décrivant les deux électrons éjectés est orthogonale à la fonction d'onde non corrélée. Cette fonction ne tient compte ni des interactions entre les deux électrons éjectés et l'ion, ni des interactions entre les deux électrons éjectés. Il est certain que ce modèle nécessite des énergies très élevées pour chaque électron (plus que 100 eV). Dans ce cas la section efficace différentielle serait pratiquement proportionnelle à la double transformée de Fourier ^[8].

$$\Psi_{if}(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2)} \quad (\text{B 2-3})$$

et permettrait une étude directe de la corrélation dans l'état initial.

b - modèle C.W:

Byron et Joachain^[10] ont proposé de décrire les électrons éjectés par des ondes coulombiennes avec une charge fixe correspondante à celle de l'ion résiduel. Ce modèle tient compte de l'interaction entre l'ion et chaque électron éjecté mais néglige toute interaction entre électrons éjectés.

$$\begin{aligned} \Phi(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = & \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\bar{k}_1 \bar{r}_1} e^{\frac{\pi z_1}{2k_1}} \Gamma\left(1 + \frac{iz_1}{k_1}\right) {}_1F_1\left(-\frac{iz_1}{k_1}, 1, -i(k_1 r_1 + \bar{k}_1 \bar{r}_1)\right) \\ & \times \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i\bar{k}_2 \bar{r}_2} e^{\frac{\pi z_2}{2k_2}} \Gamma\left(1 + \frac{iz_2}{k_2}\right) {}_1F_1\left(-\frac{iz_2}{k_2}, 1, -i(k_2 r_2 + \bar{k}_2 \bar{r}_2)\right) \end{aligned} \quad (B\ 2-4)$$

où Γ et ${}_1F_1$ sont les fonctions gamma et hypergéométrique confluyente^[11] respectivement, z est la charge effective vue par l'électron éjecté. Il est important de remarquer que cette onde coulombienne tend vers une onde plane quand $\frac{z}{k_{1,2}} \rightarrow 0$; dans ce modèle la charge effective z est fixée mais pourrait dépendre des conditions expérimentales comme l'avait montré l'étude de certains gaz rares^[12,13] par collisions $(e, 2e)$.

c - Modèle O.C.W ^[4,14].

La fonction d'onde décrivant les deux électrons éjectés est (comme pour le modèle O.P.W) orthogonale à la fonction d'onde non corrélée. Elle est (comme pour le modèle C.W) constituée par deux ondes coulombiennes avec des charges variables. Ce modèle introduit la corrélation entre les deux électrons éjectés, les charges variables dépendant de l'angle d'éjection. Ces charges sont en quelque sorte des paramètres ajustables. Ces charges Z_1 et Z_2 doivent néanmoins satisfaire les conditions de Peterkop^[15]:

$$\frac{Z_1}{k_1} + \frac{Z_2}{k_2} = \frac{Z}{k_1} + \frac{Z}{k_2} - \frac{1}{|\bar{k}_1 - \bar{k}_2|} \quad (B\ 2-5)$$

La charge Z se calcule en utilisant la formule de Schweitzer et Klapisch^[16], ou celle de Rudge et Schultz^[17,18]:

$$Z = 2 - \frac{K(k_1^2 - \bar{k}_1 \bar{k}_2)}{|\bar{k}_1 - \bar{k}_2|} \quad (\text{B 2 -6})$$

d - Résultats

Ces résultats sont représentés par des diagrammes polaires, où l'axe horizontal représente le transfert impulsional \bar{K} . L'un des électrons éjectés est fixe suivant la direction θ_1 par rapport à \bar{K} . Chaque figure est représentée par quatre courbes correspondants aux quatre différentes fonctions d'ondes décrivant l'état initial. La section efficace quintuplement différentielle est représentée par rapport à la direction du second électron éjecté.

Un premier résultat frappant dans le cas où $\theta_1 = 0^\circ$, est que les deux électrons éjectés quittent la cible dans la même direction. Or dans le cas symétrique étudié ici les deux électrons éjectés possèdent la même énergie; ce résultat est impossible physiquement car la répulsion coulombienne doit les séparer. On voit sur la figure (7-2) que les modèles (O.P.W) et (C.W) prévoient un maximum de probabilité pour cette configuration, quelle que soit le type de la fonction d'onde initiale utilisée. Ce résultat montre que ces deux modèles ne peuvent pas être utilisés pour décrire une situation expérimentale de ce type où la corrélation dans l'état final est prépondérante. Il est à noter aussi que la fonction de Hartree-Fock a été divisée par 10 ce qui montre l'extrême sensibilité de ces sections efficaces à la qualité des fonctions d'ondes utilisées pour décrire l'état final.

Par contre le modèle O.C.W donne des résultats déjà conformes à la réalité physique: les deux électrons éjectés quittent la cible avec un écart angulaire (fig. 7-2 c -3 c -4 c). Dans ce cas également la corrélation caractérisant l'état initial semble négligeable devant la corrélation dans l'état final.

D'autres résultats ont été obtenus par Dal Cappello et col.^[19] en étudiant la double ionisation du krypton $4p^6$, avec l'ion dans un état singulet 1S . Cette fois ci deux modèles ont été proposé pour décrire l'état initial afin d'examiner l'importance des corrélations: la fonction de Hartree-Fock de Clementi et de Roetti, puis la fonction calculée par Langlois qui sera détaillée par la suite, et pour l'état final les mêmes modèles que ceux qui ont été utilisés dans le traitement de l'atome de l'hélium. L'accord avec l'expérience s'est révélé insatisfaisant.

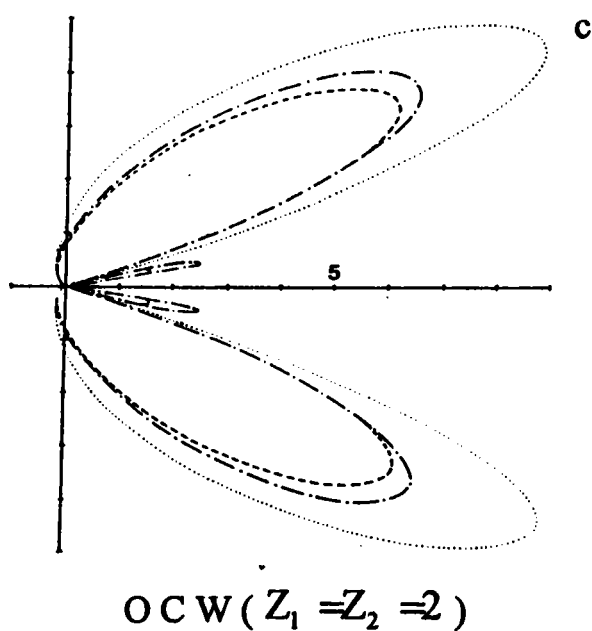
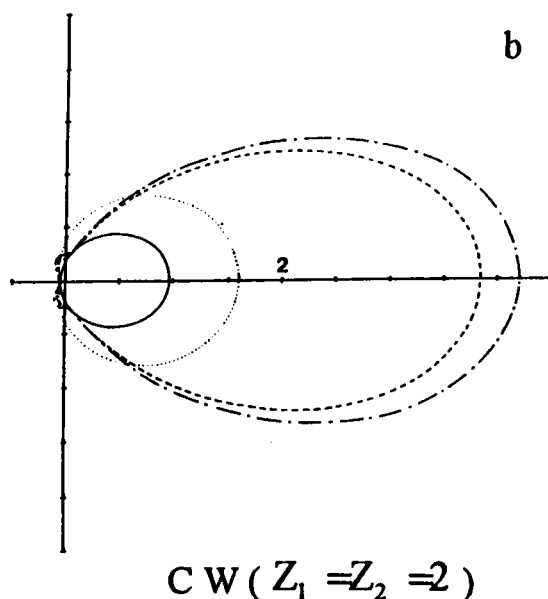
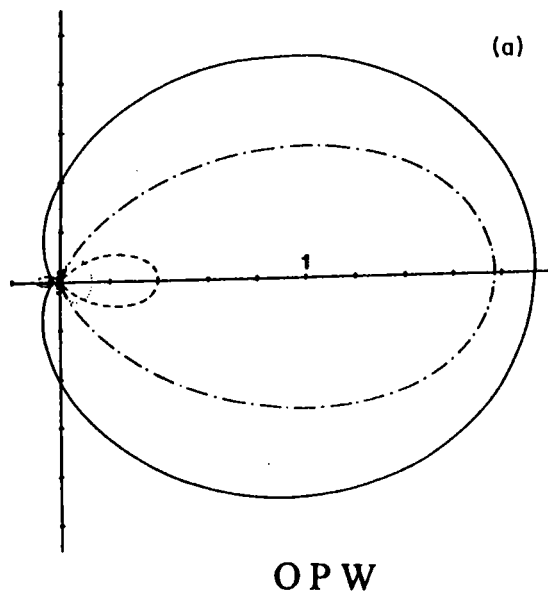


Fig (7 - 2)

Section efficace quintuplement différentielle
représentée en coordonnées polaires

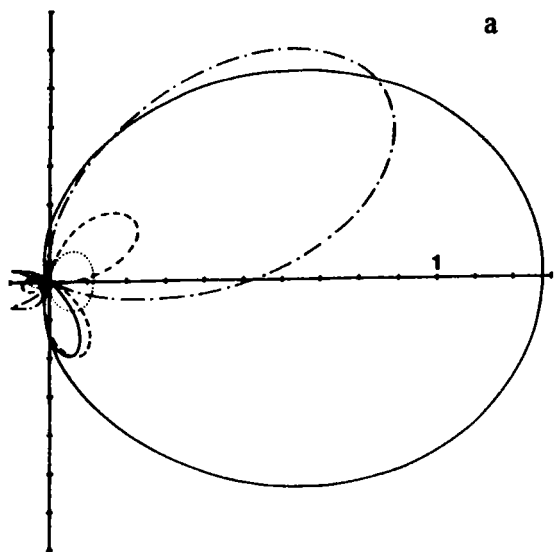
$E_0 = 5109 \text{ ev}$ $E_1 = E_2 = 15 \text{ ev}$ $\theta_2 = 0^\circ$

—— Fonction d'onde de H - F

..... Fonction de S P M 1

----- Fonction de S P M 2

— · — · — Fonction de Tweed et Langlois



OPW

Fig (7 - 3)

Section efficace quintuplement différentielle
représentée en coordonnées polaires

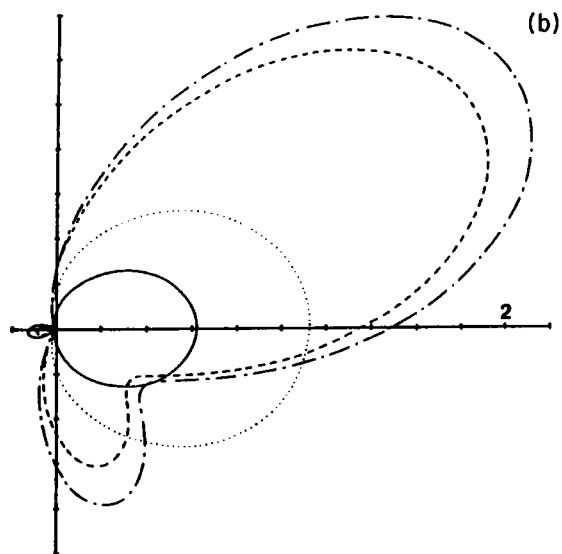
$$E_0 = 5109 \text{ eV} \quad E_1 = E_2 = 15 \text{ eV} \quad \theta_2 = 45^\circ$$

—— Fonction d'onde de H - F

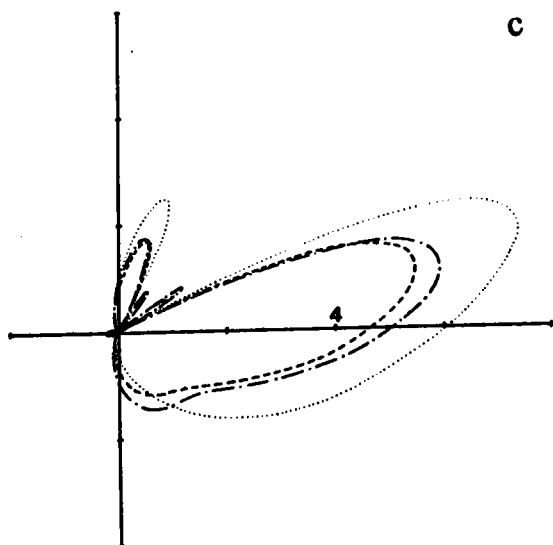
..... Fonction de S P M 1

----- Fonction de S P M 2

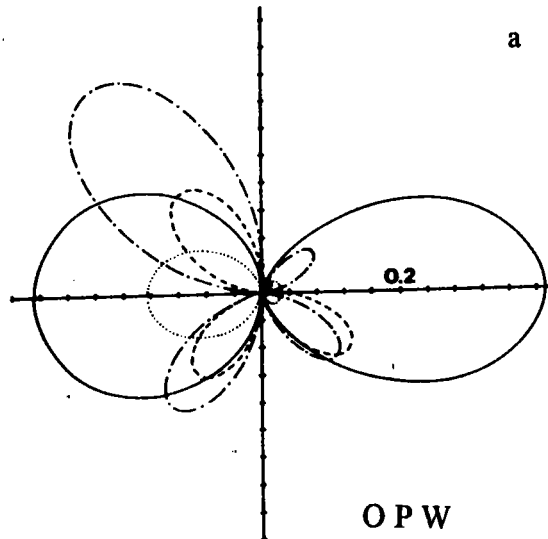
— · — · — Fonction de Tweed et Langlois



CW ($Z_1 = Z_2 = 2$)



OCW



(Fig 7 - 4)

Section efficace quintuplement différentielle
représentée en coordonnées polaires

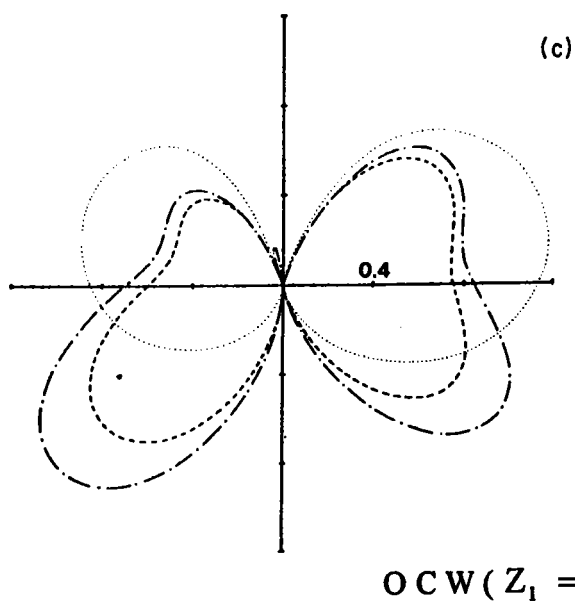
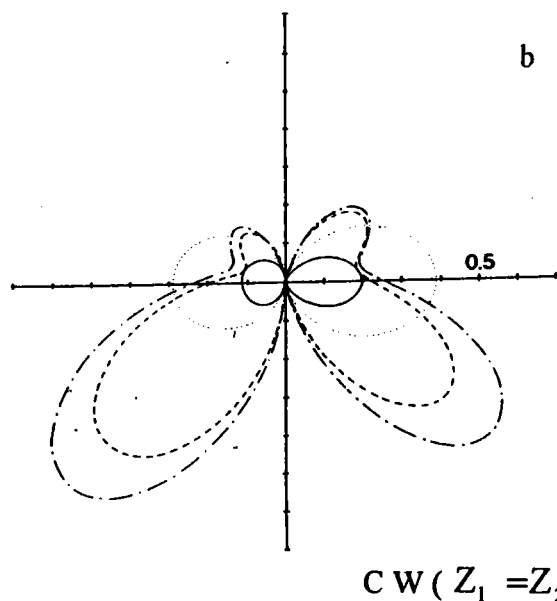
$E_0 = 5109 \text{ eV}$ $E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$ $\theta_2 = 90^\circ$

—— Fonction d'onde de H - F

..... Fonction de S P M 1

----- Fonction de S P M 2

— · — · — Fonction de Tweed et Langlois



3 - Modèle de Brauner - Briggs - Klar (B B K)

L'un des apports les plus intéressants de ces dernières années sur le plan théorique est le modèle B.B.K. Ce modèle permet de prendre en compte l'interaction entre le noyau et chaque électron éjecté ainsi que la répulsion entre chaque électron éjecté. Il vérifie d'autre part les conditions asymptotiques exactes du problème à trois corps. C'est actuellement le seul modèle capable d'expliquer qualitativement les très récents résultats obtenus sur la distribution angulaire des électrons éjectés après une double photoionisation de l'hélium. Il améliore ainsi considérablement les modèles O.P.W , C. W et O.C.W qui négligeaient ou prenaient en compte d'une façon empirique la répulsion entre les deux électrons éjectés.

Historiquement c'est en 1989 que Brauner, Briggs et Klar ^[20,21] ont utilisé une fonction d'onde symétrique pour décrire l'état des trois particules dans le continuum d'énergie résultant de la simple ionisation de l'atome d'hydrogène par impact électronique. Cette fonction notée par la suite B.B.K, avait été suggérée par Garibotti et Miraglia^[22] en 1980 et Godunov^[23] en 1983. Ces auteurs avaient proposé, mais sans le réaliser, un calcul incluant la fonction B.B.K pour des collisions par impact d'ions.

Le modèle B B K est actuellement le plus approprié pour le double continuum d'énergie. Malheureusement, il nécessite dans le cas de cibles comme l'argon ou le krypton un nombre considérable de dérivations multiples suivies d'une double intégration numérique, toutes opérations nécessitant un temps considérable malgré l'utilisation du calcul formel. Jusqu'à présent seules les fonctions d'ondes de l'état initial incluant des termes de type Hylleraas ou des termes 1s et 2s peuvent être utilisées avec la fonction B.B.K. Cette fonction B.B.K s'écrit:

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}\vec{r}_1) C(-\alpha_1, \vec{k}_1, \vec{r}_1) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k}\vec{r}_2) C(-\alpha_2, \vec{k}_2, \vec{r}_2) C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \quad (\text{B 3-1})$$

où le facteur de coulomb est définie par:

$$C(\alpha, \vec{k}, \vec{r}) = e^{\frac{\pi z}{k}} \Gamma(1 - i\alpha) {}_1F_1(i\alpha, 1, i(kr + \vec{k}\vec{r})) \quad (\text{B 3-2})$$

Les symboles Γ et ${}_1F_1(a, b, z)$ sont respectivement les fonctions gamma et hypergéométrique confluente (Abramowitz et Stegun 1972)^[11] .

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \frac{z}{k_1} \\ \alpha_2 &= \frac{z}{k_2} \\ \alpha_{12} &= \frac{1}{2k_{12}} \\ \bar{k}_{12} &= \frac{1}{2}(\bar{k}_1 - \bar{k}_2) \\ \bar{r}_{12} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2\end{aligned}\tag{ B 3-3}$$

La fonction B B K est orthonormée:

$$\begin{aligned}\langle \Psi_f | \Psi_f \rangle &= \int d\bar{r}_1 \int d\bar{r}_2 \Psi_f(\bar{k}_1', \bar{k}_2', \bar{r}_1, \bar{r}_2) \Psi_f(\bar{k}_1, \bar{k}_2, \bar{r}_1, \bar{r}_2) \\ &= \delta(\bar{k}_1 - \bar{k}_1') \delta(\bar{k}_2 - \bar{k}_2')\end{aligned}\tag{ B 3-4}$$

Notre but étant d'expliquer les résultats d'expériences (e,3e) sur des gaz rares tels que l'argon ou le krypton, il nous est nécessaire actuellement d'approximer cette fonction B.B.K, en égalant arbitrairement la troisième fonction hypergéométrique à 1.

$${}_1F_1\left(\frac{i}{2k_{12}}, 1, -i(k_{12}\bar{r}_{12} + \bar{k}_{12}\bar{r}_{12})\right) \approx 1\tag{ B 3-5}$$

Cette fonction n'est plus orthonormée, ce qui fait que l'on perd une partie de l'information sur l'amplitude de la section efficace différentielle (ici la section efficace quintuplement différentielle), mais on garde le facteur $\exp(-\frac{\pi}{4k_{12}})\Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{12}}\right)$ qui apparaît suffisant pour expliquer la forte corrélation angulaire dans l'état final. Dal cappello et col^[24] ont vérifié cette approximation dans le cas de la double ionisation de l'hélium et ils ont observé la même forme de la distribution angulaire avec et sans la troisième fonction hypergéométrique, la différence était tout simplement dans l'amplitude de la section efficace.

Il est important de noter à ce propos que l'amplitude des sections efficaces différentielles obtenues en incluant la fonction B.B.K ne correspond pas aux résultats expérimentaux dès que l'énergie de l'électron éjecté (cas des expériences (e,2e)) ou l'énergie des deux électrons éjectés (cas de la double photoionisation de l'hélium) devient faible (la limite pourrait être 10 eV). Par contre la distribution angulaire reste relativement conforme à celle observée par l'expérience.

La fonction B.B.K approximée s'écrit ainsi, en omettant la fonction de spin:

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{BBK}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &\approx \frac{e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \Gamma\left(1 + \frac{iz}{k_1}\right) {}_1F_1\left(-\frac{iz}{k_1}, 1, -i(k_1 r_1 + \vec{k}_1 \vec{r}_1)\right) \\ &\times \frac{e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2}}{(2\pi)^{3/2}} \Gamma\left(1 + \frac{iz}{k_2}\right) {}_1F_1\left(-\frac{iz}{k_2}, 1, -i(k_2 r_2 + \vec{k}_2 \vec{r}_2)\right) \\ &\times e^{-\frac{\pi}{4k_{12}}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{12}}\right)\end{aligned}\quad (\text{B 3-5})$$

Si les fonctions d'ondes $\Phi_{\text{BBK}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et $\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sont des fonctions propres de même hamiltonien H avec:

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{B 3-6})$$

la contribution nucléaire devrait disparaître à cause de l'orthogonalité de ces deux fonctions d'ondes.

$$\langle \Phi_{\text{BBK}}(1,2) | 2 | \Phi_i(1,2) \rangle = 0 \quad (\text{B 3-7})$$

La fonction d'onde finale étant symétrique, elle bénéficie des propriétés suivantes .

$$\Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (\text{B 3-8})$$

$$\Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad (\text{B 3-9})$$

$$\Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_{\text{BBK}}(-\vec{k}_1, -\vec{k}_2, -\vec{r}_1, -\vec{r}_2) \quad (\text{B 3-10})$$

$$\Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi_{\text{BBK}}(\vec{k}_2, \vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{B 3-11})$$

a - Application à l'étude de la double ionisation de l'hélium

Il nous a semblé intéressant de rappeler succinctement les principaux résultats obtenus par Joulakian et col.^[25,26] sur la double ionisation de l'hélium par impact électronique à l'aide du modèle B.B.K. L'état initial est décrit par un produit de deux fonctions d'ondes. La première décrit l'électron incident à l'aide d'une onde plane (ce qui est légitime vu la forte énergie incidente utilisée: 5 keV). La seconde décrit les deux électrons de la cible à l'aide de fonctions de type Hylleraas^[27,28].

$$\Psi_i(r_1, r_2) = N u(a, b) (1 + A r_{12}^{n_1} e^{-\lambda r_{12}}) + v(c, d) (B + C r_{12}^{n_2} e^{-\mu r_{12}}) + D v(e, f) \quad (\text{B 2-14})$$

$$v(a, b) = (e^{-a r_1} e^{-b r_2} + e^{-b r_1} e^{-a r_2}) \quad (\text{B 2-15})$$

où N est le facteur de normalisation ; la valeur numérique des différents paramètres est donnée par Bonham et Kohl^[29]. La fonction d'onde finale est orthogonalisée à la fonction d'onde initiale par la procédure habituelle de Schmidt:

$$\langle \Phi_f | = \frac{e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_0}}{(2\pi)^{3/2}} (\langle \Psi_f^- | - \langle \Psi_f^- | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i |) \quad (\text{B2-16})$$

$$\Psi_f^-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)) \quad (\text{B2-17})$$

	1	2	3	4	5	6	7	8
a	1.8850	1.4368	1.4096	1.4115	1.3392	1.3991	1.3676	1.3511
b	2.1832	2.2077	2.2058	2.2061	2.3227	2.0970	2.3069	2.2541
A		0.2934	-0.6054	0.3608			0.1189	0.1190
λ			0.2420	0.1016			1.1530	1.0956
n_1		1		1			1	1
c					1.7840	1.6300	1.5154	1.5596
d					1.7840	1.6300	1.7000	1.7065
B							0.6046	0.6153
C					0.2755	-0.4431	-0.7253	-0.7787
n_2					1			
μ						0.4134	0.3556	0.3481
e								2.0741
f								3.9535
D								0.0927
I^{2+}	2.875661	2.901419	2.901923	2.901911	2.902313	2.903115	2.903414	2.903486
N^2	0.502571	0.455466	2.684140	0.421021	0.459852	1.442181	0.575338	0.548218

Tableau B -1

Fonction d'onde type Hylleraas décrivant l'atome de l'hélium donnée par Bonham et Kohl^[29]

Un des buts du travail de Joulakian et col.^[25,26] était d'étudier la sensibilité de la double ionisation vis à vis de la fonction d'onde initiale. Ces auteurs ont ainsi testé un certain nombre de fonctions d'ondes de type Hylleraas (voir équation B 2-14 et tableau (B 1)).

Les figures 1, 2 et 3 représentent les sections efficaces quintuplement différentielle en coordonnées polaires. L'angle de diffusion est 0.5^0 , les énergies des deux électrons éjectés sont fixées à $E_1=5$ eV et $E_2=25$ eV. L'angle de l'un des deux électrons éjectés est fixé respectivement (par rapport à la direction de l'électron incident) à 0^0 (fig. 1) 90^0 (fig. 2) et -38.12^0 (fig. 3). Cette dernière situation correspond au cas où l'un des deux électrons est éjecté suivant la direction du transfert \vec{K} . Les symboles \bullet , $+$, \diamond , Δ , \times correspondent respectivement à l'utilisation des fonctions d'ondes 1,2,6,7 et 8 (Voir tableau B-1). Les figures 1,2 et 3 montrent la sensibilité des calculs aux fonctions d'ondes décrivant l'état

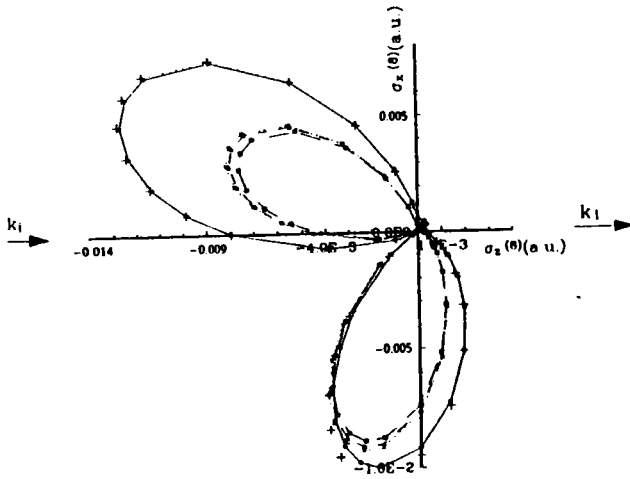


Fig 1 $\theta_1 = 0^\circ$

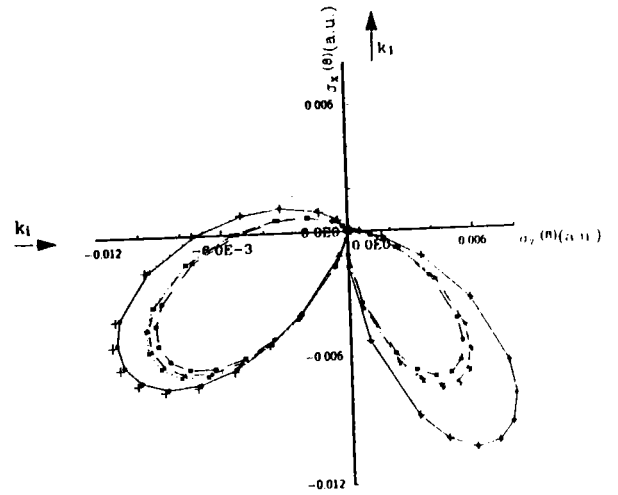


Fig 2 $\theta_1 = 90^\circ$

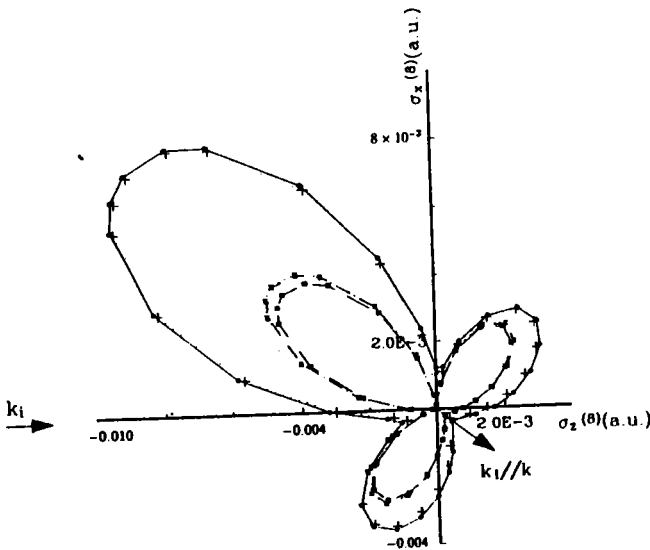


Fig 3 $\theta_1 = \theta_k = -38.2^\circ$

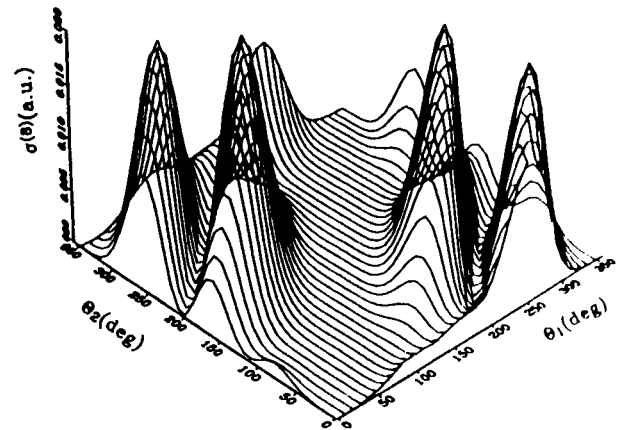


Fig. 4 section efficace quintuplement différentielle en fonction de θ_1 et θ_2 , $E_1 = 10\text{ eV}$, $E_2 = 20\text{ eV}$, $\theta_s = 0.25^\circ$

Résultat de Joulakian et Dal Cappello

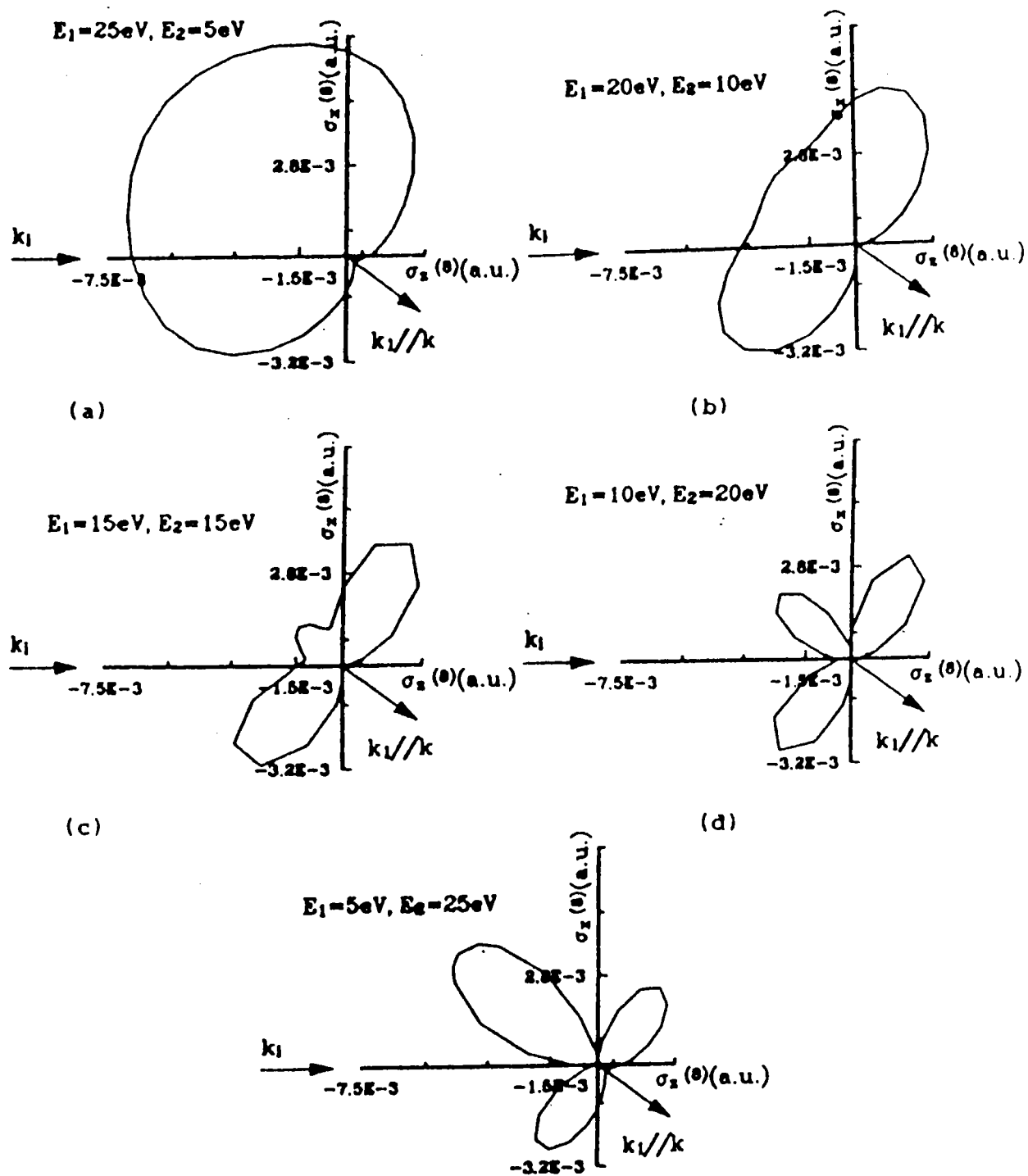


Fig. 5 section efficace quintuplement différentielle en fonction des différentes valeurs des énergies d'éjections ($E_1 + E_2 = 30\text{eV}$)

Résultat de Joulakian et Dal Cappello

initial: les fonctions notées 1 et 2 donnent des résultats différents (en amplitude) de ceux obtenus avec les autres fonctions.

Un autre objectif du travail de Joulakian et col.^[25] était d'étudier la section efficace différentielle en fonction des deux angles d'éjection θ_1 et θ_2 , les énergies des électrons éjectés étant fixées respectivement à $E_1=10$ eV et $E_2=20$ eV. La figure 4 indique quatre pics correspondant à des situations telles que $\theta_1 - \theta_2 \approx 130^\circ$. L'une de ces situations pourrait être étudiée expérimentalement dès 1994 par A.Lahmam-Bennani et col. à Orsay avec leur nouveau système de multidétection.

Afin de donner le maximum de résultats aux groupes d'expérimentateurs, Joulakian et col.^[25] ont également étudié la répartition angulaire des électrons éjectés en fonction de la variation des énergies des électrons éjectés (la somme de ces énergies restant toutefois égale à 30 eV). L'un des électrons est éjecté suivant la direction du transfert \vec{K} . Il est intéressant de noter la sensibilité des courbes à la répartition énergétique. Ceci peut s'expliquer simplement de la façon suivante: lorsque le premier électron est éjecté avec la majeure partie de l'énergie, le deuxième sera sensible uniquement au potentiel de l'ion et sera éjecté de façon plus au moins isotrope ($E_1=25$ eV et $E_2=5$ eV); dans le cas contraire ($E_1=5$ eV et $E_2=25$ eV) le premier électron est éjecté avec une faible énergie et peut encore interagir avec le deuxième: le facteur de répulsion reste prépondérant et le deuxième électron va être éjecté suivant la direction contraire à \vec{K} .

4 - Description de l'état initial .(np⁶)

Les gaz rares étudiés dans ce travail (krypton, argon et néon) sont tous caractérisés par une dernière couche de type np⁶ avec n=4, 3 et 2. Nous avons montré précédemment qu'il était légitime de négliger l'action éventuelle des électrons d'autres couches et nous sommes ramenés à examiner une fonction de l'état initial ou final comportant six électrons dit actifs. Comme nous étudions la double ionisation de ces couches np⁶ il a été démontré (chapitre B) qu'il suffisait de décrire les deux électrons concernés directement par le choc. Ainsi il nous suffira d'utiliser des fonctions d'ondes dépendant de deux variables notées r_1 et r_2 .

Afin de tester la sensibilité des sections efficaces différentielles de la double ionisation à la corrélation présente dans l'état initial nous avons utilisé deux fonctions d'ondes:

- celle de Clementi et de Roetti ^[5], de type Hartee-fock, que l'on peut écrire sous la forme

$$\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{3}} [Y_1^0(\hat{r}_1)Y_1^0(\hat{r}_2) - Y_1^1(\hat{r}_1)Y_1^{-1}(\hat{r}_2) - Y_1^{-1}(\hat{r}_1)Y_1^1(\hat{r}_2)]$$

$$\times \left[\sum_{i=1}^2 A_i R(2, \epsilon_i, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j R(3, \epsilon_j, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k R(4, \epsilon_k, r_1) \times r_1 \rightarrow r_2 \right] \tag{B 3-1}$$

$$R(n, \epsilon, r) = (2n!)^{-\frac{1}{2}} (2\epsilon)^{n+\frac{1}{2}} r^{n-1} \exp(-\epsilon r) \tag{B 3-2}$$

Cette fonction ne contient, par définition, aucune corrélation radiale ou angulaire.

- Celle de Langlois, qui est directement inspirée de celle de Tweed et Langlois relative à l'hélium et qui s'écrit dans ce dernier cas:

$$\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda \mu} C_{\lambda-\mu 0}^{\lambda \mu 0} Y_{\lambda}^{\mu}(\hat{r}_1) Y_{\lambda}^{-\mu}(\hat{r}_2) \sum_{ij} \alpha_{ij} R(n_i, \epsilon_i, r_1) R(n_j, \epsilon_j, r_2) + (r_1 \overleftrightarrow{r_2}) \tag{B 3-3}$$

où $C_{\lambda-\mu 0}^{\lambda \mu 0}$ est le coefficient de Clebsch-Gordan. Les coefficient α_{ij} sont calculées par Tweed et col.^[7] et sont donnés par le tableau suivant:

i	j	α_{ij}
1	1	-0.318825
1	2	0.952963
1	3	0.861769
2	2	-0.413939
2	3	-0.280631
3	3	0.023109
4	4	0.084186
4	5	-0.117540
5	5	0.078558
6	6	-0.008608

Cette fonction inclue 94% de l'énergie totale de corrélation.

Dans le cas spécifique des gaz rares (np^6) la fonction d'onde utilise une superposition de configurations qui inclue huit composantes:

$$4p^6 - 4p^4(^1S)4d^2(^1S) - 4p^4(^1S)5s^2(^1S) - 4p^4(^1S)5p^2(^1S) - 4p^4(^3P)5p^2(^3P) - \\ 4p^4(^3P)4d^2(^3P) - 4p^4(^1D)5p^2(^1D) - 4p^4(^1D)4d^2(^1D) \quad (B-3-4)$$

On voit que cette fonction est basée sur la fonction de Hartree-Fock ($4p^6$), elle s'écrit:

$$\Psi_i = \alpha_0 \Psi_0^0 + \alpha_1 \Psi_0^s p^4 (\Psi_0^s s^2) + \alpha_2 \Psi_0^s p^4 (\Psi_0^s p^2) + \alpha_3 \Psi_0^s p^4 (\Psi_0^s d^2) \\ + \alpha_4 \Psi_0^p p^4 (\Psi_0^p p^2) + \alpha_5 \Psi_0^p p^4 (\Psi_0^p d^2) + \alpha_6 \Psi_0^D p^4 (\Psi_0^D p^2) + \alpha_7 \Psi_0^D p^4 (\Psi_0^D d^2) \quad (B-3-4)$$

Les coefficients α_i ($i = 0, 1, \dots, 7$) sont calculés par Langlois ^[30].

L'état de l'ion après collision est soit 1S , 1D ou 3P . La modeste énergie de résolution actuelle ne permet pas de différencier ces trois états. Par contre en double photoionisation les récents expériences de A.Huetz et Col. ^[31] ont permis de séparer les contributions ainsi que celles de 3P_2 , 3P_1 et 3P_0 .

i - L'état singulet 1S ($m_L = 0$ $m_S = 0$)

Pour un état singulet 1S les spins sont antiparallèles et la fonction d'onde décrivant cet état est:

$$\Psi_i^s = \frac{1}{\sqrt{3}} [|p_0 \bar{p}_0| - |\bar{p}_1 p_{-1}| - |p_1 \bar{p}_{-1}|] \quad (\text{annexe C})$$

Tenant compte de la fonction antisymétrique de spin et des termes de corrélation, la fonction d'onde s'écrit :

$$\Psi_i^s = \frac{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)}{\sqrt{2}} \left[\frac{\alpha_0}{\sqrt{3}} (p_0(1)p_0(2) - p_1(1)p_{-1}(2) - p_1(2)p_{-1}(1)) + \alpha_1 s(1)s(2) \right. \\ \left. + \frac{\alpha_2}{\sqrt{3}} (p'_0(1)p'_0(2) - p'_1(1)p'_{-1}(2) - p'_1(2)p'_{-1}(1)) \right. \\ \left. + \frac{\alpha_3}{\sqrt{5}} (-d_{-1}(1)d_1(2) - d_{-1}(2)d_1(1) + d_{-2}(1)d_2(2) + d_{-2}(2)d_2(1)) \right]$$

(Annexe C)

La partie spatiale peut se mettre sous la forme:

$$\Psi_i^s(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = \frac{\alpha_0}{\sqrt{3}} [Y_1^0(\hat{r}_1)Y_1^0(\hat{r}_2) - Y_1^1(\hat{r}_1)Y_1^{-1}(\hat{r}_2) - Y_1^{-1}(\hat{r}_1)Y_1^1(\hat{r}_2)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^0 R(2, \varepsilon_i^0, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j^0 R(3, \varepsilon_j^0, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k^0 R(4, \varepsilon_k^0, r_1) \times r_1 \overleftrightarrow{r_2} \right] \\ + \frac{\alpha_1}{\sqrt{5}} [Y_2^0(\hat{r}_1)Y_2^0(\hat{r}_2) - Y_2^1(\hat{r}_1)Y_2^{-1}(\hat{r}_2) - Y_2^{-1}(\hat{r}_1)Y_2^1(\hat{r}_2) + Y_2^2(\hat{r}_1)Y_2^{-2}(\hat{r}_2) - Y_2^{-2}(\hat{r}_1)Y_2^2(\hat{r}_2)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^5 A_i^1 R(3, \varepsilon_i^1, r_1) + R(4, \varepsilon^1, r_1) \times r_1 \overleftrightarrow{r_2} \right] + \alpha_2 [Y_0^0(\hat{r}_1)Y_0^0(\hat{r}_2)] \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^2 R(1, \varepsilon_i^2, r_1) \right. \\ \left. + \sum_{j=1}^2 B_j^2 R(2, \varepsilon_j^2, r_1) + \sum_{k=1}^3 C_k^2 R(3, \varepsilon_k^2, r_1) + \sum_{l=1}^3 D_l^2 R(4, \varepsilon_l^2, r_1) + R(5, \varepsilon^2, r_1) \times r_1 \overleftrightarrow{r_2} \right] \\ + \alpha_3 [Y_1^0(\hat{r}_1)Y_1^0(\hat{r}_2) - Y_1^1(\hat{r}_1)Y_1^{-1}(\hat{r}_2) - Y_1^{-1}(\hat{r}_1)Y_1^1(\hat{r}_2)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^3 R(2, \varepsilon_i^3, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j^3 R(3, \varepsilon_j^3, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k^3 R(4, \varepsilon_k^3, r_1) \times r_1 \overleftrightarrow{r_2} \right] \quad (B\ 3-5)$$

$$R(n, \varepsilon, r) = (2n!)^{-\frac{1}{2}} (2\varepsilon)^{n+\frac{1}{2}} r^{n-1} \exp(-\varepsilon r)$$

ii - L'état singulet 1D ($m_L = 1$ $m_S = 0$)

Pour le singulet 1D on a en fait cinq contributions qui correspondent à un état antisymétrique de spin. Ces cinq contributions peuvent se regrouper en trois groupes de termes ($m_L = \pm 2$ $m_S = 0$); ($m_L = \pm 1$ $m_S = 0$); ($m_L = 0$ $m_S = 0$). Dans cette partie les calculs sont limités à un seul cas, les deux autres sont donnés en annexe C.

$$\Psi_i^{1D} = \frac{\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)}{\sqrt{2}} \left[\frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} (p_0(1)p_{-1}(2) + p_0(2)p_{-1}(1)) + \frac{\alpha_6}{\sqrt{2}} (p'_0(1)p'_{-1}(2) + p'_0(2)p'_{-1}(1)) \right. \\ \left. + \frac{\alpha_7}{\sqrt{14}} (d_0(1)d_{-1}(2) + d_0(2)d_{-1}(1)) - \frac{\sqrt{6}\alpha_7}{\sqrt{14}} (d_1(1)d_{-2}(2) + d_1(2)d_{-2}(1)) \right]$$

(Annexe C)

Soit encore, pour la partie spatiale:

$$\Psi_i^{1D}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\alpha_0}{\sqrt{2}} [Y_1^0(\hat{r}_1)Y_1^{-1}(\hat{r}_2) + Y_1^0(\hat{r}_2)Y_1^{-1}(\hat{r}_1)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^0 R(2, \epsilon_i^0, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j^0 R(3, \epsilon_j^0, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k^0 R(4, \epsilon_k^0, r_1) \times r_1 \rightleftharpoons r_2 \right] \\ + \frac{\alpha_7}{\sqrt{14}} [Y_2^0(\hat{r}_1)Y_2^{-1}(\hat{r}_2) + Y_2^{-1}(\hat{r}_1)Y_1^0(\hat{r}_2) - \sqrt{6}(Y_2^1(\hat{r}_1)Y_2^{-2}(\hat{r}_2) + Y_2^{-2}(\hat{r}_1)Y_2^1(\hat{r}_2))] \\ \times \left[\sum_{i=1}^5 A_i^1 R(3, \epsilon_i^1, r_1) + R(4, \epsilon^1, r_1) \times r_1 \rightleftharpoons r_2 \right] + \frac{\alpha_6}{\sqrt{2}} [Y_1^0(\hat{r}_1)Y_1^{-1}(\hat{r}_2) + Y_1^0(\hat{r}_2)Y_1^{-1}(\hat{r}_1)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^3 R(2, \epsilon_i^3, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j^3 R(3, \epsilon_j^3, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k^3 R(4, \epsilon_k^3, r_1) + R(5, \epsilon^3, r_1) \times r_1 \rightleftharpoons r_2 \right]$$

(B 3-7)

iii -L'état triplet 3P ($m_L = 1, m_S = 1, 0, -1$)

Après la collision, l'ion krypton peut se trouver dans l'un des deux états cités précédemment, ou bien dans un état triplet de spin qui correspond à une fonction de spin symétrique. Au

total on a neuf états dépendants, mais vu leur similitude du point de vue fonction spatiale, le calcul peut se restreindre à trois contributions qui sont comme suit (voir annexe C):

$$(m_L = 1, m_s = 1, 0, -1) , (m_L = -1, m_s = 1, 0, -1) , (m_L = 0, m_s = 1, 0, -1)$$

$$\Psi_i^{3p} = \frac{\alpha(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \left[\alpha_0(p_1(1)p_0(2) - p_1(2)p_0(1)) + \alpha_4(p'_1(1)p'_0(2) - p'_1(2)p'_0(1)) \right. \\ \left. + \frac{2\alpha_5}{\sqrt{10}}(-d_2(1)d_1(2) + d_2(2)d_1(1)) + \frac{\sqrt{6}\alpha_5}{\sqrt{10}}(d_1(1)d_0(2) - d_1(2)d_0(1)) \right] \quad (\text{Annexe C})$$

$$\Psi_i^{3p}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \alpha_0[Y_1^1(\hat{r}_1)Y_1^0(\hat{r}_2) - Y_1^1(\hat{r}_2)Y_1^0(\hat{r}_1)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^0 R(2, \epsilon_i^0, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j^0 R(3, \epsilon_j^0, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k^0 R(4, \epsilon_k^0, r_1) \times r_1 \rightleftharpoons r_2 \right] \\ + \frac{\alpha_5}{\sqrt{10}} \left[2(-Y_2^2(\hat{r}_1)Y_2^1(\hat{r}_2) + Y_2^1(\hat{r}_1)Y_2^2(\hat{r}_2)) + \sqrt{6}(Y_2^1(\hat{r}_1)Y_2^0(\hat{r}_2) - Y_2^1(\hat{r}_2)Y_2^0(\hat{r}_1)) \right] \\ \times \left[\sum_{i=1}^5 A_i^1 R(3, \epsilon_i^1, r_1) + R(4, \epsilon^1, r_1) \times r_1 \rightleftharpoons r_2 \right] + \alpha_4[Y_1^1(\hat{r}_1)Y_1^0(\hat{r}_2) - Y_1^1(\hat{r}_2)Y_1^0(\hat{r}_1)] \\ \times \left[\sum_{i=1}^2 A_i^3 R(2, \epsilon_i^3, r_1) + \sum_{j=1}^3 B_j^3 R(3, \epsilon_j^3, r_1) + \sum_{k=1}^4 C_k^3 R(4, \epsilon_k^3, r_1) + R(5, \epsilon^3, r_1) \times r_1 \rightleftharpoons r_2 \right] \quad (\text{B 3-8})$$

5 - Calcul de l'élément de matrice:

L'élément de matrice caractérisant la transition de l'état initiale discret à l'état final s'écrit pour une fonction d'onde finale orthogonale à l'état initial (et pour le cas du 'S):

$$M = \langle \Psi_f^\perp | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle \quad (\text{B 5-1})$$

$$\langle \Psi_f^\perp | = \langle \Psi_f | - \langle \Psi_f | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \quad (\text{B 5-2})$$

$$M = \langle \Psi_f | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle - \langle \Psi_f | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle \quad (\text{B 5-3})$$

5 a - Calcul du terme $\langle \Psi_i | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle$.

$$\langle \Psi_i | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle =$$

$$2\alpha_0^2 [\langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle] + 2\alpha_1^2 [\langle s | e^{i\vec{k}\vec{r}} | s \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle + \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle] +$$

$$\frac{2\alpha_2^2}{3} [\langle p_1' | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1' \rangle + \langle p_{-1}' | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1}' \rangle + \langle p_0' | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0' \rangle + 2\langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle + 2\langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle + 2\langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle]$$

$$+ \frac{2\alpha_3^2}{3} [\langle d_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle + \langle d_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle + \langle d_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_0 \rangle + \langle d_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_2 \rangle + \langle d_{-2} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-2} \rangle + 4\langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle]$$

$$+ 3\langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle + 3\langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle]$$

(B 5- a)

5 b - Calcul de terme $\langle \Psi_f | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle$.

$$\langle \Psi_f | \sum_{i=1}^2 e^{i\vec{k}\vec{r}_i} | \Psi_i \rangle =$$

$$\frac{\alpha_0}{\sqrt{3}} [\langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle + \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle - \langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle - \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle]$$

$$\begin{aligned}
& -\langle \Phi_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle - \langle \Phi_2 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle + 2(\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle) (\langle \Phi_1 | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle) \\
& -(\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle + 2\langle p_0 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_0 \rangle) (\langle \Phi_1 | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle + \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle) \\
& -\langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle - \langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle \\
& -\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle + 2\langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle + 2\langle p_0 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle \\
& + 2\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle + 2\langle p_0 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle] \\
& + \alpha_1 [\langle \Phi_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | s \rangle \langle \Phi_2 | s \rangle + \langle \Phi_2 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | s \rangle \langle \Phi_1 | s \rangle + 2(\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle) \langle \Phi_1 | s \rangle \langle \Phi_2 | s \rangle \\
& - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | s \rangle \langle \Phi_2 | s \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle - \langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | s \rangle \langle \Phi_2 | s \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | s \rangle \langle \Phi_1 | s \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle \\
& - \langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | s \rangle \langle \Phi_1 | s \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle + \\
& \frac{\alpha_2}{\sqrt{3}} [\langle \Phi_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p'_0 \rangle + \langle \Phi_2 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_0 \rangle \langle \Phi_1 | p'_0 \rangle - \langle \Phi_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p'_{-1} \rangle - \langle \Phi_2 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p'_1 \rangle \\
& - \langle \Phi_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p'_1 \rangle - \langle \Phi_2 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_1 \rangle \langle \Phi_1 | p'_{-1} \rangle + 2(\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle) (\langle \Phi_1 | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p'_0 \rangle) \\
& - (\langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_{-1} \rangle + 2\langle p_0 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p_0 \rangle) (\langle \Phi_1 | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p'_{-1} \rangle + \langle \Phi_1 | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p'_1 \rangle) \\
& - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p'_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle - \langle p_1 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p'_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}\vec{r}} | p'_0 \rangle \langle \Phi_1 | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_0 \rangle \langle \Phi_1 | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle \\
& + \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle + \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p'_1 \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle \\
& + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p'_1 \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_1 \rangle \langle \Phi_1 | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p'_1 \rangle \langle \Phi_1 | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle + \\
& \frac{\alpha_3}{\sqrt{5}} \left[-\langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-1} \rangle - \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | d_1 \rangle - \langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | d_1 \rangle - \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle \langle \Phi_1 | d_{-1} \rangle \right. \\
& + \langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-2} \rangle + \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-2} \rangle \langle \Phi_1 | d_2 \rangle + \langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | d_1 \rangle + \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_2 \rangle \langle \Phi_1 | d_{-2} \rangle \\
& + \langle \Phi_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | d_0 \rangle + \langle \Phi_2 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_0 \rangle \langle \Phi_1 | d_0 \rangle + 2(\langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle) (\langle \Phi_1 | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | d_0 \rangle) \\
& - (\langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle + 2\langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle) (\langle \Phi_1 | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-1} \rangle + \langle \Phi_1 | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | d_1 \rangle) \\
& - \langle \Phi_1 | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-2} \rangle - \langle \Phi_1 | d_{-2} \rangle \langle \Phi_2 | d_2 \rangle \Big) \\
& + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle + \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle \\
& + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_1 | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle + \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | d_1 \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | d_1 \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle \\
& + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle \langle \Phi_1 | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle + \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_1 \rangle \langle \Phi_1 | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-2} \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle \\
& - \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-2} \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle - \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-2} \rangle \langle \Phi_1 | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle - \langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | d_{-2} \rangle \langle \Phi_1 | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\langle p_1 | e^{i\vec{K}r} | d_{-2} \rangle \langle \Phi_2 | d_2 \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle - \langle p_0 | e^{i\vec{K}r} | d_{-2} \rangle \langle \Phi_2 | d_2 \rangle \langle \Phi_1 | p_0 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}r} | d_2 \rangle \langle \Phi_1 | d_{-2} \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle \\
& - \langle p_0 | e^{i\vec{K}r} | d_2 \rangle \langle \Phi_1 | d_{-2} \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}r} | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | d_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle - \langle p_1 | e^{i\vec{K}r} | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | d_0 \rangle \langle \Phi_1 | p_1 \rangle \\
& \langle p_{-1} | e^{i\vec{K}r} | d_0 \rangle \langle \Phi_1 | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle - \langle p_1 | e^{i\vec{K}r} | d_0 \rangle \langle \Phi_1 | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle] \\
& \hspace{15em} (B\ 5- b)
\end{aligned}$$

5 c - Calcul du terme $\langle \Psi_f | \Psi_i \rangle$

Pour calculer ce terme il suffit de faire tendre le transfert d'impulsion \vec{K} vers zéro dans l'expression (B 5- b)

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_f | \Psi_i \rangle &= \frac{\alpha_0}{\sqrt{3}} [\langle \Phi_1 | p_0 \rangle \langle \Phi_2 | p_0 \rangle - \langle \Phi_1 | p_1 \rangle \langle \Phi_2 | p_{-1} \rangle - \langle \Phi_1 | p_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p_1 \rangle] + \alpha_1 \langle \Phi_1 | s \rangle \langle \Phi_2 | s \rangle \\
&+ \frac{\alpha_2}{\sqrt{3}} [\langle \Phi_1 | p'_0 \rangle \langle \Phi_2 | p'_0 \rangle - \langle \Phi_1 | p'_1 \rangle \langle \Phi_2 | p'_{-1} \rangle - \langle \Phi_1 | p'_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | p'_1 \rangle] + \frac{\alpha_3}{\sqrt{5}} [-\langle \Phi_1 | d_1 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-1} \rangle \\
&+ \langle \Phi_1 | d_{-1} \rangle \langle \Phi_2 | d_1 \rangle + \langle \Phi_1 | d_2 \rangle \langle \Phi_2 | d_{-2} \rangle + \langle \Phi_1 | d_{-2} \rangle \langle \Phi_2 | d_2 \rangle + \langle \Phi_1 | d_0 \rangle \langle \Phi_2 | d_0 \rangle] \\
& \hspace{15em} (B\ 4- c)
\end{aligned}$$

Notons que dans le cas où le transfert d'impulsion est faible tous les termes croisés seront pris égaux à zéro, par exemple pour le terme suivant:

$$\langle p_i | e^{i\vec{K}r} | p_j \rangle_{i \neq j} \approx 0$$

Les éléments de matrice correspondant aux états de l'ion 3P et 1D sont reportés en annexe D. Tous ces éléments prennent en compte pour la plupart des calculs de transformée de Fourier-coulomb que nous avons inclus dans nos programmes.

REFERENCES :

- 1- M.Born, Z.Phys, **37**, 863 (1926)
- 2- A.Bethe, Ann.Physik, **37**, 863 (1930)
- 3 - J.H.Mc Guire. Phys.Rev.Lett. **49**, 1153 (1982)
- 4- C Dal.Cappello, H.Le Rouzo, Phys.Rev.A, **43**, 3, 1395 (1991)
- 5- E.Clementi and C.Roetti, At. Data Nucl. Data Tables, **14**, 177 (1974)
- 6- J.N.Silverman, O.Platas and F.A.Matsen, J.Chem.phys, **32**, 1042 (1960)
- 7- R.J.Tweed, J.Langlois, J.Phys.B, **20**, 5213 (1987)
- 8- Yu.F.Smirnov, A.V.Pavlitchenkov, V.G.Levin, V.G.Neudatchin, J.Phys.B, **11**, 20 (1978)
- 9- V.G.Neudatchin, Yu.F.Smirnov, A.V.Pavlitchenkov, V.G.Levin, Phys.Lett., **64**, A31 (1978)
- 10 - F.W.Byron, Jr.and C.J.Joachain, Phys.Rev.A, **164**, 1 (1967)
- 11- M.Abramowitz, I.Stegun, Hundbook of mathematical function "New York: Dover, (1972)
- 12- C.Dal.Cappello, C.Tavard, A.Lahmam-Bennani, M.C.Dal.Cappello, J.Phys.B, **17**, 4557 (1984)
- 13- L Avaldi, R.Camilloni, C.Dal.Cappello, E.Fainelli, A.Lahmam-Bennani, G.Stefani, Z.Phys.D, Atoms, Molecules and Clusters, **16**, 107 (1990)
- 14- H.Le.Rouzo, C Dal.Cappello, Phys.Rev.A, **43**, 318 (1991)
- 15- R.K.Peterkop, Opt.Spectors, **13**, 87 (1962)
- 16- C.Schweitzer, M.Klapish.:Fourteenth ICPEAC Conf., Abstracts Contributed Papers, J.Gedds et al. (eds) 380, (1987)
- 17- M.Schultz, J.Phys.B, **6**, 2580, (1973)
- 18- M.Rudge, Rev.Mod.Phys, **40**, 564, 1968
- 19 - C.Dal.Cappello, J.Langlois, M.C.Dal Cappello, B.Joulakian, A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, R.Tweed, Z.Phys.D, Atoms, Molecules and Clusters **23**, 389-396 (1992)
- 20- M.Brauner, H.Klar, J.S.Briggs, Z.Phys, Atoms, Molecules and Clusters, **11**, 257 (1989)
- 21- M.Brauner, J.B.Briggs, H.Klar, J.Phys.B.At.Mol.Phys, **22**, 2265, (1989)
- 22- G.Garibotti , J.E.Miraglia , Phys.Rev.A , **21** , 572 , 1980
- 23- A.L.Godunov, Sh.D.Kunikeev, V.N.Mileev, V.S Senashenko, Proc.13th.Int.Conf on Physics of Electronic and Atomic Collisions, Berlin ed Eichler (Amsterdam, North-Holland) Abstracts p380 (1983)
- 24- C.Dal Cappello, B.Joulakian, Proc.of the NATO Advanced Research Workshop on (e,2e) and Related Process (Cambridge) (Dordrecht: Kluwer) (1993)

- 25- B.Joulakian, C.Dal Cappello, M.Brauner, J.Phys.B.At.Mol.Phy, **25**, 2863 (1992)
- 26- B.Joulakian, C.Dal Cappello, Phys.Rev.A, **47**, 3788 (1993)
- 27- E.A.Hylleraas, Z.Phys.D, **54**, 347 (1929)
- 28- E.A.Hylleraas, Z.Phys.D, **71**, 739 (1931)
- 29- R.A.Bonham, D.A Kohl, J Chem.Phy, **45**, 2471, (1966)
- 30- J.Langlois (unpublished)
- 31- A.Huetz, P.Selles, D.Waymel, J.Mazeau, J.Phys.B **24**, 1917 (1991)

C - RESULTATS

1 - Historique

Nous nous proposons dans cette partie de rappeler brièvement l'historique des expériences de double ionisation par impact électronique et photonique avec la détection en coïncidence des électrons qui émergent après collision. Ces collisions, notées $(e,3e)$ dans le cas de l'impact électronique, ont été réalisées pour la première fois en 1989^[1] sur l'argon ($3p^6$). La faible résolution n'a pas permis et ne permet pas de distinguer l'état final de l'ion. L'équipe d'Orsay a poursuivi ces expériences $(e,3e)$ sur le krypton ($4p^6$)^[2,3].

Tous ces résultats expérimentaux seront examinés en détail par la suite et seront confrontés aux résultats donnés par notre modèle théorique. A.Lahmam-Bennani et col. ont également réalisés des expériences de type $(e,(3-1)e)$ ^[4] sur le krypton et récemment Ford et col. sur le néon^[5]. Les collisions $(e,(3-1)e)$ correspondent à la détection en coïncidence de deux des trois électrons après collision. Le taux de comptage est évidemment plus élevé dans ce cas. C'est certainement grâce à l'essor des dispositifs de multidétection que les expériences "pures" $(e,3e)$ vont pouvoir s'effectuer dans divers laboratoires d'ici deux ans. L'appareillage d'Orsay est actuellement en cours de transformation mais celui implanté à l'université du Maryland est déjà opérationnel: il vient de fournir très récemment^[6] les premiers résultats sur le magnésium (c'est l'effet Auger qui est étudié dans ce cas).

La double photoionisation est un processus bien moins probable que la simple photoionisation. Un facteur de 100 ^[7] sépare généralement les deux phénomènes. Néanmoins, les progrès accomplis dans la détection et l'accroissement de la puissance des sources lumineuses, ont permis la mesure des sections efficaces totales en fonction de l'énergie de photon^[8]. Puis récemment sont apparues les premières expériences $(\gamma,2e)$ où les deux électrons éjectés sont détectés en coïncidences. Mazeau et col.^[9] étudièrent la distribution angulaire des photoélectrons pour la double ionisation du krypton $4p^6$ avec un ion dans l'état 3P . Cette étude fut reprise et complétée^[10] par des expériences sur la double photoionisation du xénon^[10,11] $5p^6$ (état de l'ion: 1S). La précision de ces expériences $(\gamma,2e)$ est telle que l'on arrive maintenant à séparer la contribution de l'ion dans l'état 3P_2 des autres états de l'ion dans le cas d'une cible constituée de krypton^[10]. On peut également citer les expériences de Krassig et col.^[12] sur la double photoionisation de l'argon (l'ion étant dans un état 1D) qui établissent de manière indiscutable l'intervention de mécanismes de second ordre. Enfin il faut noter l'expérience, tant attendue par les théoriciens, de la

double photoionisation de l'hélium par Schwartzkopf et col.^[13]. Divers modèles théoriques ont pu être confrontés aux résultats de cette dernière expérience. Il ressort de cette étude que seul le modèle B.B.K donne une bonne interprétation des résultats expérimentaux^[14] excepté pour les amplitudes^[15]. Les modèles basés sur la théorie de Wannier^[16,17] ne donnent pas la répartition angulaire des électrons éjectés. Il est utile de rappeler que la théorie classique de Wannier permet avant tout de montrer que la probabilité de double ionisation doit varier comme E^n (E est l'énergie en excès au dessus de seuil de double ionisation, et n un paramètre à déterminer) sans faire d'hypothèses sur la charge ou la masse des particules qui interviennent comme facteur d'échelle.

Le modèle développé dans ce travail^[18] peut facilement se transposer à l'étude de la double photoionisation en faisant tendre le moment de transfert \vec{K} vers zéro. Dans ce cas on obtient des résultats de la forme "longueur"^[7]. Mais il faudrait en fait obtenir des résultats de la forme "vitesse" qui semblent mieux correspondre aux données expérimentales^[15].

2 - Etude de l'importance de la corrélation dans l'état final

Le travail préliminaire de Byron et Joachain en 1967 sur la double photoionisation de l'hélium avait établi le rôle prépondérant de la corrélation dans l'état initial. Ces auteurs avaient estimé comme négligeable la contribution de la corrélation dans l'état final lorsqu'ils calculaient la section efficace totale de la double photoionisation. Tweed vérifia ce résultat pour les sections efficaces totales ou simplement différentielle de la double ionisation de l'hélium (de H^- et de Li^+) par impact électronique. A cette époque les expérimentateurs se contentaient de mesurer la plupart du temps des sections efficaces totales ou simplement différentielles, les techniques de coïncidence n'étaient guère développées. Dal Cappello et Le Rouzo entreprirent d'examiner ce problème fondamental de l'importance de la corrélation dans l'état initial et final en 1990 en calculant cette fois-ci des sections efficaces différentielles correspondant aux expériences de type $(e,3e)$ et $(\gamma,2e)$. Ils démontrèrent, dans le cas de l'hélium, l'importance fondamentale de la corrélation dans l'état final pour des situations expérimentales où l'un des électrons est éjecté suivant la direction de transfert \vec{K} , le deuxième électron étant éjecté avec la même énergie que le premier. Nous nous proposons dans un premier temps de refaire cette étude dans le cas de la double ionisation du krypton ($4p^6$). Puis, dans une deuxième étape, nous examinerons en détail les expériences $(e,3e)$ réalisées sur le krypton et l'argon et nous expliquerons pourquoi il

faudrait réaliser ce type d'expériences sur le néon et quelles seraient les meilleures conditions cinématiques pour le réaliser.

Il nous a semblé utile d'examiner préalablement le rôle de la corrélation dans l'état final pour une situation "critique" pour laquelle le premier électron est éjecté suivant le transfert \bar{K} . Cette situation n'a pas encore été examinée du point de vue expérimental car les expériences (e,3e) de groupe d'Orsay ont été réalisées en l'absence complète de prévisions théoriques. Il ne semble pas y avoir de difficultés supplémentaires à réaliser ce type d'expériences et nous encourageons vivement les expérimentateurs à l'effectuer. Cette situation expérimentale permet d'apporter une réponse aussi quasi-immédiate au problème du choix du type de mécanisme de la double ionisation. Si l'expérience montre une symétrie de la distribution angulaire du second électron par rapport au transfert \bar{K} on peut conclure que les mécanismes de two-step n'interviennent pas, ce qui confirmerait le résultat de Mc Guire. Dans le cas contraire, la première approximation de Born ne serait plus suffisante, et l'intervention des mécanismes TS1 et TS2 serait nécessaire. Vu l'énergie incidente utilisée ici (de l'ordre de 5 keV) il est raisonnable de se placer dans la première hypothèse.

Les figures 1a et 2a confirment les résultats de Dal Cappello et Le Rouzo sur l'hélium: le modèle onde plane (qui néglige toute interaction électron - électron et électron - ion) et le modèle des ondes coulombiennes qui néglige l'interaction électron - électron) donnent un résultat inacceptable au point de vue physique: les deux électrons sont éjectés simultanément dans la même direction. Le fait de prendre en compte la corrélation dans l'état initial ne change en rien ce résultat (fig. 1b et 2b) (ce que confirment également les résultats de Dal Cappello et Le Rouzo sur l'hélium).

Les figures 1a, 1b, 2a, 2b montrent également le comportement très différent des contributions des états singulet de spin et de triplet de spin . Ce dernier interdit la sortie simultanée des électrons éjectés dans la même direction (la fonction spatiale est antisymétrique) contrairement aux états singulet (la fonction spatiale est ici symétrique).

Si l'on inclue le facteur de répulsion $e^{-\frac{\pi}{2k_{12}}} \Gamma(1 - \frac{i}{2k_{12}})$, présent dans le modèle B.B.K, on

obtient des résultats physiquement acceptables (fig. 1c et 1d). On note la diminution d'amplitude et l'effet négligeable ici de la corrélation dans l'état initial. En conclusion, il est maintenant clairement établi que quelque soit la cible choisie la corrélation dans l'état final doit être prise en compte lorsque l'on étudie les sections efficaces multiplement différentielles.

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV} \quad \theta_1 = \theta_k = 56^\circ$$

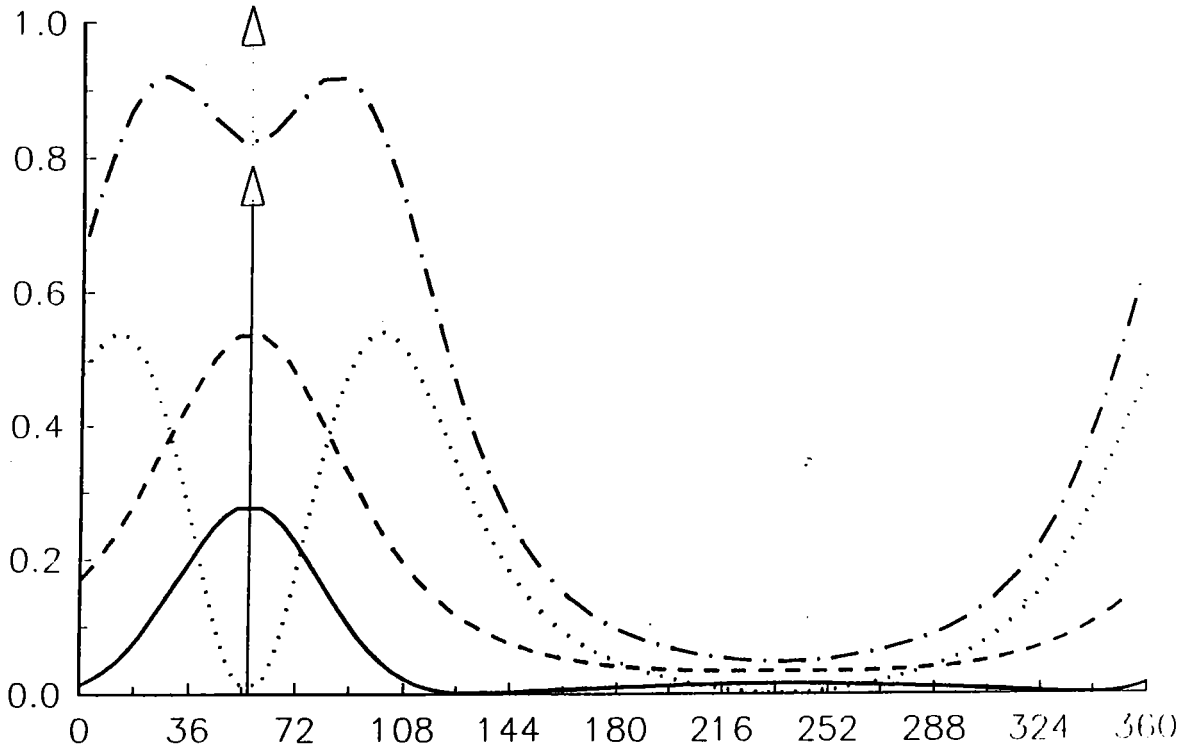


Fig. 1a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant la direction de \vec{K} ($\theta_1 = \theta_2 = 56^\circ$) . Modèle utilisé : ondes planes . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état 1S de l'ion
- contribution de l'état 1D de l'ion
- contribution de l'état 3P de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- ⤴ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

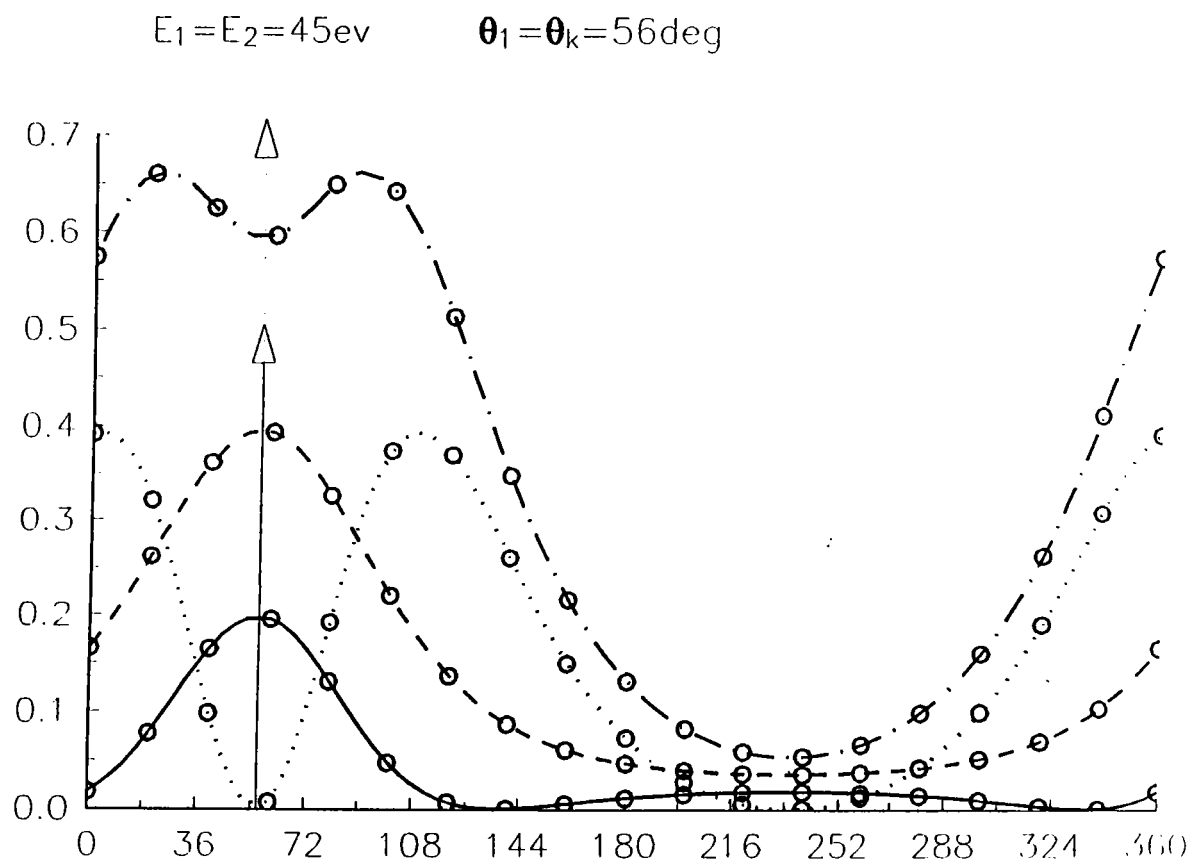


Fig. 1b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant la direction de \vec{K} ($\theta_1 = \theta_2 = 56^\circ$) . Modèle utilisé : ondes planes . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- - - - contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- · - · - somme des trois contributions $1S + 1D + 3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- ⤴ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = \theta_k = 56^\circ$$

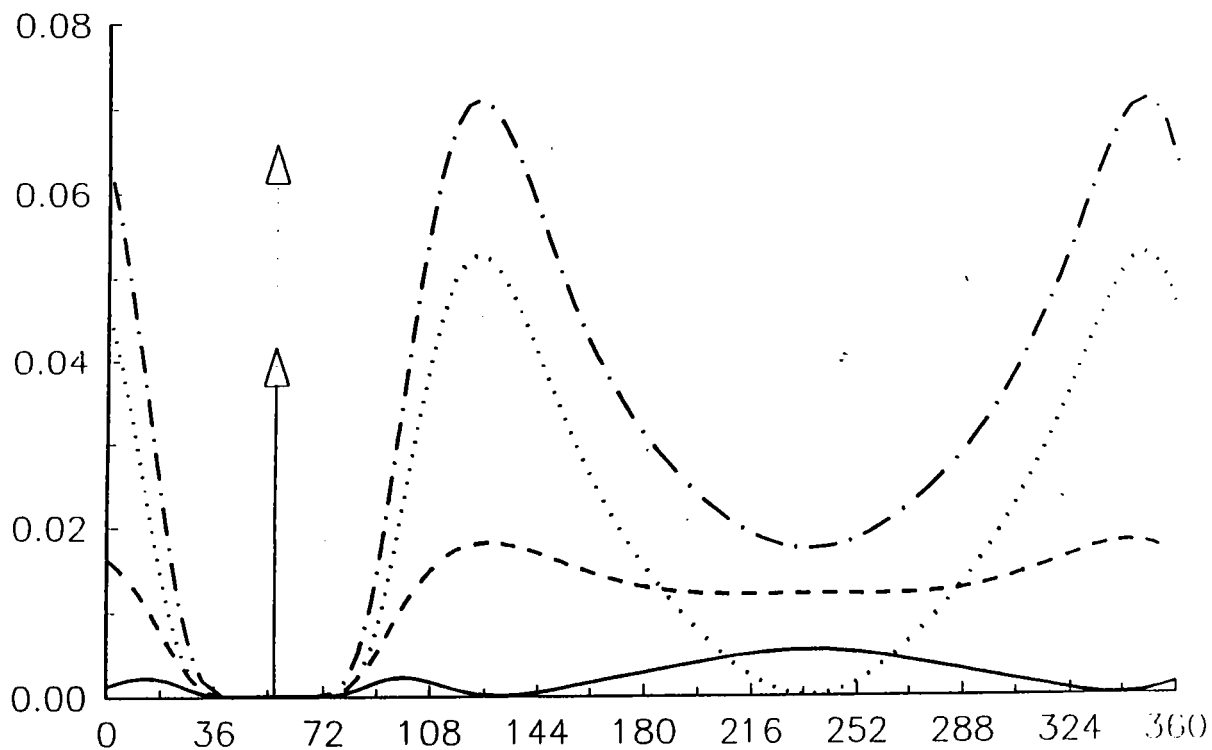


Fig. 1c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant la direction de \vec{K} ($\theta_1 = \theta_2 = 56^\circ$) . Modèle utilisé : ondes planes avec facteur de répulsion . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

—— contribution de l'état 1S de l'ion

----- contribution de l'état 1D de l'ion

..... contribution de l'état 3P de l'ion

-.-.- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$

↑ direction du premier électron éjecté

⤴ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = \theta_k = 56^\circ$$

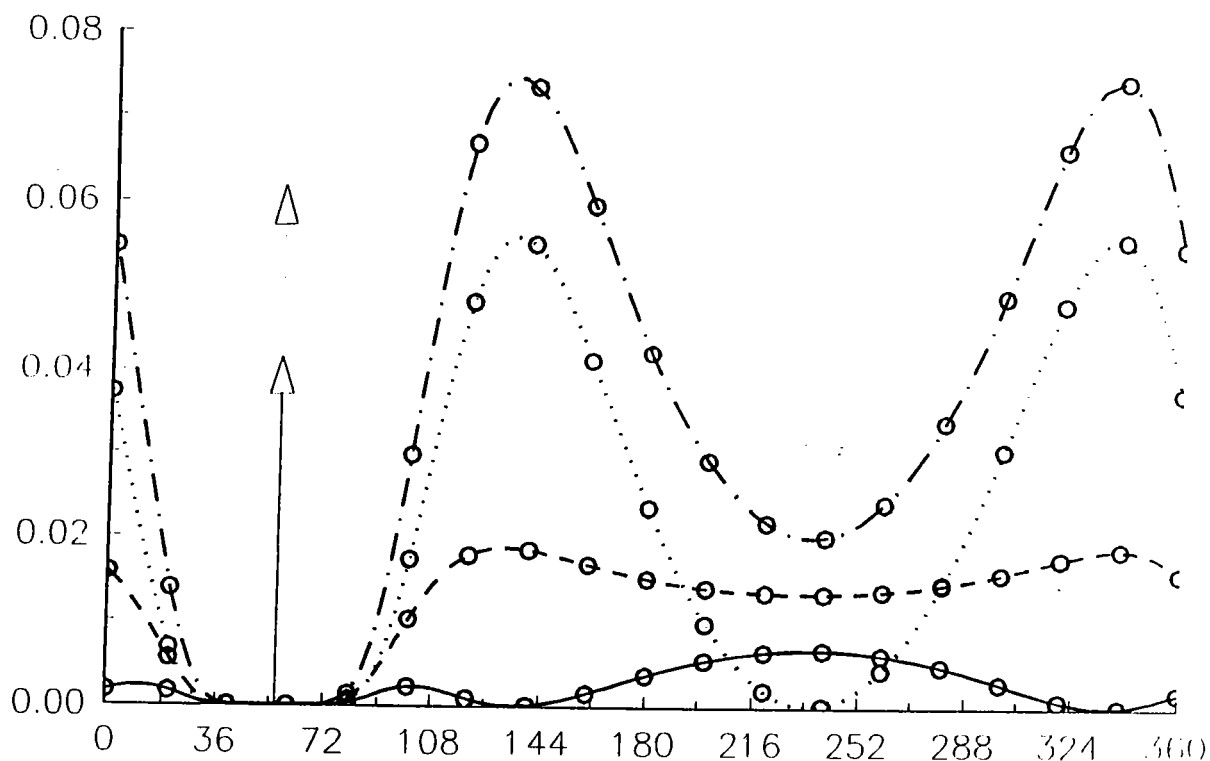


Fig. 1d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant la direction de \vec{K} ($\theta_1 = \theta_2 = 56^\circ$) . Modèle utilisé : ondes planes avec facteur de répulsion . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti

—— contribution de l'état 1S de l'ion

-o-o-o-o contribution de l'état 1D de l'ion

.o.o.o.o. contribution de l'état 3P de l'ion

-o-o-o- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$

↑ direction du premier électron éjecté

⤴ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = \theta_k = 56^\circ$$

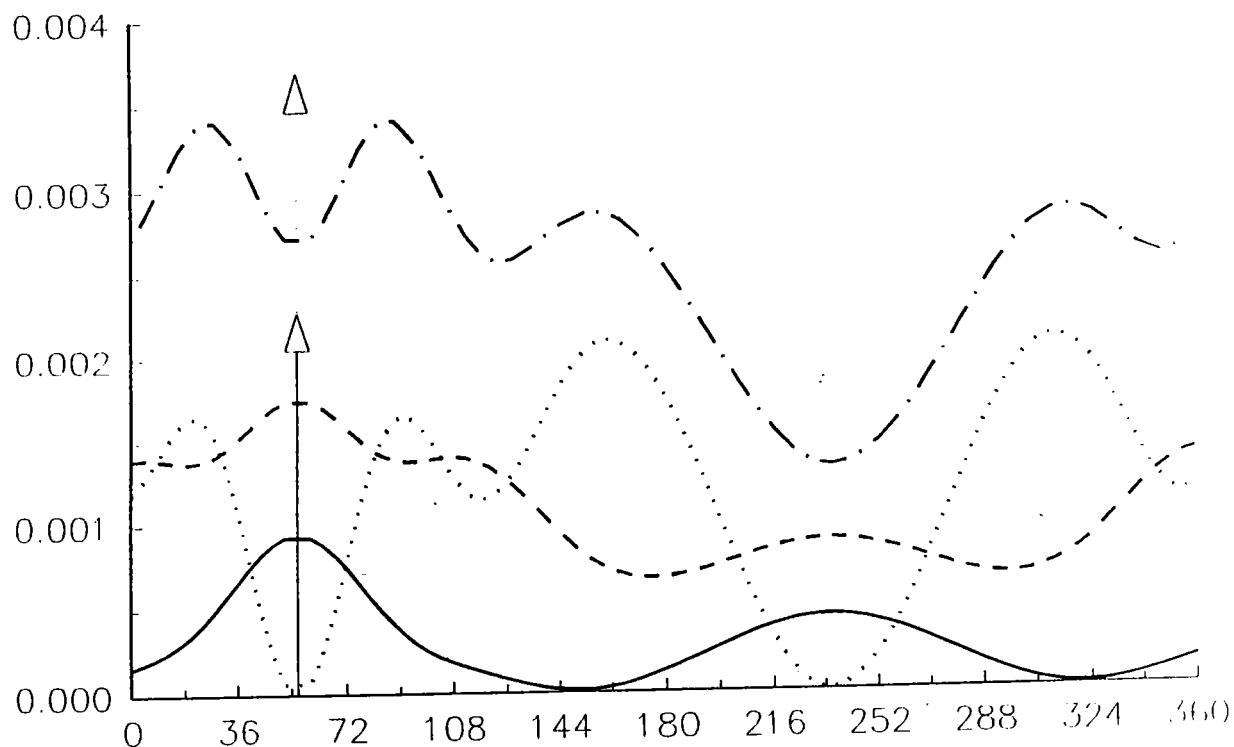


Fig. 2a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant la direction de \vec{K} ($\theta_1 = \theta_2 = 56^\circ$) . Modèle utilisé : ondes coulombiennes . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état 1S de l'ion
- contribution de l'état 1D de l'ion
- contribution de l'état 3P de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- ⋆ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = \theta_k = 56^\circ$$

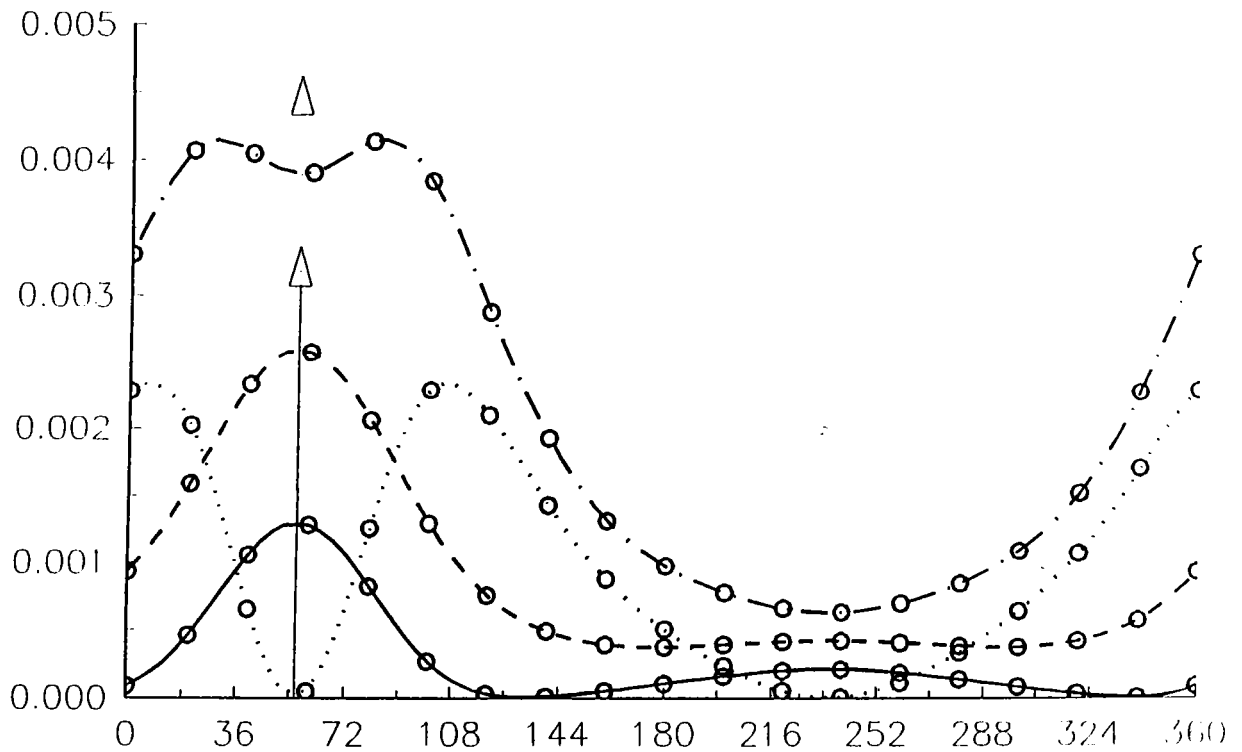


Fig. 2b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant la direction de \vec{K} ($\theta_1 = \theta_2 = 56^\circ$) . Modèle utilisé : ondes coulombiennes . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti

— contribution de l'état $1S$ de l'ion

-o-o-o-o contribution de l'état $1D$ de l'ion

.o.o.o.o. contribution de l'état $3P$ de l'ion

-·o-·o-·o- somme des trois contributions $1S+1D+3P$

↑ direction du premier électron éjecté

↗ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

3 - Interprétation des expériences (e,3e)

On se propose ici de confronter notre modèle basé sur le formalisme B.B.K à toutes les expériences (e,3e) existant à ce jour (excepté celles très récentes où l'effet Auger est prédominant). C'est là le point essentiel de notre travail, car rappelons qu'il n'existe jusqu'à présent aucun modèle théorique applicable à l'étude des collisions de type (e,3e). Ces expériences réalisées par A.Lahmam-Bennani et col.^[1-4] sont soit symétriques ($E_1 = E_2$) soit asymétriques ($E_1 \neq E_2$). La grande majorité d'entre elle concerne l'étude de la double ionisation du krypton $4p^6$. Il nous a semblé intéressant de les classer suivant les valeurs croissantes de la somme des énergies des électrons éjectés.

a - Cas du krypton ($E_1 + E_2 = 30\text{eV}$)

La direction du premier électron éjecté est fixée soit à $104^\circ \sim 105^\circ$ ou soit à $254^\circ \sim 255^\circ$ (Fig. 3a - d). On remarque tout d'abord que la direction du transfert \vec{K} ou $-\vec{K}$ ne joue ici aucun rôle du point de vue axe de symétrie. C'est là une différence considérable avec les expériences (e,2e) où le moment de transfert \vec{K} est axe de symétrie (lorsque la première approximation de Born est applicable). On remarque ensuite la prépondérance de la contribution de l'état 3P de l'ion excepté dans la région proche de \vec{K} . Ce résultat avait été établi en double photoionisation par R Hall et col. lors de la mesure des sections efficaces totales. Le fait marquant ici est l'absence de pics aigus (Fig. 3b , 3c et 3d). Ce résultat contraste également avec ceux obtenus en (e,2e) où la structure est très typique: maximum aigu dans la direction de \vec{K} pour des orbitales ns et minimum pour des orbitales np. L'influence de la prise en compte de l'orthogonalisation de l'état final par rapport à l'état initial est ici négligeable (excepté une petite diminution de l'amplitude). L'accord avec l'expérience est ici satisfaisant.

$$E_1 = E_2 = 15 \text{ eV} \quad \theta_1 = 105^\circ$$

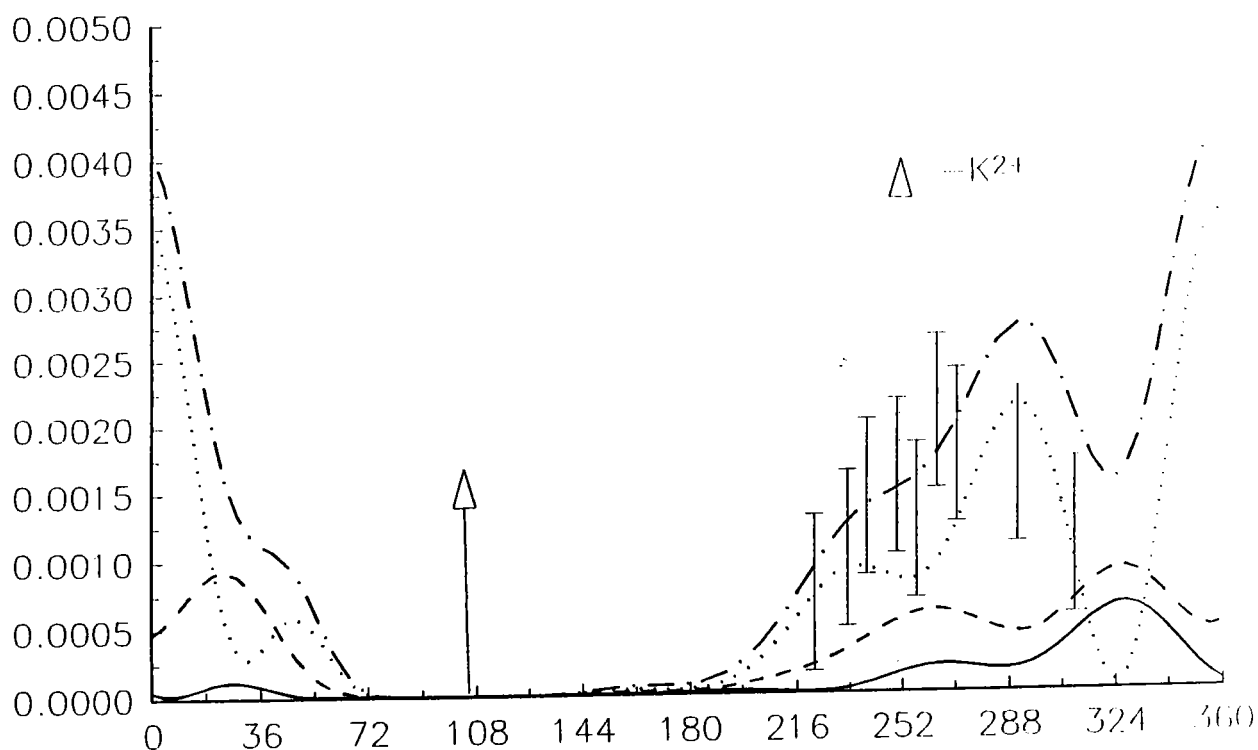


Fig. 3a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 105^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $1S+1D+3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- ⊥ expérience

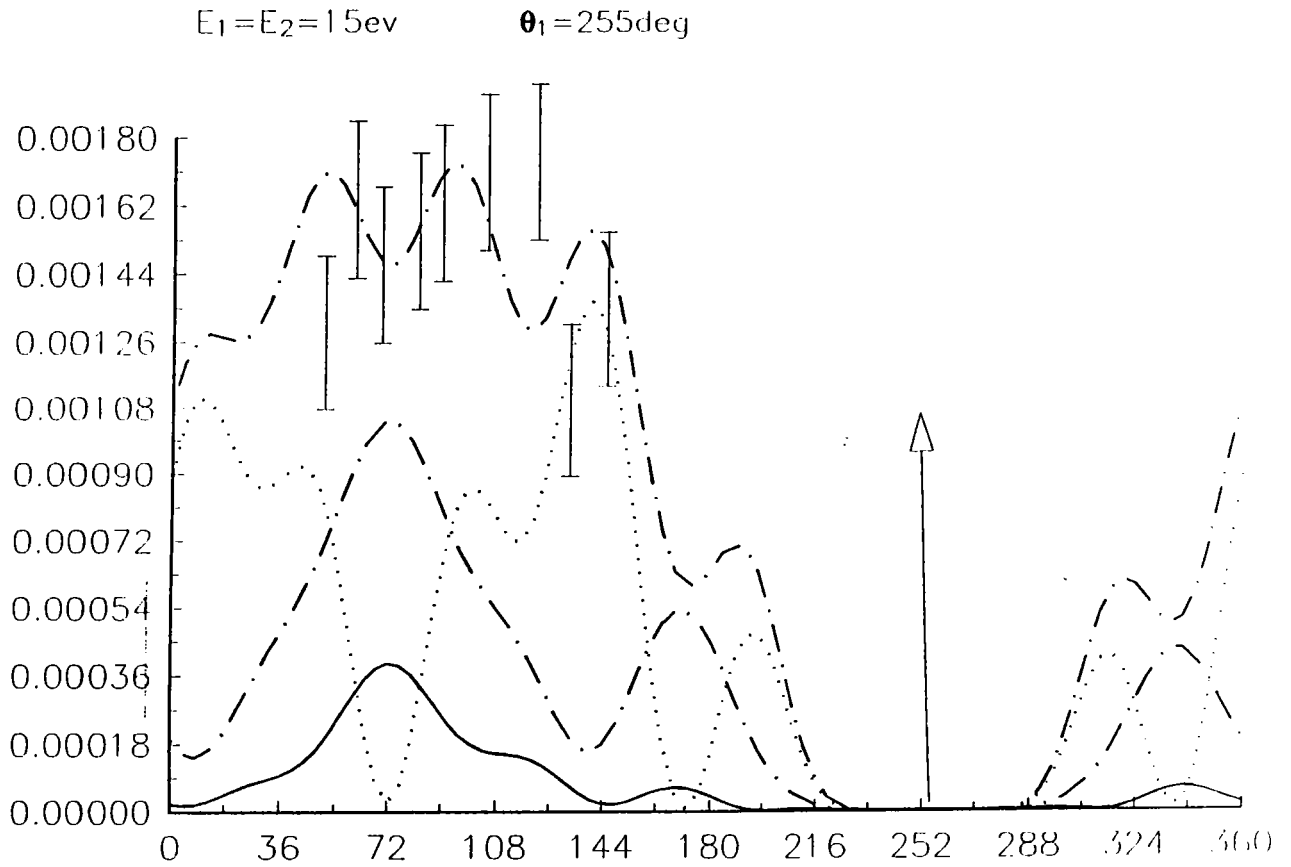


Fig. 3b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état ^1S de l'ion
- contribution de l'état ^1D de l'ion
- contribution de l'état ^3P de l'ion
- somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- ⊥ expérience

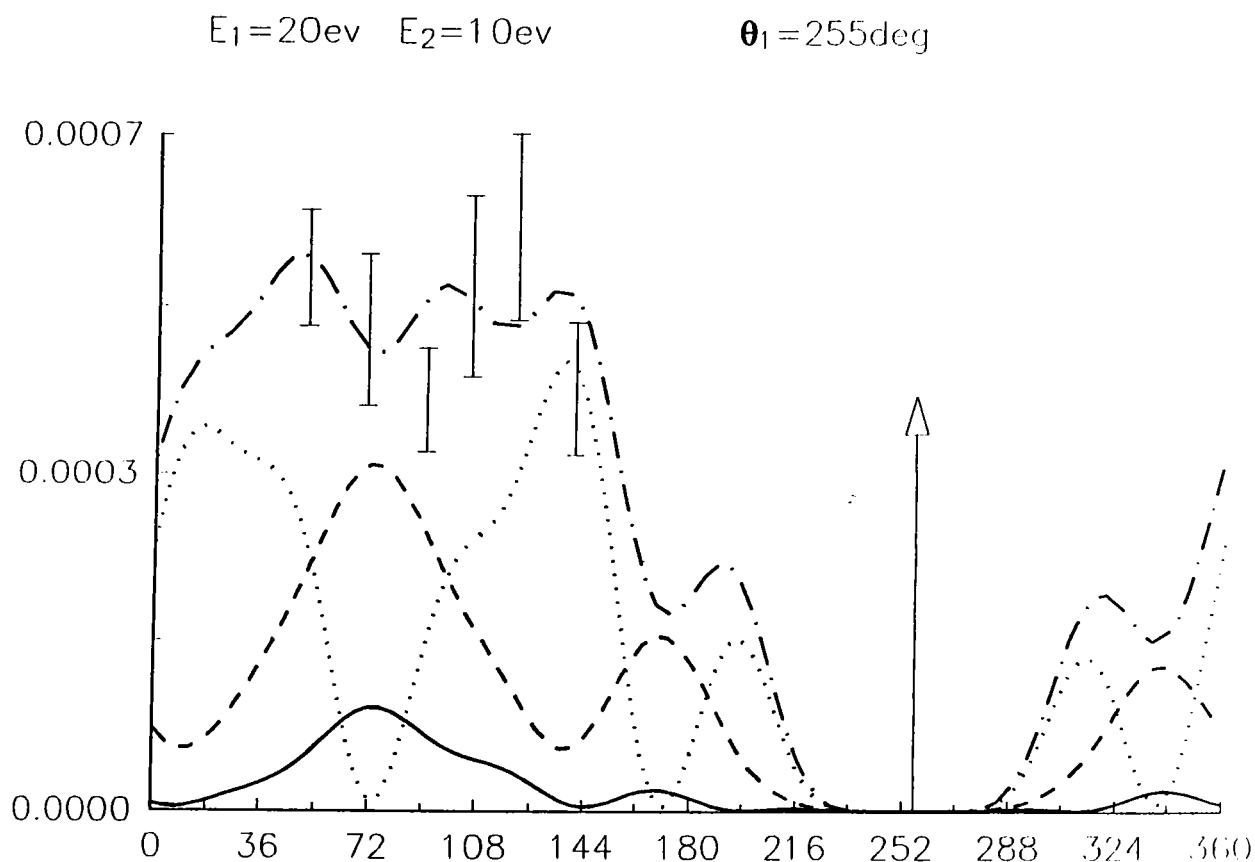


Fig. 3c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

—— contribution de l'état $1S$ de l'ion
 ----- contribution de l'état $1D$ de l'ion
 contribution de l'état $3P$ de l'ion
 -·-·- somme des trois contributions $1S+1D+3P$

↑ direction du premier électron éjecté

I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 0.33

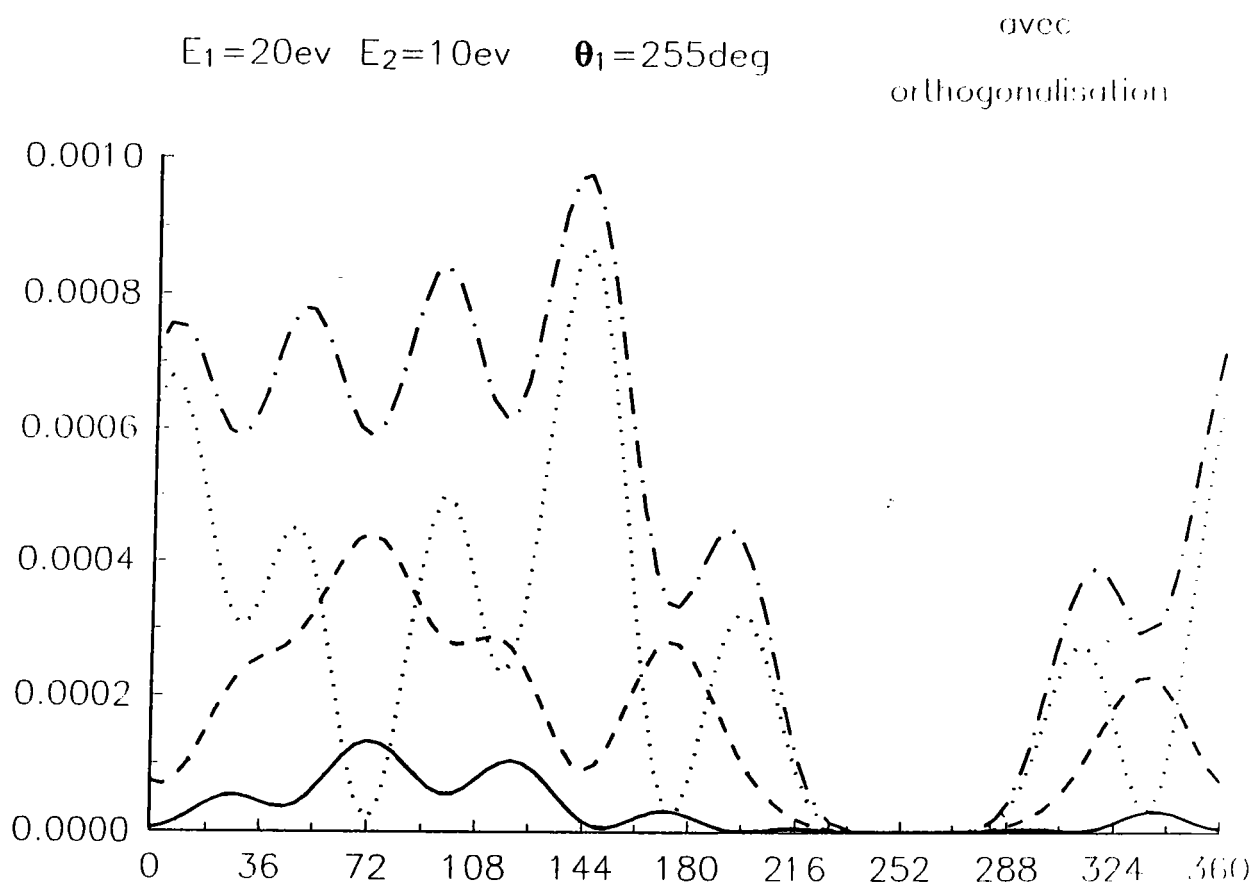


Fig. 3d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état ^1S de l'ion
- contribution de l'état ^1D de l'ion
- contribution de l'état ^3P de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$

b - Cas du krypton $E_1 + E_2 = 90\text{eV}$

Comme précédemment la direction du premier électron éjecté est fixée soit à $104^\circ \sim 105^\circ$ ou soit à 255° (Fig. 4a -4i). La direction de \vec{K} ou de $-\vec{K}$ ne joue également aucun rôle ici (Fig. 4a et 4c). Lorsque le premier électron est éjecté avec $\theta_1=104^\circ \sim 105^\circ$ (Fig. 4a , 4b, 4c, 4d, 4e, 4f,4h) la forme de la courbe expérimentale (ou théorique) ne présente pas de différences notables avec celles observées dans le cas a - $E_1 + E_2 = 30\text{eV}$. Par contre lorsque le premier électron est éjecté à 255° la structure est plus marquée avec deux pics successifs aigus (Fig. 4c et 4i) prévus par la théorie, alors que l'expérience semble indiquer la présence d'un seul pic aux environs de 85° . Il serait intéressant de refaire des expériences avec quelques points supplémentaires entre 25° et 70° .

La corrélation dans l'état initial joue un certain rôle (Fig. 4b et 4h) car elle modifie beaucoup l'amplitude de la section quintuplement différentielle et un peu la forme de la courbe. Comme précédemment l'influence de l'orthogonalisation de l'état final reste faible.

L'accord avec l'expérience demeure satisfaisant sauf pour le cas $E_1 = 60\text{eV}$ et $E_2 = 30\text{eV}$ où notre modèle. prévoit un maximum vers 280° .

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV} \quad \theta_1 = 105^\circ$$

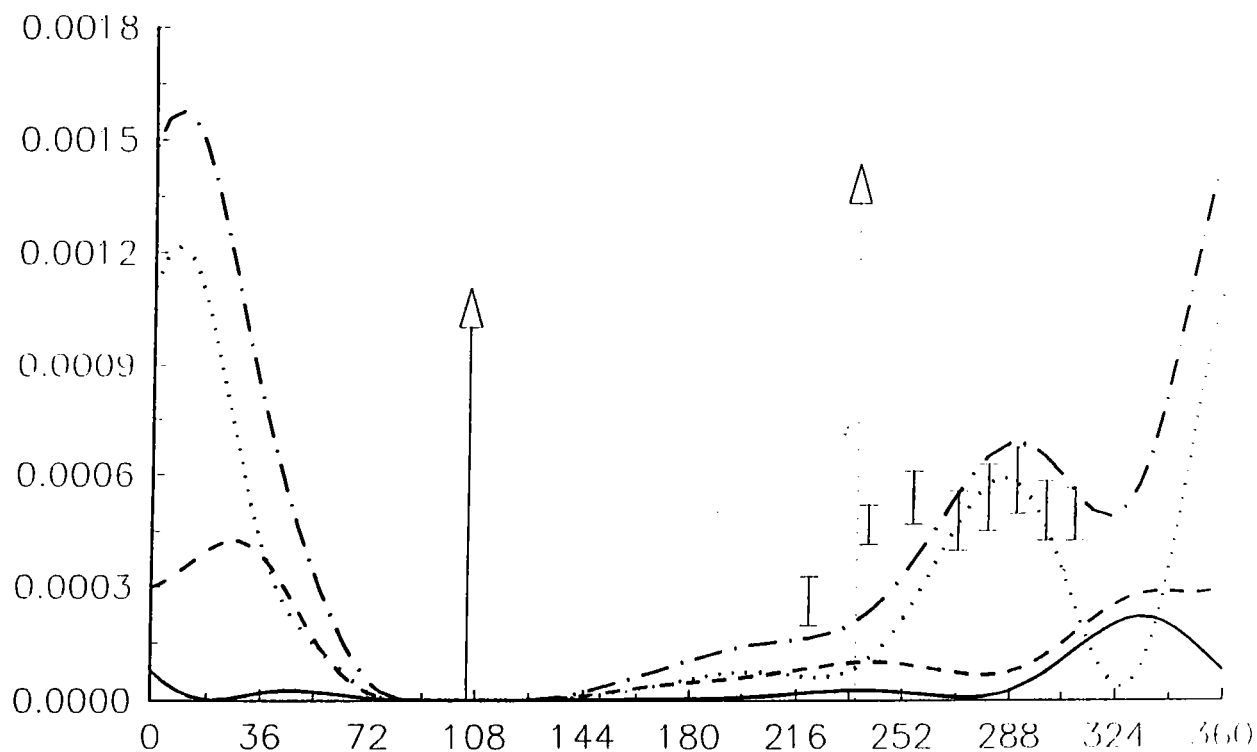


Fig. 4a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 105^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

—— contribution de l'état 1S de l'ion

----- contribution de l'état 1D de l'ion

..... contribution de l'état 3P de l'ion

- · - · - somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$

↑ direction du premier électron éjecté

⤵ direction du transfert d'impulsion \vec{K}

⊥ expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 1.5

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV} \quad \theta_1 = 105^\circ$$

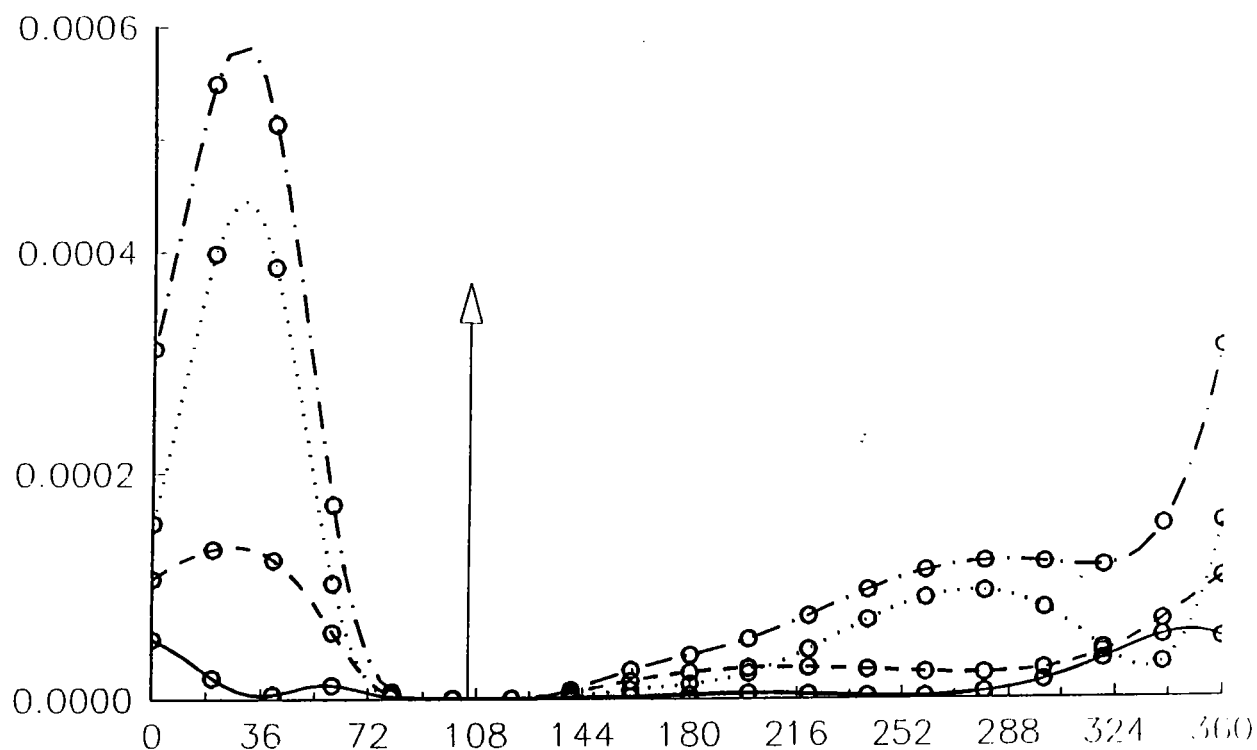


Fig. 4b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 105^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et de Roetti

- contribution de l'état 1S de l'ion
- contribution de l'état 1D de l'ion
- contribution de l'état 3P de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = 255^\circ$$

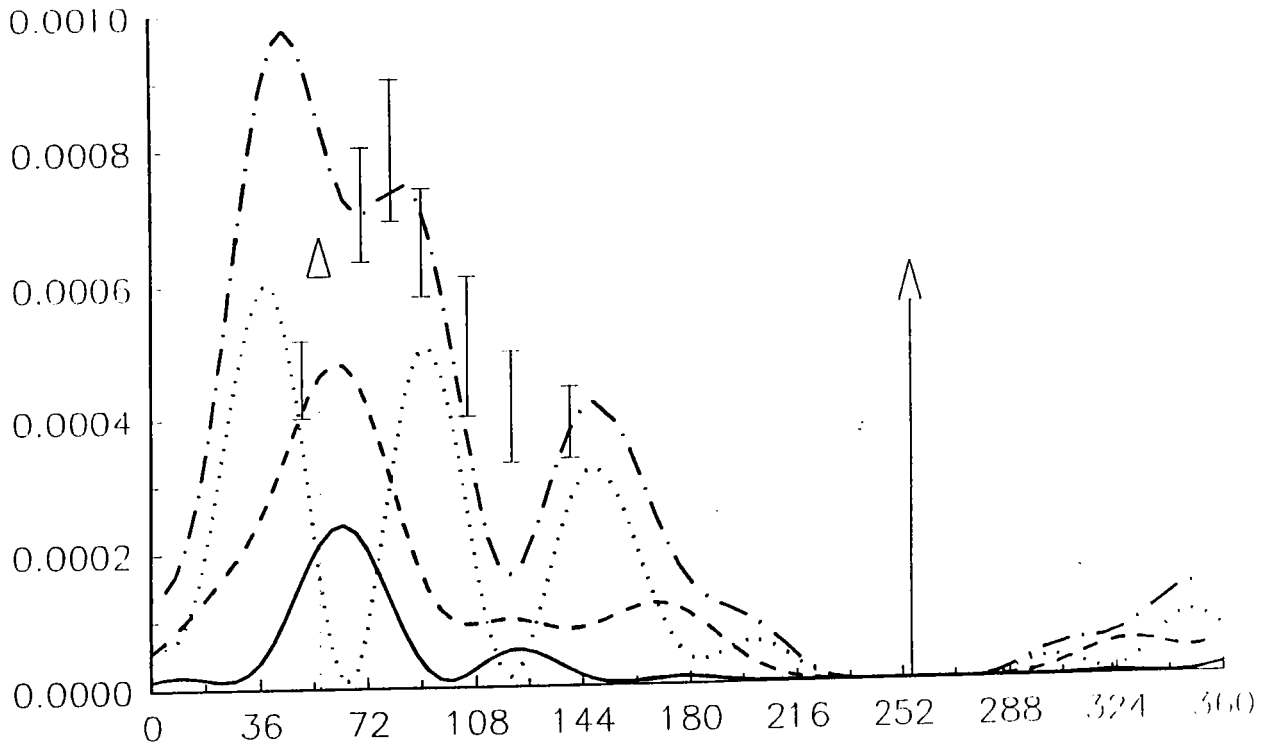


Fig. 4c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $1S+1D+3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- ⋮ direction du transfert d'impulsion \vec{K}
- I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 1.5

$E_1 = 60\text{ev}$ $E_2 = 30\text{ev}$ $\theta_1 = 104\text{deg}$

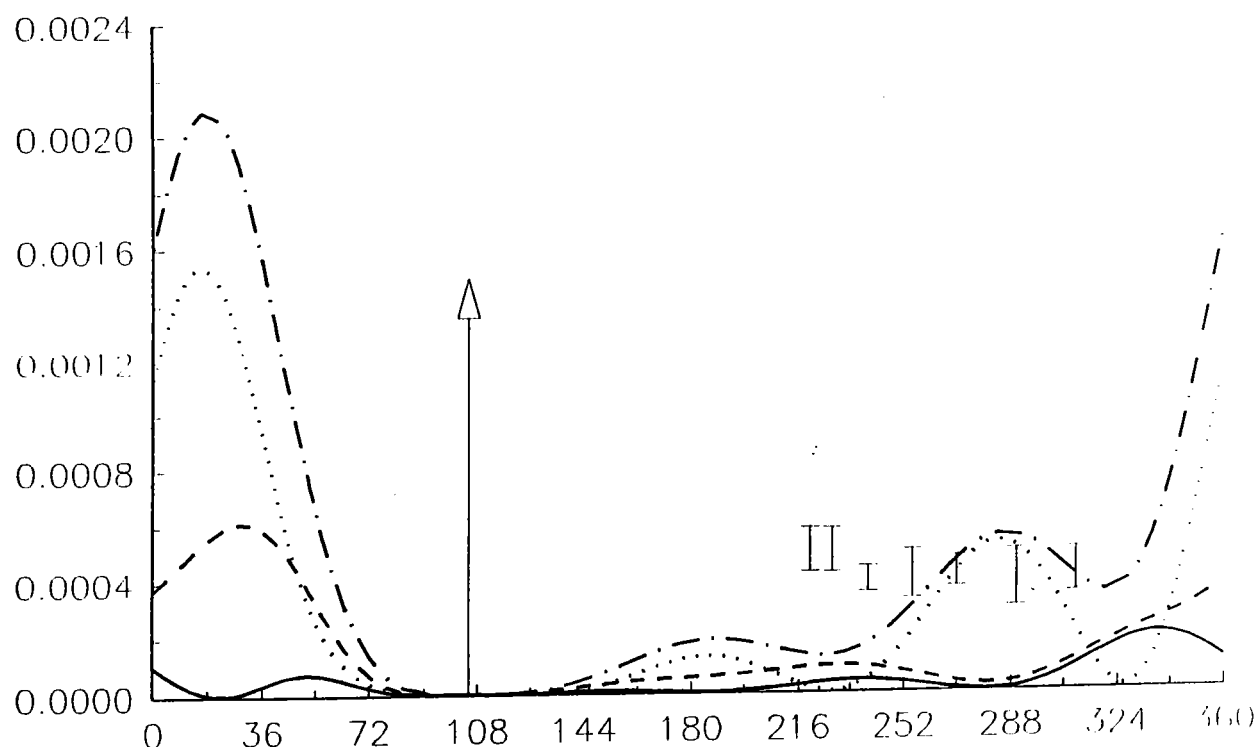


Fig. 4d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 60\text{eV}$, $E_2 = 30\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$.
Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

—— contribution de l'état ^1S de l'ion
 ----- contribution de l'état ^1D de l'ion
 contribution de l'état ^3P de l'ion
 -.-.- somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$

↑ direction du premier électron éjecté

I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 1.5

$E_1 = 60 \text{ eV}$ $E_2 = 30 \text{ eV}$ $\theta_1 = 104^\circ$

avec
orthogonalisation

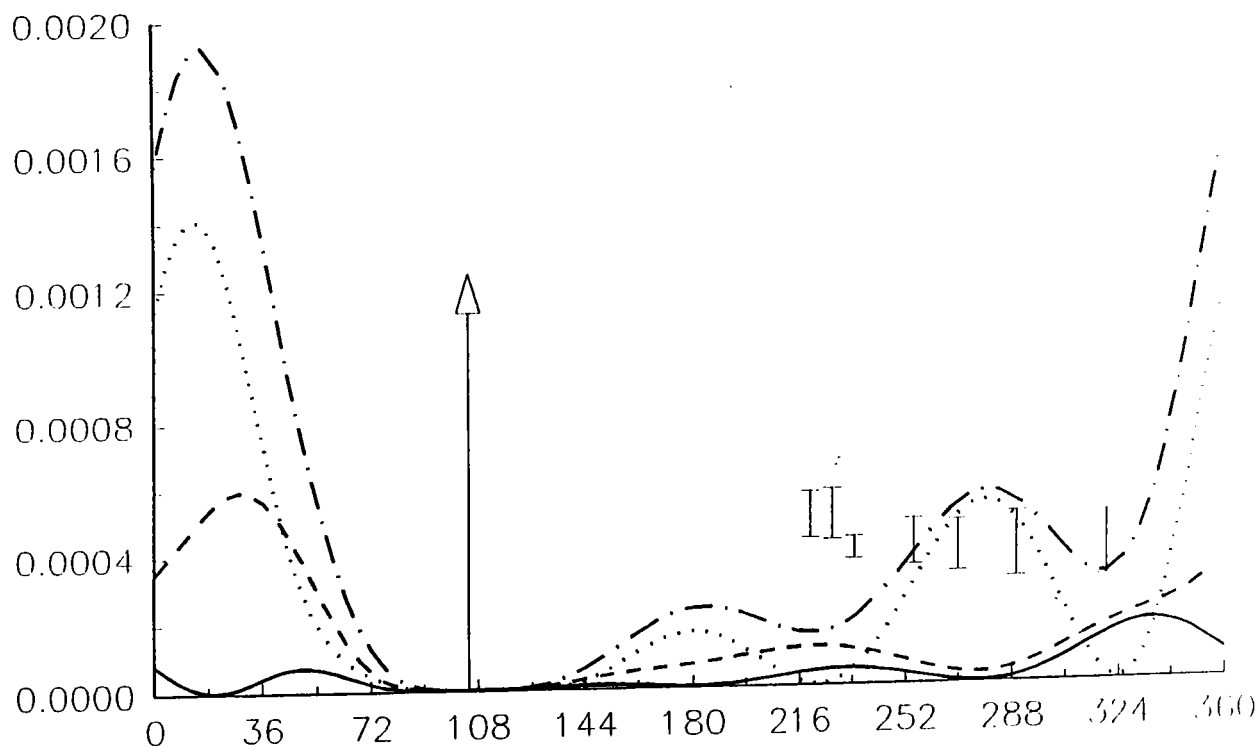


Fig. 4e - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 60 \text{ eV}$, $E_2 = 30 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$.
Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état ^1S de l'ion
- contribution de l'état ^1D de l'ion
- contribution de l'état ^3P de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 1.5

$$E_1 = 30 \text{ eV} \quad E_2 = 60 \text{ eV} \quad \theta_1 = 104^\circ$$

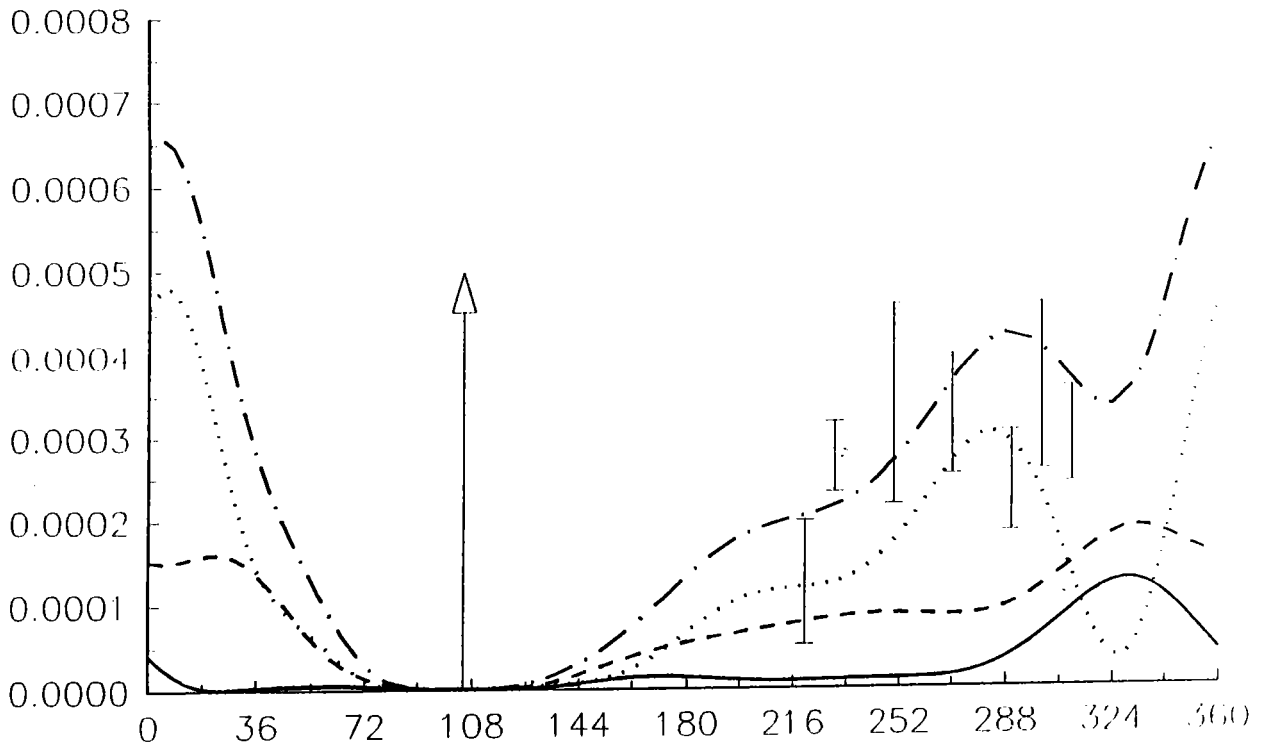


Fig. 4f - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 30 \text{ eV}$, $E_2 = 60 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$.
Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $1S+1D+3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 0.5

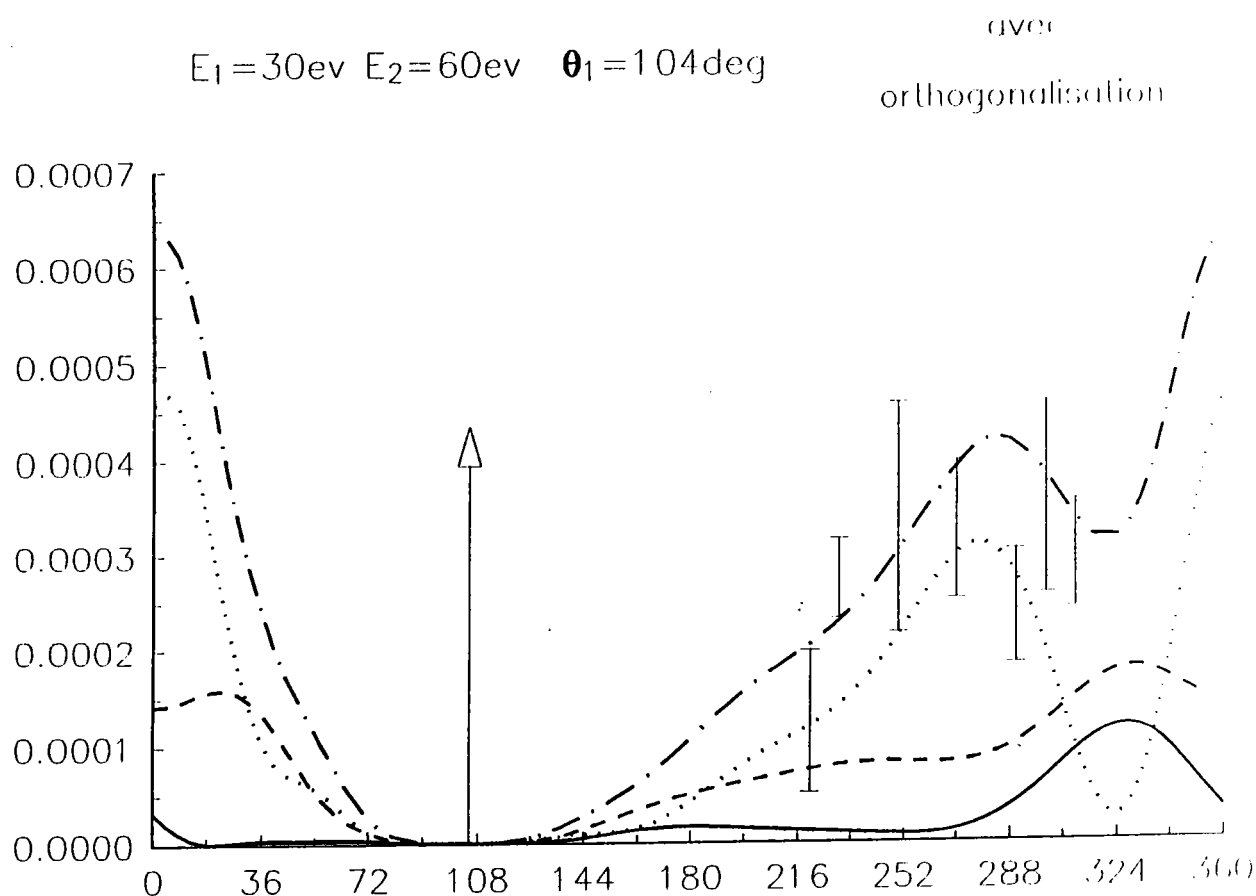


Fig. 4g - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 30\text{eV}$, $E_2 = 60\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état ^1S de l'ion
- - - contribution de l'état ^1D de l'ion
- contribution de l'état ^3P de l'ion
- · - · - somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$
- ↑ direction du premier électron éjecté
- I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 0.5

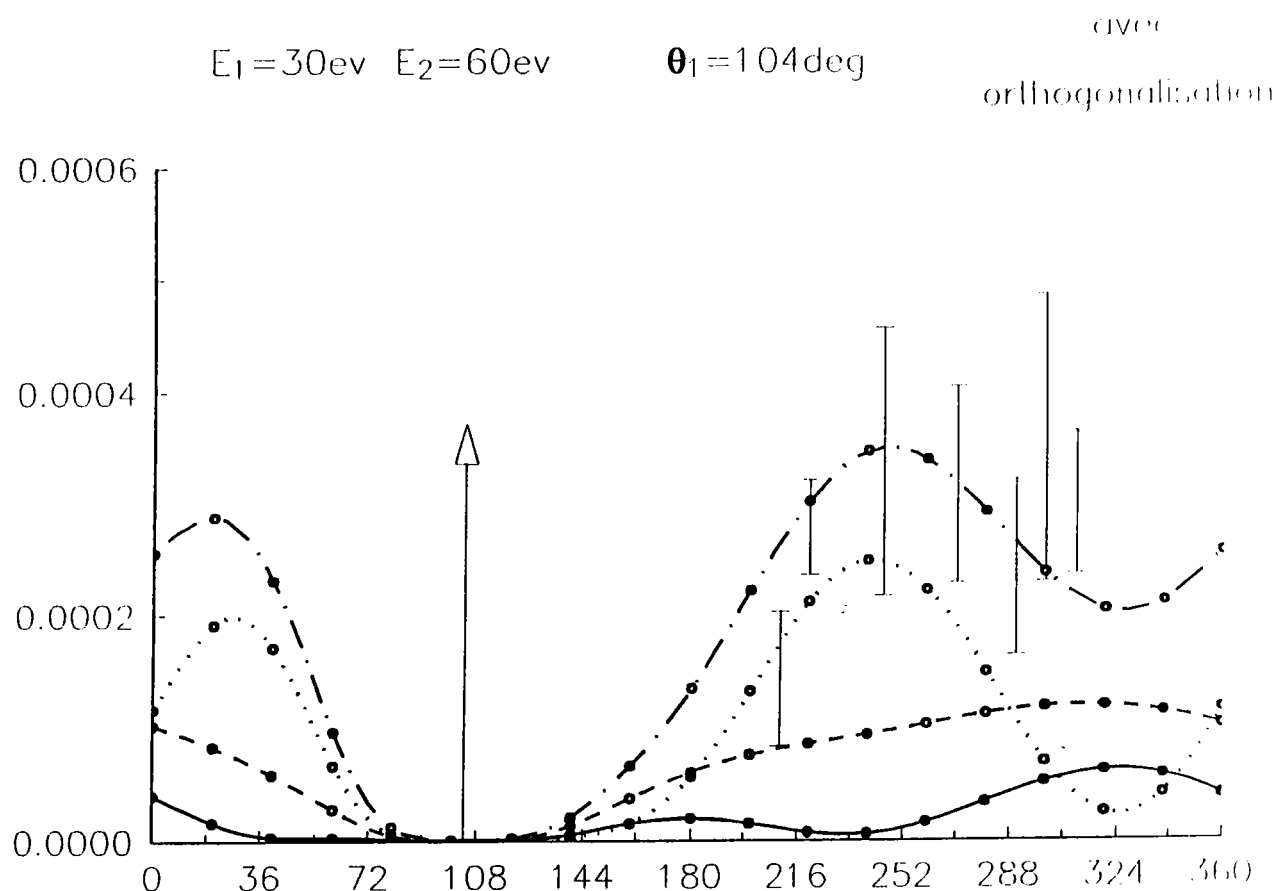


Fig. 4h - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 30\text{eV}$, $E_2 = 60\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$.
Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti (corrélée)

- contribution de l'état ^1S de l'ion
- - -○- - contribution de l'état ^1D de l'ion
- . . .○. . . contribution de l'état ^3P de l'ion
- . - . -○- . - . somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$

↑ direction du premier électron éjecté

I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 0.5

c - Cas du krypton $E_1 + E_2 = 120\text{eV}$

Une seule expérience a été réalisée par le groupe d'Orsay. Elle est de type symétrique $E_1 = E_2 = 60\text{eV}$ (Fig. 5a - 5c). La valeur de l'amplitude de la section efficace quintuplement différentielle est élevée. Elle est même supérieure à celle observée dans le cas correspondant b- ($E_1 + E_2 = 90\text{eV}$, $\theta_1 = 104^\circ$) mais reste inférieure à celle observée dans le cas a- ($E_1 + E_2 = 30\text{eV}$, $\theta_1 = 104^\circ$). Notre modèle donne un bon accord avec l'expérience moyennant ici l'introduction d'un facteur multiplicatif plus important. Néanmoins, la forme de la courbe expérimentale est bien reproduite, ce qui n'avait pas été le cas pour $E_1 = 60\text{eV}$ et $E_2 = 30\text{eV}$.

d - Cas de l'argon ($E_1 + E_2 = 30\text{eV}$)

Une seule expérience a été réalisée $E_1 = 20\text{eV}$ et $E_2 = 10\text{eV}$. La figure 6a montre un bon accord théorie - expérience. La prise en compte de la corrélation dans l'état initial joue ici un rôle considérable aussi bien du point de vue amplitude que forme de la courbe. Ce dernier point est illustré par la figure 6b (tracée en diagramme polaire) Nous avons également tracé deux autres diagrammes polaires (Fig. 6c et 6d) relatifs au cas du krypton qui montrent également l'influence de la corrélation sur la forme de la courbe. Ce point est très visible sur la figure 6d pour $E_1 = E_2 = 45\text{eV}$.

$$E_1 = E_2 = 60 \text{ eV} \quad \theta_1 = 104^\circ$$

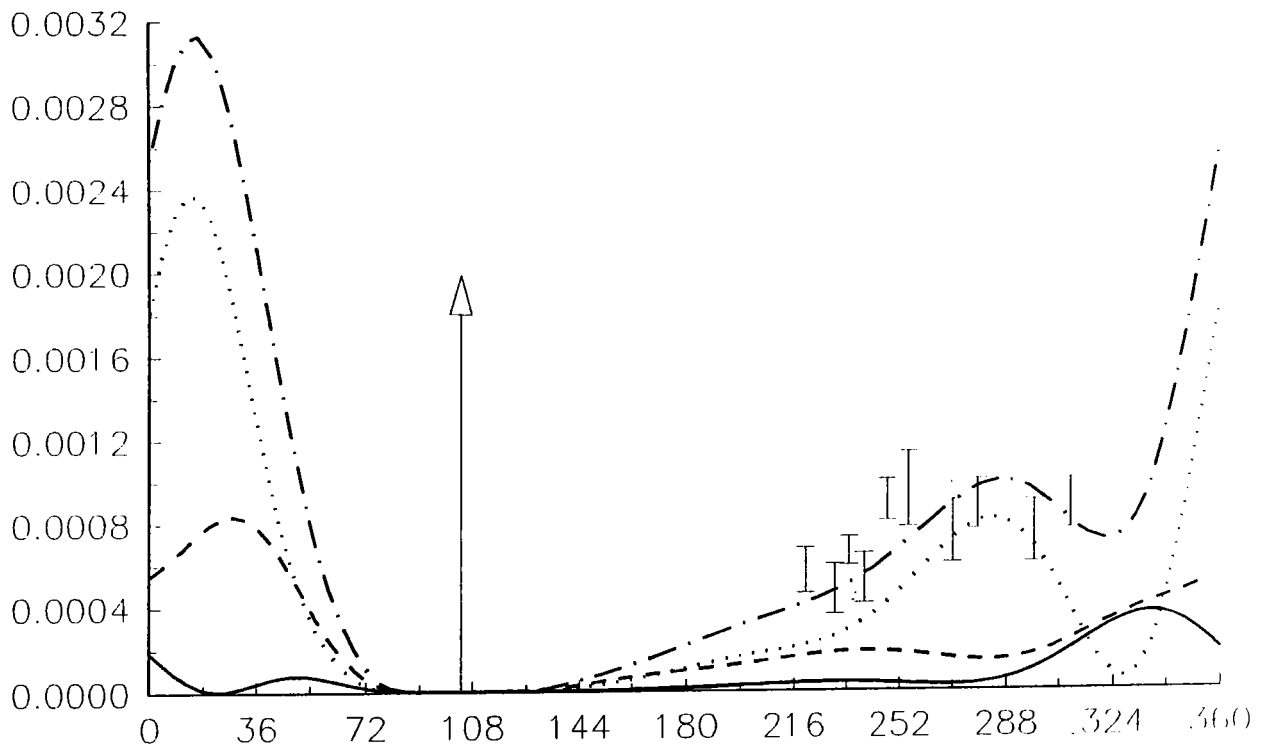


Fig. 5a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

—— contribution de l'état ^1S de l'ion

----- contribution de l'état ^1D de l'ion

..... contribution de l'état ^3P de l'ion

-.-.- somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$

↑ direction du premier électron éjecté

I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 12.5

$$E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = 104^\circ$$

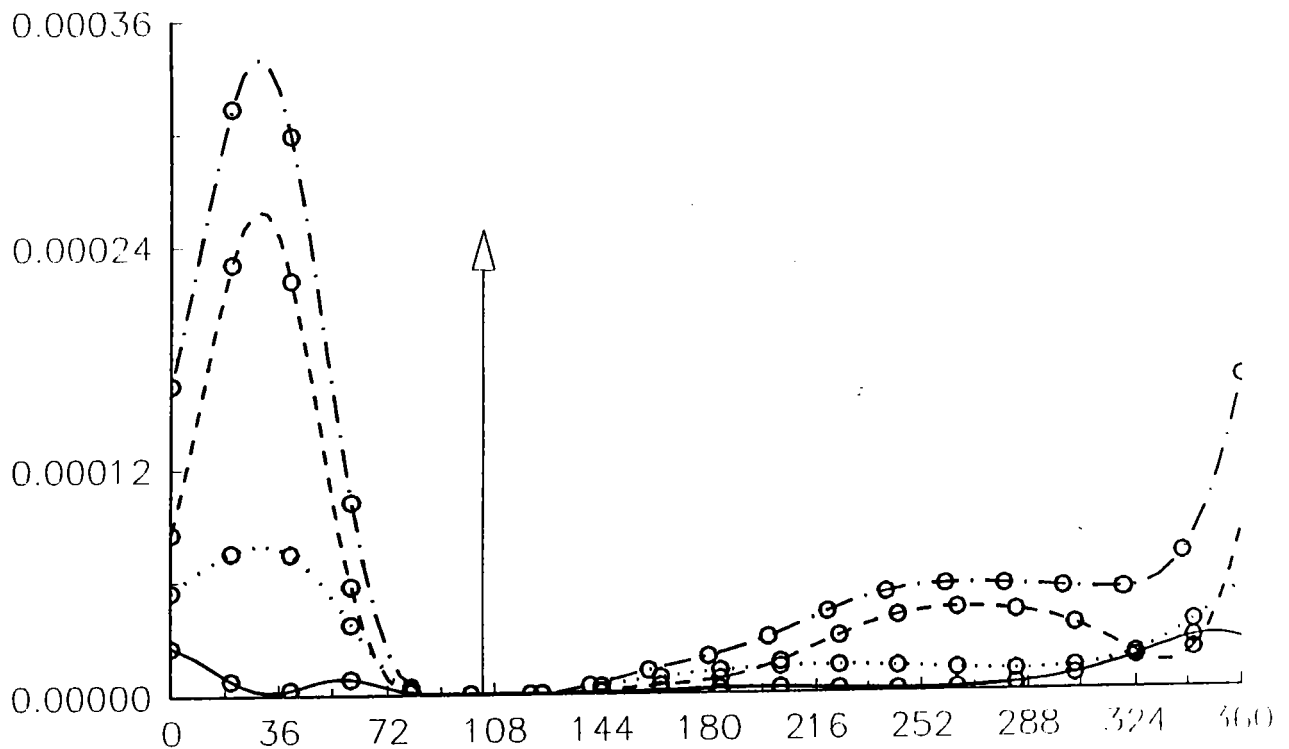


Fig. 5b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et de Roetti .

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- - -○- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- ...○... contribution de l'état $3P$ de l'ion
- · - · -○- somme des trois contributions $1S + 1D + 3P$
- ↑ direction du premier électron éjecté

$E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$ $\theta_1 = 104^\circ$

avec
orthogonalisation

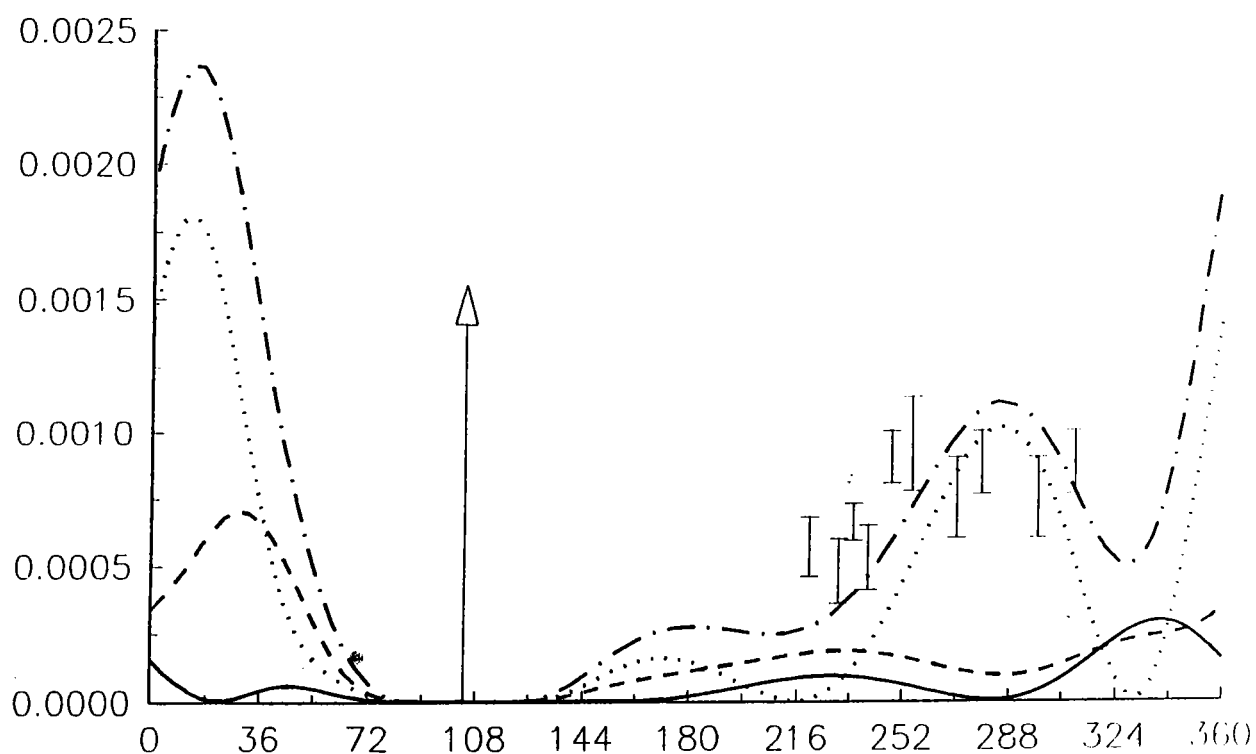


Fig. 5c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 104^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

— contribution de l'état 1S de l'ion

----- contribution de l'état 1D de l'ion

..... contribution de l'état 3P de l'ion

- · - · - somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$

↑ direction du premier électron éjecté

I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 12.5

$E_1 = 20\text{eV}$ $E_2 = 10\text{eV}$ $\theta_1 = 255^\circ$

orthogonalisation

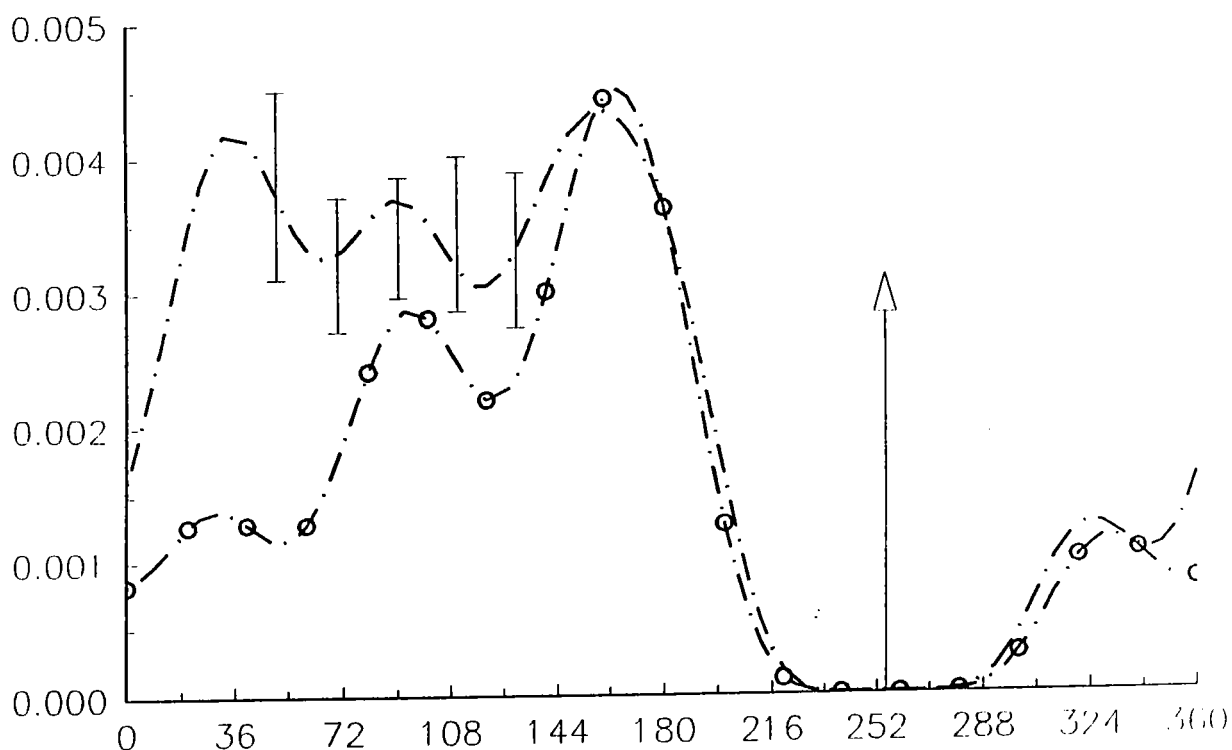


Fig. 6a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée) et celle de Clementi et Roetti .

--- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$ (Langlois)

-0-0- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$ (Clementi et Roetti)

↑ direction du premier électron éjecté

I expérience

Les résultats théoriques sont multipliés par 0.4

$E_1=20\text{ev}$ $E_2=10\text{ev}$ $\theta_1=255\text{deg}$

avec
orthogonalisation

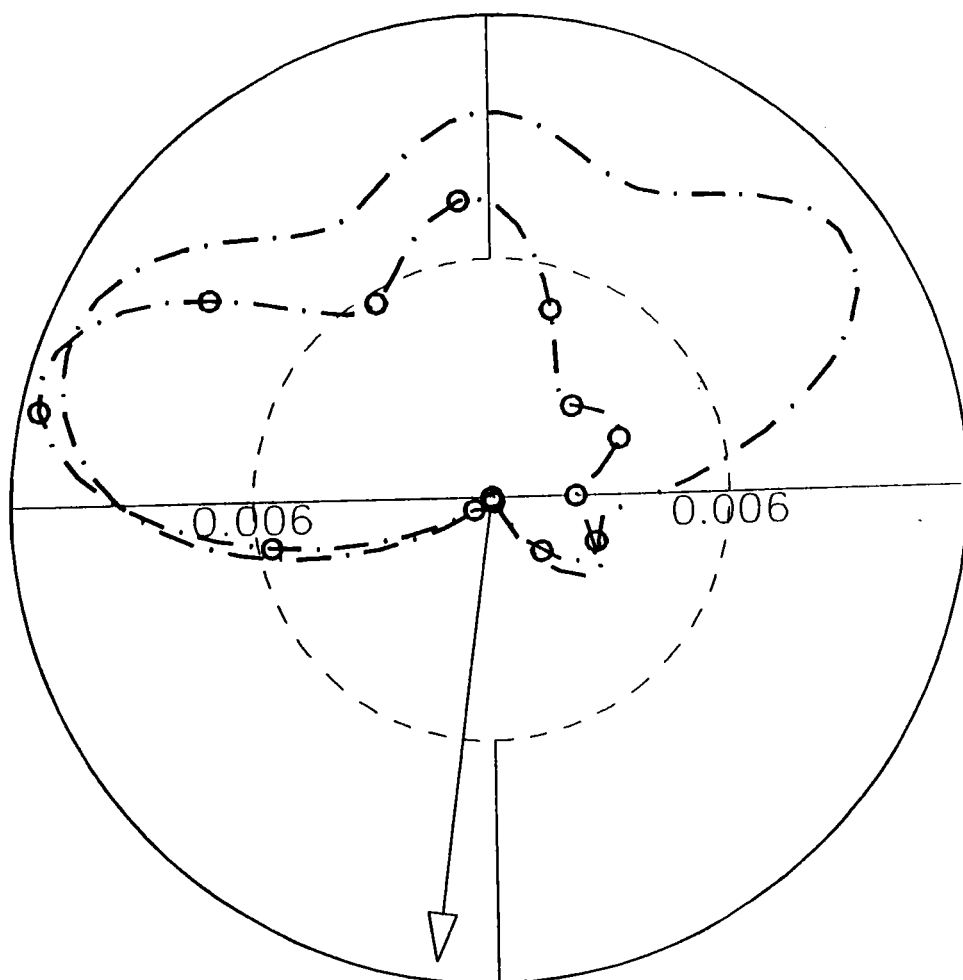


Fig. 6b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du l'argon représentée en diagramme polaire en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée) et celle Clementi et de Roetti
 -.-.- - somme des trois contributions $1S+1D+3P$ (Langlois)
 -o-o- somme des trois contributions $1S+1D+3P$ (Clementi et Roetti)
 ↑ direction du premier électron éjecté

$$E_1 = 20\text{eV} \quad E_2 = 10\text{eV}$$

$$\theta_1 = 255^\circ$$

avec orthogonalisation

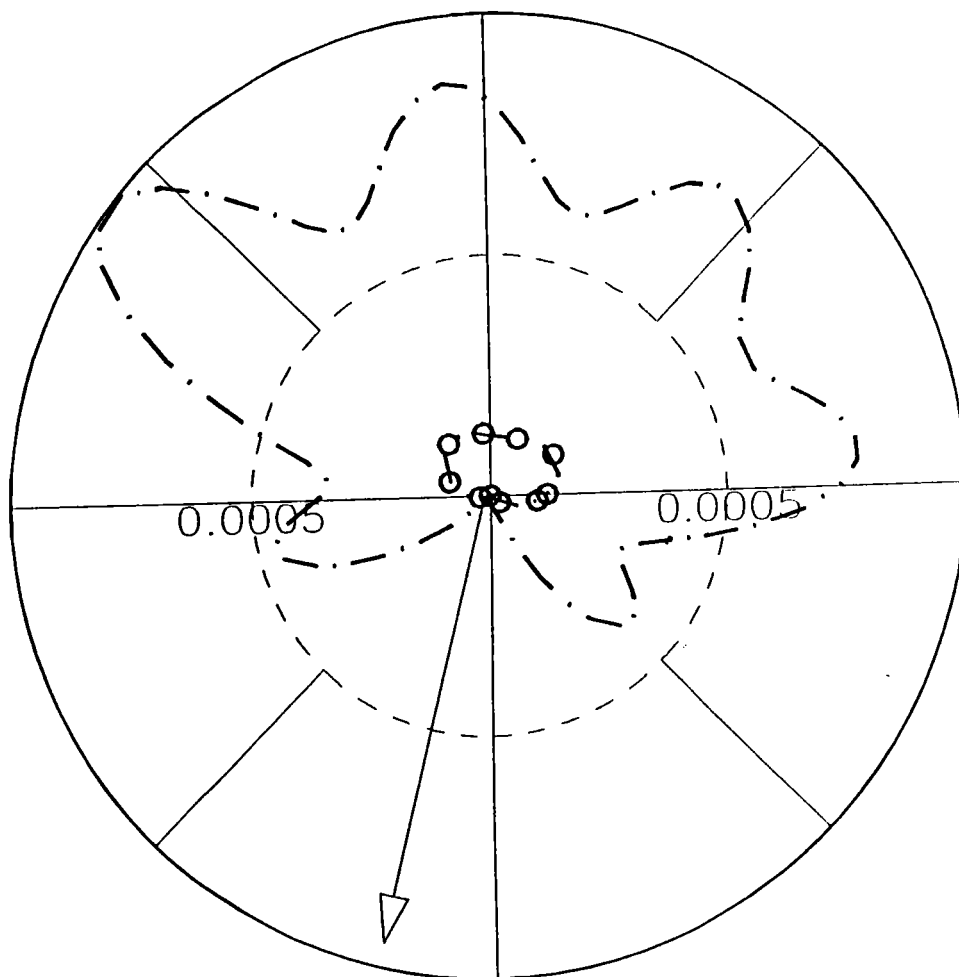
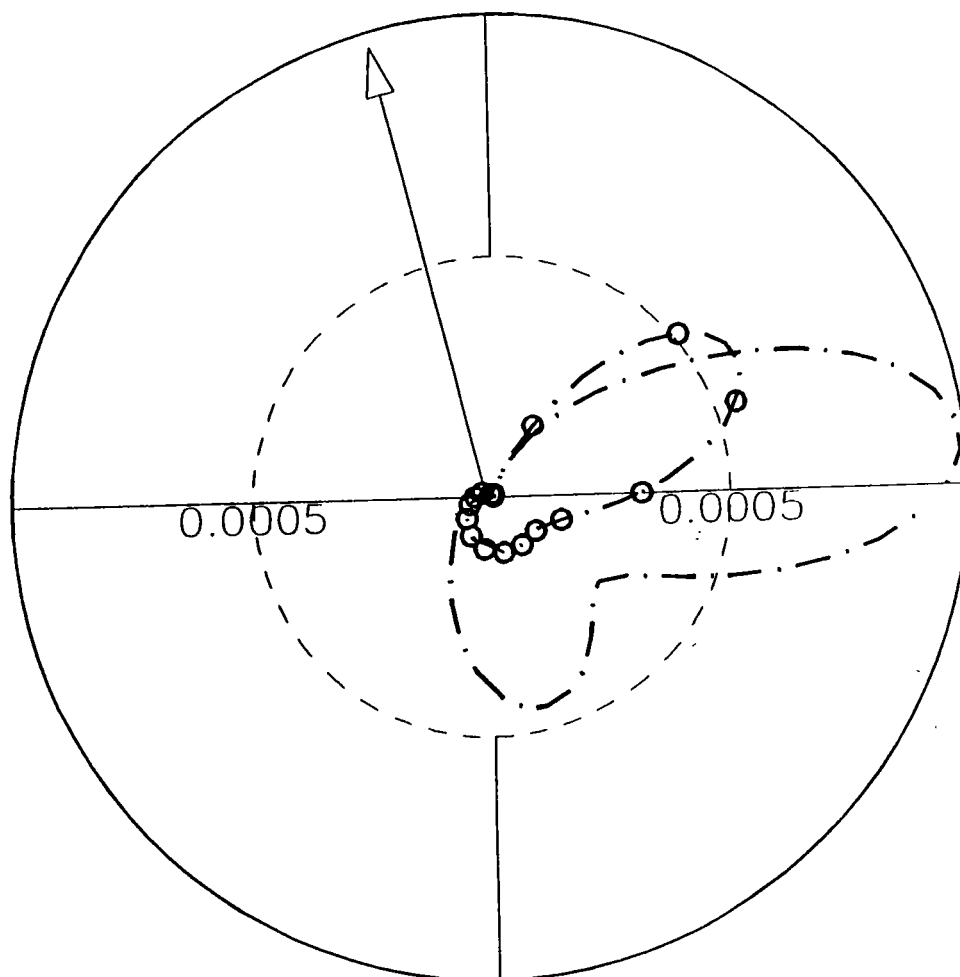


Fig. 6c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton représentée en diagramme polaire en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial .
 Fonction d'onde de l'état initial : celle Langlois (corrélée) et celle de Clementi et de Roetti
 -.-.- - somme des trois contributions $^1S+^1D+^3P$ (Langlois)
 -o-o- somme des trois contributions $^1S+^1D+^3P$ (Clementi et Roetti)
 ↑ direction du premier électron éjecté

orthogonalisation

 $\theta_1 = 1.05 \text{ deg}$ 

-.-.- somme des trois contributions $^1S+^1D+^3P$ (Langlois)
 -o-o- somme des trois contributions $^1S+^1D+^3P$ (Clementi et Roetti)
 ↑ direction du premier électron éjecté

e - Cas du néon

Aucune expérience n'a été réalisée à ce jour, mais il nous a semblé utile d'examiner le comportement du néon dans les mêmes conditions que l'argon et le krypton. Les figures 7a et 7b montrent ici l'influence négligeable de la corrélation dans l'état initial. Ce point est très important et mérite quelques commentaires. Dal Cappello et col.^[19] ont étudié systématiquement la contribution de chaque interaction de configuration présente dans la fonction corrélée de Langlois. Ils ont montré la forte prépondérance des termes ($4d^2$) pour le krypton et ($3d^2$) pour l'argon. Ce sont ces termes qui expliquent la forte différence de comportement entre les fonctions de type Hartree-Fock de Clementi et de Roetti et les fonctions interaction de configuration de Langlois. Or, pour le néon, il n'existe pas de couche d de même niveau quantique que $2p^6$. Cette absence explique à elle seule les résultats différents de la double ionisation du néon par rapport à la double ionisation de l'argon et du krypton.

Un autre point très important est celui évoqué par R.Hall et col.^[20] lors de l'étude de double photoionisation des gaz rares. Ils ont observé la prépondérance de la contribution 3P à la section efficace totale dans le cas de l'argon, du krypton et du xénon, excepté le néon. Nous avons étudié ce point en traçant la section efficace quintuplement différentielle (Fig. 7c) mais nous n'avons relevé aucune différence de comportement : le terme 3P semble encore rapporter la plus forte contribution comme le cas de l'argon et du krypton. Le néon semble donc présenter un comportement différent et mériterait une investigation expérimentale plus conséquente aussi bien par impact photonique que par impact électronique.

f - Etude en fonction de l'angle de diffusion

Un autre point essentiel est l'étude de la variation de la section efficace quintuplement différentielle en fonction de l'angle de diffusion θ_s (figures 8a-d). L'angle d'éjection θ_1 est fixé ($\theta_1=280^\circ$ ou $\theta_1=80^\circ$). L'angle d'éjection θ_2 est variable ($\theta_2=105^\circ+\theta_s$ ou $\theta_2=255^\circ+\theta_s$) de telle façon que l'angle relative entre les deux électrons éjectés soit proche de 180° . On voit bien que la section efficace quintuplement différentielle décroît très rapidement quand l'angle de diffusion augmente, surtout entre 0° et 1° . Ce résultat confirme celui obtenu Joulakian et Dal Cappello^[21] sur l'étude de la double ionisation de l'hélium. L'accord avec l'expérience est nettement moins bon. Ce désaccord n'est pas surprenant car notre modèle ne donne pas une amplitude correcte (nous avons égalé la troisième fonction hypergéométrique de la fonction B.B.K à 1) en fait notre modèle ne peut expliquer que qualitativement les distributions angulaires.

$$E_1 = 20 \text{ eV} \quad E_2 = 10 \text{ eV}$$
$$\theta_1 = 255 \text{deg}$$

avec orthogonalisation

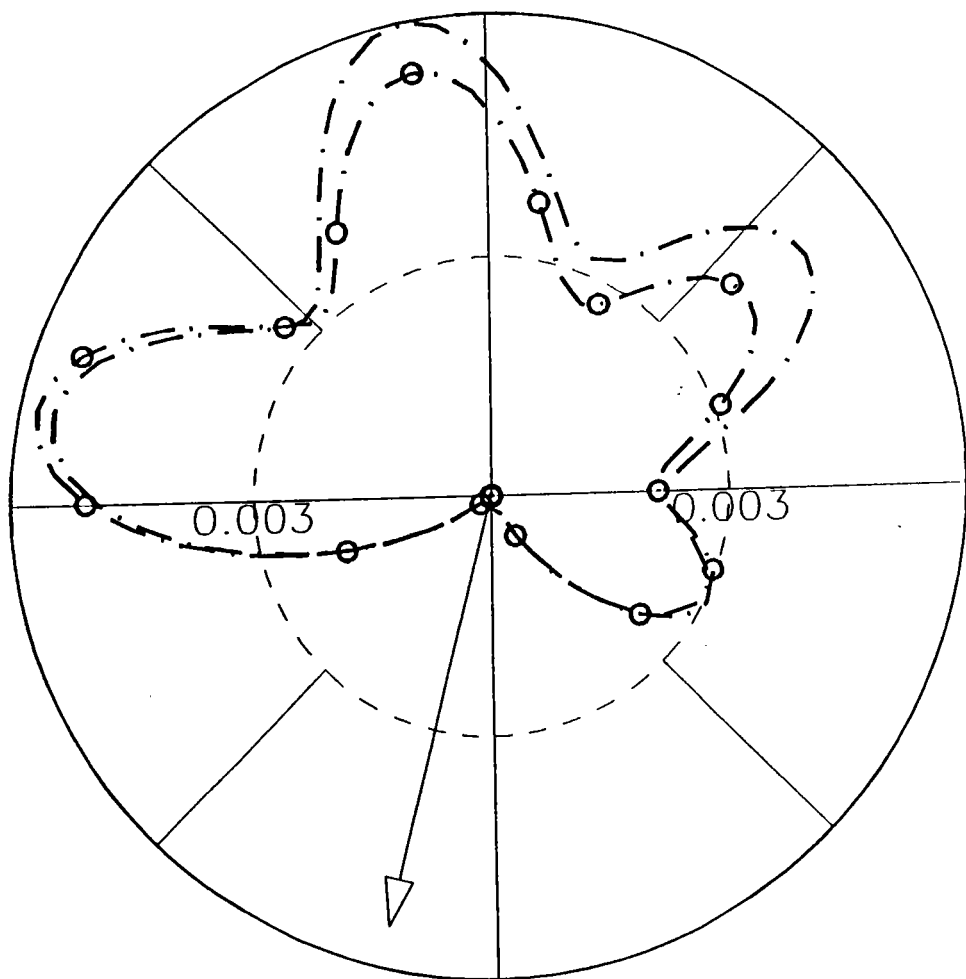


Fig. 7a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon représentée en diagramme polaire en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée) et celle de Clementi et de Roetti

--- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$ (Langlois)

—o—o— somme des trois contributions $1S+1D+3P$ (Clementi et Roetti)

↑ direction du premier électron éjecté

$E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$ $\theta_1 = 255^\circ$ avec orthogonalisation

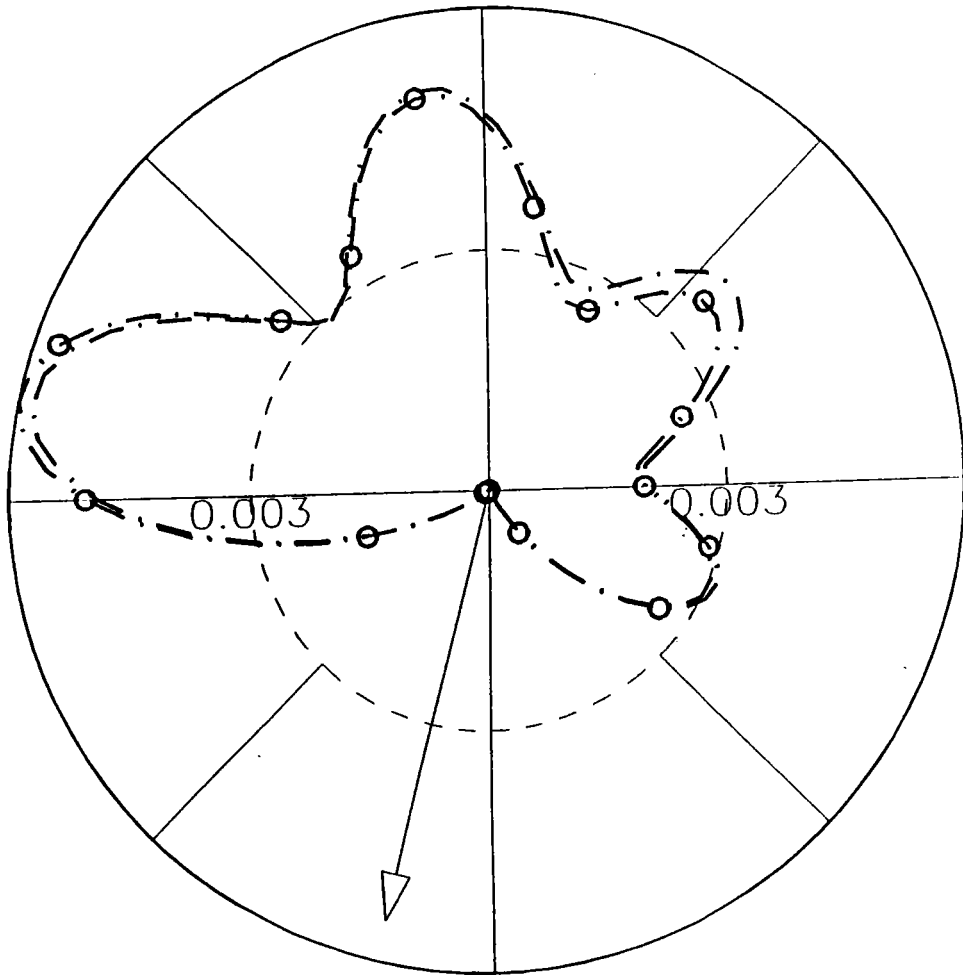


Fig. 7b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon représentée en diagramme polaire en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont identiques : $E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$. Modèle utilisé : fonction B.B.K . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée) et celle de Clementi et de Roetti

— · — · — — — — — somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$ (Langlois)

— o — o — — — — — somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$ (Clementi et Roetti)

↑ direction du premier électron éjecté

$$E_1 = 20\text{eV} \quad E_2 = 10\text{eV}$$

$$\theta_1 = 255^\circ$$

avec orthogonalisation

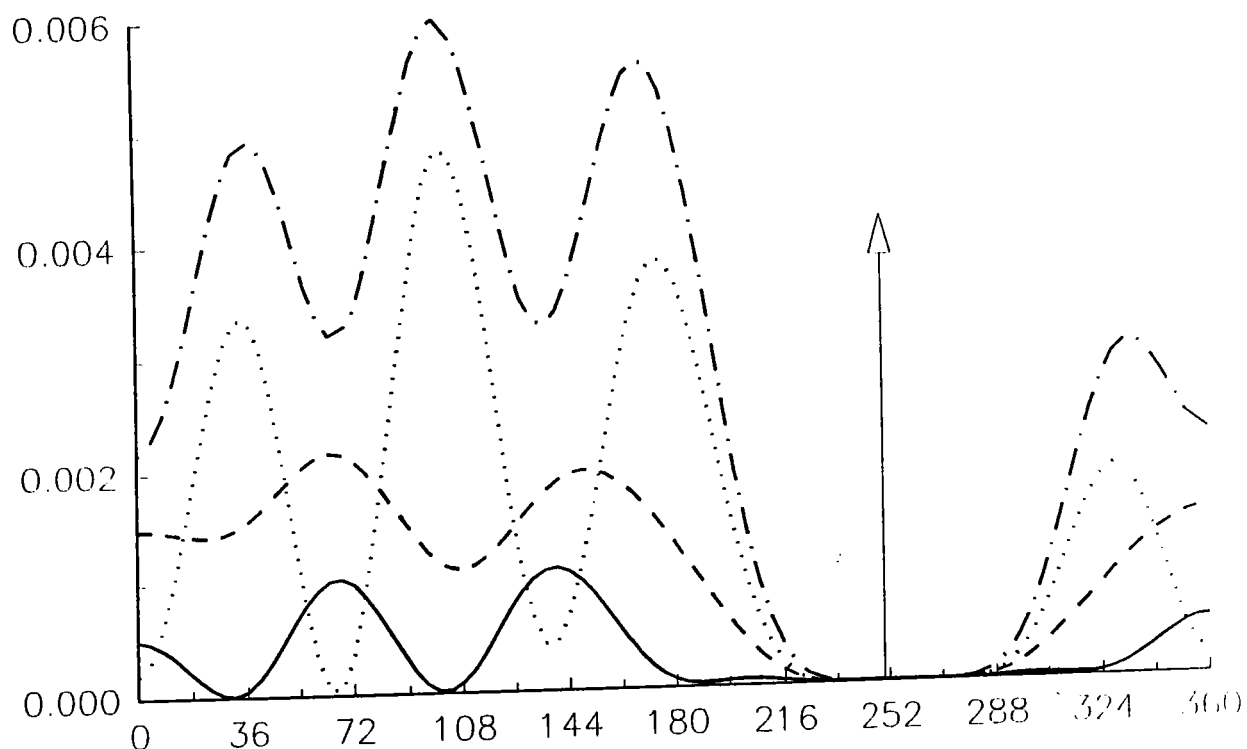


Fig. 7c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon en fonction de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron . Les énergies des électrons éjectés sont différentes : $E_1 = 20\text{eV}$, $E_2 = 10\text{eV}$. Le premier électron est éjecté suivant $\theta_1 = 255^\circ$.
Modèle utilisé : fonction B.B.K orthogonale à l'état initial . Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée)

—— contribution de l'état ^1S de l'ion

----- contribution de l'état ^1D de l'ion

..... contribution de l'état ^3P de l'ion

-.-.- somme des trois contributions $^1\text{S} + ^1\text{D} + ^3\text{P}$

↑ direction du premier électron éjecté

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = 80^\circ$$

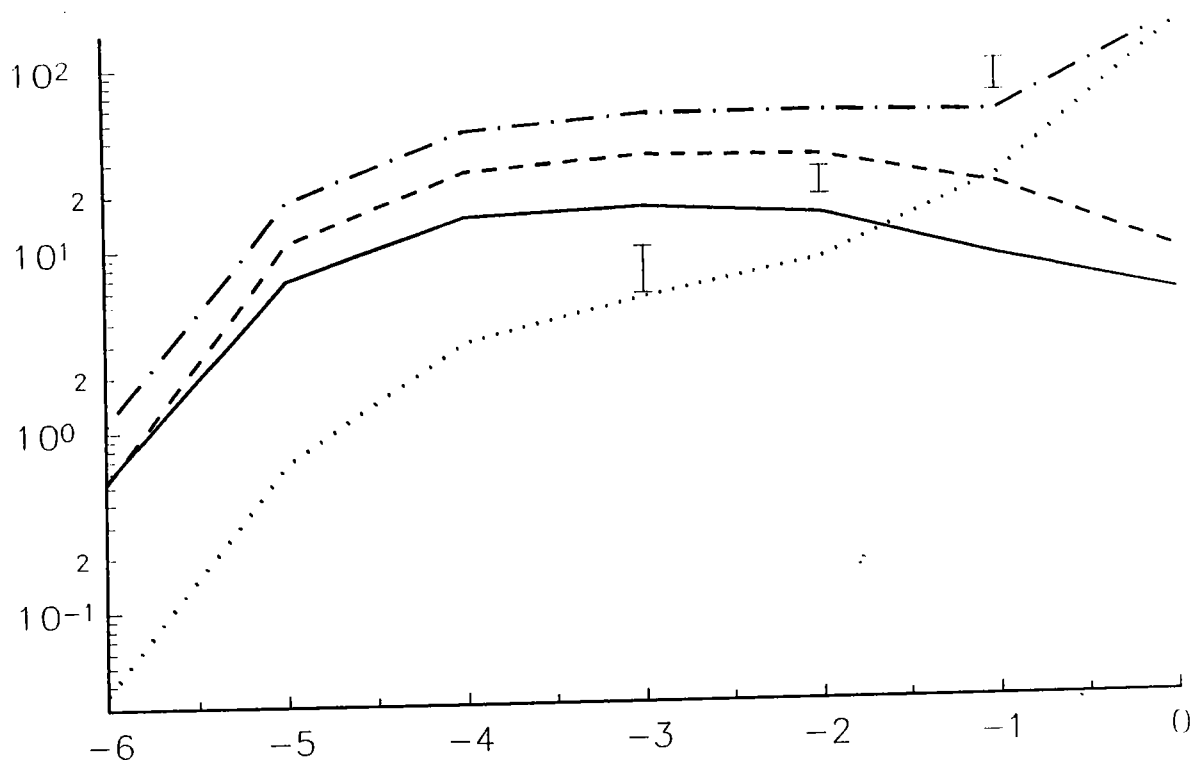


Fig. 8a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle de diffusion. Le premier électron est éjecté pour $\theta_1 = 80^\circ$. Le deuxième électron est éjecté pour $\theta_2 = 105^\circ + \theta_s$; (θ_s est l'angle de diffusion). Modèle utilisé: fonction B.B.K. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $1S+1D+3P$
- ⊥ expérience

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = 80^\circ$$

avec orthogonalisation

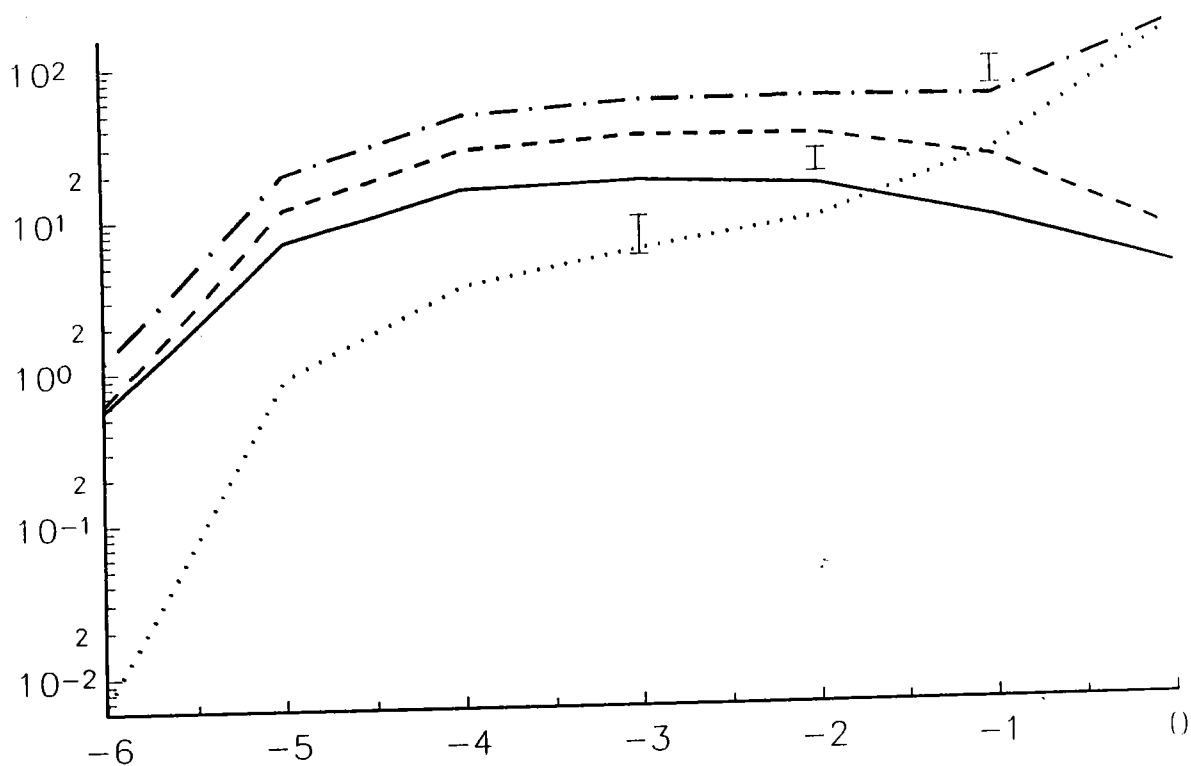


Fig. 8b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle de diffusion. Le premier électron est éjecté pour $\theta_1 = 80^\circ$. Le deuxième électron est éjecté pour $\theta_2 = 105^\circ + \theta_s$; (θ_s est l'angle de diffusion). Modèle utilisé: fonction B.B.K. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état 1S de l'ion
- contribution de l'état 1D de l'ion
- contribution de l'état 3P de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $^1S + ^1D + ^3P$
- ⊥ expérience

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

$$\theta_1 = 280^\circ$$

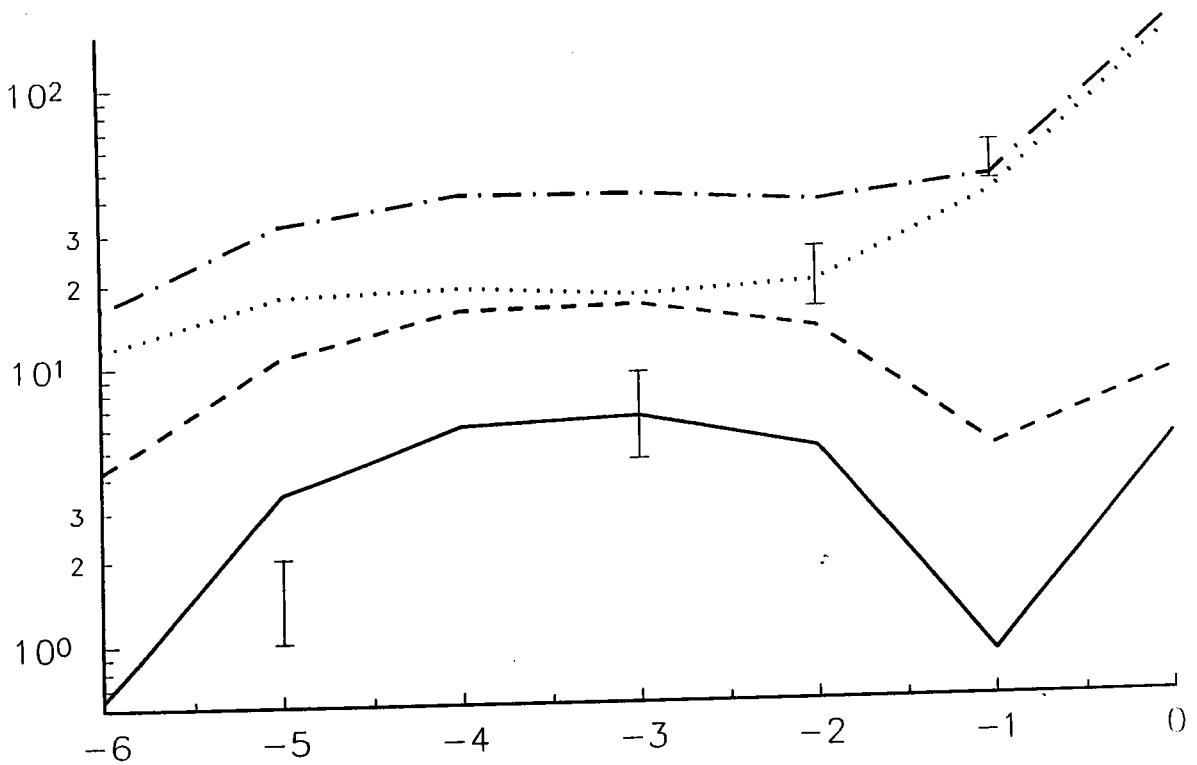


Fig. 8c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle de diffusion. Le premier électron est éjecté pour $\theta_1 = 280^\circ$. Le deuxième électron est éjecté pour $\theta_2 = 255^\circ + \theta_s$; (θ_s est l'angle de diffusion). Modèle utilisé: fonction B.B.K. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $1S+1D+3P$
- ⊥ expérience

$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$ $\theta_1 = 280^\circ$

avec orthogonalisation

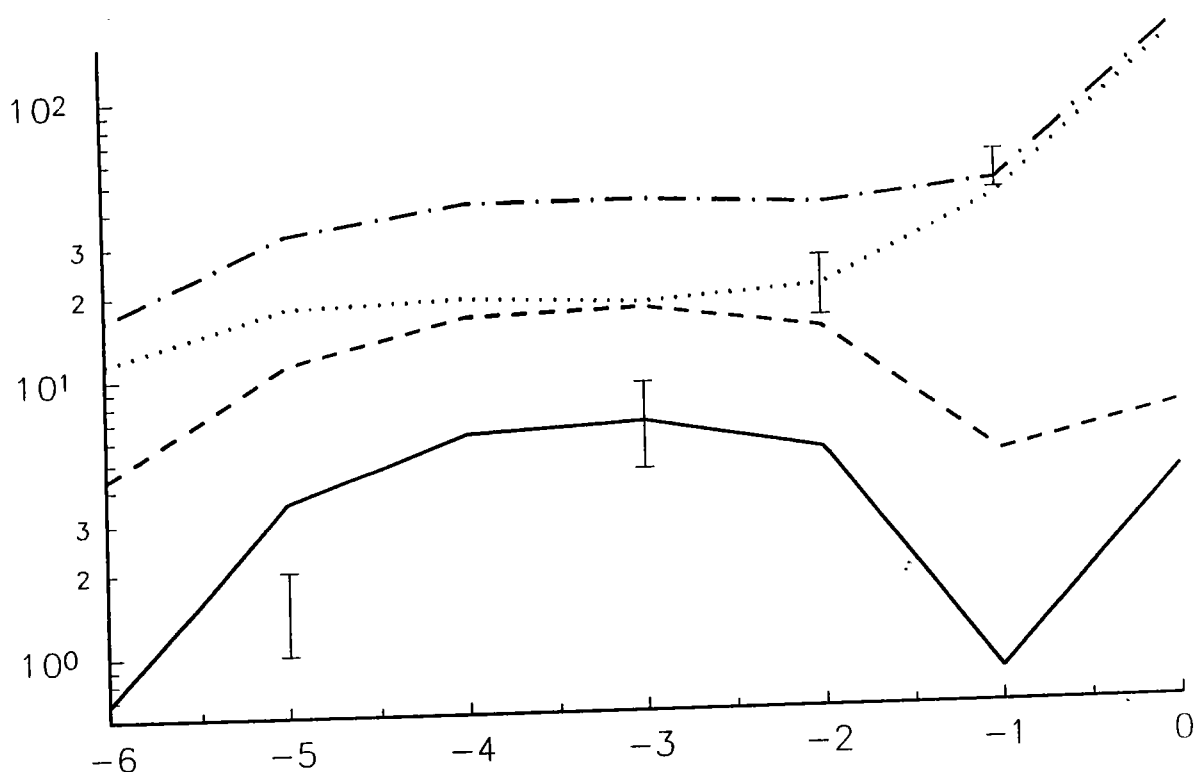


Fig. 8d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle de diffusion. Le premier électron est éjecté pour $\theta_1 = 280^\circ$. Le deuxième électron est éjecté pour $\theta_2 = 255^\circ + \theta_s$; (θ_s est l'angle de diffusion). Modèle utilisé: fonction B.B.K.

Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée)

- contribution de l'état $1S$ de l'ion
- contribution de l'état $1D$ de l'ion
- contribution de l'état $3P$ de l'ion
- .-.- somme des trois contributions $1S + 1D + 3P$
- ⊥ expérience

4- Obtention des meilleures conditions expérimentales

Afin de donner aux expérimentateurs les meilleures conditions expérimentales nous avons étudié la section efficace quintuplement différentielle en fonction des deux angles d'éjection pour des énergies variant de 5 eV à 85 eV. Les diagrammes en trois dimensions donnent des indications quant au meilleur emplacement des détecteurs. Lorsque les énergies des deux électrons éjectés sont égales (fig. 9a-d et 9h) on observe l'existence d'une vallée profonde où toute éjection est impossible. Cette vallée disparaît au fur et à mesure de l'amplification de la dissymétrie en énergie (fig.9g). Les figures 9 (a-g) illustrent respectivement le cas de la double ionisation de krypton. Les figures 10 (a-e) et 11 (a-e) illustrent respectivement le cas du néon et de l'argon. Il nous a semblé plus commode de rassembler les résultats marquants de ces figures dans un tableau. On constate de nouveau l'importance de la prise en compte de la corrélation dans l'état initial pour le cas du krypton.

	fonction d'onde initial	E ₁ en eV	E ₂ en eV	maximum	θ ₁ en deg.	θ ₂ en deg.
krypton	fonction de Langlois	15	15	6,6439 10 ⁻³	342	157
		45	45	9,9011 10 ⁻⁴	106	7
		60	30	2,2176 10 ⁻³	157	49
		85	5	1,5334 10 ⁻²	320	60
		60	60	2,5373 10 ⁻⁴	275	47
	fonction de H-F	15	15	2,3931 10 ⁻⁴	113	25
		45	45	4,9282 10 ⁻⁴	92	20
		60	30	1,9480 10 ⁻³	180	60
argon	fonction de Langlois	15	15	3,0018 10 ⁻²	105	2
		45	45	3,2208 10 ⁻³	336	89
		60	30	3,1658 10 ⁻³	90	338
		85	5	2,4181 10 ⁻³	336	85
		60	60	1,3563 10 ⁻³	332	82
néon	fonction de Langlois	15	15	1,6201 10 ⁻²	109	17
		45	45	1,0420 10 ⁻²	89	12
		60	30	1,1253 10 ⁻²	10	86
		85	5	1,5829 10 ⁻²	75	8
		60	60	5,8871 10 ⁻³	85	12

$$E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

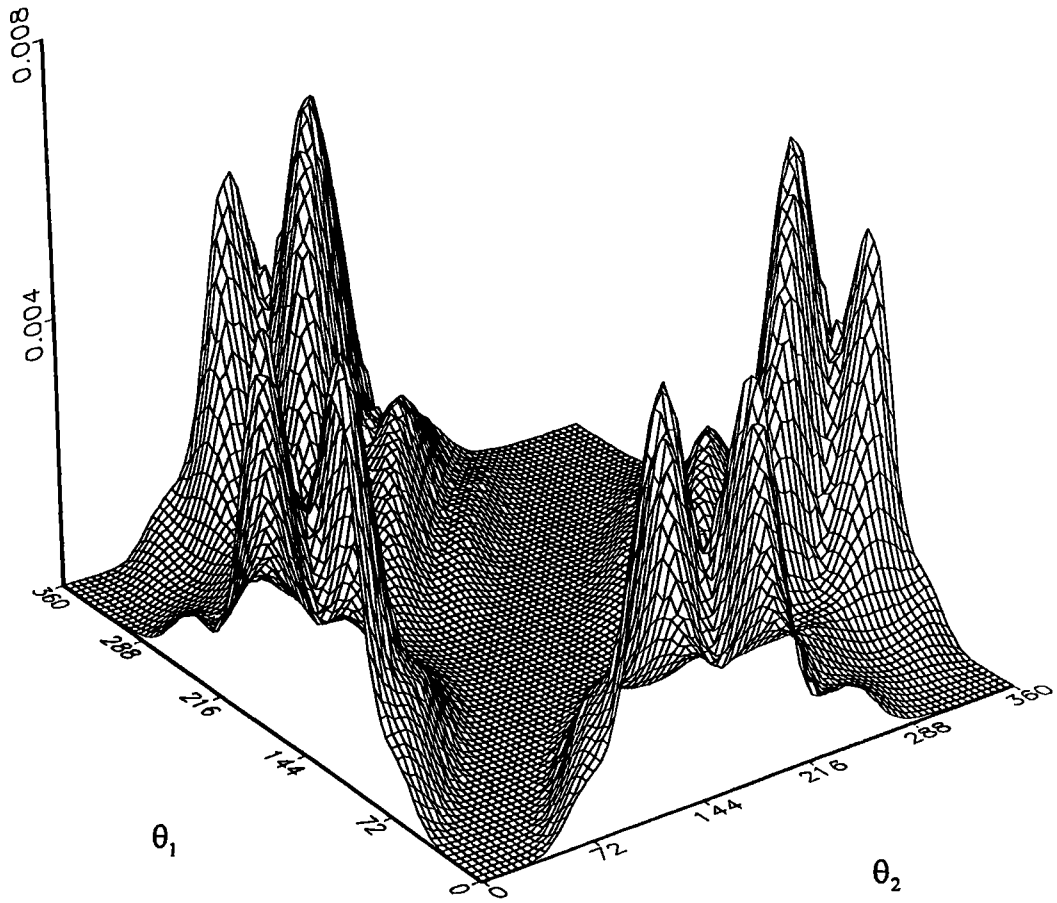


Fig. 9a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

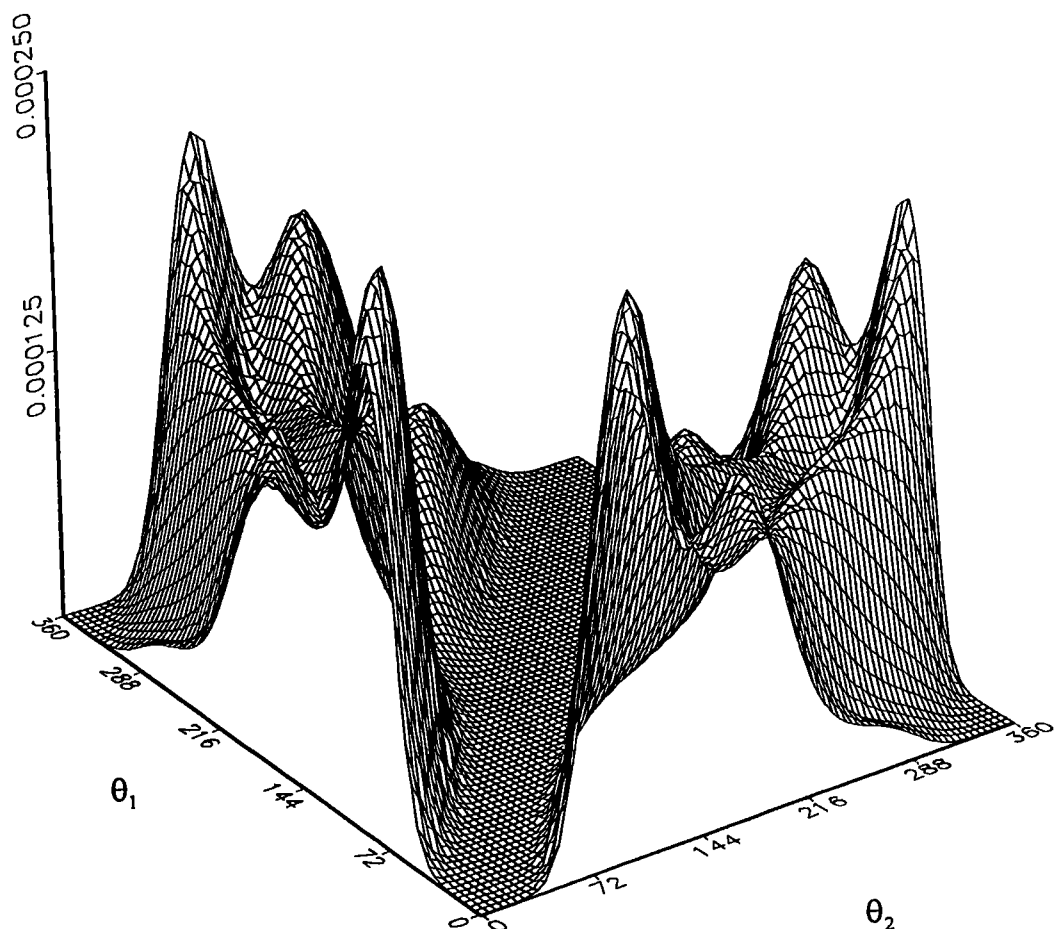


Fig. 9b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti.

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

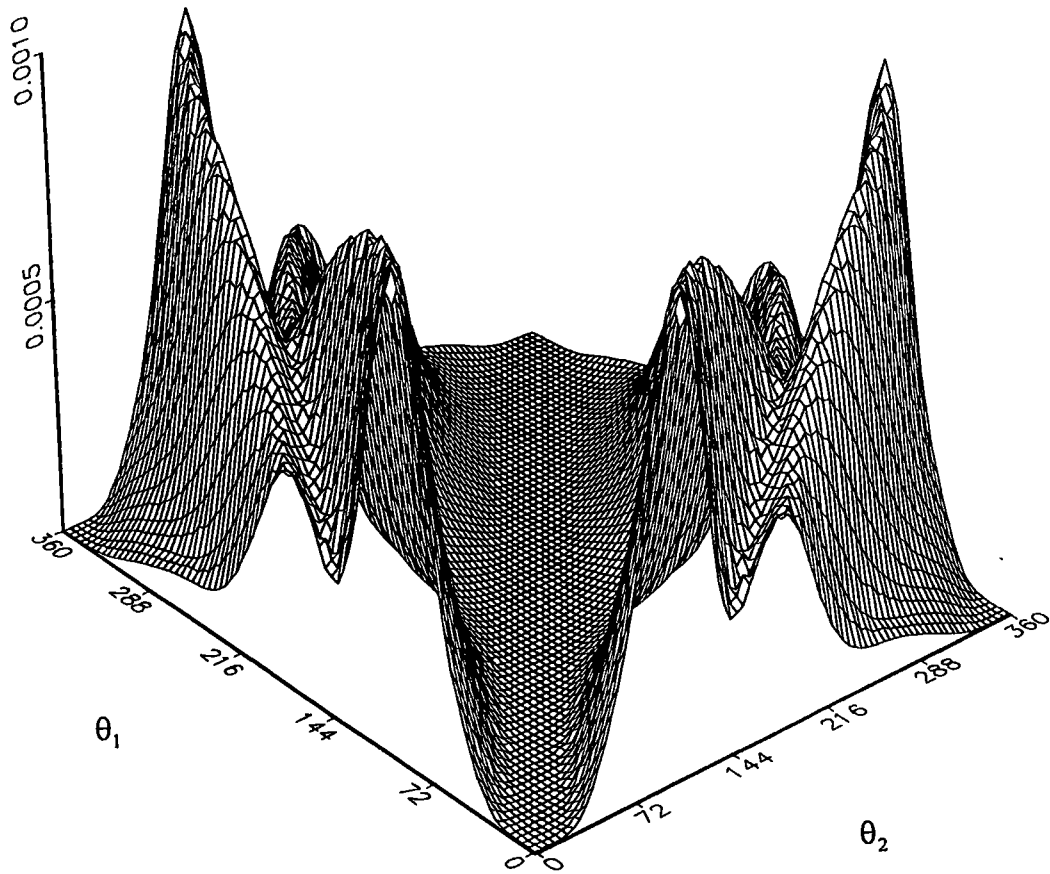


Fig. 9c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

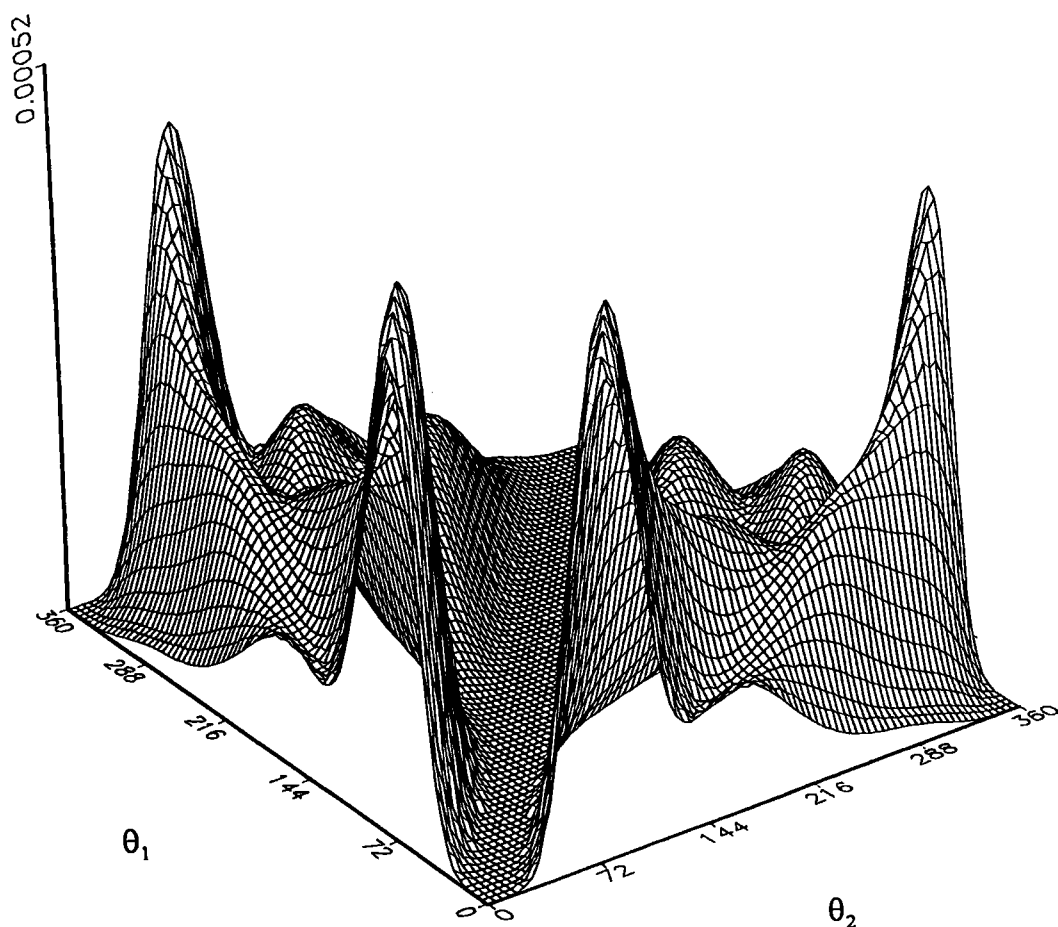


Fig. 9d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti.

$E_1=60$ $E_2=30\text{ev}$ avec orthogonalisation

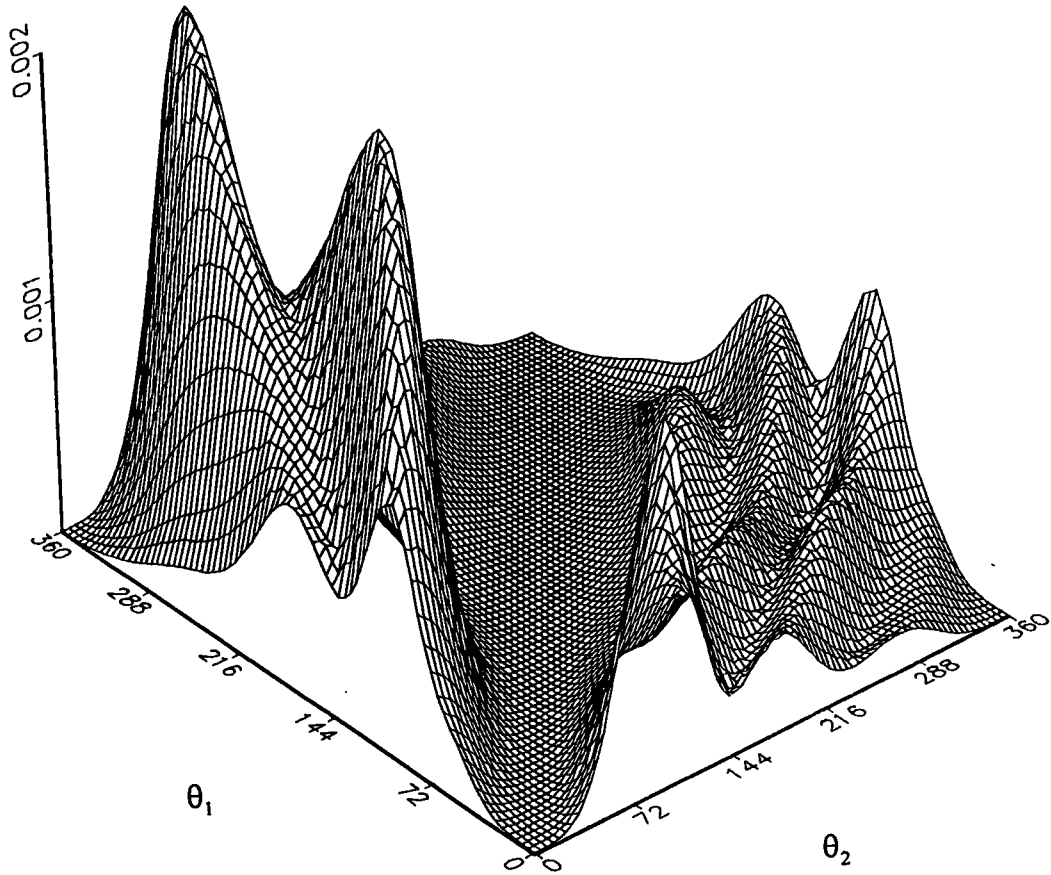


Fig. 9e - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée).

$E_1=60$ $E_2=30\text{ev}$ avec orthogonalisation

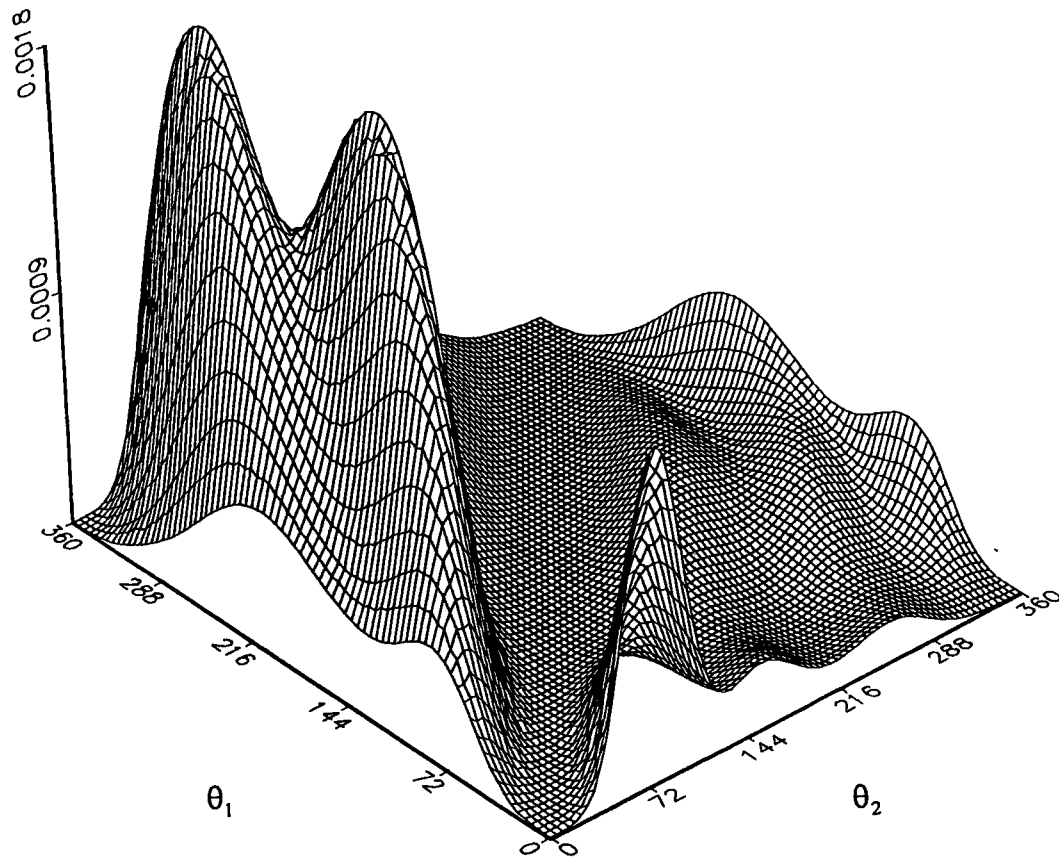


Fig. 9f - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Clementi et Roetti.

$E_1=85\text{ev}$ $E_2=5\text{ev}$

avec orthogonalisation

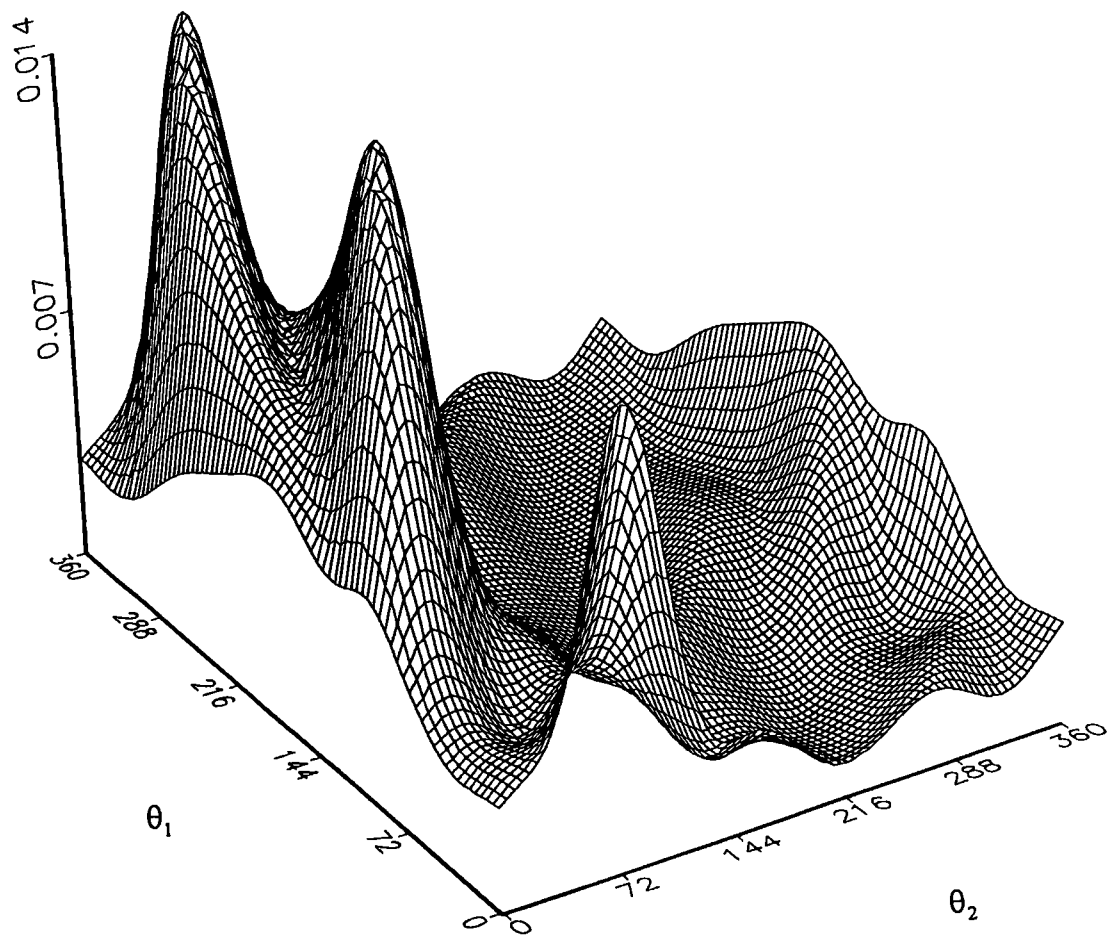


Fig. 9g - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

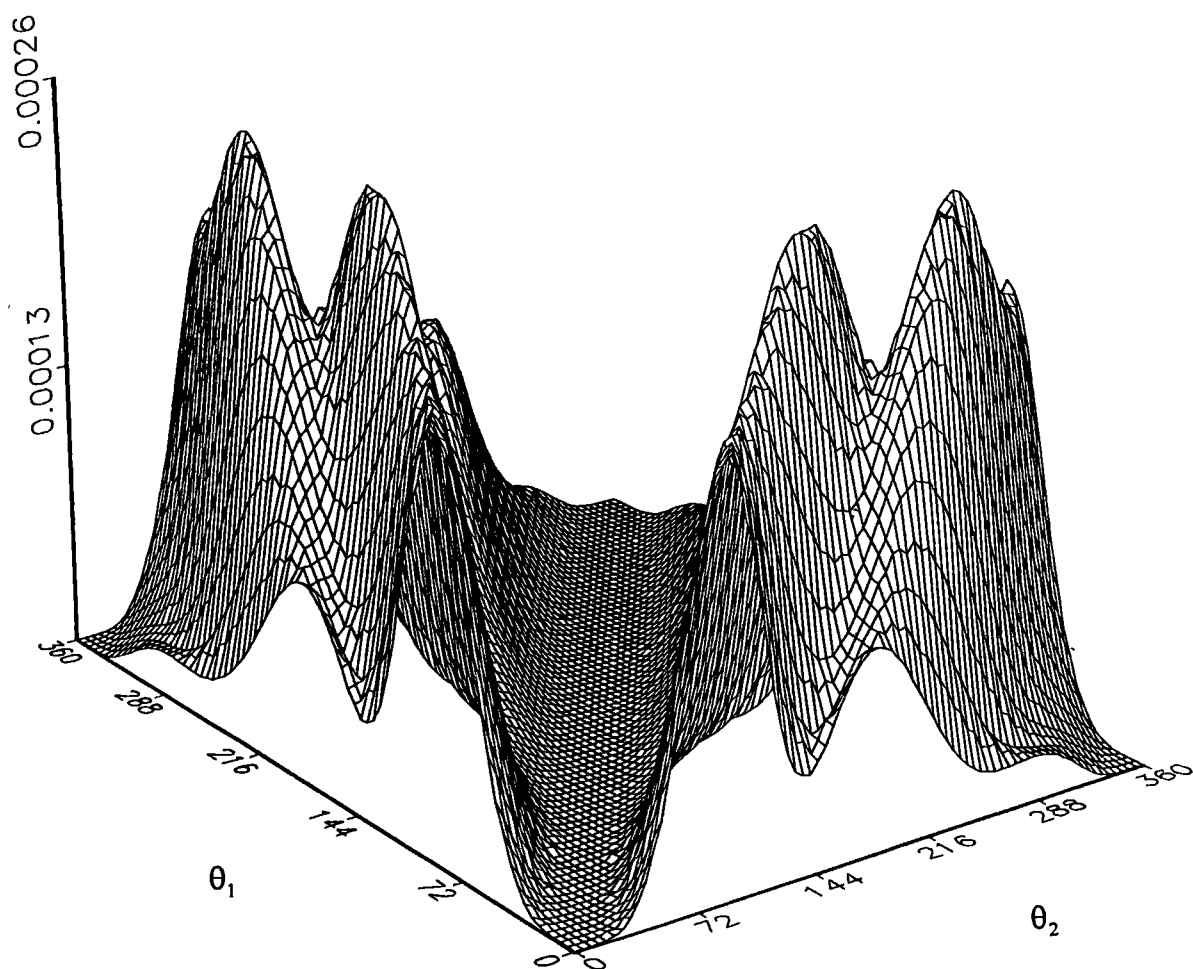


Fig. 9h - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du krypton en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial : celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

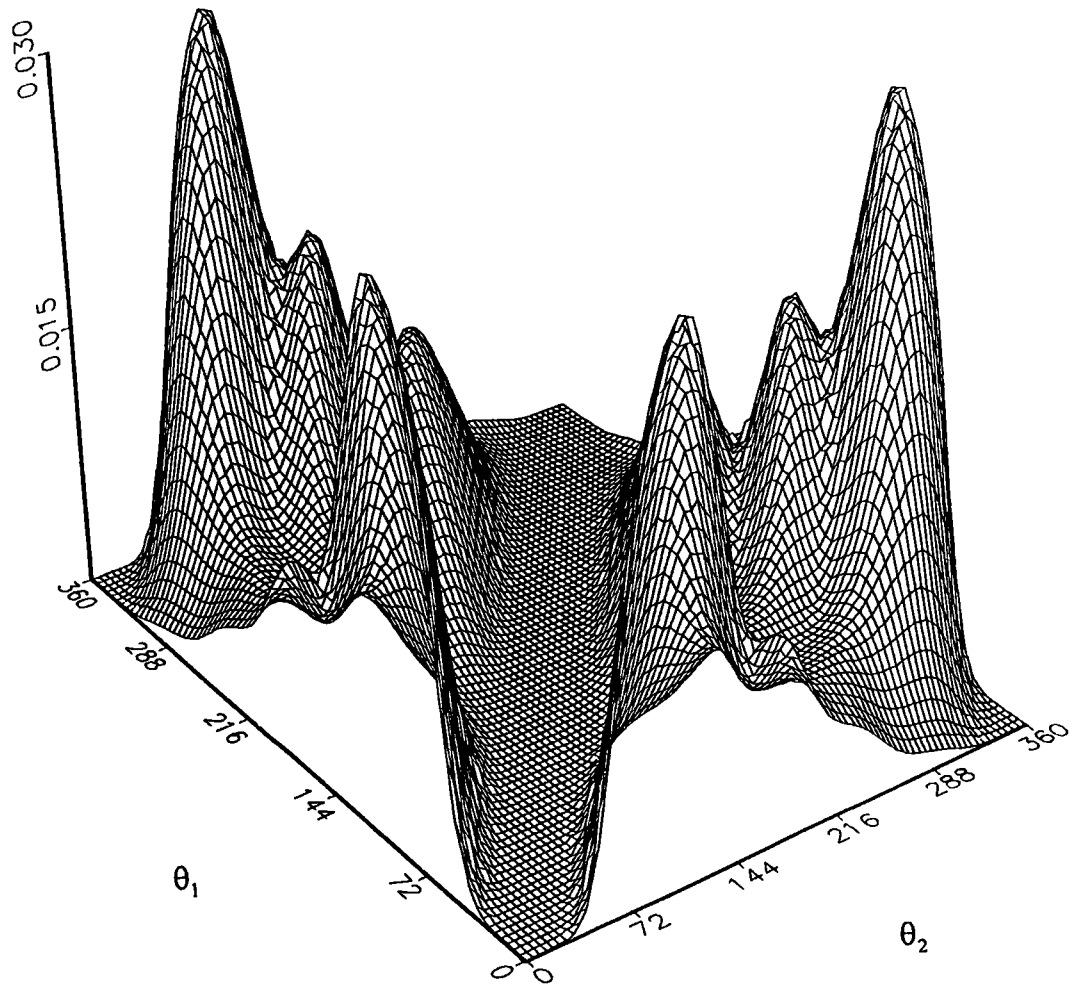


Fig. 10a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) de l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à $-0,45^\circ$.

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

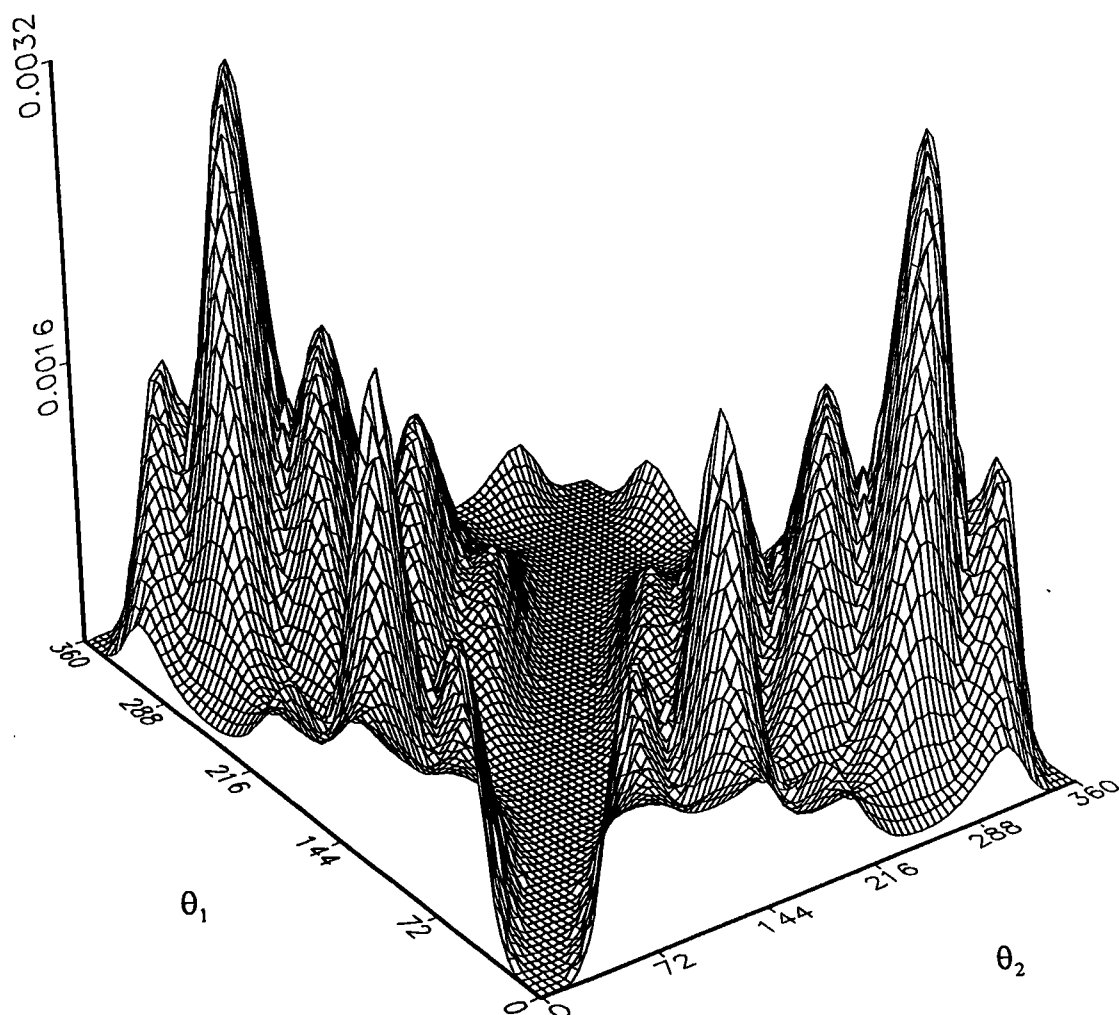


Fig. 10b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) de l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à $-0,45^\circ$.

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$E_1=60\text{eV}$ $E_2=30\text{eV}$

avec orthogonalisation

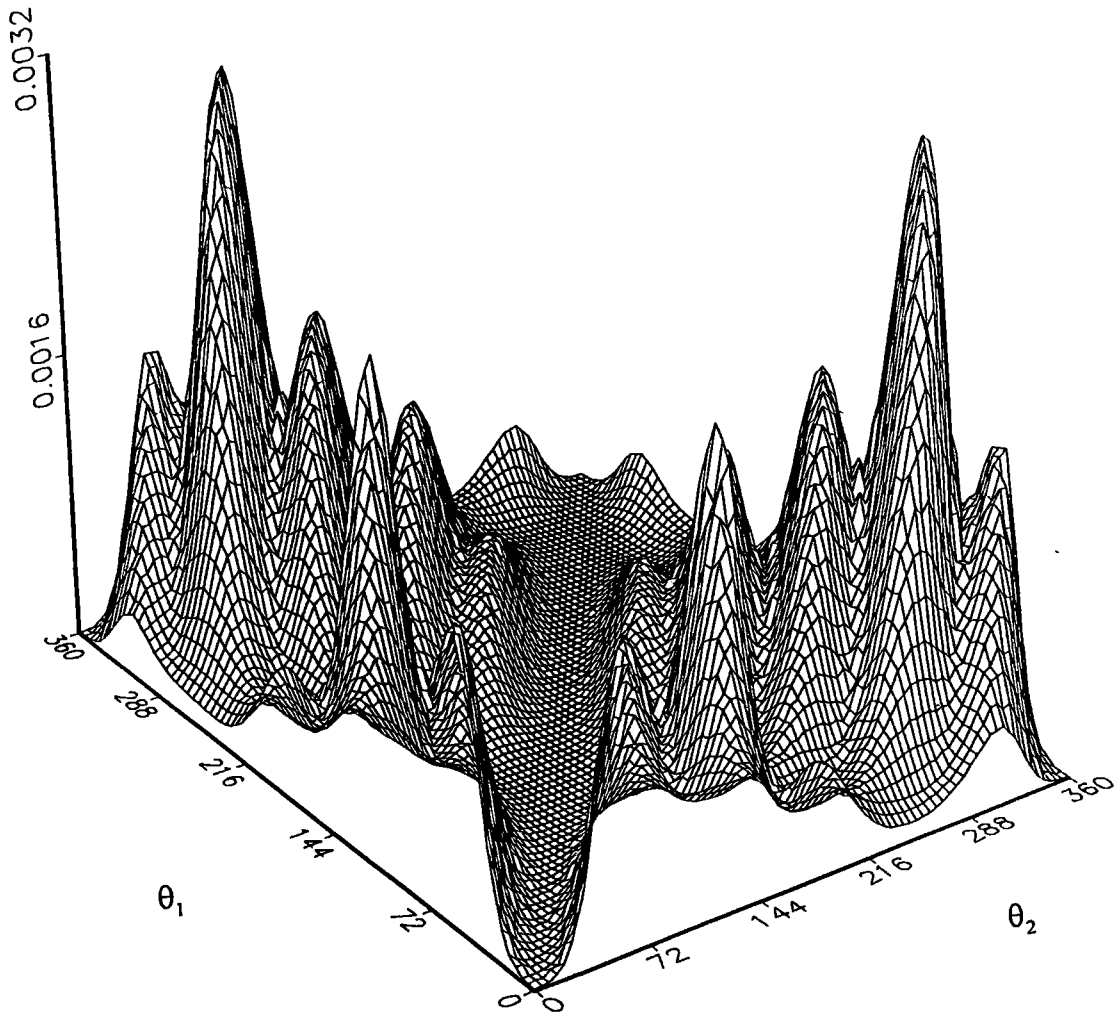


Fig. 10c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) de l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à $-0,45^\circ$.

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$$E_1=85\text{eV} \quad E_2=5\text{eV}$$

avec orthogonalisation

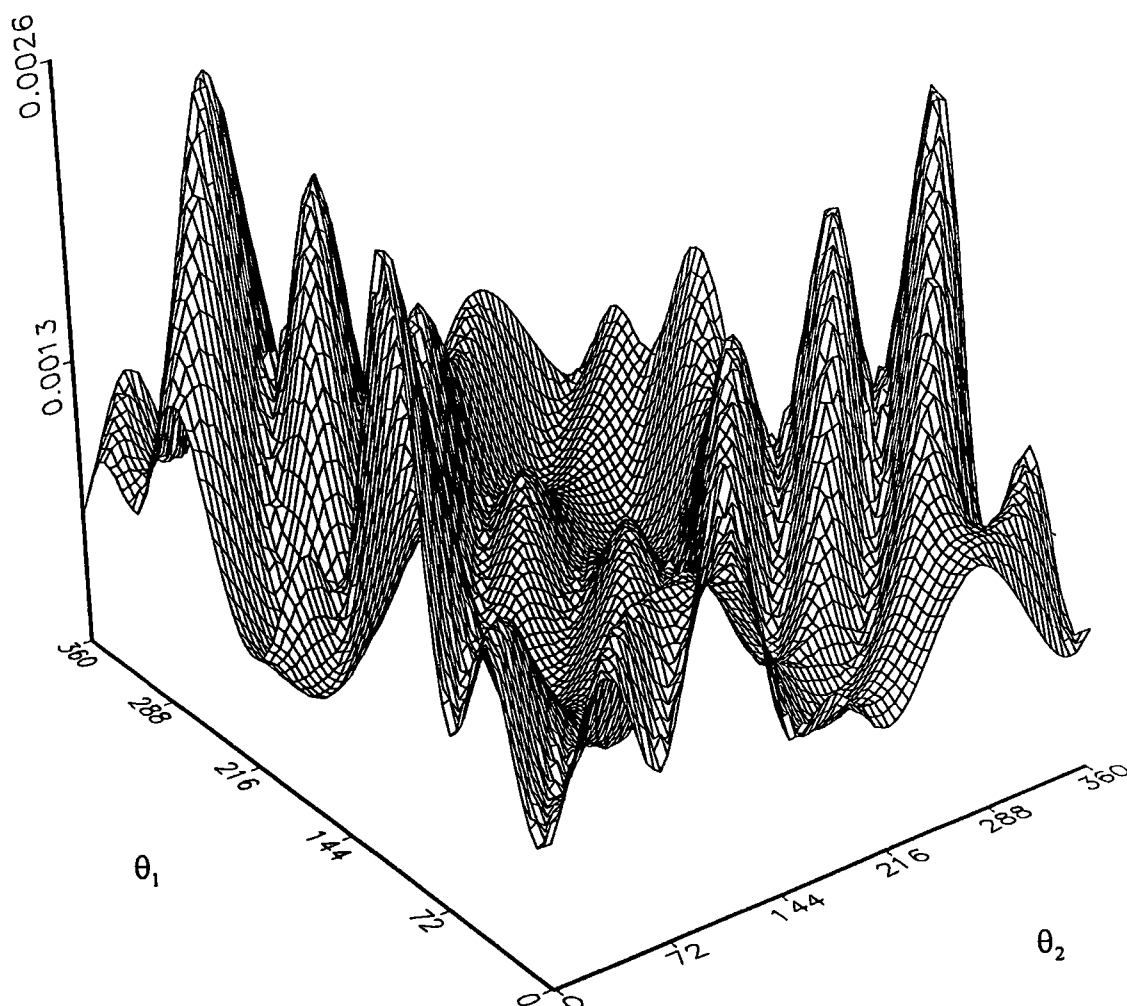


Fig. 10d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) de l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à $-0,45^\circ$.
Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de (Langlois).

$$E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

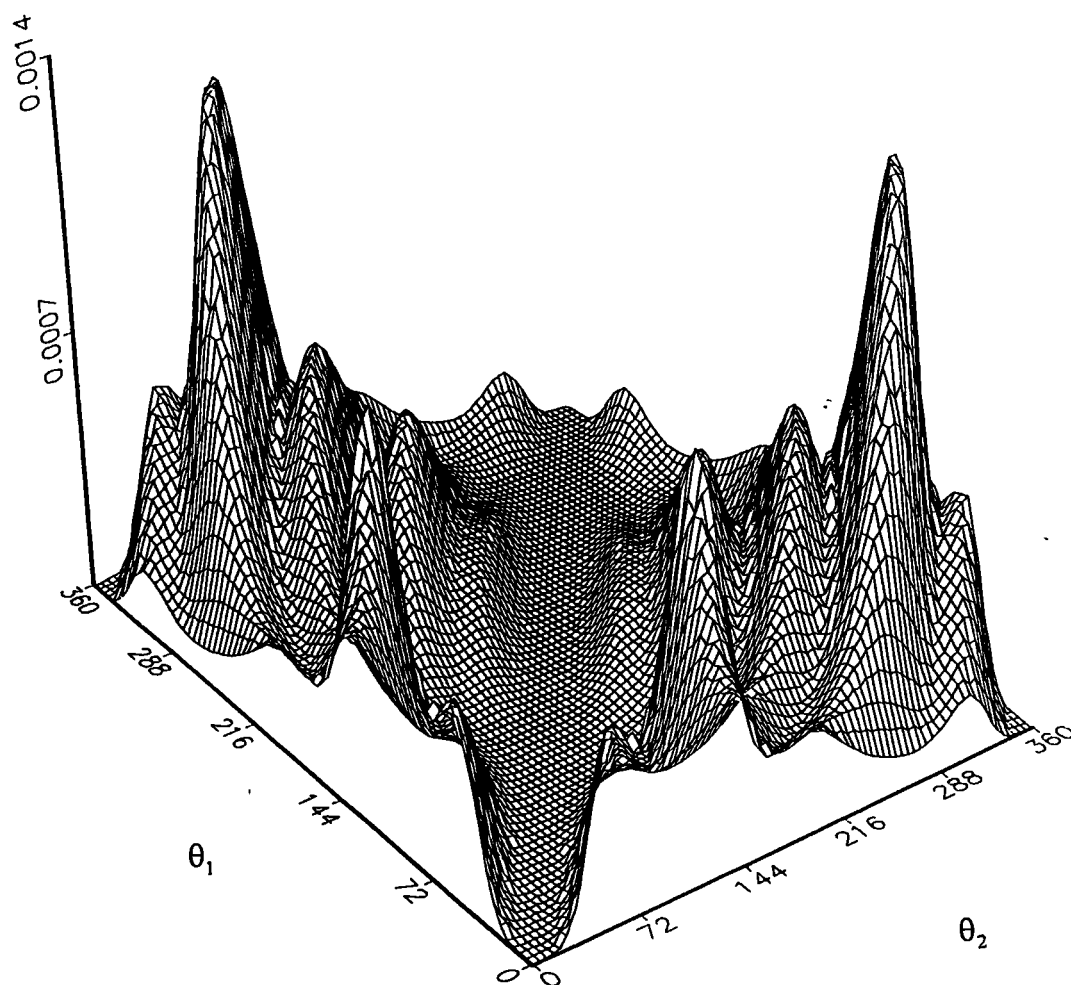


Fig. 10e - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) de l'argon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à $-0,45^\circ$.

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 15 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

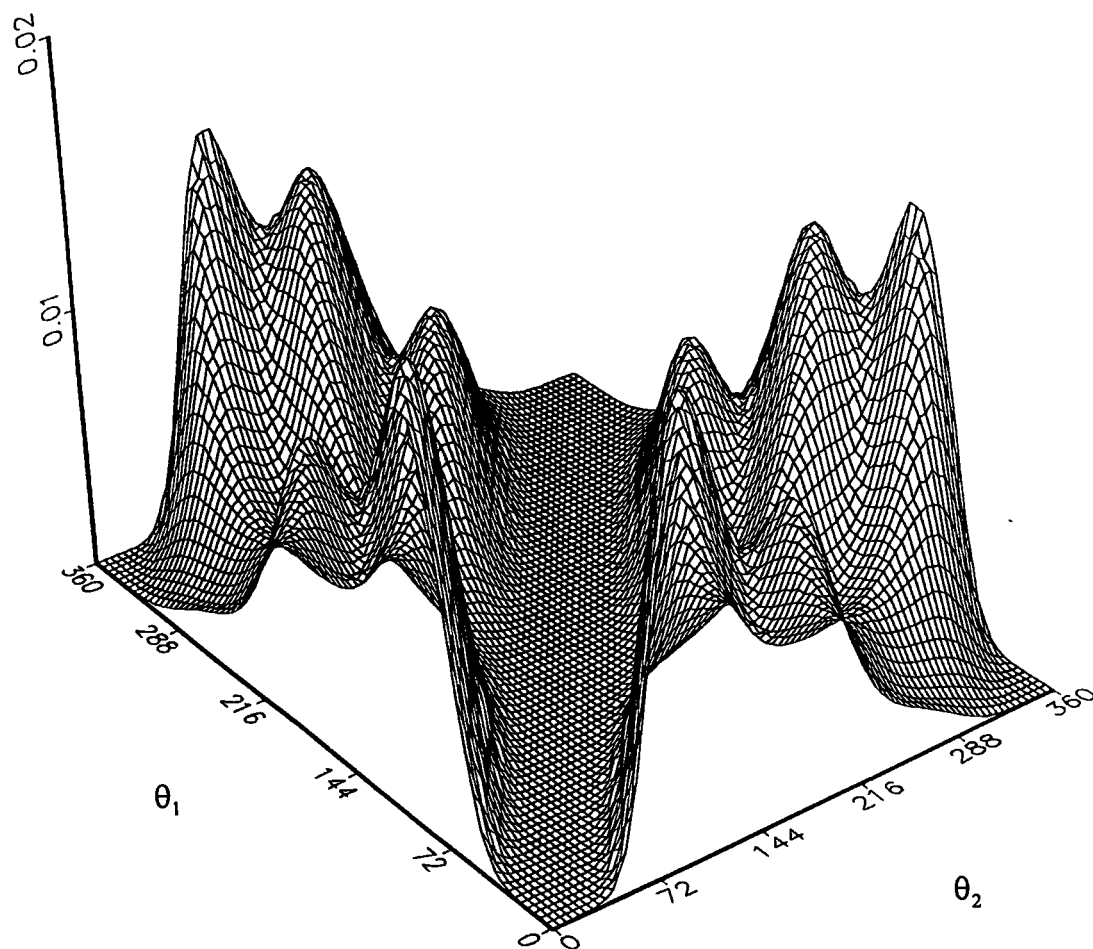


Fig. 11a - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$$E_1 = E_2 = 45 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

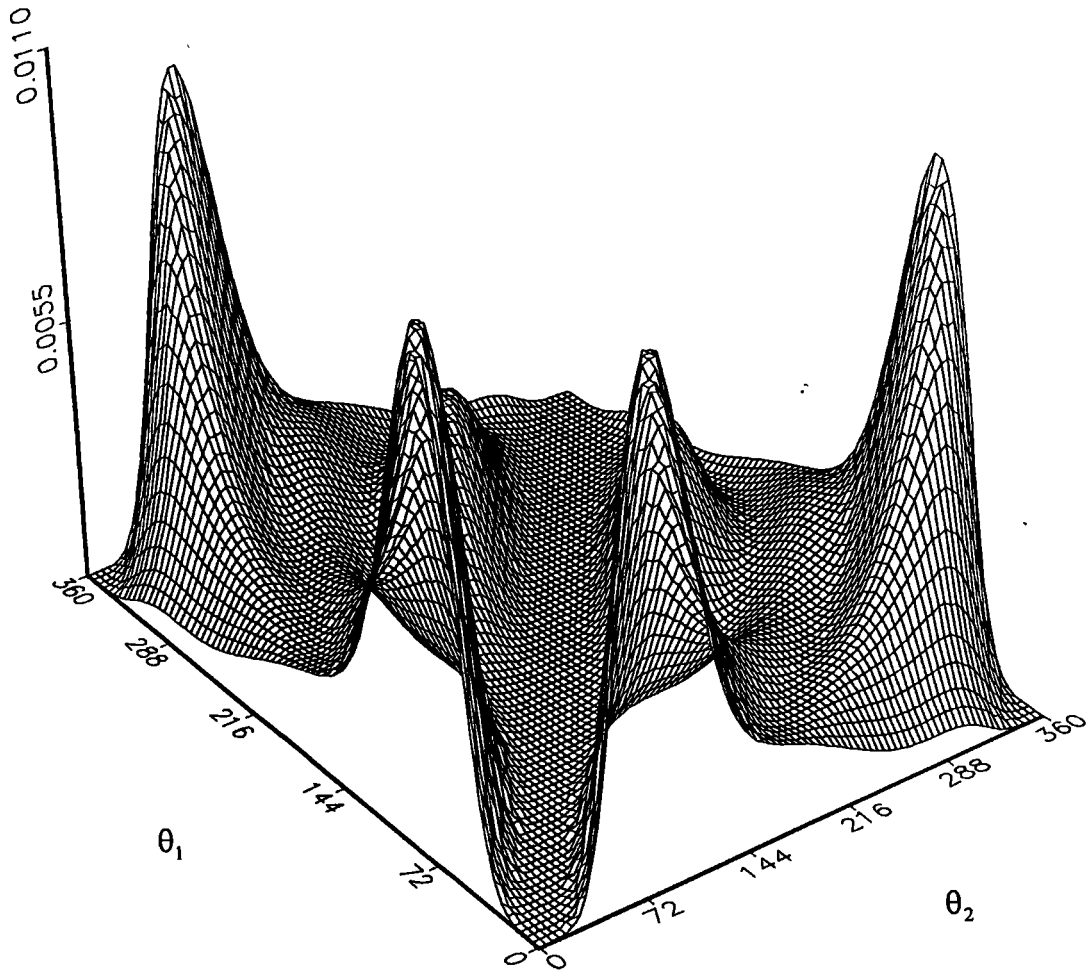


Fig. 11b - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$E_1=60\text{eV}$ $E_2=30\text{eV}$

avec orthogonalisation

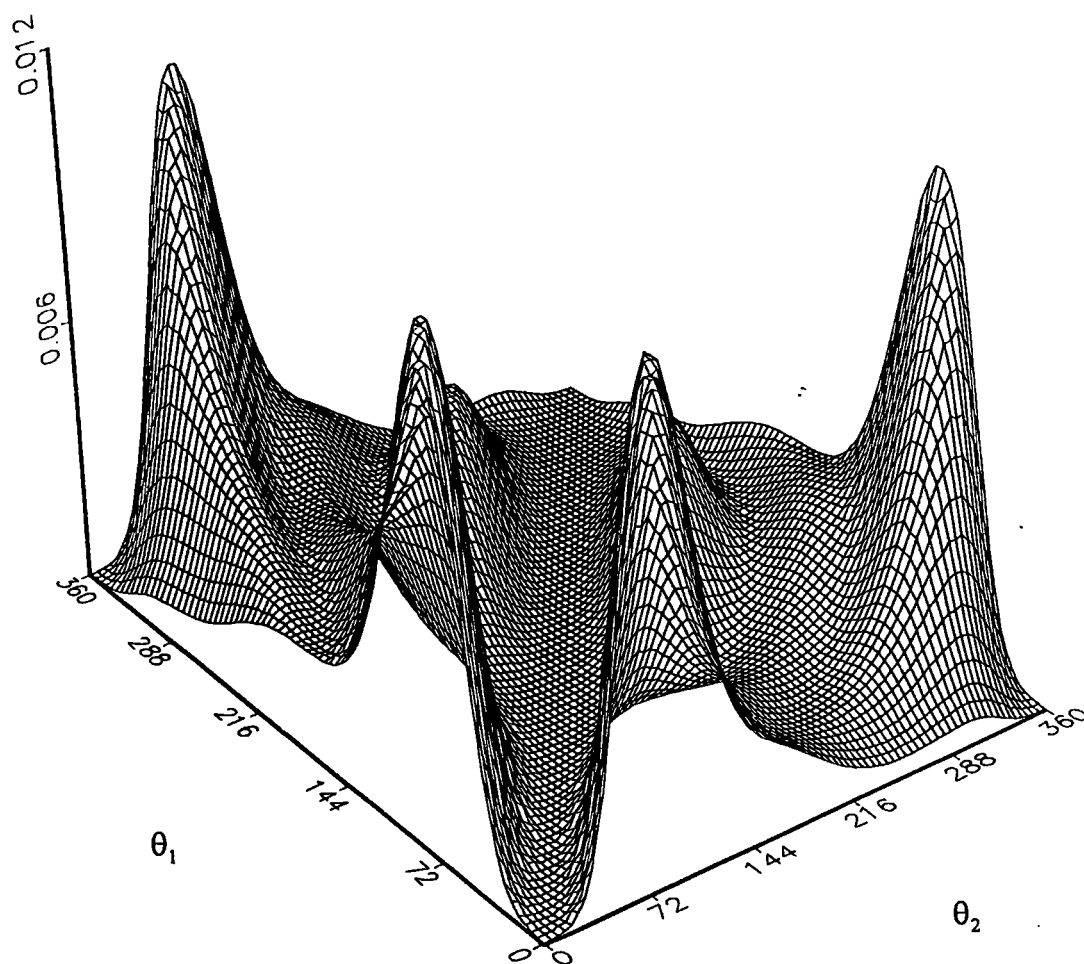


Fig. 11c - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

$E_1=85\text{eV}$ $E_2=5\text{eV}$

avec orthogonalisation

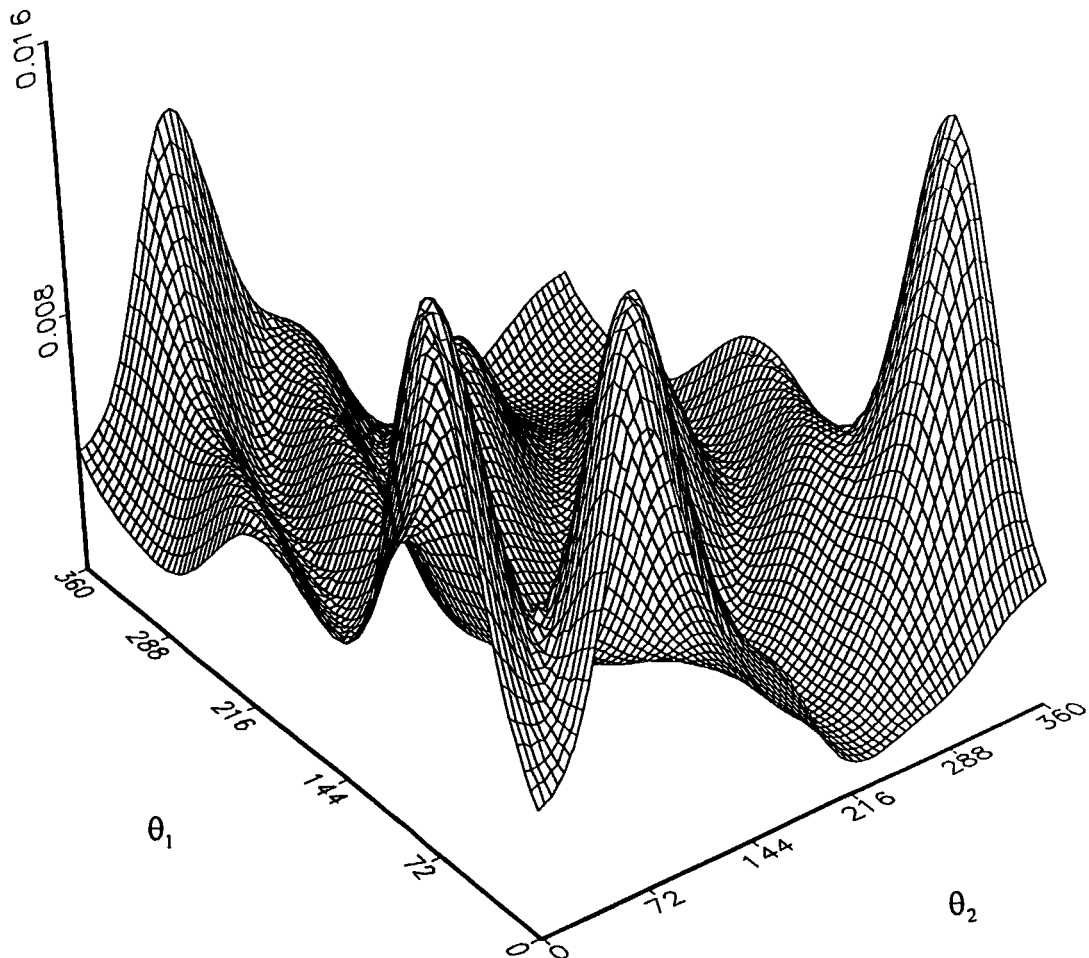


Fig. 11d - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .
Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de (Langlois).

$$E_1 = E_2 = 60 \text{ eV}$$

avec orthogonalisation

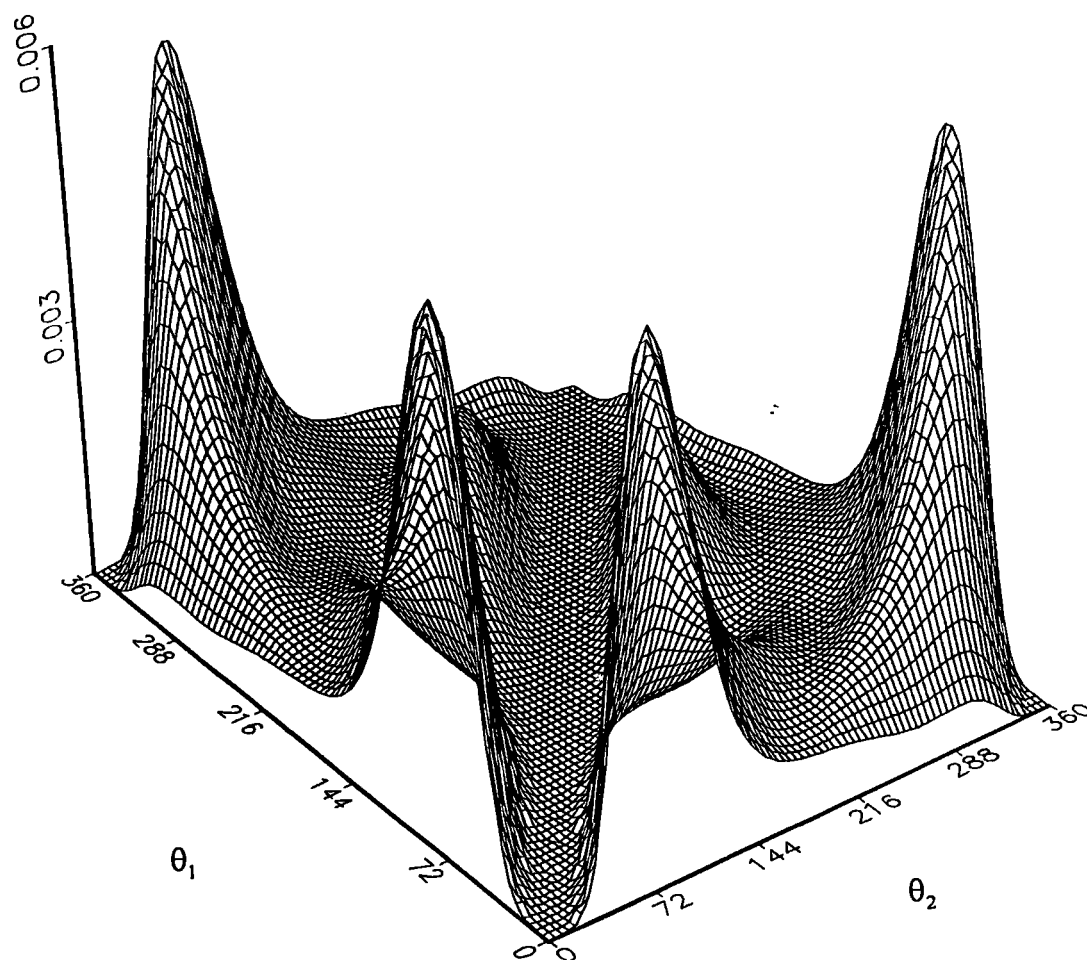


Fig. 11e - section efficace quintuplement différentielle (en u.a) du néon en fonction de l'angle d'éjection θ_1 du premier électron et de l'angle d'éjection θ_2 du deuxième électron. L'angle de diffusion θ_s est égal à -1° .

Modèle utilisé: fonction B.B.K orthogonale à l'état initial. Fonction d'onde de l'état initial: celle de Langlois (corrélée).

D- CONCLUSION

Ce travail a permis d'expliquer la plupart des expériences (e,3e) réalisées à ce jour par l'équipe de A.Lahmam-Bennani à Orsay. Nous avons pu établir que le mécanisme shake-off est prépondérant. Il faut néanmoins tenir compte de l'interaction continue qui s'exerce entre les deux électrons éjectés. A ce propos nous avons démontré l'importance de la corrélation dans l'état initial pour le cas de l'argon et du krypton.

Nous avons également indiqué les conditions optimales de détection en coïncidence des deux électrons éjectés et de l'électron diffusé. Ceci devrait permettre aux expérimentateurs de reprendre leurs expériences sur le krypton et l'argon et, grâce à la mise en place très récente de procédés de multidétection, de pouvoir séparer les contributions respectives 1S , 1D et 3P de l'ion. Il faudrait également réaliser des expériences sur le néon qui semble avoir un comportement différent de celui des autres gaz rares.

Bien que notre modèle rende compte de l'allure des distributions angulaires il ne donne pas l'amplitude exacte. Il faudrait donc reprendre notre calcul avec le vrai formalisme B.B.K, puis tenter de mieux prendre en compte l'interaction entre l'électron éjecté et la cible doublement ionisée à l'aide, par exemple, d'un potentiel modèle.

REFERENCES

- 1- A.Lahmam-Bennani, C.Dupré, A.Duguet, Phys.Rev.Lett. , **63**, 1582, (1989)
- 2- A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, A.M Grisogono, M.Lecas, J.Phys.B, **25**, 2873, (1992)
- 3- A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, Paper presented at ICPEAC XVII, Brisbane, July (1991)
- 4- A.Duguet, A.Lahmam-Bennani, Z.Phys.D, Atoms, Molecules and Clusters, **23**, 383, (1992)
- 5- M.Ford, J.P.Doering, J.W.Cooper, M.A.Coplan, J.H.Moore, Intern.Symp on (e,2e) Collisions, Double Photoionisation and Related Processes (Paris) (1993)
- 6- M.Ford, communication privée
- 7 - H.Le Rouzo, C.Dal.Cappello, Phys.Rev.A, **43**, 43, 1, 318 (1991)
- 8- Pour une revue détaillée : H.Le Rouzo, Phys.Rev.A, **37**, 1512, (1988), complétée par :
 - V.Schmidt, N.Sandner, H.Krentzemüller, P.Dlez, F.Wuilleumier, E.Källne, Phys.Rev.A, **13**, 1748 (1976)
 - D.M.P.Holland, K.Godliny, J.B.West, G.V.Man, J.Phys.B, **12**, 2465 (1979)
 - T.Masuoka, J.A.R.Samson, J.Chim.Phys. **77**, 623, (1980)
 -G.Dujardin, M.J.Bernard, L.Hellener, Y.Malinovitch, Phys.Rev.A, **35**, 5012 (1987)
 - P.Lablanquie, J.H.D.Eland, Nenner, P.Morin, J.Delwiche, M.J.Hubin-Franslein, Phys.Rev.Lett., **58**, 992 (1987)
 - S.D.Price, J.H.D.Eland, J.Phys.B, **22**, L153 (1989)
 - S.D.Price, J.H.D.Eland, J.Phys.B, **23**, 2269 (1990)
 - P.Lablanquie, K.Ito, P.Morin, I.Nenner, J.H.D.Eland, Z.Phys.D, **16**, 77 (1990)
- 9- J.Mazeau, P.Selles, D.Waymel, A.Huetz, Phys.Rev.Lett., **67**, 820, (1991)
- 10- A.Huetz, P.Selles, D.Waymel, L.Andric, J.Mazeau, Proc.of the NATO Advanced Research Workshop on (e,2e) and Related Processes (Cambridge) (Dordrecht: Kuver) (1993)
- 11- D.Waymel, L.Andric, J.Mazeau, P.Selles, A.Huetz, J.Phys.B, **26**, 123 (1993)
- 12- B.Krässig, V.Schmidt, X.Intern.Conf.on VUV Radiat. Physics, Paris, France, Contrib. Paper, Mo78 (1992)
- 13- O.Schwartzkopf, B.Krässig, J.Elmiyer, V.Shmidt, Phys.Rev.Lett., **70**, 3008 (1993)
- 14- F.Maulbetsch, J.Briggs, accepted by J.Phys.B (1993)
- 15- M.A.Kornberg, J.E.Miraglia, submitted to Phys.Rev
- 16- G.H.Wannier, Phys.Rev., **90**, 817 (1953)
- 17- A.Huetz, P.Selles, D.Waymel, J.Mazeau, J.Phys.B, **24**, 1917 (1991)
- 18- H.Hda, C.Dal Cappello, J.Langlois, Z.Phys.D **29**, 25 (1994)
- 19- C.Dal Cappello, J.Langlois, M.C.Dal Cappello, B.Joulakian, A.Lahmam-Bennani, A.Duguet, R.Tweed, Z.Phys.D, Atoms, Molecules and Clusters **23**, 389-396 (1992)
- 20-R.I.Hall, G.Dawber, A.G.Mc Conkey, M.A.MacDonald, G.C.King, Z.Phys.D, Atoms, Molecules and Clusters **23**, 377-381 (1992)

Annexe A

Les fonctions d'ondes décrivant les états initial et final de l'atome de krypton sont des déterminants de Slater (6×6) qui s'écrivent de la manière suivante:

pour l'état initial on a:

$$2p^6 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6!}} |a_1(1)a_2(2)a_3(3)a_4(4)a_5(5)a_6(6)| \quad (\text{AA -1})$$

pour l'état final les deux électrons éjectés sont décrits par deux fonctions d'ondes Φ_1 et Φ_2 supposées séparables:

$$2p^4\Phi_1\Phi_2 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{6!}} |b_1(1)b_2(2)b_3(3)b_4(4)b_5(5)b_6(6)| \quad (\text{AA -2})$$

Soit f_n un opérateur de l'élément de matrice M:

$$M = \langle 2p^6 | \sum_n f_n | 2p^4\Phi_1\Phi_2 \rangle = \left\langle \sum_p \frac{(-1)^p}{\sqrt{N!}} a_1(1)a_2(2).....a_N(n) \middle| \sum_n f_n \right. \\ \left. \middle| \sum_p \frac{(-1)^p}{\sqrt{N!}} b_1(i_1)b_2(i_2).....b_N(i_n) \right\rangle \quad (\text{AA -3})$$

$$M = \sum_p \frac{(-1)^p}{N!} \langle a_1(1)a_2(2).....a_N(n) | \sum_n f_n | b_1(i_1)b_2(i_2).....b_N(i_n) \rangle \quad (\text{AA -4})$$

i_1, i_2, \dots, i_n sont les permutations de $1, 2, \dots, N$ et p est le nombre de permutation. Les électrons éjectés auront le même spin que dans l'état initial, on pose:

$$a_1 = b_1 \quad a_2 = b_2 \quad a_3 = b_3 \quad a_4 = b_4 \quad b_5 = \Phi_1 \quad b_6 = \Phi_2$$

En tenant compte de l'orthogonalité spin - orbite on obtient $i_1 = 1 \quad i_2 = 2 \quad i_3 = 3 \quad i_4 = 4$

$$M = \sum_p \frac{(-1)^p}{N!} \langle a_1(1)a_2(2).....a_6(6) | \sum_n f_n | a_1(1)a_2(2).....\Phi_1(i_5)\Phi_2(i_6) \rangle \quad (\text{AA -5})$$

La seule possibilité qui existe est: $i_5 = 5$ et $i_6 = 6$ car les deux électrons éjectés auront le même spin que dans l'état initial, Φ_1 et Φ_2 ont des spins différents, l'élément de matrice s'écrit alors:

$$M = \sum_{n=1}^4 \langle a_n | e^{i\vec{k}\vec{r}_n} | a_n \rangle \langle a_5 | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle + \langle a_5 | e^{i\vec{k}\vec{r}_5} | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle \\ + \langle a_6 | e^{i\vec{k}\vec{r}_6} | \Phi_2 \rangle \langle a_5 | \Phi_1 \rangle - 6 \langle a_5 | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle \quad (\text{AA -6})$$

On suppose maintenant qu'on remplace a_4 et a_6 par Φ_1 et Φ_2 , dans ce cas Φ_1 et Φ_2 ont même spin (-), cette fois ci, l'orthogonalité des spin - orbitales nous donne:

$$i_4 = 4 \text{ et } i_6 = 6 \text{ ou } i_4 = 6 \text{ et } i_6 = 4$$

L'élément de matrice devient pour le même spin et en tenant compte de la permutation

$$M = \sum_{n=1,2,3,5} \langle a_n | e^{i\vec{k}\vec{r}_n} | a_n \rangle [\langle a_4 | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle - \langle a_6 | \Phi_1 \rangle \langle a_4 | \Phi_2 \rangle] + \langle a_4 | e^{i\vec{k}\vec{r}_4} | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle \\ - \langle a_4 | e^{i\vec{k}\vec{r}_4} | \Phi_2 \rangle \langle a_6 | \Phi_1 \rangle + \langle a_6 | e^{i\vec{k}\vec{r}_6} | \Phi_2 \rangle \langle a_4 | \Phi_1 \rangle - \langle a_6 | e^{i\vec{k}\vec{r}_6} | \Phi_1 \rangle \langle a_4 | \Phi_2 \rangle \\ - 6 [\langle a_4 | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle - \langle a_4 | \Phi_2 \rangle \langle a_6 | \Phi_1 \rangle] \quad (\text{AA -7})$$

On aura quinze façons possibles d'éjecter deux électrons, six pour les spins identiques et neuf pour les spins différents:

$$p_{-1}\bar{p}_{-1} \quad p_{-1}\bar{p}_0 \quad p_{-1}\bar{p}_1 \quad \bar{p}_{-1}p_0 \quad \bar{p}_{-1}p_1 \quad p_0\bar{p}_0 \quad p_0\bar{p}_1 \quad \bar{p}_0p_1 \quad p_1\bar{p}_1$$

Dans le cas où le transfert d'impulsion prend n'importe quelle direction, il faut tenir compte des contributions ci-dessous:

$$\langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle \neq 0 \quad \text{ainsi que} \quad \langle p_{+10} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_{-1} \rangle \neq 0$$

Dans un premier temps on permute Φ_1 et a_1 puis Φ_1 et a_3 , pour chaque cas le nombre de permutation est $(-1)^1=1$, on obtient les deux contributions:

$$-\langle a_5 | e^{i\vec{k}\vec{r}_5} | a_1 \rangle \langle a_1 | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle \quad \text{et} \quad -\langle a_5 | e^{i\vec{k}\vec{r}_5} | a_3 \rangle \langle a_3 | \Phi_1 \rangle \langle a_6 | \Phi_2 \rangle$$

De la même manière on permute Φ_2 et a_2 puis Φ_2 et a_4 on obtient les deux autres contributions

$$\langle a_6 | e^{i\vec{k}\vec{r}_6} | a_2 \rangle \langle a_2 | \Phi_2 \rangle \langle a_5 | \Phi_1 \rangle \quad \text{et} \quad -\langle a_6 | e^{i\vec{k}\vec{r}_6} | a_4 \rangle \langle a_4 | \Phi_2 \rangle \langle a_5 | \Phi_1 \rangle$$

Finalement si la direction du transfert d'impulsion ne constitue pas un axe de référence, il faut ajouter les quatre contributions citées ci-dessus, et l'élément de matrice pour les spins différents (par exemple $p_{-1}\bar{p}_{-1}$)

$$\begin{aligned} M = & [\langle p_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle + \langle \bar{p}_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \bar{p}_0 \rangle + \langle p_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle + \langle \bar{p}_1 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \bar{p}_1 \rangle] [\langle p_{-1} | \Phi_1 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_2 \rangle] \\ & + \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \Phi_1 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_2 \rangle + \langle \bar{p}_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \Phi_2 \rangle \langle p_{-1} | \Phi_1 \rangle - 6 \langle p_{-1} | \Phi_1 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_2 \rangle \\ & - \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_0 \rangle \langle p_0 | \Phi_1 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_2 \rangle - \langle p_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | p_1 \rangle \langle p_1 | \Phi_1 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_2 \rangle - \langle \bar{p}_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \bar{p}_0 \rangle \langle \bar{p}_0 | \Phi_2 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_1 \rangle \\ & - \langle \bar{p}_{-1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | \bar{p}_1 \rangle \langle \bar{p}_1 | \Phi_2 \rangle \langle \bar{p}_{-1} | \Phi_1 \rangle \end{aligned} \quad (AA-8)$$

Les autres termes à spins différents ou à spins identiques s'obtiennent de la même façon.

Annexe B

Calcul des intégrales:

soit \vec{K} le transfert d'impulsion pris dans une direction quelconque, on doit calculer l'intégrale suivante:

$$\text{1- Calcul de } I = \left\langle np_0 \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix} e^{i\vec{K}\vec{r}} \begin{vmatrix} 1 \\ -1 \end{vmatrix} n'p_0 \right\rangle \quad (\text{A B -1})$$

$$e^{i\vec{K}\vec{r}} = 4\pi \sum_l \sum_m i^l J_l(K.r) Y_l^{*m}(\Omega) Y_l^m(\Omega) \quad (\text{A B -2})$$

$$I = \sum_l \sum_m \int Y_l^{*m_1}(\Omega) Y_l^m(\Omega) Y_l^{m_2}(\Omega) d\Omega 4\pi Y_l^{*m}(\Omega_k) i^l \int R_{n,l_1} J_l(K.r) R_{n',l_2} r^2 dr \quad (\text{A B -3})$$

$$I_\Omega = \int Y_{l_1}^{*m_1}(\Omega) Y_l^m(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) d\Omega = \frac{1}{(-1)^{m_1}} \int Y_{l_1}^{-m_1}(\Omega) Y_l^m(\Omega) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega) d\Omega \quad (\text{A B -4})$$

$$I_\Omega = \frac{1}{(-1)^{m_1}} \left(\frac{(2l_1+1)(2l+1)(2l_2+1)}{4\pi} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & 1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & 1 & l_2 \\ -m_1 & m & m_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A B -5})$$

$$-m_1 + m + m_2 = 0 \quad |l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2 \quad \begin{cases} l_1 = 1 & l_2 = 1 \\ l = 0 & l = 1 & l = 2 \end{cases}$$

Règle de symétrie:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j & j_2 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \text{ est:}$$

- a - invariant dans une permutation de trois colonnes;
- b - multiplié par $(-1)^{j+j_2+j_3}$ lorsqu'on permute deux colonnes;
- c - multiplié par $(-1)^{j+j_2+j_3}$ lorsqu'on change les signes m_1, m_2, m_3

calcul de terme $\langle np_0 | e^{i\vec{K}\vec{r}} | n'p_0 \rangle$

$$I_\Omega = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{3\sqrt{5}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A B -6})$$

On a exclu le cas où $l=1 \quad m=0$ car si $m_1 = m_2 = m = 0$ et si $l_1 + l_2 + 1$ est impair alors

$$\begin{pmatrix} l_1 & 1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{A B -7})$$

Dans notre cas il reste tout simplement les cas ($l=0 \quad m=0$) et ($l=2 \quad m=2$)

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{2}{15}} \quad (\text{A B -8})$$

$$I = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{3} 4\pi Y_0^0(\Omega_k) \int R_{n,1}(r) J_0(k.r) R'_{n,1}(r) r^2 dr$$

$$3\sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{2}{15} 4\pi Y_2^0(\Omega_k) i^2 \int R_{n,1}(r) J_2(k.r) R'_{n,1}(r) r^2 dr$$

$$I = \int_0^\infty R_{n,1}(r) J_0(k.r) R'_{n,1}(r) r^2 dr - (3 \cos^2 \theta_k - 1) \int_0^\infty R_{n,1}(r) J_2(k.r) R'_{n,1}(r) r^2 dr \quad (\text{A B -9})$$

$$I = I_{n0n'}^{1,1} - (3 \cos^2 \theta_k - 1) I_{n2n'}^{1,1} \quad (\text{A B -10})$$

$$\begin{cases} R_2^1(r) = \frac{2}{\sqrt{3}} \varepsilon^{5/2} r e^{-\alpha} \\ R_3^1(r) = \frac{2^{3/2}}{3\sqrt{5}} \varepsilon^{7/2} r^2 e^{-\alpha} \\ R_4^1(r) = \frac{2}{3\sqrt{35}} \varepsilon^{9/2} r^3 e^{-\alpha} \\ R_5^1(r) = \frac{2^{3/2}}{45\sqrt{7}} \varepsilon^{11/2} r^4 e^{-\alpha} \end{cases} \quad (\text{A B -11})$$

$$\int x^n e^{-\beta x} \sin(bx) dx = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \beta^n} \left(\frac{b}{b^2 + \beta^2} \right) \quad (\text{Re } \beta > 0 \quad b > 0) \quad (\text{A B -12})$$

Le calcul des intégrales s'obtiennent aisément en appliquant la relation (A B -12):

$$I_{202}^{1,1} = 32(\varepsilon \varepsilon')^{5/2} (\varepsilon + \varepsilon') \frac{(\varepsilon + \varepsilon')^2 - K^2}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^4}$$

$$I_{302}^{1,1} = 24 \frac{2^{3/2}}{3\sqrt{15}} \varepsilon^{7/2} \varepsilon'^{5/2} \frac{5(\varepsilon + \varepsilon')^4 + K^4 - 10(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^5}$$

$$I_{402}^{1,1} = \frac{4}{\sqrt{105}} \varepsilon^{\frac{3}{2}} \varepsilon'^{\frac{5}{2}} \frac{240(\varepsilon + \varepsilon')(3(\varepsilon + \varepsilon')^4 + 3K^4 - 10(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^6}$$

$$I_{502}^{1,1} = \frac{4\sqrt{2}}{45\sqrt{21}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{7}{2}} 720 \frac{7(\varepsilon + \varepsilon')^6 - K^6 - 35(\varepsilon + \varepsilon')^4 k^2 + 21(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^4}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^7}$$

$$I_{303}^{1,1} = \frac{8}{45} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{7}{2}} \frac{240(\varepsilon + \varepsilon')(3(\varepsilon + \varepsilon')^4 + 3K^4 - 10(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^6}$$

$$I_{403}^{1,1} = \frac{4\sqrt{2}}{45\sqrt{7}} \varepsilon^{\frac{3}{2}} \varepsilon'^{\frac{7}{2}} 720 \frac{7(\varepsilon + \varepsilon')^6 - K^6 - 35(\varepsilon + \varepsilon')^4 k^2 + 21(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^4}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^7}$$

$$I_{503}^{1,1} = \frac{8}{135\sqrt{35}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{7}{2}} 720 \times 56(\varepsilon + \varepsilon') \frac{(\varepsilon + \varepsilon')^6 - K^6 - 7(\varepsilon + \varepsilon')^4 k^2 + 7(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^4}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^8}$$

$$I_{404}^{1,1} = \frac{8}{315} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{9}{2}} 720 \times 56(\varepsilon + \varepsilon') \frac{(\varepsilon + \varepsilon')^6 - K^6 - 7(\varepsilon + \varepsilon')^4 k^2 + 7(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^4}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^8}$$

$$I_{504}^{1,1} = \frac{4\sqrt{2}}{135\sqrt{245}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{9}{2}} 720 \times 56 \frac{9(\varepsilon + \varepsilon')^8 - 84(\varepsilon + \varepsilon')^6 K^2 + 126(\varepsilon + \varepsilon')^4 k^4 - 36(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^6 + K^8}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^9}$$

$$I_{505}^{1,1} = \frac{8}{7(45)^2 \sqrt{245}} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{11}{2}} 720 \times 56 \times 18 I_0(8, \varepsilon, \varepsilon')$$

$$I_0(8, \varepsilon, \varepsilon') = \frac{5(\varepsilon + \varepsilon')^8 - 60(\varepsilon + \varepsilon')^6 K^2 + 126(\varepsilon + \varepsilon')^4 k^4 - 60(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^6 + 5K^8}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^{10}}$$

Pour la fonction de Bessel d'ordre 2 les intégrales de type $I_{n2n}^{1,1}$ se calculent de la même manière que précédemment:

$$I_{222}^{1,1} = \frac{4}{3} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{5}{2}} \frac{48K^2(\varepsilon + \varepsilon')}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^4}$$

$$I_{322}^{1,1} = \frac{2^{\frac{5}{2}}}{3\sqrt{15}} \varepsilon^{\frac{3}{2}} \varepsilon'^{\frac{5}{2}} \frac{48K^2(7(\varepsilon + \varepsilon')^2 - K^2)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^5}$$

$$I_{422}^{1,1} = \frac{4}{3\sqrt{105}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{1}{2}} \frac{384K^2(\varepsilon + \varepsilon')(7(\varepsilon + \varepsilon')^2 - 3K^2)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^6}$$

$$I_{522}^{1,1} = \frac{2^{\frac{5}{2}}}{45\sqrt{21}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{5}{2}} \frac{1152K^2(21(\varepsilon + \varepsilon')^4 - 18(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 + K^4)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^7}$$

$$I_{323}^{1,1} = \frac{8}{45} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{1}{2}} \frac{384K^2(\varepsilon + \varepsilon')(7(\varepsilon + \varepsilon')^2 - 3K^2)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^6}$$

$$I_{423}^{1,1} = \frac{2^{\frac{5}{2}}}{45\sqrt{7}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{7}{2}} \frac{1152K^2(21(\varepsilon + \varepsilon')^4 - 18(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 + K^4)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^7}$$

$$I_{523}^{1,1} = \frac{8}{135\sqrt{35}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{7}{2}} \frac{11520K^2(\varepsilon + \varepsilon')(21(\varepsilon + \varepsilon')^4 - 30(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 + 5K^4)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^8}$$

$$I_{424}^{1,1} = \frac{4}{315} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{1}{2}} \frac{11520K^2(\varepsilon + \varepsilon')(21(\varepsilon + \varepsilon')^4 - 30(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 + 5K^4)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^8}$$

$$I_{524}^{1,1} = \frac{2^{\frac{5}{2}}}{945\sqrt{5}} \varepsilon^{\frac{1}{2}} \varepsilon'^{\frac{9}{2}} \frac{1152K^2(231(\varepsilon + \varepsilon')^6 - 496(\varepsilon + \varepsilon')^4 K^2 + 165(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^4 - 5K^6)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^9}$$

$$I_{525}^{1,1} = \frac{8}{7(45)^2} (\varepsilon \varepsilon')^{\frac{1}{2}} I_2(8, \varepsilon, \varepsilon')$$

$$I_2(8, \varepsilon, \varepsilon') = \frac{11520K^2(\varepsilon + \varepsilon')(33(\varepsilon + \varepsilon')^6 - 99(\varepsilon + \varepsilon')^4 K^2 + 55(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 - 5K^6)}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^{10}}$$

2- Calcul des autres intégrales de type:

$$I_1 = \langle np_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | n' p_{+1} \rangle \quad I_2 = \langle np_{+1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | n' p_{+1} \rangle \quad I_3 = \langle np_{+1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | n' p_{-1} \rangle$$

En utilisant les relations (A B -3) et (A B -5)

$$I_1 = \pm \frac{3}{\sqrt{2}} \cos \theta_k \sin \theta_k e^{\pm i\varphi_k} I_{n2n'}^{1,1} \quad (\text{A B -13})$$

$$I_2 = I_{n0n'}^{1,1} + \frac{1}{2} (\cos^2 \theta_k - 1) I_{n2n'}^{1,1}$$

$$I_3^+ = \frac{3}{2} \sin^2 \theta_k e^{-2i\varphi_k} I_{n2n'}^{1,1} \quad (m=-2) \quad (A B -14)$$

$$I_3^- = \frac{3}{2} \sin^2 \theta_k e^{2i\varphi_k} I_{n2n'}^{1,1} \quad (m=2) \quad (A B -15)$$

L'introduction des corrélations (5 s) dans l'état initial nous amène à calculer

$$I_4 = \langle np_0 | e^{i\vec{k}\vec{r}} | n's \rangle = i \cos \theta_k I_{n1n'}^{1,0}$$

$$I_5 = \langle np_{\pm 1} | e^{i\vec{k}\vec{r}} | n's \rangle = \pm i \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \sin \theta_k e^{\mp i\varphi_k} I_{n1n'}^{1,0}$$

$$I_{211}^{1,0} = \left(\frac{2}{3}\right)^{1/2} \varepsilon^{5/2} \varepsilon'^{3/2} \frac{8K(\varepsilon + \varepsilon')}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^3}$$

$$I_{212}^{1,0} = \frac{2}{3} (\varepsilon \varepsilon')^{5/2} 8K \frac{5(\varepsilon + \varepsilon')^2 - K^2}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^4}$$

$$I_{213}^{1,0} = \frac{2^{5/2}}{3\sqrt{15}} \varepsilon^{5/2} \varepsilon'^{7/2} 48K(\varepsilon + \varepsilon') \frac{5(\varepsilon + \varepsilon')^2 - 3K^2}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^5}$$

$$I_{214}^{1,0} = \frac{4}{3\sqrt{105}} \varepsilon^{5/2} \varepsilon'^{9/2} 48K \frac{35(\varepsilon + \varepsilon')^4 + 3K^2 - 42K^2(\varepsilon + \varepsilon')^2}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^6}$$

$$I_{215}^{1,0} = \frac{2^{5/2}}{45\sqrt{21}} \varepsilon^{5/2} \varepsilon'^{11/2} 1920K(\varepsilon + \varepsilon') \frac{7(\varepsilon + \varepsilon')^4 - 14(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 + 3K^4}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^7}$$

$$I_{315}^{1,0} = \frac{8}{135\sqrt{35}} \varepsilon^{7/2} \varepsilon'^{11/2} 5760K \frac{21(\varepsilon + \varepsilon')^6 - 63(\varepsilon + \varepsilon')^4 K^2 + 27(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^4 - K^6}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^8}$$

$$I_{415}^{1,0} = \frac{2^{5/2}}{135\sqrt{245}} \varepsilon^{9/2} \varepsilon'^{11/2} 80640K(\varepsilon + \varepsilon') \frac{15(\varepsilon + \varepsilon')^6 - 63(\varepsilon + \varepsilon')^4 K^2 + 45(\varepsilon + \varepsilon')^2 K^2 - 5K^6}{(K^2 + (\varepsilon + \varepsilon')^2)^9}$$

$$I_{515}^{1,0} = \frac{8(\epsilon\epsilon')^{1/2}}{135\sqrt{35}} 403200K \frac{33(\epsilon + \epsilon')^8 - 184(\epsilon + \epsilon')^6 + 198(\epsilon + \epsilon')^4 K^4 - 44(\epsilon + \epsilon')^2 K^6 + K^8}{(K^2 + (\epsilon + \epsilon')^2)^{10}}$$

De même pour $\langle 5s|e^{i\vec{k}\vec{r}}|4p\rangle$; $\langle 5s|e^{i\vec{k}\vec{r}}|3p\rangle$; $\langle 5s|e^{i\vec{k}\vec{r}}|2p\rangle$, $\langle 4p|e^{i\vec{k}\vec{r}}|3s\rangle$...etc.

L'introduction de la contribution $4d^2$ dans le singulet 1D , le triplet 3P et le singulet 1S fait apparaître d'autres formes d'intégrales qui se calculent de la même manière que précédemment mais qui nécessiteraient un nombre conséquent de pages pour les écrire.

$$\langle np_0|e^{i\vec{k}\vec{r}}|nd_{\pm 1}\rangle = \mp \frac{3}{\sqrt{10}} i(1 - \cos^2 \theta_k) \sin \theta_k e^{\pm i\varphi_k} I_{n3n'}^{1,2}$$

$$\langle np_{\pm 1}|e^{i\vec{k}\vec{r}}|nd_{\pm 1}\rangle = \frac{3}{\sqrt{5}} i \cos \theta_k I_{n1n'}^{1,2} - \frac{3i}{2\sqrt{5}} (3 \cos \theta_k - 5 \cos^3 \theta_k) I_{n3n'}^{1,2}$$

$$\langle np_{\pm 1}|e^{i\vec{k}\vec{r}}|nd_{\mp 1}\rangle = \frac{15\sqrt{3}}{2} i \cos \theta_k \sin^2 \theta_k e^{\mp 2i\varphi_k} I_{n3n'}^{1,2}$$

$$\langle np_0|e^{i\vec{k}\vec{r}}|nd_{\pm 2}\rangle = -\frac{15\sqrt{3}}{2\sqrt{2}} i \cos \theta_k \sin^2 \theta_k e^{\pm 2i\varphi_k} I_{n3n'}^{1,2}$$

$$\langle np_{\pm 1}|e^{i\vec{k}\vec{r}}|nd_{\pm 2}\rangle = \mp \frac{3i}{\sqrt{5}} \sin \theta_k e^{\pm i\varphi_k} I_{n1n'}^{1,2} \pm \frac{3}{4\sqrt{5}} i(1 - 5 \cos^2 \theta_k) \sin \theta_k e^{\pm i\varphi_k} I_{n3n'}^{1,2}$$

$$\langle np_{\pm 1}|e^{i\vec{k}\vec{r}}|nd_{\mp 2}\rangle = \pm \frac{3\sqrt{5}}{4} i \sin^3 \theta_k e^{\mp 3i\varphi_k} I_{n3n'}^{1,2}$$

Annexe C

Cas des atomes à couche ouverte.

Il diffère en deux points du cas des atomes à couches complètes:

a - La fonction d'onde est généralement représentée par une combinaison linéaire de déterminants.

b - Le problème n'a plus la symétrie sphérique. Examinons la difficulté soulevée par le premier point, et la manière dont on le résout.

Lorsque un atome possède p électrons répartis dans une couche de nombre azimutal l , il existe C_n^p manières de représenter la configuration considérée (avec $n = 2(2l+1)$, c'est à dire C_n^p déterminants de Slater à envisager pour cet atome), soient D_i ces déterminants, chaque déterminant est fonction propre de l'hamiltonien, de S_z et de L_z .

Déterminants d^2 .

Tableau I

	L^2		L^2
$D_1 = d_2 d_0 $	$12D_1$	$D_{18} = \bar{d}_2 \bar{d}_0 $	$18D_{18}$
$D_2 = d_2 \bar{d}_0 $	$12D_2 + 2\sqrt{6}D_3$	$D_{19} = \bar{d}_2 \bar{d}_{-1} $	$8D_{19} + 2\sqrt{6}D_{20}$
$D_3 = d_1 \bar{d}_1 $	$\sqrt{6}D_2 + 14D_3 + 2\sqrt{6}D_4$	$D_{20} = \bar{d}_1 \bar{d}_0 $	$6D_{20} + 2\sqrt{6}D_{19}$
$D_4 = d_0 \bar{d}_2 $	$12D_4 + 2\sqrt{6}D_3$	$D_{21} = \bar{d}_2 \bar{d}_{-2} $	$4D_{21} + 4D_{22}$
$D_5 = d_2 d_{-1} $	$8D_5 + 2\sqrt{6}D_6$	$D_{22} = \bar{d}_1 \bar{d}_{-1} $	$10D_{22} + 4D_{21}$
$D_6 = d_1 d_0 $	$6D_6 + 2\sqrt{6}D_5$	$D_{23} = d_1 d_{-2} $	$8D_{23} + 2\sqrt{6}D_{24}$
$D_7 = d_2 \bar{d}_{-1} $	$8D_7 + 2\sqrt{6}D_8$	$D_{24} = d_0 d_{-1} $	$6D_{24} + 2\sqrt{6}D_{23}$
$D_8 = d_1 \bar{d}_0 $	$12D_8 + 2\sqrt{6}D_7 + 6D_9$	$D_{25} = d_1 \bar{d}_{-2} $	$8D_{25} + 2\sqrt{6}D_{26}$
$D_9 = \bar{d}_1 d_0 $	$12D_9 + 6D_8 + 2\sqrt{6}D_{10}$	$D_{26} = d_0 \bar{d}_{-1} $	$12D_{26} + 2\sqrt{6}D_{25} - 6D_{27}$
$D_{10} = \bar{d}_2 d_{-1} $	$8D_{10} + 2\sqrt{6}D_9$	$D_{27} = \bar{d}_0 d_{-1} $	$12D_{27} - 6D_{26} + 2\sqrt{6}D_{28}$
$D_{11} = d_2 d_{-2} $	$4D_{11} + 4D_{12}$	$D_{28} = \bar{d}_1 \bar{d}_{-2} $	$8D_{28} + 2\sqrt{6}D_{27}$
$D_{12} = d_1 d_{-1} $	$10D_{12} + 4D_{11}$	$D_{29} = \bar{d}_1 \bar{d}_{-2} $	$4D_{29} + 2\sqrt{6}D_{30}$
$D_{13} = d_2 \bar{d}_{-2} $	$4D_{13} + 4D_{11}$	$D_{30} = \bar{d}_0 \bar{d}_{-1} $	$6D_{30} + 2\sqrt{6}D_{29}$
$D_{14} = d_1 \bar{d}_{-1} $	$10D_{14} + 6D_{13} + 6D_{15}$	$D_{31} = d_0 d_{-2} $	$12D_{31}$
$D_{15} = d_0 \bar{d}_0 $	$12D_{15} + 6D_{14} - 6D_{16}$	$D_{32} = d_0 \bar{d}_{-2} $	$12D_{32} + 2\sqrt{6}D_{33}$
$D_{16} = \bar{d}_1 d_{-1} $	$10D_{16} - 6D_{15} + 4D_{17}$	$D_{33} = d_{-1} \bar{d}_{-1} $	$14D_{33} + 2\sqrt{6}D_{32} - 2\sqrt{6}D_{34}$
$D_{17} = \bar{d}_2 d_{-2} $	$4D_{17} + 4D_{16}$	$D_{34} = \bar{d}_0 d_{-2} $	$12D_{34} - 2\sqrt{6}D_{33}$

L'opération $L^2 D_i = \sum_j \lambda_{ij} D_j$ permet de déterminer les éléments de matrices non nuls λ_{ij} rapportés dans le tableau I. La détermination des valeurs et des vecteurs propre ne pose aucun problème, ces derniers seront donnés dans le tableau II.

Vecteurs propres en fonction des D_i	m_L	m_S	Etat
$\frac{1}{\sqrt{10}}(-2D_5 + \sqrt{6}D_6)$	1	1	3P
$\frac{1}{\sqrt{20}}(-2D_7 + \sqrt{6}D_8 - \sqrt{6}D_9 + 6D_{10})$	1	0	
$\frac{1}{\sqrt{5}}(-2D_{11} + D_{12})$	0	1	
$\frac{1}{\sqrt{10}}(2D_{13} - D_{14} - D_{16} + 2D_{17})$	0	0	
$\frac{1}{\sqrt{10}}(-2D_{19} + \sqrt{6}D_{20})$	1	-1	
$\frac{1}{\sqrt{5}}(-2D_{21} + D_{22})$	0	-1	
$\frac{1}{\sqrt{10}}(-2D_{23} + \sqrt{6}D_{24})$	-1	1	
$\frac{1}{\sqrt{10}}(-2D_{25} + \sqrt{6}D_{26} + \sqrt{6}D_{27} - 2D_{28})$	-1	0	
$\frac{1}{\sqrt{10}}(-2D_{29} + \sqrt{6}D_{30})$	-1	-1	
$\sqrt{\frac{2}{7}}(-D_2 + \frac{\sqrt{6}}{2}D_3 + D_4)$	2	0	1D
$\frac{1}{\sqrt{84}}(-6D_7 + \sqrt{6}D_8 - \sqrt{6}D_9 + 6D_{10})$	1	0	
$\frac{1}{\sqrt{14}}(2D_{13} + D_{14} - 2D_{15} - D_{16} - 2D_{17})$	0	0	
$\frac{1}{\sqrt{84}}(-6D_{25} + \sqrt{6}D_{26} - \sqrt{6}D_{27} + 6D_{28})$	-1	0	
$\sqrt{\frac{2}{7}}(-D_{32} + \frac{\sqrt{6}}{2}D_{33} + D_{34})$	-2	0	
$-\frac{1}{\sqrt{5}}(-D_{13} + D_{14} - D_{15} - D_{16} + D_{17})$	0	0	1S

Déterminants p^2 .

Il est possible d'envisager par un calcul analogue que précédemment les quinze déterminants p^2 suivants:

Tableau III.

	L^2	S^2
$D_1 = 4p_1 4\bar{p}_1 $	$6D_1$	0
$D_2 = 4p_1 4p_0 $	$2D_2$	$2D_2$
$D_3 = 4p_1 4\bar{p}_0 $	$4D_3 - 2D_4$	$D_3 + D_4$
$D_4 = 4\bar{p}_1 4p_0 $	$4D_4 - 2D_3$	$D_3 + D_4$
$D_5 = 4\bar{p}_1 4\bar{p}_0 $	$2D_5$	$2D_5$
$D_6 = 4p_1 4p_{-1} $	$2D_6$	$2D_6$
$D_7 = 4p_1 4\bar{p}_{-1} $	$2D_7 + 2D_9$	$D_7 + D_8$
$D_8 = 4\bar{p}_1 4p_{-1} $	$2D_8 - 2D_9$	$D_7 + D_8$
$D_9 = 4p_0 4\bar{p}_0 $	$2D_7 - 2D_8 + 4D_9$	0
$D_{10} = 4\bar{p}_1 4p_{-1} $	$2D_{10}$	$2D_{10}$
$D_{11} = 4p_0 4p_{-1} $	$2D_{11}$	$2D_{11}$
$D_{12} = 4p_0 4\bar{p}_{-1} $	$4D_{12} - 2D_{13}$	$D_{12} + D_{13}$
$D_{13} = 4\bar{p}_0 4p_{-1} $	$4D_{13} - 2D_{12}$	$D_{12} + D_{13}$
$D_{14} = 4\bar{p}_0 4\bar{p}_{-1} $	$2D_{14}$	$2D_{14}$
$D_{15} = 4p_{-1} 4\bar{p}_{-1} $	$6D_{15}$	0

Tableau IV.

	Expression des vecteurs propres en fonction des D_i	m_L	m_S	Etat
B_1	D_2	1	1	3P
B_2	$\frac{1}{\sqrt{2}}(D_3 + D_4)$	1	0	
B_3	D_5	1	-1	
B_4	D_6	0	1	
B_5	$\frac{1}{\sqrt{2}}(D_7 + D_8)$	0	0	
B_6	D_{10}	0	-1	
B_7	D_{11}	-1	1	
B_8	$\frac{1}{\sqrt{2}}(D_{12} + D_{13})$	-1	0	
B_9	D_{14}	-1	-1	

Angular distributions of electrons in the $(e, 3e)$ reaction

H. Hda¹, C. Dal Cappello¹, J. Langlois²

¹ Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Institut de Physique et d'Electronique de Metz,
1 rue Arago, F-57078 Metz Cedex 3, France

² Laboratoire de Collisions Electroniques et Atomiques, Faculté des Sciences et Techniques, Université de Bretagne Occidentale,
6 avenue V. Le Gorgeu, F-29287 Brest, France

Received: 1 July 1993 / Final version: 10 September 1993

Abstract. The differential cross sections for the Kr $(e, 3e)$ Kr⁺⁺ reaction are calculated (by using correlated wave function) in the case of high incident energy (5 keV) for the three terms of the final Kr⁺⁺ ($4p^4$) ion. We have performed an ab initio calculation on the basis of the first Born approximation using correlated wave functions for the target. The agreement with the first available $(e, 3e)$ experimental data is fairly good. Other typical experimental situations are proposed and discussed.

PACS: 34.80.Dp

1. Introduction

The understanding of correlation effects arising in the dynamics of electrons escaping from a charged core constitutes a permanent challenge in atomic and molecular physics. Double ionization by electron impact is the most attractive study because the simultaneous ejection of two electrons is forbidden when the independent-particle model is applied and is strongly dependent on the electron-electron correlation. In the present paper, only the double ionization of noble gases by electron impact is investigated although the theoretical development used here could be also applied to the other cases.

Double ionization is experimentally much less probable than single ionization. For instance the ratio σ^{2+}/σ^+ of double to single ionization total cross sections is only around 0.5% for helium if the high incident energy is 5 keV. This ratio increases (by a factor of ten) when argon or krypton is used as target [1] instead of helium. The first experimental investigations determined this ratio [1, 3] as a function of the incident particle energy. Then partial-differential cross sections have been studied [4, 5]. But all these experiments are not very sensitive to finer details of the ionization dynamics. Lahmam-Bennani et al. [6, 7] have recently performed measurements of *fully differential cross sections* on argon and krypton.

In this type of experiment the directions and the energies of the three outgoing electrons of the final state (one scattered and two ejected) are measured by using three detectors in coincidence. These so-called $(e, 3e)$ experiments appear to be the most interesting tool available to study the double ionization process. Unfortunately the energy resolution is too poor presently to distinguish the different states of the ion but we hope it will become sufficient in near future.

Several hypotheses have been made to explain the mechanisms of the double ionization. In the early calculations of Tweed [8] the colliding electron is considered to interact with and to eject only one of the target electrons. The second one leaves the target because of the resulting change of the effective potential that it sees. This first order process is similar to the "shake off" model [9].

Carlson and Krause [10] have proposed two other mechanisms in the case of electron impact (or photon impact). In a first case the incident particle interacts successively with two different target electrons, ejecting them one by one. In a second case the incident particle ejects one target electron, which then collides with and ejects a second one. These two two-step mechanisms contribute appreciably at incident energies below 1 keV [11]. Since the projectile is very fast (5 keV) we neglect these two-step mechanisms and use plane waves to describe it. So we arrive at standard first Born formulation of this collision problem.

The model developed in this paper includes: the correlation in the initial state, the different states of the ion (³P, ¹S and ¹D) and the correlation in the final state by using an approximation of the BBK model [12].

This model improves the preceding model of Yudin et al. [13] where the interaction between both ejected electrons is neglected. It improves as well the recent model of Dal Cappello et al. [14] where the orthogonalized-Coulomb-wave model [15] is used instead of the BBK model and where the calculation is limited to the ion state ¹S.

2. Theory

The double ionization of complex atoms like krypton ($4p^6$) is a difficult problem and it is necessary to make many approximations. Firstly we only take into account of the six electrons of the outer-subshell ($4p^6$) of krypton. Secondly the radial functions used to describe the electrons of the krypton ion ($4p^4$) are assumed to be the same as the radial functions for electrons in the initial state of the neutral atom of krypton. These two approximations are consistent with the well-know "frozen core" approximation.

Starting from the first Born approximation we get the fivefold differential cross section in atomic units for one of the 15 possible ion state:

$$\sigma^{(5)} = \frac{d^5 \sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 d(k_1^2/2) d(k_2^2/2)} = \frac{4k_s k_1 k_2}{k_i K^2} (|M|^2) \quad (1)$$

where $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ is the momentum transfer, \mathbf{k}_i and \mathbf{k}_s the momenta of the incident and scattered electrons, respectively. The matrix element M corresponding to the six electrons of the shell ($4p^6$) is written as:

$$M = \frac{1}{K} \langle \Psi_f | -6 + \sum_{n=1}^6 e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_n} | \Psi_i \rangle. \quad (2)$$

Here, Ψ_i is the wave function for the initial state ($4p^6$) and Ψ_f that of the final state ($4p^4$) and the two ejected electrons).

The matrix element may be reduced to a linear combination of simple matrix elements M_{ij} when we expand ψ_i in terms of one electron orbitals and we use the BBK wave function for both ejected electrons:

$$M_{ij} = \frac{1}{K} \langle \psi_{\text{BBK}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_2} - 2 | \phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_2) \rangle \quad (3)$$

with

$$\phi = Y_l^m(\theta) R(n, \varepsilon; r) \quad (4)$$

$$R(n, \varepsilon; r) = [(2n)!]^{-1/2} (2\varepsilon)^{n+1/2} r^{n-1} \exp(-\varepsilon r) \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\text{BBK}} = & \frac{e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} e^{\pi Z/2k_1} \Gamma(1+iZ/k_1) \\ & \cdot {}_1F_1\left(\frac{-iZ}{k_1}, 1; -i(k_1 r_1 + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1)\right) \\ & \cdot \frac{e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2}}{(2\pi)^{3/2}} e^{\pi Z/2k_2} \Gamma(1+iZ/k_2) \\ & \cdot {}_1F_1\left(\frac{-iZ}{k_2}, 1; -i(k_2 r_2 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)\right) \\ & \cdot e^{-\pi/4k_{12}} \Gamma(1-i/2k_{12}) \\ & \cdot {}_1F_1(i/2k_{12}, 1; -i(k_{12} r_{12} + \mathbf{k}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12})) \end{aligned} \quad (6)$$

and $k_{12} = \frac{1}{2}|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$.

(3) is obtained if we assume:

$$\langle \phi_i | e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} | \phi_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (7)$$

(7) is right when the momentum transfer tends to zero. This case corresponds to the best situation that is to the greatest values of the differential cross section [16]. It is also close to the case of the ($e, 3e$) experiments performed by Lahmam-Bennani et al. [6, 7] on argon and krypton ($K < 0.45$).

The matrix element requires a final state orthogonal to the initial one. Here the wave functions used are not orthogonal. It is possible to enforce the orthogonality by the Schmidt procedure whose results, in the case of low momentum transfer values, do not differ very much from those obtained by (3).

Finally, (3) shows that the difficult problem of the double ionization of rare gases like krypton can be reduced to a problem of two active electrons under simple approximations.

2.1. The initial state wave function

This part is detailed in the paper of Dal Cappello [14] and we only add some little changes. We also examine two wave functions: the Hartree-Fock wave function of Clementi and Roetti [17] and those of Langlois [18] calculated by superposition of configurations in order to see the importance of the correlation for each ion state. Here we use the following eight component:

$$\begin{aligned} & 4p^6, 4p^4(^1S)4d^2(^1S), 4p^4(^1S)5s^2(^1S), \\ & 4p^4(^1S)5p^2(^1S), 4p^4(^3P)5p^2(^3P), 4p^4(^3P)4d^2(^3P), \\ & 4p^4(^1D)5p^2(^1D), 4p^4(^1D)4d^2(^1D). \end{aligned} \quad (8)$$

This type of correlated wave function can be used for the case of the double ionization of any np^6 shell [18] (neon, argon and xenon). It is also possible to include another component like $4f^2$ but we estimate that the $4d^2$ component is probably sufficient.

2.2. The final state wave function

The orthogonalized-Coulomb-wave model [15] used in the preceding paper [14] leads to some disagreement with a model based upon the BBK wave function in the case of the double photoionization of helium [19]. The BBK model is actually the best treatment to describe the double continuum of the two ejected electrons in the field of an ion. Unfortunately it is not easy to apply when we consider orbitals such as $4d$ or $5p$ because it needs many derivatives. Another way is to approximate this wave function by assuming the third hypergeometric function in (6) to be equal to 1. We lose a part of the information about the amplitude of the differential cross sections but we keep the repulsive factor $e^{-\pi/4k_{12}} \Gamma(1-i/2k_{12})$ which is sufficient to explain the strong angular correlation in the final state. We have checked this approximation in the case of ($e, 3e$) on helium [20] and we observe the same angular distribution, the differences being only on the amplitude of the cross section. Our first aim being the explanation of the angular distributions we use this "approximate" BBK model in this paper.

3. Results and discussion

We have discussed in the preceding paper [14] the inadequacy of the orthogonalized-plane-wave model [21, 22] and the Coulomb-wave-model [8, 23]. We have concluded that a model without correlation in the final state is unable to describe $(e, 3e)$ experiments. We have also observed that the orthogonalized Coulomb-wave-model, which simulates the Coulomb interaction between the ejected electrons, gave some disagreement with experiments [14, 19]. Then we only consider the approximate BBK model described in this paper to explain the experimental results on krypton [7] and argon [6] and to propose new experiments.

In order to test the first Born approximation it is interesting to examine a coplanar situation where an ejected electron leaves the target in the direction of the momentum transfer, the second electron being ejected in the plane defined by the momentum of the incident electron and the momentum transfer. If the angular distribution of the second ejected electron is not symmetric around the momentum transfer \mathbf{K} we have a proof that the two-step mechanism is not negligible. This type of experiment has not yet been performed and constitutes a very clear check of the theoretical models. This typical situation is studied in the Figs. 1, 2 and 3. At first we examine the importance of the correlation in the initial state for each ion state (3P , 1D and 1S) for krypton. In Fig. 1 we omit the repulsive factor and see that the 3P shows big differences with the two other states of the residual ion. For example there is a minimum when the second electron leaves the target in the direction of \mathbf{K} . Finally when we include the repulsive factor (Fig. 2) we get little charge for 3P contrary to other states for

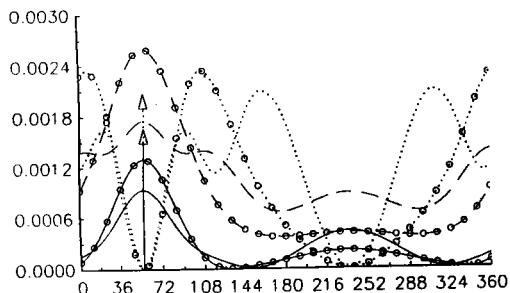


Fig. 1. The five-fold differential cross section in atomic units for the $(e, 3e)$ double ionization of krypton $4p^6$ in coplanar geometry. Electron energies are 5628.4 eV, 5500 eV and 45 eV, respectively for incident, scattered and ejected electrons. The scattering angle is -1° . One electron is detected along the momentum transfer direction (56°), while the second one is detected at variable angle. Final-state wave function: Coulomb-wave model. Initial-state wave function: Hartree-Fock wave function [17] $\circ-\circ-$ 1S ion state; $\circ-\circ-\circ$ 1D ion state; $\circ-\circ-\circ$ 3P ion state. Configuration interaction wave function of Langlois [18]: $—$ 1S ion state; $---$ 1D ion state; \cdots 3P ion state. \uparrow direction of the momentum transfer \mathbf{K} ; \uparrow direction of the first ejected electron

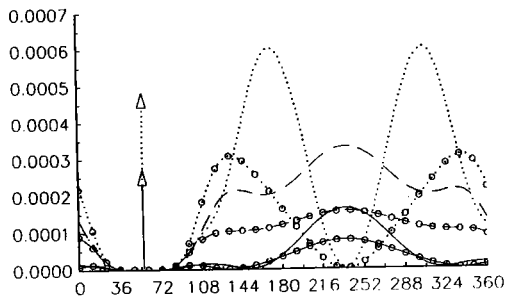


Fig. 2. Same as Fig. 1, except for the final-state wave function: approximate BBK model

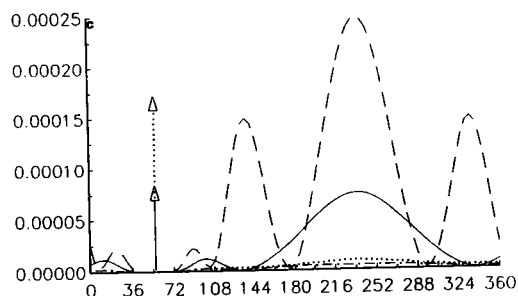
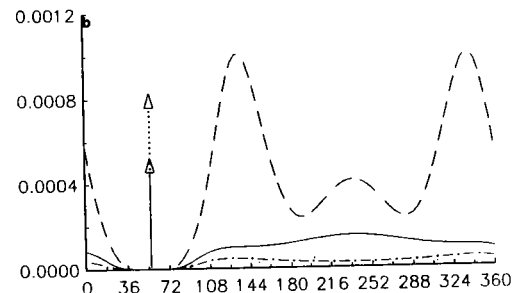
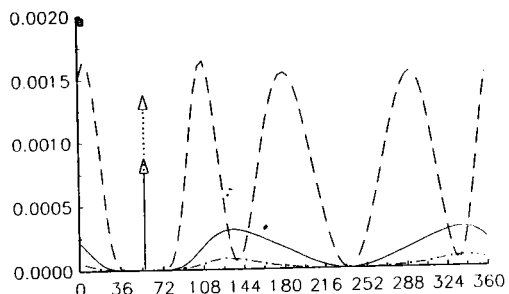


Fig. 3. Same as Fig. 2, but with a for the 3P ion state: $—$ Hartree-Fock contribution; $---$ $5p^2$ component ($\times 10$); \cdots $4d^2$ component ($\times 10$). b for the 1D ion state: $—$ Hartree-Fock contribution; $---$ $5p^2$ component ($\times 10$); \cdots $4d^2$ component ($\times 10$). c for the 1S ion state: $—$ Hartree-Fock contribution; $---$ $5p^2$ component ($\times 10$); \cdots $4d^2$ component ($\times 10$); \dashdot $5s^2$ component ($\times 10$)

which the maximum in the K direction disappears. The inclusion of the correlations in the initial state leads to different results: there is a big change in the shape of the curves for the 3P (Fig. 1 and Fig. 2), such as shifts of the maximum and only change of the amplitudes for 1D and 1S (Fig. 1 and Fig. 2).

It is interesting to study now the importance of each component of the initial state when the repulsive factor is included. The Fig. 3a, b and c show that the big part is given by the $4d^2$ component for any ion state. We may explain this result if we consider that the $4d^2$ component is built from orbital such as $n=4$ and may interact strongly with $4p^2$ while the other components are built from orbitals such as $n=5$.

In order to compare our theoretical results with the experimental data of Lahmam-Bennani et al. and to future experiments able to distinguish each ion state we have drawn the contribution of each state to the cross section as well as their sum. As a first conclusion of the Figs. 4, 5, 6, 7 and 8 the major contribution is due to the 3P ion state except near the K direction. As a

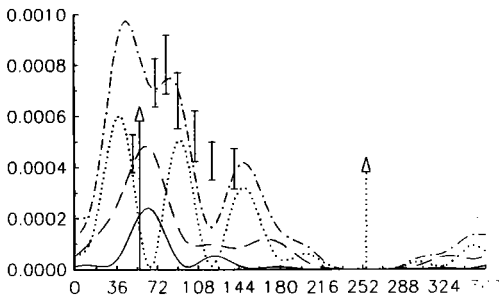


Fig. 4. The five-fold differential cross section in atomic units for the double ionization of krypton $4p^6$ in coplanar geometry. Electron energies are 5628.4 eV, 5500 eV and 45 eV, respectively for incident, scattered and ejected electrons. The scattering and the first ejected electron angles are -1° and 255° . The five-fold differential cross section is plotted as a function of the direction of the second ejected electron. Final-state wave function: configuration interaction wave function of Langlois [18]. The theoretical results are multiplied by 1.5. — 1S ion state; 3P ion state; --- 1D ion state; -.- $^1S + ^3P + ^1D$ ion states; I experimental data [7]. \uparrow direction of the momentum transfer K ; \uparrow direction of the first ejected electron

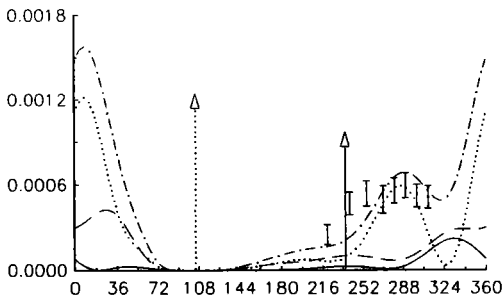


Fig. 5. Same as Fig. 4, except for the first ejected electron angle (105°) and \uparrow direction of $-K$

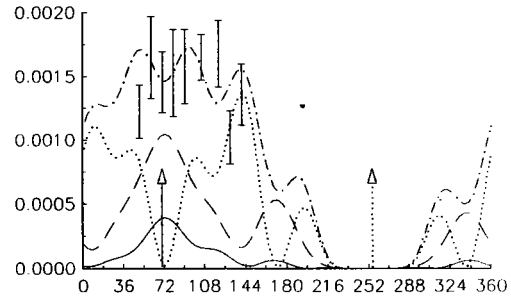


Fig. 6. Same as Fig. 4, but with 5568.4 eV, 5500 eV and 15 eV, respectively for incident, scattered and ejected electrons. There is no multiplicative factor here

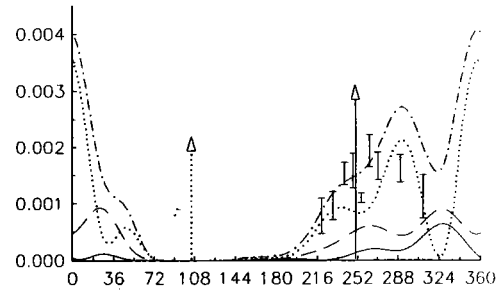


Fig. 7. Same as Fig. 6, except for the first ejected electron angle (105°) and \uparrow direction of $-K$

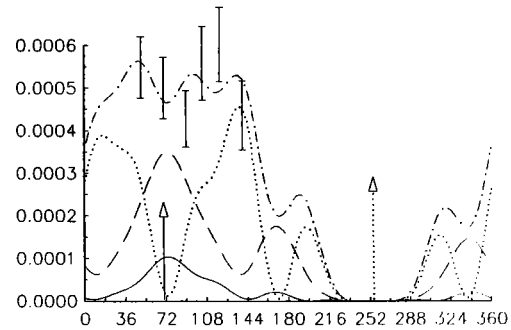


Fig. 8. Same as Fig. 4, but with 5568.4 eV, 5500 eV, 20 eV and 10 eV, respectively for incident, scattered, first and second ejected angles. The theoretical results are multiplied by 0.33

second conclusion there is a general agreement between our model and experiments. So we can explain the smooth curve in Fig. 6 and Fig. 8 by the amount of 1D and 3P contributions and the inclusion of the $4d^2$ component. This result seems to show that contributions of excited $4p^4$ states and double ionization $4p^{-1}4s^{-1}$ are negligible.

Nevertheless we observe little disagreement (Fig. 4) for a case where both energies of ejected electrons are higher. For this case it will be interesting to add a $4f^2$ component in the initial state wave function.

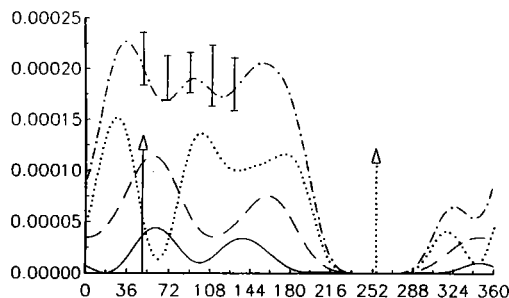


Fig. 9. The five-fold differential cross section in atomic units for the double ionization of argon $3p^6$ in coplanar geometry. Electron energies are 5553 eV, 5480 eV, 20 eV and 10 eV, respectively for incident, scattered and ejected electrons. The scattering and the first ejected electron angles are -0.45° and 255° . The five-fold differential cross section is plotted as a function of the direction of the second ejected electron. Final state wave function: approximate BBK model. Initial-state wave function: configuration interaction wave function of Langlois [18]. The theoretical results are divided by 60. — 1S ion state; 3P ion state; --- 1D ion state; -.-.- $^1S + ^3P + ^1D$ ion states; I experimental data [6]

The Fig. 9 shows a comparison between our model and the first $(e, 3e)$ experiments on argon $3p^6$ [6]. We observe a good agreement between theory and experiments as for the case of krypton (Figs. 6 and 8).

It would be interesting to do same new experiments on neon $2p^6$ because Hall et al. [24] showed that the 1D contribution is more important than the 3P in a double photoionization contrary to the cases of krypton and argon.

4. Conclusion

We are able for the first time to explain the major part of the first $(e, 3e)$ experiments on argon $3p^6$ and krypton $4p^6$ with our approximate BBK model. We show that the inclusion of the $4d^2$ component is necessary to explain the smooth experimental curves. We also show that the 3P ion state gives the more important contribution except in the vicinity of the momentum transfer. It is now interesting to perform new experiments with typical situations, especially for the case of the double ionization of neon $2p^6$, in order to determine exactly the final ion state.

We would like to thank Dr. R.J. Tweed, Pr. Tavad and Pr. Popov for fruitful discussions about the manuscript. We also thank P. Senot and Mrs. C. Cueille for technical assistance. The calculations have been done on the C.C.S. (Centre de Calcul de Strasbourg) computer.

References

1. Nagy, P., Skutlartz, A., Schmidt, V.: J. Phys. B13, 1249 (1980)
2. Andersen, L.H., Hvelplund, P., Knudsen, H., Moller, S.P., Sorensen, A.H.: Phys. Rev. A36, 3612 (1987)
3. Shah, M.B., Elliot, D.S., McCallion, P., Gilbody, H.B.: J. Phys. B21, 2751 (1988)
4. Hippler, R., Saeed, K., Duncan, A.J., Kleinpoppen, H.: Phys. Rev. A30, 3328 (1984)
5. Chaudhry, M.A., Duncan, A.J., Hippler, R., Kleinpoppen, H.: Phys. Rev. A39, 530 (1989)
6. Lahmam-Bennani, A., Dupre, C., Duguet, A.: Phys. Rev. Lett. 63, 1582 (1989)
7. Lahmam-Bennani, A., Duguet, A., Grisogono, A.M., Lucas, M.: J. Phys. B25, 2873 (1992)
8. Tweed, R.J.: J. Phys. B6, 398 (1973)
9. Tweed, R.J.: Z. Phys. D23, 309 (1992)
10. Carlson, T.A., Krause, M.O.: Phys. Rev. A140, 1057 (1965)
11. McGuire, J.H.: Phys. Rev. Lett. 49, 1153 (1982); J. Phys. B17, L779 (1984)
12. Brauner, M., Klar, H., Briggs, J.S.: Z. Phys. D11, 257 (1989)
13. Yudin, N.P., Pavlitchenkov, A.V., Neudatchin, V.G.: Z. Phys. A320, 565 (1985)
14. Dal Cappello, C., Langlois, J., Dal Cappello, M.C., Joulakian, B., Lahmam-Bennani, A., Duguet, A., Tweed, R.: Z. Phys. D23, 389 (1992)
15. Dal Cappello, C., Le Rouzo, H.: Phys. Rev. A43, 3, 1395 (1991)
16. Joulakian, B., Dal Cappello, C.: Phys. Rev. A47, 5, 3788 (1993)
17. Clementi, E., Roetti, C.: At. Data Nucl. Data Tables 14, 177 (1974)
18. Langlois, J.: (unpublished)
19. Schmidt, V.: 9ème Colloque des systèmes atomiques et moléculaires à deux électrons actifs, 27–29 January 1993, Paris, France (to be published)
20. Dal Cappello, C., Joulakian, B.: Proc. of the NATO Advanced Research Workshop on $(e, 2e)$ and Related Process (Cambridge). Dordrecht, Kluwer 1993
21. Smirnov, Yu.F., Pavlitchenkov, A.V., Levin, V.G., Neudatchin, V.G.: J. Phys. B11, 20 (1978)
22. Neudatchin, V.G., Smirnov, Yu.F., Pavlitchenkov, A.V., Levin, V.G.: Phys. Lett. A64, 31 (1977)
23. Byron, F.W. Jr., Joachain, C.J.: Phys. Rev. A164, 1 (1967)
24. Hall, R.I., Dawber, G., McConkey, A.G., Mac Donald, M.A., King, G.C.: Z. Phys. D23, 377 (1992)