



**HAL**  
open science

# Double ionisation de l'atome d'hélium et de l'ion hydrure par impact électronique : étude des sections efficaces multiples différentielles

Pascal Lamy

► **To cite this version:**

Pascal Lamy. Double ionisation de l'atome d'hélium et de l'ion hydrure par impact électronique : étude des sections efficaces multiples différentielles. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1995. Français. NNT : 1995METZ005S . tel-01777085

**HAL Id: tel-01777085**

**<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01777085>**

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](mailto:ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr)

## LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

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

[http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg\\_droi.php](http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php)

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

681680

**UNIVERSITE DE METZ**  
INSTITUT DE PHYSIQUE ELECTRONIQUE ET DE CHIMIE

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE SCIENCE ET TECHNOLOGIES - METZ	
N° Inv.	1995/165
Cote	S/M 3 95/5
Loc.	Magasin
Cat	

**THESE DE DOCTORAT**

Spécialité : Atomes, molécules, photons et leurs interactions

présentée pour obtenir le titre de

Docteur de l'Université de Metz

par

Pascal LAMY

Sujet : Double ionisation de l'atome d'hélium et de l'ion hydrure par impact électronique : étude des sections efficaces multiplement différentielles

Soutenu le 3 mars 1995 devant la commission d'examen

Professeur C. DAL CAPPELLO

Directeur de Recherches R. GAYET

Professeur I

Professeur C

Professeur J

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 420860 0

Université de METZ (Directeur de thèse)

Université de BORDEAUX (rapporteur)

Université de LOUVAIN (rapporteur)

Université de PARIS-SUD

Université de METZ

*A mon Epouse*

Ce travail a été effectué au Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions de l'Université de Metz. Je tiens à remercier ses Directeurs, C. Favard et C. Dal Cappello, pour l'accueil qu'ils m'ont réservé tout au long de ce séjour mais aussi pour les encouragements, la confiance, les orientations ainsi que leurs remarques sur la rédaction de ce mémoire.

Mes remerciements vont également à P. Defrance, Professeur à l'Université catholique de Louvain, ainsi qu'à R. Gayet, Directeur de Recherches à l'Université de Bordeaux, qui se sont intéressés à mon travail et ont bien voulu accepter d'être rapporteur.

Je remercie également J. F. Muller, Professeur à l'Université de Metz et C. Le Sech, Professeur à l'Université de Paris-Sud, qui ont accepté de faire partie du jury de cette thèse.

Je suis reconnaissant à B. Joulakian, Maître de Conférences à l'Université de Metz, pour ses conseils, ses suggestions et son aide.

A mes amis du laboratoire H; Hda, H. Hafid, B. Najjari, M. Roeth, j'exprime ma sincère et amicale gratitude pour le soutien cordial qu'ils m'ont apporté.

Je remercie également P. Senot pour l'assistance technique qu'il a apporté durant ce travail ainsi que le secrétaire, P. Sierputowicz, pour sa participation à la frappe de ce mémoire.

# SOMMAIRE

<b>Introduction</b> .....	3
<b>I Généralités</b> .....	5
1) Les types de diffusion .....	5
2) Les différents mécanismes d'ionisation .....	8
3) Importance de la corrélation.....	14
4) La section efficace : amplitude de transition et approximation de Born .....	16
a) Notion de section efficace .....	17
b) Approximation dans la description de la collision .....	17
c) La section efficace .....	19
d) La section efficace différentielle .....	20
<b>II La section efficace différentielle de double ionisation</b> .....	22
1) Calcul de la section efficace quintuplement différentielle .....	22
2) Le modèle BBK .....	24
3) Le modèle pour l'état initial .....	31
4) Expression de l'amplitude de transition .....	35
<b>III Résultats et discussions</b> .....	38
A) Ionisation double de He et $H^-$ : section efficace quintuplement différentielle .....	38
1) Comparaison avec les résultats de B. Joulakian .....	39
2) Représentation pour différentes valeurs de l'énergie .....	42
3) Utilisation d'une fonction d'onde initiale non corrélée .....	51
4) Modification de l'état final .....	56
5) Variation de la section efficace en fonction des deux angles d'éjection .....	58
B) Ionisation double : vers les expériences $(e, (3-1)e)$ .....	63
1) Représentation pour différentes énergies .....	63
2) Utilisation de charges variables .....	68
<b>Conclusion</b> .....	72

<b>Références</b> .....	73
<b>Annexes</b> .....	76
- Calcul de l'intégrale intervenant dans l'amplitude de transition .....	76
- Article : (e-3e) differential cross section of $H^-$ : use of Pluvinage type correlated wavefunctions J. Phys.B : At. Mol. Opt. Phys., 27 3559 (1994) .....	80

# INTRODUCTION

L'étude de la double ionisation d'atomes et d'ions constitue aujourd'hui un nouveau challenge pour les théoriciens et les expérimentateurs.

En effet, jusqu'à présent, les expériences de simple ionisation ont été fortement développées. Elles ont débuté avec Langmuir et Jones [1928] et Rudberg [1930], suivies par les travaux de Bethe [1930] puis Massey et Mohr [1933] qui ont réussi à décrire l'ionisation en utilisant l'approximation de Born. La mesure des sections efficaces totale, différentielle simple et double a été faite plus tard, entre autres par Hughes et Mc Millen [1932]. Ensuite, Peterkop [1960] et Rudge et Seaton [1964, 1968] ont donné une formulation théorique de l'ionisation en tenant compte de la présence de trois corps chargés dans l'état final. Les développements expérimentaux ont aussi progressé avec Ehrhardt et col. [1969] et Amaldi et col. [1969] qui ont réussi la détection en coïncidence des deux électrons sortant pour déterminer la section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'hélium et d'un film mince de carbone. Plus tard, Ehrhardt et col [1982] et Lahmam-Bennani et col [1983] ont continué ces travaux sur la simple ionisation alors que dans un même temps, les théories se sont développées (Schultz [1973], Whelan et col [1989], Brauner et col [1989]).

Après avoir pu expliquer la plupart des résultats des expériences de simple ionisation, les physiciens s'intéressent aujourd'hui aux processus entraînant l'ionisation double.

Il existe d'abord des processus de type direct, tel que le « shake-off » où deux électrons sont éjectés simultanément; ces processus étant prépondérants pour les atomes légers (en particulier les atomes de type hélium : He,  $H^-$  et  $Li^+$ ). Ensuite, on peut distinguer les processus de type indirect : par exemple une ionisation d'un électron d'une couche interne suivie d'un réarrangement avec une deuxième ionisation d'une couche externe (effet Auger).

Alors que la plupart des problèmes de structure atomique et de collision électron-atome peuvent s'expliquer sur la base de modèle à électrons indépendants (Lahmam-Bennani [1991]), les processus de double ionisation nécessitent la prise en compte des corrélations entre électrons. On peut rappeler à ce propos le résultat obtenu par Byron et Joachain [1966] : l'application de ce modèle à électrons indépendants conduisait à une section efficace de double ionisation nulle



pour l'hélium! Ces auteurs ont ainsi établi le rôle fondamental joué par la corrélation entre électrons dans la cible mais par contre, ils négligeaient la corrélation dans l'état final de double continuum constitué par les deux électrons éjectés soumis au potentiel de l'ion restant. Ce n'est qu'en 1991 que Dal Cappello et Le Rouzo ont montré que l'absence de la prise en compte de cette corrélation conduit à un résultat absurde du point de vue physique : les deux électrons peuvent être éjectés simultanément dans une même direction.

Durant cette période, les expériences ont elles aussi progressé : on est ainsi passé de la mesure de sections efficaces totales ( Nagy et col. [1980], Shah et col [1988], Peart et col [1969, 1971]) à des mesures de section multiplement différentielles.

Ainsi, en 1989, Lahmam-Bennani et col. ont réalisé une véritable prouesse technique : la mesure, en coïncidence, des trois électrons dans la voie finale (l'électron diffusé et les deux électrons éjectés) dans le cas de la double ionisation de l'argon. Cet exploit technologique est actuellement en cours d'être réédité pour le cas de la double ionisation de l'hélium.

Le but de ce travail est de proposer un modèle qui tienne compte de la corrélation électronique dans l'état initial et dans l'état final et de l'appliquer au cas de la double ionisation de l'atome d'hélium et de l'ion hydrure  $H^-$ . Ce dernier présente l'avantage d'une section efficace de double ionisation bien supérieure à celle des autres atomes ou ions à deux électrons (Peart et col. [1971], Defrance et col. [1982], Yu et col [1992]).

## I - Généralités.

### 1 ) Les types de diffusion.

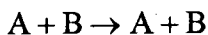
La double ionisation par impact électronique est un problème particulier de la théorie des collisions. Elle apparaît, dans la voie d'entrée, comme une collision à 2 corps ( un électron incident et un atome cible ).

Lors du choc, il y a plusieurs phases distinctes :

- une première phase où les deux corps sont isolés
- une deuxième phase d'interaction
- une phase finale dans laquelle les deux électrons cible sont éjectés.

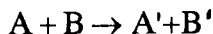
Soient 2 particules A et B entrant en collision. On observe 3 effets distincts :

- diffusion élastique :



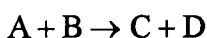
Les particules sont déviées sans changement de l'état interne.

- diffusion inélastique :



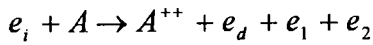
Les particules sont déviées avec un changement de leur état quantique interne.  
( renversement de spin, par exemple ou ionisation )

- collision de réarrangement :



Le système initial se scinde en deux particules différentes ou plus.

Dans notre cas, il s'agit d'un processus d'ionisation directe par impact électronique des couches externes de cibles atomiques ou moléculaires considérées comme immobiles.



$$\vec{k}_i, E_i \quad \vec{k}_d, E_d \quad \vec{k}_1, E_1 \quad \vec{k}_2, E_2$$

Où  $e_i, e_d, e_1, e_2$  désignent les électrons incident, diffusé et éjectés d'énergies  $E_i, E_d, E_1$  et  $E_2$

$\vec{k}_i, \vec{k}_d, \vec{k}_1, \vec{k}_2$  sont leurs quantités de mouvements.

La conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement nous donnent :

$$E_i = E_d + E_1 + E_2 + E_{io}^{++}$$

$$\vec{k}_i = \vec{k}_d + \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{q}$$

$E_{io}^{++}$  est le seuil d'énergie de la double ionisation de la cible A,  $\vec{q}$  la quantité de mouvement de recul de l'ion résiduel. On introduit souvent le transfert d'impulsion :

$$\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_d$$

Les travaux expérimentaux concernant les études de corps doublement ionisés se développent actuellement. On note de tels types d'expériences  $(e,3e)$  ou  $(\gamma,2e)$  pour la double photoionisation.

Ces études ont été précédées par les collisions (e,2e), collisions de simple ionisation où l'électron diffusé et l'électron éjecté sont détectés en coïncidence : on détecte simultanément l'électron diffusé et l'électron éjecté (après un certain temps de retard), ce qui nous assure que l'événement est bien une simple ionisation.

De telles expériences ont été faites en 1969 par Amaldi et col , Ehrhardt et col .

Amaldi utilise un film de carbone comme cible et met en évidence la possibilité de déterminer la densité d'impulsion électronique  $\rho(p)$ .

Ehrhardt a réalisé des expériences sur l'hélium et a observé une structure en double lobe dans la répartition des électrons éjectés. Lahmam-Bennani [1991] a fait le point sur les expériences (e,2e) et sur les mécanismes intervenant dans ce type de réactions.

Plus récemment, les expérimentateurs ont réussi la prouesse technique de détecter en coïncidence l'électron diffusé et les 2 éjectés. Ces expériences sont très difficiles à mettre au point mais permettent d'avoir accès à des sections efficaces différentielles et permettent de «mesurer» la corrélation dans la cible.

Sur le plan théorique, de nombreux modèles ont été développés pour l'étude de la double ionisation et peuvent être confrontés à l'expérience. La description du processus de collision par impact électronique dépend des énergies mises en jeu durant la collision mais aussi de  $\vec{k}$ , le transfert d'impulsion. Le processus de double ionisation est au minimum un problème à 4 corps, nécessitant une solution approchée de l'équation de Schrödinger basée sur des approximations physiques.

L'étude théorique de l'ionisation d'un atome 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.

Pour l'ionisation, il s'agit de la transition d'un ou plusieurs électrons de leur état initial, défini par leurs énergies et un ensemble de nombres quantiques à un état final du continuum défini par son énergie.

## 2 ) Les différents mécanismes d'ionisation.

Pour expliquer le processus d'une double ionisation, plusieurs hypothèses ont été émises :

- le shake-off : c'est un processus à 2 étapes :

l'électron incident éjecte le premier électron et se trouve diffusé. Par un réarrangement, il y a éjection du deuxième électron. Les deux étapes sont indépendantes, sans interaction, ni de l'électron incident, ni du premier électron éjecté avec le deuxième.

D'un point de vue énergétique, l'énergie perdue par l'électron incident et nécessaire pour une seconde ionisation, doit être transmise d'une manière ou d'une autre à l'électron «shake-off».

Les travaux de Carlson [1965, 1967] et Krause [1968] ont montré que pour l'hélium ou pour les couches externes des autres gaz rares, le shake-off ne pouvait rendre compte que d'environ 25% de l'ionisation double totale.

- mécanismes two-step.

Ils ont été proposés par Carlson et Krause [1965] pour un impact électronique (ou photonique). Ces mécanismes contribuent de façon appréciable pour des énergies inférieures à 1 keV (Mc Guire [1982, 1984]).

\* TS1 : la particule incidente éjecte un électron de l'atome cible.

Cet électron éjecté entre en collision avec le deuxième et l'éjecte.

\* TS2 : la particule incidente interagit successivement avec les 2 électrons de la cible en les éjectant un par un.

En comparant les amplitudes de probabilité pour la double ionisation, on a suivant Byron et col [1967, 1966] et Mittleman [1966]

- pour le shake-off :

$$a_{so} = i \int_0^{\infty} \exp [i(E_f - E_i)t] \langle \Phi_1^f | V | \Phi_1^i \rangle \langle \Phi_2^f | \Phi_2^i \rangle dt$$

- pour le two-step :

$$a_{1s} = i \left\{ \int_0^{\infty} \exp [i(E_f - E_i)t] \langle \Phi_2^f | V | \Phi_2^i \rangle dt \right\} \left\{ i \int_0^{\infty} \exp [i(E_f - E_i)t] \langle \Phi_1^f | V | \Phi_1^i \rangle dt \right\}$$

où  $\Phi_1^i, \Phi_2^i$  décrivent l'état initial des électrons 1 et 2.

$\Phi_1^f, \Phi_2^f$  décrivent l'état final des électrons 1 et 2.

V est l'énergie potentielle d'interaction entre les sous-systèmes : cible et électron éjecté.

Dans le cadre de l'approximation de Born, le mécanisme de S.O. est de premier ordre, dans le potentiel de l'interaction entre le projectile et la cible.

Le deuxième mécanisme (TS) est de second ordre et résulte des corrélations de courte portée dans l'état final (l'ion résiduel et les deux électrons éjectés).

Parmi ces deux mécanismes, lequel est le plus important ?

Mc Guire [1982] 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 multiples différentielles à cause de la possibilité d'interférences (Tweed [1992]). On peut avoir une idée de l'évolution des différents mécanismes en fonction de l'énergie de la particule incidente et donc estimer qu'elle devrait être prépondérante dans la double ionisation aux hautes énergies. Les sections efficaces de double ionisation doivent décroître très vite avec l'énergie incidente (Mittleman[1966]).

La section efficace calculée pour le mécanisme S.O. doit se comporter comme une section efficace de simple ionisation multipliée par un terme essentiellement indépendant de l'énergie (Mc Guire et col [1977]) ; elle doit décroître également aussi avec l'énergie, mais de façon beaucoup moins rapide que la section efficace calculée pour les mécanismes two-step (Mc Guire et col [1977]).

Ceci a été expliqué par Mc Guire [1982] qui a proposé une description des sections efficaces totales de la double ionisation à partir de ces deux mécanismes (fig 1), réussissant à reproduire plus ou moins les grandes tendances des données en fonction de l'énergie de l'électron incident.

Ici, dans notre étude, 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 [1967] à basse énergie).

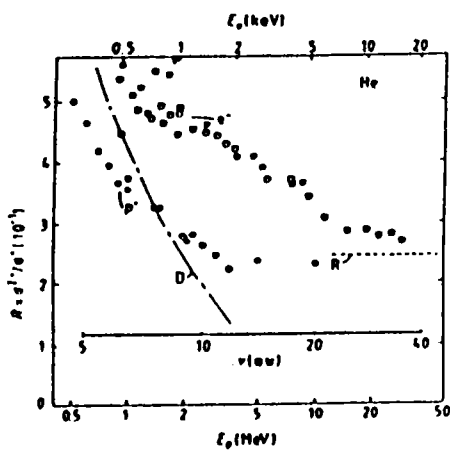
Lahmam-Bennani [1991] ont donné également une description qualitative des mécanismes réactionnels des collisions (e,(3-1)e). Dans ce genre d'expériences, l'électron diffusé n'est pas détecté et l'on ne connaît ni l'énergie, ni la quantité de mouvement cédées à l'atome cible. Plaçons nous dans le cas où les deux électrons éjectés (notés b et c) sont rapides :  $E_b = 75$  eV et  $E_c = 155$  eV (fig 2a) ;  $E_b = 155$  eV et  $E_c = 75$  eV (fig 2b).

La direction de l'électron incident est le long de l'axe vertical,  $\theta_c$  indique la direction fixe de l'électron c, l'électron b est détecté à des angles variables.

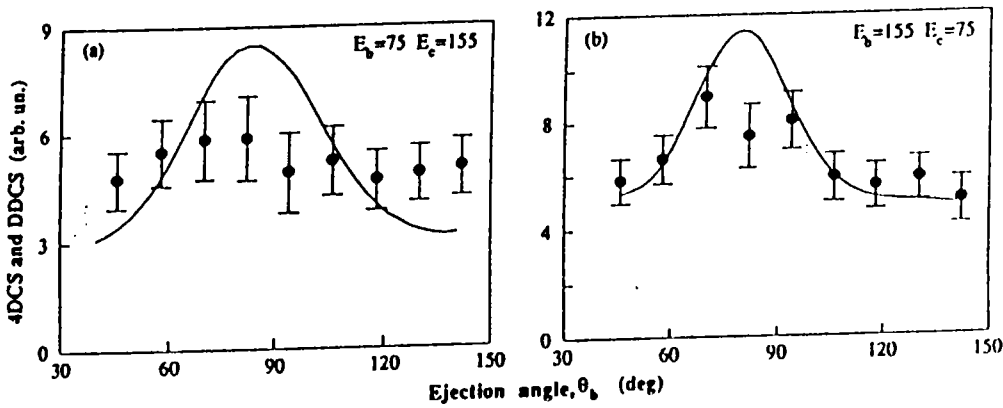
Si on raisonne en terme de shake-off, l'un des électrons est éjecté primordialement avec toute l'énergie, tandis que le second électron est émis en une seconde étape avec une faible énergie. Les figures 3a, 3b présentent un lobe binaire mais pas de lobe de recul à cause de la rapidité de l'électron incident 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  $\vec{k}_i$ . 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 (3a,3b) sont à considérer. Si l'électron de 75 eV est détecté à  $\theta_c$  fixe, la distribution angulaire de la section efficace quadruplement différentielle de l'électron de 155 eV est donné par la figure (3b) avec un pic à  $\sim 80^\circ$ .

Alternativement si l'électron de 155 eV est détecté à  $\theta_c$  fixe, la distribution angulaire de la section efficace quadruplement différentielle est isotropique (figure (3a)). Les deux cas qu'on vient de citer correspondent à la figure 2.

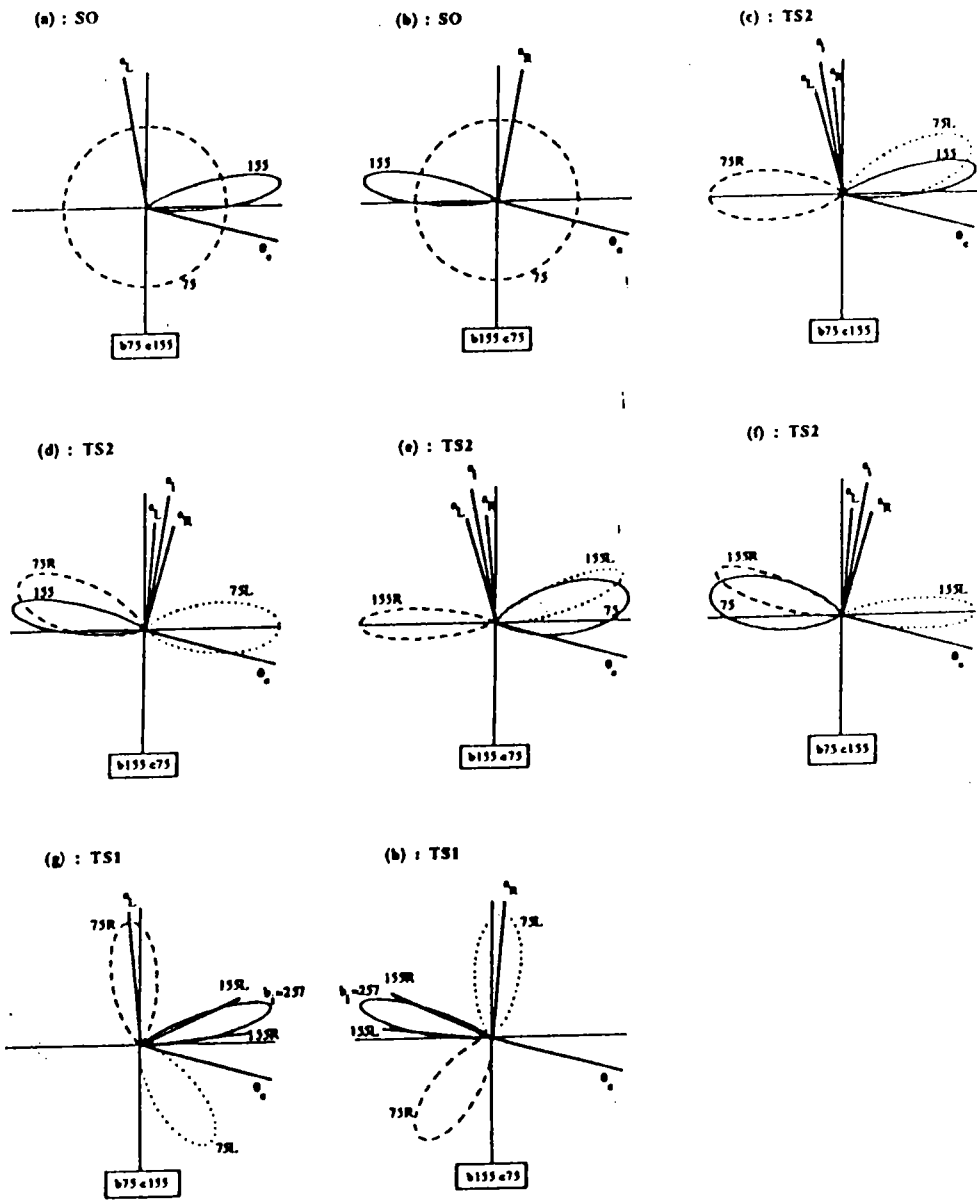


**Fig. 1** Rapport des sections efficaces de la double ionisation à la simple ionisation en fonction de la vitesse des particules incidentes ( protons et électrons )



**Figure 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  $\theta_b$  du deuxième électron . Les énergies des deux électrons éjectés sont (a)  $E_b = 75$  eV et  $E_c = 155$  eV ; (b)  $E_b = 155$  eV et  $E_c = 75$  eV. Ici  $\theta_c = 255^\circ$ .





**Figure 3** diagrammes des différents mécanismes de la double ionisation correspondant à la figure 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  $a_i$ ; ( $a_i$  intermédiaire) pour TS2 et  $a_L$  ( $a$  left) ou  $a_R$  ( $a$  right) pour S.O et TS1.

---; ..... distribution produite par la seconde ionisation

La similitude entre la distribution de la section efficace doublement et quadruplement différentielle donnée par la figure (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 (figure (2a)). Donc on peut conclure que le mécanisme S.O est le responsable de l'observation faite sur les figures (2a, 2b).

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

Dans le mécanisme TS2 (figures 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. 3(c) et 3(d) ou de 75 eV (fig. 3(e) et 3(f)). L'électron  $a_i$  est diffusé soit à gauche de la direction  $\vec{k}_i$  (fig. 3(c), 3(e)) soit à droite (fig. 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. 3(c), 3(d)) ou de 155 eV (fig. 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  $\theta_c$  fixée, les diagrammes 3(d) et 3(e) ne peuvent pas correspondre à la figure 2(a). Ceci parce qu'il n'y a pas d'électron de 155 eV dans la direction de  $\theta_c$  en 3(d) et pas d'électron de 75 eV dans la direction opposée en 3(e). De même les diagrammes 3(c) et 3(f) ne peuvent pas correspondre à 2(b).

Finalement, si l'électron de 155 eV ou de 75 eV est détecté à  $\theta_c$  fixé, la distribution de l'autre électron présente un pic à  $\sim 80^\circ - 90^\circ$ . Ce cas correspond à la figure 2(b) mais contrarie la mesure de la distribution donnée en figure 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 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 3(g) peut correspondre à la distribution de la figure 2(a) mais avec une faible probabilité, mais il ne peut pas correspondre à la figure 2(b) puisque l'électron de 75 eV n'est pas éjecté dans le demi-plan d'observation. De même le diagramme 3(h) ne peut correspondre à la distribution 2(a) car l'électron de 155 eV n'est pas émis dans la direction d'observation, mais peut contribuer à la figure 2(b) avec une faible probabilité.

Lahmam-Bennani et col [1991] concluent que les conditions cinématiques choisies ici 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 les demi-plans opposés sélectionne peut-être les différents mécanismes.

### 3 ) Importance de la corrélation.

Un des intérêts de la double ionisation est la sensibilité à la corrélation inter-électronique. Les travaux de Dal Cappello et Le Rouzo [1991] ont montré l'importance de la corrélation dans l'état final et dans une moindre mesure dans l'état initial pour les processus de double ionisation (dans le cas de l'hélium). Cette importance de la corrélation dans l'état initial avait été précédemment établie par Byron et Joachain [1967], puis par Smirnov et al [1978].

Nous allons donc définir de manière précise les corrélations inter-électroniques dans les processus de double ionisation.

Pour les collisions qui nous concernent, le type de corrélation qui intervient de la manière la plus fondamentale est celle qui existe entre les électrons de l'atome cible; on peut l'appeler corrélation structurelle.

Il s'agit des interactions coulombiennes qui existent entre les électrons de l'atome, exprimées par des potentiels de la forme  $1/r_{ij}$ , qui rendent impossible la détermination exacte de l'équation de Schrödinger pour tout problème à trois corps (atome possédant au moins deux électrons).

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 molécule) calculée avec une fonction d'onde dite «corrélée» et l'énergie calculée avec une fonction de type Hartree-Fock, non corrélée. Ce critère de l'énergie de corrélation ne juge que très partiellement de la qualité globale d'une fonction d'onde. Les études sur les collisions (e,2e) ont montré que deux fonctions d'ondes de même qualité, au regard de ce critère, donnaient des sections efficaces différentielles très différentes.

Comme nous l'avons dit précédemment, les expériences (e,3e) devraient accroître la sensibilité des tests à la qualité de la fonction d'onde utilisée.

Un autre aspect sous lequel interviennent les 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 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 négligeables. Les conséquences des interactions post-collisionnelles sont beaucoup plus importantes : la répulsion coulombienne des électrons émergent de l'atome et l'action de l'ion résiduel sur ces électrons devrait être prise en compte. En effet, lors d'une ionisation produite par un électron incident rapide, on retrouve, après la collision, un électron rapide que l'on peut désigner comme l'électron diffusé et dont les termes d'échanges avec les deux électrons lents sont faibles. Ce n'est donc que dans la double ionisa-

tion 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, pour He, sur ces électrons est aussi plus importante dans les processus de double ionisation que pour les processus de simple ionisation, la charge de l'ion étant doublée. L'effet de la charge, pour He et H<sup>+</sup>, est négligeable tant que  $Z/k_i < 1$  ua.

On emploie souvent le terme de corrélation dans l'état initial (respectivement dans l'état final) pour désigner la corrélation structurelle présentée avant la collision (respectivement après). La description de l'état final tenant compte de cette corrélation s'avère en fait avoir une influence très forte (Résultats de Joulakian et Dal Cappello [1993]).

#### **4 ) La section efficace : amplitude de transition et approximation de Born.**

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 relation 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° et 180° 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 s'exprime en fonction de la probabilité de transition (Goldberger et col [1957] et Joachain [1975]).

L'étude de l'évolution du système au cours du temps permet de définir cette probabilité en fonction de la matrice de transition T ou d'Heisenberg S.

### a ) Notion de section efficace.

Considérons un flux F de particules incidentes, monoénergétiques et homogènes, qui entrent en collision avec une cible gazeuse composée de  $N_t$  particules identiques. On considère que la pression du gaz est suffisamment faible pour avoir un seul choc par particule.

Soit N, le nombre de particules diffusées par unité de temps. On définit la section efficace totale par :

$$\sigma = \frac{N}{F} \frac{1}{N_t}$$

et elle est mesurée en  $m^2$  et reliée à la probabilité de transition  $P_{if}$  par unité de temps par la relation (Goldberger et col [1957] et Joachain [1975]).

$$\sigma_{if} = \frac{P_{if}}{F}$$

### b ) Approximation dans la description de la collision.

Afin de simplifier les expressions représentant la section efficace différentielle, il est nécessaire d'effectuer des approximations. D'un point de vue quantique, on désigne par H le hamiltonien du système formé par la particule incidente et la cible. L'évolution au cours du temps de ce système est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t) = H(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)$$

où  $\Psi$  représente la fonction d'onde du système,  $\vec{r}$  les positions des particules qui le composent.

Nous avons déjà vu que le système présente trois phases :

- un état initial où les deux corps (cible et particule incidente) sont séparés et leur interaction est pratiquement nulle.
- une phase d'interaction.
- un état final comprenant, pour les collisions (e,3e), la particule diffusée, les électrons éjectés et l'atome ionisé.

L'hamiltonien est donné par :

$$H(\vec{r}, t) = H_0(\vec{r}) + V(\vec{r}, t)$$

$H_0$  décrit le mouvement individuel du projectile et de la cible,  $V$  représente leur interaction.

Dans la collision, lorsque le temps  $t$  tend vers  $-\infty$ , les deux corps sont indépendants et le système est dans un état propre  $\Psi(-\infty)$  de  $H_0$  vers lequel tend  $H(\vec{r}, t)$ . Au fur et à mesure que le temps augmente, la distance entre les deux corps diminue, l'interaction devient appréciable et le système est régi par l'équation de Schrödinger.

Après l'interaction, le potentiel redevient négligeable. Les corps se séparent et l'état du système peut être désigné par  $\Psi(+\infty)$ . On résume ceci par :

$$H = \begin{cases} H_0 & -\infty < t < -t_0 \\ H_0 + V & -t_0 < t < t_0 \\ H'_0 & t_0 < t < +\infty \end{cases}$$

On considère donc que le choc se produit entre  $-t_0$  et  $t_0$ .

La résolution de l'équation de Schrödinger nous permet d'obtenir une expression de  $\Psi(\vec{r}, t)$  indépendante de  $t_0$  (Hafid [1994] et Hda [1994]) et fonction de la matrice de transition  $T$  (qui est reliée à la probabilité de transition donc à la section efficace).

**c) La section efficace.**

La probabilité de trouver le système dans l'état  $\Psi_f$  représentant l'état final est :

$$P_{fi}(t) = \left| \langle \Psi_f / S / \Psi_i \rangle \right|^2$$

Cette quantité tend vers la constante  $P_{fi}$  pour  $t$  très grand et en utilisant la relation liant  $S$  à  $T$  (Hda [1994]), on a :

$$P_{fi} = 4\pi^2 \left| \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i)$$

Le flux de la particule incidente est défini comme :

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

$v = \frac{\hbar k_i}{\mu}$  représente la vitesse de la particule incidente et  $\mu$  la masse réduite du système (approximativement la masse de l'électron); la conservation de l'impulsion est automatiquement satisfaite lorsque la masse du noyau est très grande devant celle de l'électron.

$T_{fi} = \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle$  est la matrice de transition avec :

$$T = V_f + V_f G V_i + \dots$$

$G$  : fonction de Green

$V_f$  : potentiel d'interaction dans la phase finale (après le choc)

$V_i$  : potentiel d'interaction avant le choc.

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

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



La section efficace de diffusion est définie pour une transition entre deux états non dégénérés, notamment en orientation de la particule diffusée, donc en tenant compte de la dégénérescence

$$\sigma_{if} = \frac{(2\pi)^4 m}{\hbar^2 k_i} \int d\vec{k}_d \delta(E_f - E_i) |\langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle|^2$$

Dorénavant, nous raisonnerons en unités atomiques (  $e = 1, m_e = 1, a_0 = 1, \hbar = 1$  )

#### d ) La section efficace différentielle.

Elle est associée à la probabilité de trouver des particules d'impulsions  $\vec{k}_d$  diffusées sous un angle solide  $d\Omega_d$  et compte tenu de  $d\vec{k}_d = k_d^2 dk_d d\Omega_d$ , la section efficace différentielle par unité d'angle solide de la particule diffusée est :

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_d} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int k_d^2 dk_d \delta(E_f - E_i) |\langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle|^2$$

soit

$$\frac{d\sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_d} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int k_d^2 dk_d |\langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle|^2 \delta\left(\frac{k_d^2}{2} - \frac{k_i^2}{2} + \varepsilon_d - \varepsilon_o\right)$$

$\varepsilon_d, \varepsilon_o$  représentent respectivement l'énergie totale de la cible dans l'état initial et final,  $\frac{k_i^2}{2}, \frac{k_d^2}{2}$  sont les énergies cinétiques de l'électron incident avant et après le choc, autrement dit de l'électron incident et de l'électron diffusé.

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

$$\sigma_{i \rightarrow f}^2 = (2\pi)^4 \frac{k_d}{k_i} \delta(E_f - E_i) |\langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle|^2$$

On a vu 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 :

$$\sigma_{i \rightarrow f}^2 = (2\pi)^4 \frac{k_d}{k_i} \int \delta(E_f - E_i) d\vec{k}_1 \left| \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle \right|^2$$

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

$$\frac{d^3 \sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_d d\Omega_1 d(\frac{k_d^2}{2})} = (2\pi)^4 \frac{k_d}{k_i} \int k_1^2 dk_1 \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle \right|^2$$

$$\frac{d^4 \sigma_{i \rightarrow f}}{d\Omega_d d(\frac{k_d^2}{2}) d\Omega_1 d(\frac{k_1^2}{2})} = (2\pi)^4 \frac{k_d k_1}{k_i} \delta(E_f - E_i) \left| \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle \right|^2$$

## II - La section efficace différentielle de double ionisation.

### 1) Calcul de la section efficace quintuplement différentielle.

L'énergie des électrons incident et diffusé étant très importante par rapport à celle des électrons éjectés, on considère qu'ils sont décrits par une onde plane (Lahmam-Bennani et col [1991] et Byron et Joachain [1989]). La section efficace quintuplement différentielle (en angles solides et en énergie de l'électron diffusé et des deux électrons éjectés) s'écrit :

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_d d\Omega_1 d\Omega_2 d(\frac{k_1^2}{2}) d(\frac{k_2^2}{2})} = (2\pi)^4 \frac{k_d k_1 k_2}{k_i} \left| \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle \right|^2$$

Dans le cadre de l'approximation de Born 1 :

$$T = V$$

$$\text{et } T_{fi} = \langle \Psi_f / T / \Psi_i \rangle = \left\langle \Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) / V / \Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle$$

$$\text{où } V = \frac{-Z}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}}$$

avec  $Z=2$  pour l'hélium et  $Z=1$  pour l'ion hydrure

$$\text{et } r_{01} = |\vec{r}_0 - \vec{r}_1|, r_{02} = |\vec{r}_0 - \vec{r}_2|$$

$V$  représente le potentiel d'interaction entre l'électron incident désigné par  $\vec{r}_0$  et les deux électrons atomiques  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$ , dans le cas d'une cible constituée par l'hélium ou l'ion hydrure.

Les deux fonctions d'ondes initiale et finale peuvent être écrites :

$$\Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \Phi_i(\text{cible})$$

$$\Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}_d \cdot \vec{r}_0} \Phi_f^\perp(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Où  $\Phi_i$  (cible) et  $\Phi_f^\perp$  (2 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 [1930]:

$$\frac{1}{4\pi} \int \frac{\vec{dr} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} = \frac{1}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_j}$$

$$\text{on a } T_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 k^2} \left\langle \Phi_f^\perp / -Z + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} / \Phi_i \right\rangle$$

Cet élément représente une transition de l'état initial discret à un double continuum d'énergie.

La section efficace quintuplement différentielle est :

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_d d\Omega_1 d\Omega_2 d(\frac{k_1^2}{2}) d(\frac{k_2^2}{2})} = \frac{4k_d k_1 k_2}{k_i k^4} \left| \left\langle \Phi_f^\perp / -Z + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} / \Phi_i \right\rangle \right|^2$$

Il reste maintenant à choisir un modèle pour la description des 2 électrons de la cible :  $\Phi_i$  et des 2 électrons du continuum  $\Phi_f^\perp$ .

Une approche intéressante sur la corrélation interélectronique a été introduite par Pluvillage [1951].

Dans son travail, la fonction  $\Phi_i$  pour deux électrons se déplaçant respectivement dans les potentiels  $V_1$  et  $V_2$  et interagissant par l'intermédiaire du potentiel coulombien  $\frac{1}{r_{12}}$  peut être représentée avec une bonne précision par un produit de fonctions  $\Phi_i = \phi_i \Omega_i$ .

La fonction  $\phi_i$  représente le mouvement orbital des deux électrons libres, chacun ignorant l'autre et  $\Omega_i$  est une fonction d'onde coulombienne décrivant l'interaction électronique comme une diffusion mutuelle due au terme  $1/r_{12}$ .

En suivant cette approche, il a été montré qu'une fonction  $\Phi$  peut être obtenue pour des états liés et excités de certains atomes ou molécules, Pluvinaige [1951], Aubert-Frecon et col [1981], Le Sech [1992]. Cette idée a été reprise par Vainhstein et coll [1964] et Crothers et col [1965] pour décrire l'interaction coulombienne de l'électron incident avec les électrons de la cible, dans le cadre des collisions électrons-atomes.

Plus récemment, Briggs et col [1989] ont construit une fonction d'onde pour deux électrons du continuum en prenant pour  $\Phi_f$  un produit de trois fonctions d'onde coulombienne, modèle suggéré par Garibotti et Miraglia [1980] et Godunov [1983].

Nous allons utiliser ici la même procédure pour la description de l'état lié et du double continuum (Joulakian et col [1992]) en utilisant des fonctions corrélées et donnant une bonne description de l'état initial et final dans ce cas.

## 2 ) Le modèle B.B.K. ( Brauner-Briggs-Klar ).

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 l'interaction 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 (Dal Cappello et Le Rouzo [1991]). Il améliore ainsi considérablement les modèles utilisant des ondes coulombiennes avec charges variables.

Le modèle B.B.K. est actuellement le plus approprié pour le double continuum d'énergie; malheureusement, il nécessite en général, pour des fonctions d'ondes de l'état initial de type Hylleraas [1929, 1931], des dérivations multiples suivies d'une double intégration numérique.

Cette fonction B.B.K s'exprime par :

$$\varphi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} \chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

avec 
$$\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \prod_{j=1}^2 {}_1F_1 \left[ i\alpha_j, 1; -i(\vec{k}_j \cdot \vec{r}_j + \vec{k}_j \cdot \vec{r}_j) \right] {}_1F_1 \left[ i\alpha_{12}, 1; -i(\vec{k}_{12} \cdot \vec{r}_{12} + \vec{k}_{12} \cdot \vec{r}_{12}) \right]$$

et 
$$C = \exp \left[ -\frac{1}{2} \pi (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_{12}) \right] \Gamma(1 - i\alpha_1) \Gamma(1 - i\alpha_2) \Gamma(1 - i\alpha_{12}) / (2\pi)^3$$

où 
$$\alpha_1 = -Z / |\vec{k}_1|, \quad \alpha_2 = -Z / |\vec{k}_2|, \quad \alpha_{12} = 1 / |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|$$

avec 
$$Z = 2 \text{ pour l'hélium et } Z = 1 \text{ pour } H^-.$$

Dans notre cas, nous prendrons la description des deux électrons éjectés comme la fonction B.B.K. dans sa forme orthogonalisée avec la fonction d'onde de l'état initial  $\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  :

$$\langle \Phi_f^\perp | = \langle \Phi_f | - \langle \Phi_f | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i |$$

avec 
$$\langle \Phi_f | = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \varphi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \varphi_f(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right|$$

Il nous a semblé intéressant de rappeler succinctement les principaux résultats obtenus par Joulakian et col [1992, 1993] 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 [1929, 1931]:

$$\Phi_i(r_1, r_2) = Nv(a, b)(1 + Ar_{12}^{n_1}e^{-\lambda r_{12}}) + v(c, d)(B + Cr_{12}^{n_2}e^{-\mu r_{12}}) + Dv(e, f)$$

$$v(a, b) = (e^{-ar_1}e^{-br_2} + e^{-br_1}e^{-ar_2})$$

où N est le facteur de normalisation ; la valeur numérique des différents paramètres est donnée par Bonham et Kohl [1966] (voir tableau 1). La fonction d'onde finale est orthogonalisée à la fonction d'onde initiale par la procédure habituelle de Schmidt :

$$\langle \Psi_f^\perp | = \frac{e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_0}}{(2\pi)^{3/2}} \left( \langle \Phi_f | - \langle \Phi_f | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | \right)$$

$$\Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \varphi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \varphi_f(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \right)$$

**Tableau 1**

Fonction d'onde de type Hylleraas décrivant l'atome de l'hélium donnée par Bonham et Kohl [1966];  $I^{2+}$  représente l'énergie (en u.a.) nécessaire à la double ionisation calculée à partir de chaque fonction d'onde proposée.

	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
$\lambda$			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			
$\mu$						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

Un des buts du travail de Joulakian et col [1992, 1993]. 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.

Les figures 4,5 et 6 représentent les sections efficaces quintuplement différentielle en coordonnées polaires. L'angle de diffusion est  $0.5^\circ$ , les énergies des deux électrons éjectés sont fixées à  $E_1 = 5\text{eV}$  et  $E_2 = 25\text{eV}$ . L'angle de l'un des deux électrons éjectés est fixé respectivement (par rapport à la direction de l'électron incident) à  $0^\circ$  (fig.1)  $90^\circ$  (fig.2) et  $38.12^\circ$  (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  $\cdot, +, \diamond, \Delta, \chi$  correspondent respectivement à l'utilisation des fonctions d'ondes 1,2,6,7 et 8 (Voir tableau 1).



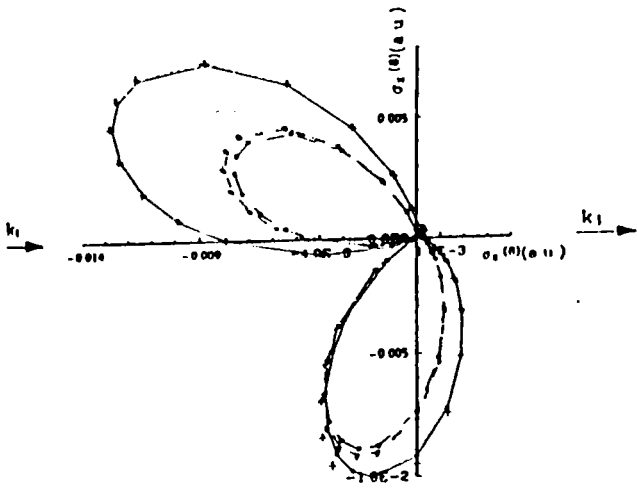


Fig 4  $\theta_1 = 0^\circ$

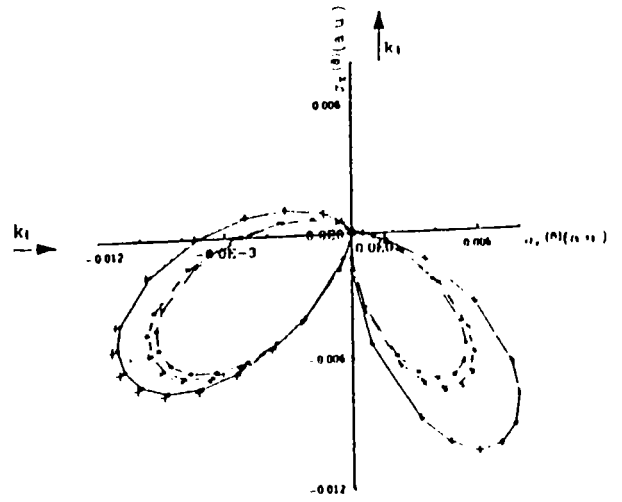


Fig 5  $\theta_1 = 90^\circ$

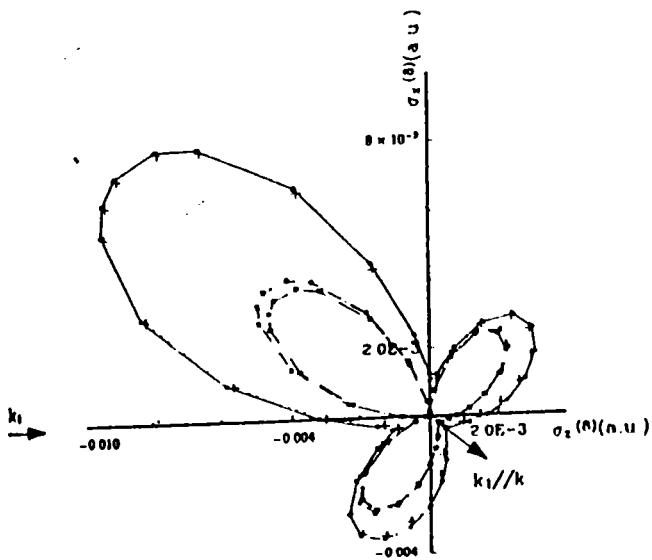


Fig 6  $\theta_1 = \theta_k = -38.2^\circ$

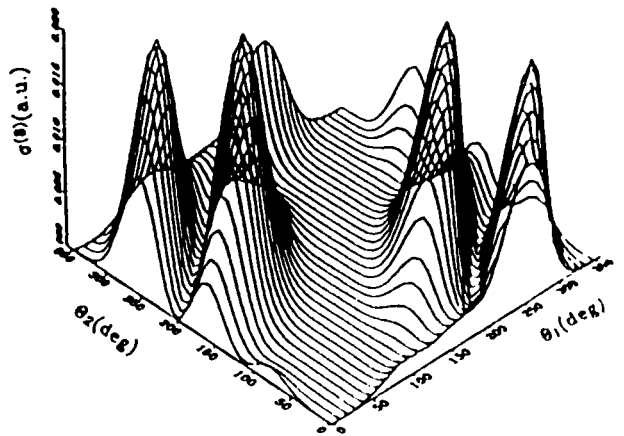


Fig. 7 section efficace quintuplement différentielle en fonction de  $\theta_1$  et  $\theta_2$ ,  $E_1 = 10\text{ev}$   $E_2 = 20\text{ev}$ ,  $\theta_s = 0.25^\circ$

Résultat de Joulakian et Dal Cappello

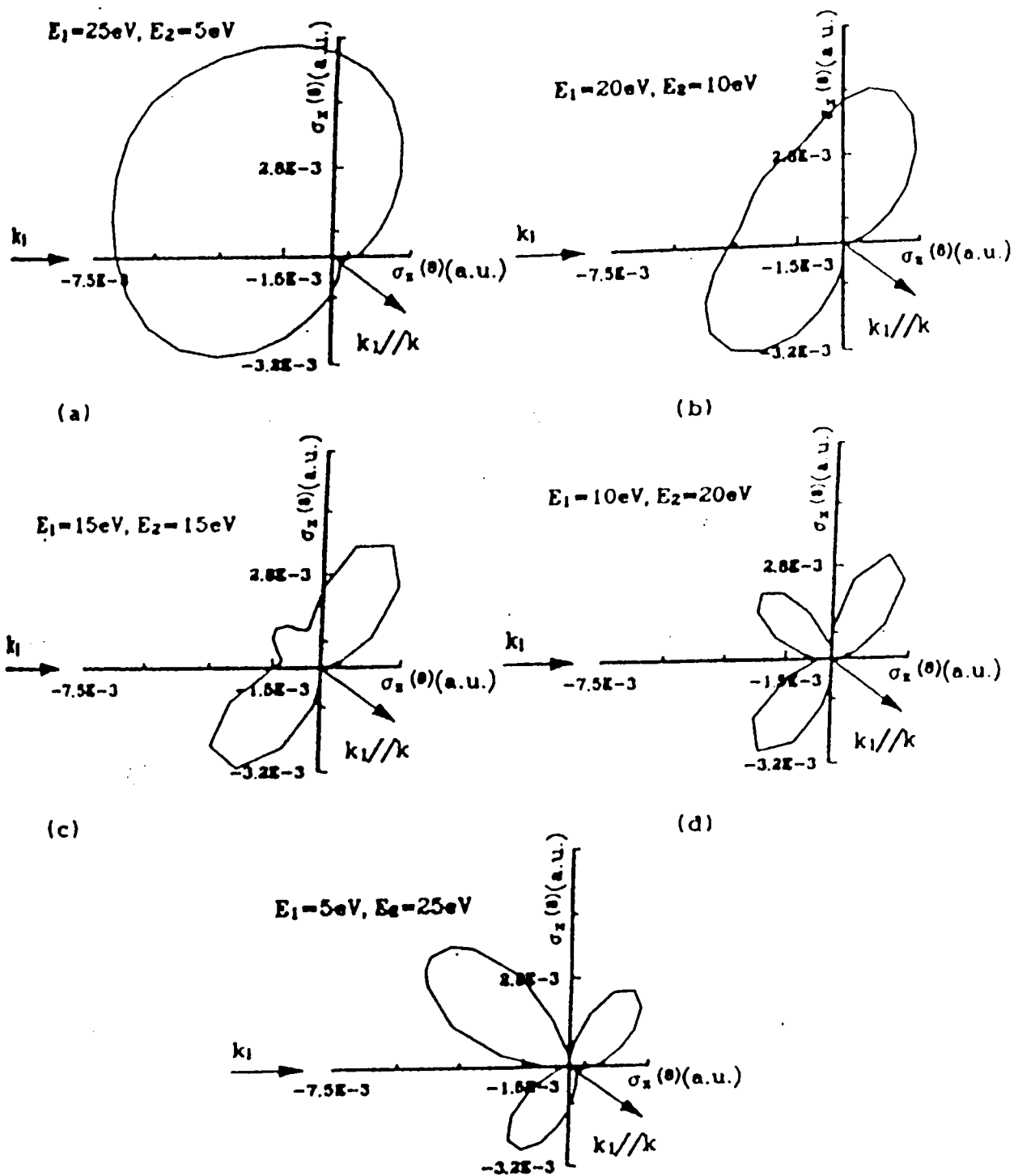


Fig. 8 section efficace quintuplement différentielle en fonction des différentes valeurs des énergies d'éjections ( $E_1 + E_2 = 30\text{eV}$ )

Résultat de Joulakian et Dal Cappello

Les figures 4,5, et 6 montrent la sensibilité des calculs aux fonctions d'ondes décrivant l'état 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.[1993] était d'étudier la section efficace différentielle en fonction des deux angles d'éjection  $\theta_1$  et  $\theta_2$ , les énergies des électrons éjectés étant fixées respectivement à  $E_1 = 10\text{eV}$  et  $E_2 = 20\text{eV}$ . La figure 7 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 1995 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.[1993] 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) (Fig. 8). 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 ou moins isotrope ( $E_1 = 25\text{eV}$  et  $E_2 = 5\text{eV}$ ); dans le cas contraire ( $E_1 = 5\text{eV}$  et  $E_2 = 25\text{eV}$ ) 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  $\vec{k}$ .

### 3 ) Le modèle pour l'état initial.

L'état initial  $\Phi_i$  dans le cas de l'atome d'hélium ou de type héliumoïde est en fait l'état représentant les 2 électrons liés au noyau.

L'équation de Schrödinger pour les deux électrons liés est :

$$(H - E)\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0.$$

$$H = \frac{-1}{2m}(\nabla_{r_1}^2 + \nabla_{r_2}^2) - \frac{1}{M} \nabla_{r_1} \nabla_{r_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

M : masse du noyau

m : masse de l'électron

La résolution de cette équation de Schrödinger est l'un des problèmes fondamentaux de la mécanique quantique. Les premiers développements pour l'analyse et la recherche d'une solution approchée ont été faits par Hylleraas [1928,1929], Pluvinage [1951] et Kato [1957]. Plus tard, les travaux de Pekeris [1958,1959,1962] et Freund et col [1984] sont notoires; ces auteurs ont obtenu une estimation de l'énergie E avec une très bonne précision, ce qui constitue un résultat important de la mécanique quantique (Bransden et Joachain [1983]).

Dans le cas d'état lié comme l'hélium, on fait l'approximation suivante :

les termes  $(\frac{m}{M})$  sont négligés (termes de polarisation de masse).

L'équation de Schrödinger peut être réécrite :

$$(H - \varepsilon)\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$$

avec

$$H = \frac{-1}{2}(\nabla_{r_1}^2 + \nabla_{r_2}^2) - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

L'approche mathématique pour la détermination de fonctions d'onde corrélées, c'est à dire ayant une dépendance explicite avec la distance interélectronique  $r_{12}$  entre les deux électrons (suivant Pluvinage) est le concept de semi-séparation de l'équation de Schrödinger.

Pour des potentiels  $V_1, V_2, V_{12}$ ; l'équation de Schrödinger est dite semi-séparable si on peut résoudre exactement les 2 équations :

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_1 + V_1 + V_2\right) \varphi_n = \varepsilon_n \varphi_n$$

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_1 + V_{12}\right) \Omega(r_{12}) = k^2 \Omega(r_{12})$$

Dans ce cas, la fonction d'onde  $\Phi_i$  ayant les conditions aux limites appropriées, peut-être déduite, avec une bonne précision comme un produit de  $\varphi_n$  et  $\Omega$ .

On écrit ainsi la fonction  $\Phi_i$  comme solution approchée de l'équation de Schrödinger en introduisant une fonction d'écran  $\xi(r)$  (Roothan et Weiss [1960]).

$$\Phi_i(r_1, r_2, r_{12}) = [\varphi(r_1) \varphi(r_2) \xi(r_2) + \varphi(r_2) \varphi(r_1) \xi(r_1)] \Omega(r_{12})$$

On introduit ce type de fonction parce qu'il existe deux types de corrélation.

La corrélation de type angulaire est relative à l'angle  $\theta_{12}$ , avec :

$$\text{Cos } \theta_{12} = \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2}$$

La corrélation de type angulaire prend en compte la distribution angulaire des électrons mais ne donne pas de renseignements sur la distribution radiale.

La corrélation de type radiale est relative à la tendance d'un électron à être emprisonné du noyau ( alors que l'autre reste libre).

La fonction d'écran  $\xi(r)$  doit prendre en compte l'effet d'écran radial sans affecter les conditions de liaison à courte portée.

Considérons le premier électron asymptotiquement loin du noyau alors que le deuxième électron est lié; on fait donc l'approximation :

$$\frac{1}{r_{12}} \underset{r_1 \rightarrow \infty}{\approx} \frac{1}{r_1}$$

Ainsi, la solution de l'équation de Schrödinger  $(H - \epsilon) \Phi = 0$  est :

$$\Phi(r_1, r_2) \underset{r_1 \rightarrow \infty}{\approx} \exp(-Zr_2 - (Z-1)r_1)$$

La fonction de corrélation  $\Omega(r_{12})$  ne doit pas prendre en compte la corrélation mais la fonction d'écran  $\xi(r)$  doit l'inclure.

Si les fonctions orbitales  $\varphi(r_1)$  et  $\varphi(r_2)$  satisfont les conditions de cusp (Kato [1957])

$$\left( \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial r_1} \right) \Big|_{r_1=0} = -Z$$

$$\left( \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial r_2} \right) \Big|_{r_2=0} = -Z$$

$$\left( \frac{1}{\Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial r_{12}} \right) \Big|_{r_{12}=0} = \frac{1}{2}$$

alors la fonction d'écran  $\xi(r)$  doit avoir le comportement :

$$\left( \frac{1}{\xi} \frac{\partial \xi}{\partial r} \right) \Big|_{r=0} = 0$$

Une forme qui est en bon accord avec ce critère est (Dulieu et Le Sech [1987], Moumeni et col [1990]).

$$\xi(r) = \frac{\text{sh } r}{r} = j_0(ir)$$

où  $j_0(r)$  est la fonction sphérique de Bessel de première espèce (Abramovitz and Steigun [1972]).

Nous prendrons ici une fonction d'écran ayant un paramètre variationnel  $\lambda$ :

$$\xi_\lambda(r) = j_0(i\lambda r) = \frac{\text{sh}\lambda r}{\lambda r}$$

La fonction de corrélation est :

$$\Omega(r_{12}) = 1 + B e^{-\beta r_{12}}$$

Elle est due à Hirschfelder [1963]. Cette fonction de corrélation obéit à la troisième condition de « cusp » et n'a pas la nature oscillatoire de l'onde coulombienne. Il faut remarquer que cette fonction de corrélation n'est pas une fonction d'onde exactement solution de l'équation de Schrödinger.

Suivant ces idées, on écrit la fonction d'onde pour l'hélium comme :

$$\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N \left( 1 + B e^{-\beta r_{12}} \right) \left[ \frac{\text{sh}\lambda r_1}{\lambda r_1} \frac{\text{sh}\lambda' r_2}{\lambda' r_2} + \frac{\text{sh}\lambda r_2}{\lambda r_2} \frac{\text{sh}\lambda' r_1}{\lambda' r_1} \right] e^{-Zr_1} e^{-Zr_2}$$

Les détails de la détermination de la fonction  $\Phi_i$  sont donnés par Moumeni et col [1990] et Siebbeles et col [1993].

$\lambda'$ ,  $\lambda$ , et  $\beta$  sont des paramètres variationnels déterminés en minimisant :

$$E[\lambda, \lambda', \beta] = \frac{\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_{\lambda\lambda'\beta}^*(r_1, r_2, r_{12})(H\Phi_{\lambda\lambda'\beta}(r_1, r_2, r_{12}))}{\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi_{\lambda\lambda'\beta}^*(r_1, r_2, r_{12})\Phi_{\lambda, \lambda', \beta}(r_1, r_2, r_{12})}$$

Cette fonction  $\Phi_i$  satisfait bien les conditions de Kato [1957] et donne pour l'état lié de l'hélium  $E = -2,899$  ua, comparée à  $E_{\text{exp}} = -2,903$  ua.

Si l'énergie de l'état lié obtenue avec une fonction Hartree Fock,  $E = -2,862$  ua, est prise comme origine de la corrélation de l'état initial, la fonction ci-dessus prend en compte 90% de l'énergie de corrélation.

#### 4) Expression de l'amplitude de transition $T_{fi}$ .

Il nous faut exprimer  $T_{fi}$  pour avoir l'expression de la section efficace différentielle.

On a donc, avec les expressions de  $\Phi_f^\perp$  et  $\Phi_i$  :

$$T_{fi} = \frac{1}{2\pi^2 k^2} \left[ \left\langle \Phi_f / e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} / \Phi_i \right\rangle - Z(\vec{k}) \langle \Phi_f / \Phi_i \rangle \right]$$

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

et  $Z(\vec{k}) = \left\langle \Phi_i(r_1, r_2) / e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} / \Phi_i(r_1, r_2) \right\rangle$

On a donc :



$$T_{\vec{r}_1} = A \left\{ \begin{aligned} & -Z(\vec{k}) \left[ G(\vec{k}_1, \vec{k}_2) + G(\vec{k}_2, \vec{k}_1) \right] + \left[ G(\vec{k} - \vec{k}_1, \vec{k}_2) + G(\vec{k} - \vec{k}_2, \vec{k}_1) \right] \\ & + \left[ G(\vec{k}_1, \vec{k} - \vec{k}_2) + G(\vec{k}_2, \vec{k} - \vec{k}_1) \right] \end{aligned} \right\}$$

avec 
$$A = \frac{N}{\sqrt{2}} C \frac{1}{2\pi^2 k^2} \frac{1}{4\lambda\lambda'}$$

$G(\vec{k}_1, \vec{k}_2)$  s'exprime en fonction de l'intégrale :

$$I(a, b, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta) = \int \frac{e^{-a\vec{r}_1}}{r_1} \frac{e^{-b\vec{r}_2}}{r_2} e^{-\beta r_{12}} e^{-i\vec{k}_1 \vec{r}_1} e^{-i\vec{k}_2 \vec{r}_2} \chi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$G(\vec{k}_1, \vec{k}_2) = B \left[ \begin{aligned} & I(C_1, C_2, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta) + \frac{I(C_1, C_3, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta) + I(C_3, C_2, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta)}{I(C_3, C_4, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta)} \\ & + I(C_2, C_1, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta) + \frac{I(C_3, C_1, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta) + I(C_2, C_3, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta)}{I(C_4, C_3, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta)} \end{aligned} \right]$$

$$+ \left[ \begin{aligned} & I(C_1, C_2, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta) + \frac{I(C_1, C_3, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta) + I(C_3, C_2, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta)}{I(C_3, C_4, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta)} \\ & + I(C_2, C_1, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta) + \frac{I(C_3, C_1, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta) + I(C_2, C_3, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta)}{I(C_4, C_3, \vec{k}_2, \vec{k}_1, \beta)} \end{aligned} \right]$$

avec  $C_1 = Z - \lambda, \quad C_2 = Z - \lambda', \quad C_3 = Z + \lambda, \quad C_4 = Z + \lambda'.$

Suivant Brauner et col [1989], nous écrivons l'intégrale I sous la forme :

$$I(a, b, \vec{k}_1, \vec{k}_2, \beta) = N(t_3 = 0) + \frac{\sinh(\pi\alpha_{12})}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{e^y}{1+e^y} e^{i\alpha_{12}y} [N(t_3) - N(t_3 = 0)]$$

avec  $t_3 = \frac{1}{1+e^y}$

Dans notre cas :

$$N(t_3) = \int \frac{e^{-ar_1}}{r_1} \frac{e^{-br_2}}{r_2} e^{-\beta'r_{12}} e^{-i\vec{k}'_1 \cdot \vec{r}_1} e^{-i\vec{k}'_2 \cdot \vec{r}_2} \prod_{j=1}^2 {}_1F_1 \left[ i\alpha_j, 1, -i(\vec{k}_j \cdot \vec{r}_j + \vec{k}'_j \cdot \vec{r}_j) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

avec  $\vec{k}'_1 = \vec{k}_1 + \vec{k}_{12} t_3$   
 $\vec{k}'_2 = \vec{k}_2 - \vec{k}_{12} t_3$  et  $\vec{k}_{12} = 0.5(\vec{k}_1 - \vec{k}_2)$   
 $\beta' = \beta - i \vec{k}_{12} t_3$

Le calcul de  $N(t_3)$  a été fait en suivant Brauner et col [1989] ( pour plus de détails, voir an-  
 nexes ).

Finalement, l'usage de ce type de fonctions d'ondes qui dépendent explicitement de  $\frac{1}{r_1}, \frac{1}{r_2}$   
 permet d'éviter deux dérivations supplémentaires par rapport aux fonctions usuelles de type  
 Hylleraas [1929,1931].

### III - Résultats et Discussion.

#### A ) Ionisation double de He et $H^-$ : section efficace quintuplement différentielle.

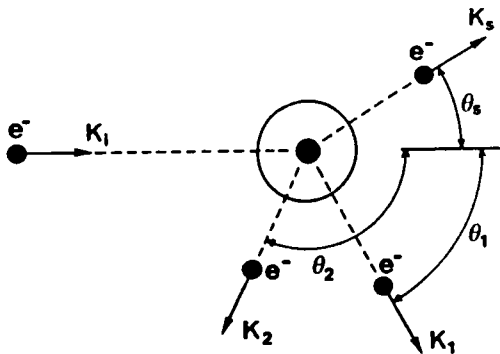
L'expression de la section efficace :

$$\sigma^{(5)} = \frac{d^5\sigma}{d\Omega_d d\Omega_1 d\Omega_2 d\left(\frac{k_1^2}{2}\right) d\left(\frac{k_2^2}{2}\right)}$$

s'exprime en fonction de l'élément de matrice  $T_{fi}$ .

On remarque que dans cette expression, interviennent les angles solides  $\Omega_d, \Omega_1$  et  $\Omega_2$  des électrons diffusé et des deux éjectés mais aussi l'énergie des deux électrons éjectés.

En général, l'énergie de l'électron incident est fixée, sa direction est prise comme axe d'origine. On se place ici dans le cas d'une collision coplanaire pour laquelle les trois électrons dans la voie de sortie appartiennent à un même plan; l'angle entre la direction incidente et les électrons éjectés ainsi que l'électron diffusé sont nuls ( $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_s = 0$ ). La définition des différents paramètres angulaires, dans le cas d'une collision coplanaire est donnée ci-après (figure 9).



**Fig. 9** Description coplanaire des différents vecteurs  $\vec{k}_i, \vec{k}_1, \vec{k}_2$  et  $\vec{k}_s$  représentant les électrons incident, les deux éjectés et le diffusé.  $\theta_s, \theta_1$  et  $\theta_2$  sont les angles du diffusé et des deux électrons éjectés défini par rapport à la direction de l'électron incident.

On peut ainsi imaginer plusieurs configurations :

- l'angle d'éjection du diffusé  $\theta_s$  est fixé, les deux énergies des éjectés sont ainsi fixées et on fait varier  $\theta_2$  entre  $0^\circ$  et  $360^\circ$  pour différentes valeurs de  $\theta_1$ .
- l'angle  $\theta_s$  est toujours fixé mais cette fois-ci,  $\theta_1$  et  $\theta_2$  sont fixés et on exprime  $\sigma^{(s)}$  pour différentes valeurs de  $E_1$  et  $E_2$ .
- comme le cas 1, mais en traçant une courbe en 3 dimensions :  $\sigma^{(s)}$  fonction de  $\theta_1$  et  $\theta_2$ .

Du fait du nombre important de paramètres, on remarque ici toute la difficulté du problème. De nombreuses courbes seront présentées dans ce travail, le plus souvent selon les schémas énoncés ci-dessus.

La majorité des courbes sera faite en considérant l'énergie de l'électron incident égale ou voisine de 5 keV, ceci afin de pouvoir le modéliser par une onde plane et qui correspond à la valeur utilisée actuellement dans les expériences menées à Orsay. Cette valeur rend légitime la description des électrons incident et diffusé par des ondes planes pour des cibles neutres. Dans le cas de cibles chargées, cette approximation est légitime pour un rapport  $Z/k_i < 1$  u.a.. Il faut aussi noter que les calculs faits ici utilisent le même type de démarche pour l'obtention des fonctions d'ondes représentant l'état initial et final du système (de type Pluinage).

## 1 ) Comparaison avec les résultats de B. Joulakian.

Dans un premier temps, nous allons comparer les résultats avec ceux obtenus par Joulakian et col [1992] qui utilisent des fonctions d'onde de type Hylleraas.

Pour cela, on fixe l'énergie incidente à 5 keV, celle du premier éjecté à  $E_1 = 5\text{eV}$ ,  $\theta_1 = 0^\circ$  le deuxième éjecté a une énergie de  $E_2 = 25\text{eV}$  et l'angle du diffusé est  $\theta_s = 0,5^\circ$  (Fig. 10 a). On examinera aussi les cas où  $\theta_1 = 90^\circ$  (Fig.10 b) et  $\theta_1 = \theta_k =$  angle du transfert d'impulsion  $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_d$  (Fig 11). On trace ainsi la section efficace en fonction de l'angle  $\theta_2$  du deuxième éjecté, (ceci en coordonnées polaires).

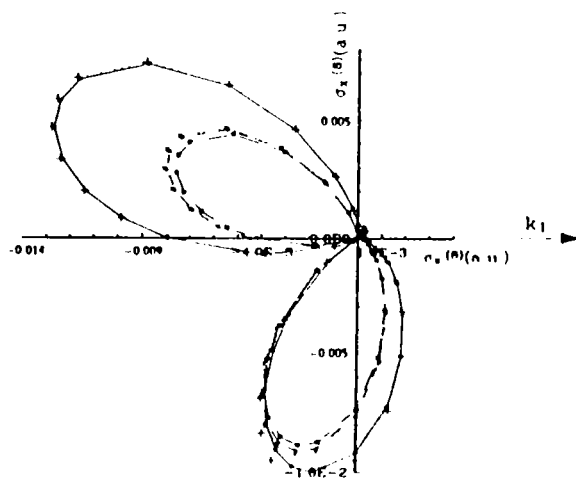
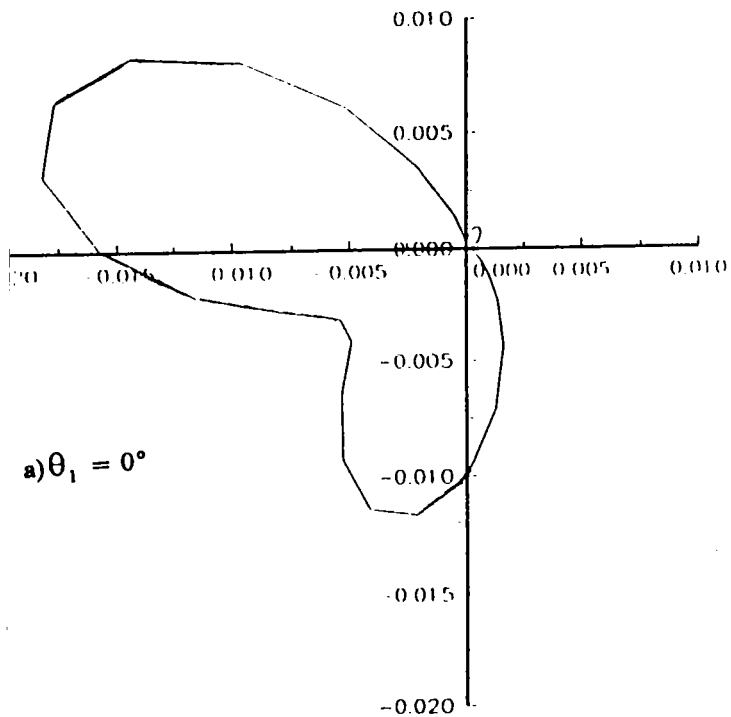


Fig 4  $\theta_1 = 0^\circ$

10 Représentation en coordonnées polaires de la section ace différentielle de la double ionisation de He, avec  $E_i = 10$  eV,  $E_1 = 5$  eV,  $E_2 = 25$  eV,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK - l'état final)

Résultat de Joulakian et Dal Cappello

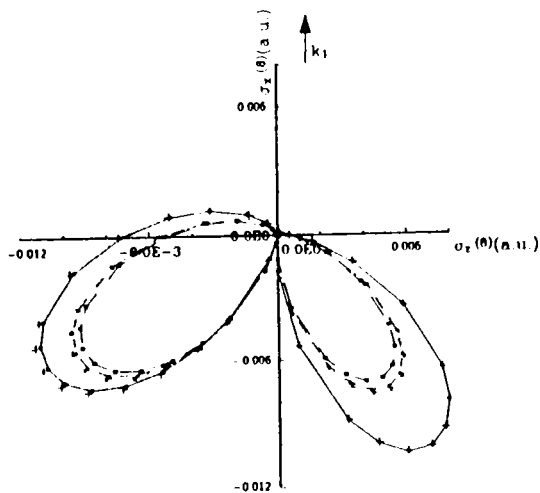
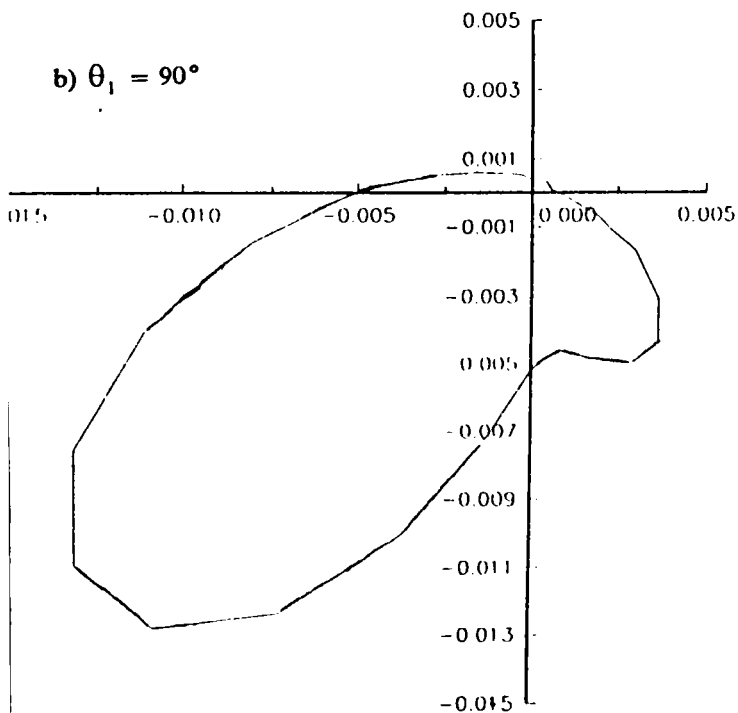
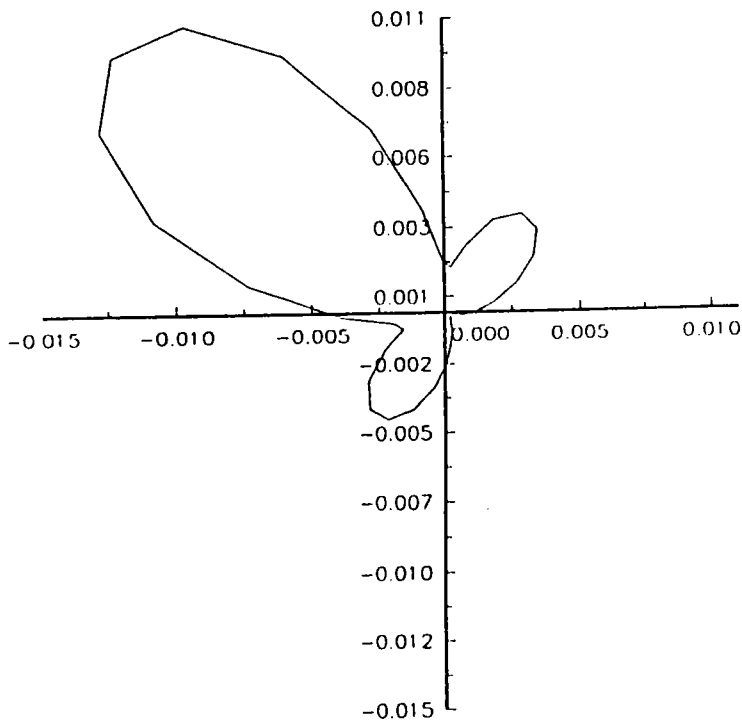
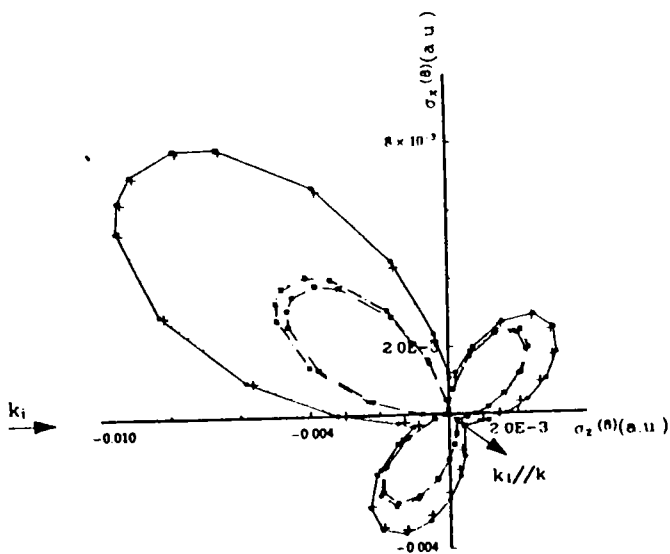


Fig 5  $\theta_1 = 90^\circ$



**Fig. 11** Représentation en coordonnées polaires de la section efficace différentielle de la double ionisation de He, avec  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 5$  eV,  $E_2 = 25$  eV,  $\theta_s = 0.5^\circ$ ,  $\theta_1 = \theta_k$  (modèle BBK pour l'état final)



**Fig 6**  $\theta_1 = \theta_k = -38.2^\circ$

**Résultat de Joulakian et Dal Cappello**

On constate ainsi que les distributions angulaires pour la section efficace différentielle sont identiques aux résultats de Joulakian et col [1992] et présentent deux lobes. Les amplitudes sont également proches. On peut en conclure que l'utilisation des fonctions développées par Le Sech [1992] est ainsi justifiée.

## 2 ) Représentation pour différentes valeurs de l'énergie.

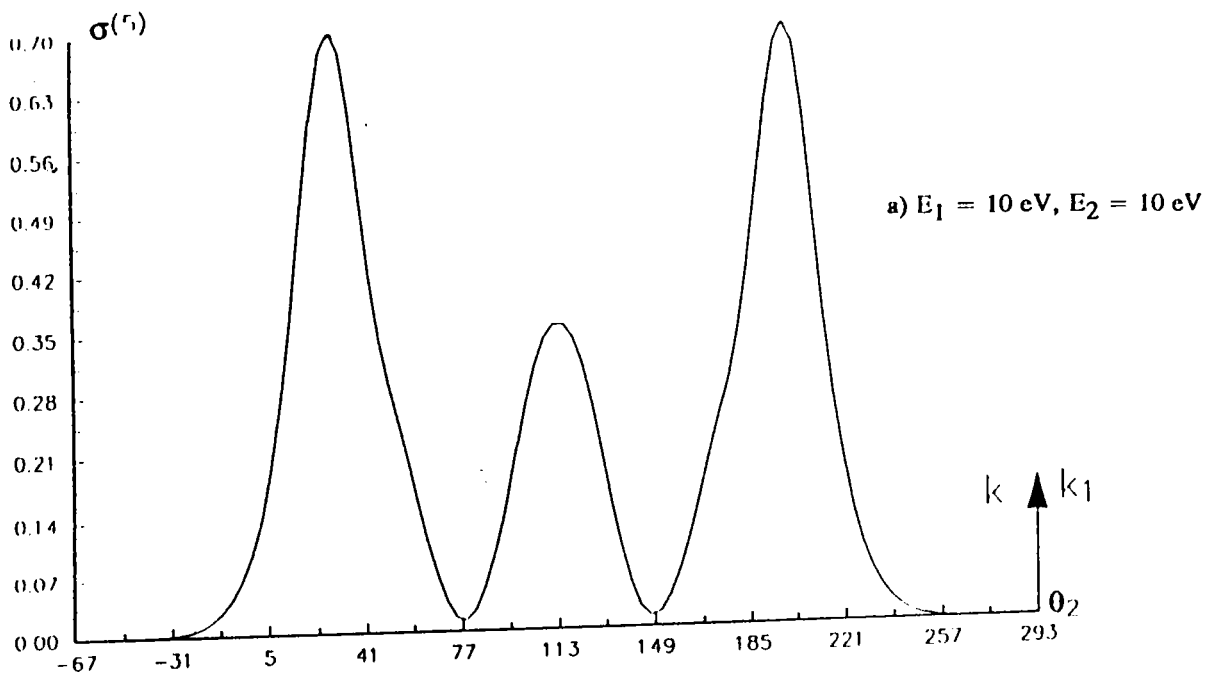
Figure 12 et 13 , on donne la représentation cartésienne de la section efficace quintuplement différentielle pour la double ionisation de  $H^-$ , l'angle d'éjection  $\theta_2$  du deuxième électron étant pris comme variable. Le premier électron éjecté sort avec une direction parallèle au transfert d'impulsion  $\vec{k}$  (Fig 12,  $\theta_1 = \theta_k$ ) ou dans une direction opposée (Fig 13,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ).

Le domaine pour la détection en énergie des 2 électrons éjectés est relativement large (1-100 eV) mais il a été observé que, pour des énergies d'éjection de l'ordre de 25 eV, la section efficace est  $10^3$  fois plus importante que pour des énergies d'éjections de l'ordre de 2 eV. C'est pourquoi nous considérons ici des situations typiques ( $E_1 = E_2 = 15\text{eV}$  ou  $10\text{eV}$ ) dans le cas symétrique et ( $E_1 = 5\text{eV}$ ;  $E_2 = 25\text{eV}$  ou  $15\text{eV}$ ) dans le cas non symétrique en énergie.

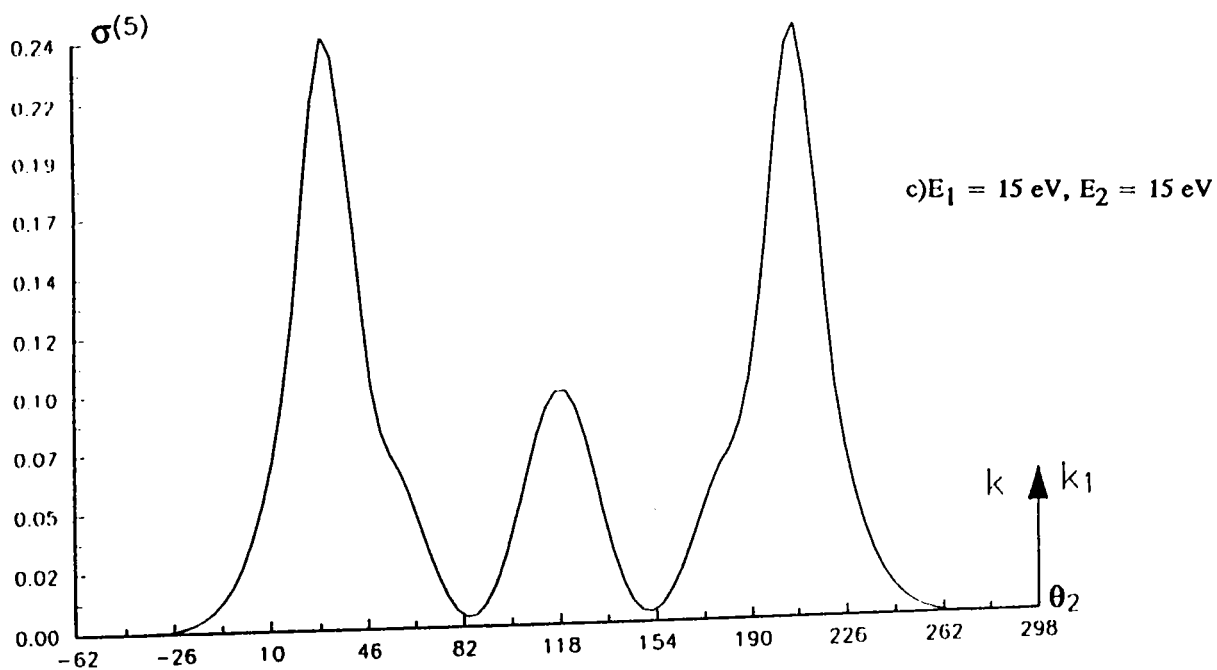
On constate ainsi sur la figure 12 que la section efficace est plus grande si :

- les énergies des deux électrons sont petites.
- les énergies des électrons éjectés sont différentes.

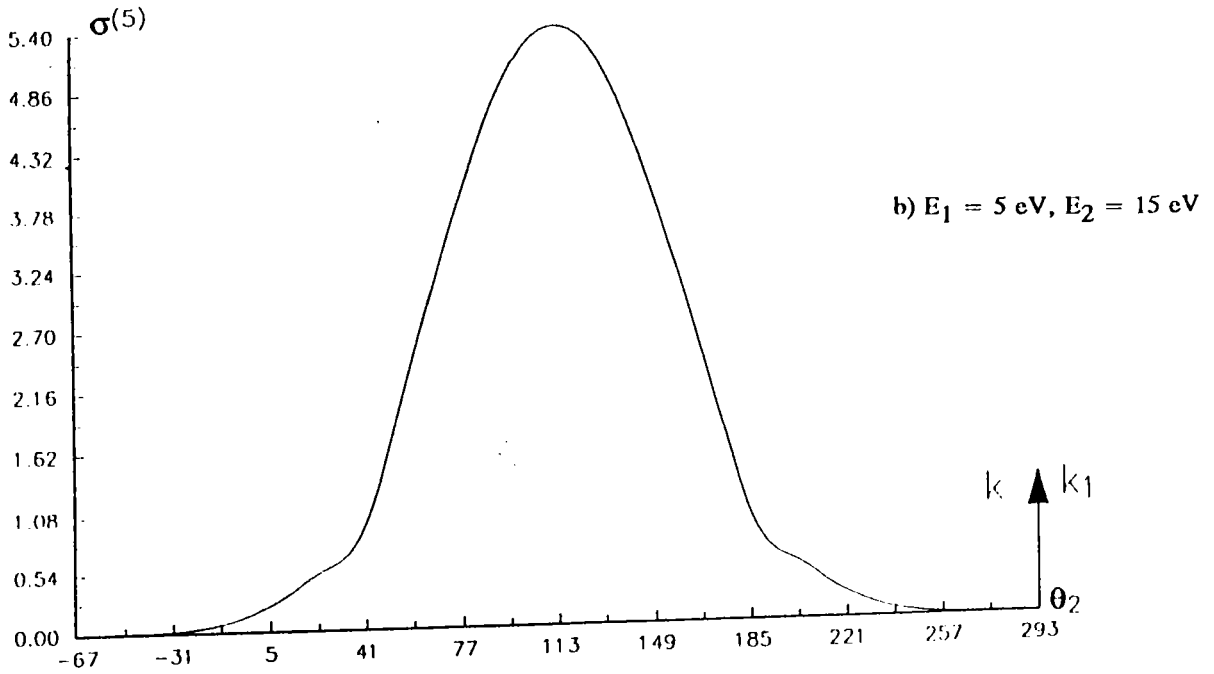
On remarque aussi que la probabilité d'éjection des deux électrons est maximale dans une direction perpendiculaire au transfert d'impulsion  $\vec{k}$  (si  $\theta_1 = \theta_k$ ) pour les énergies d'éjection égales mais maximale dans une direction opposée au transfert d'impulsion pour des énergies différentes.



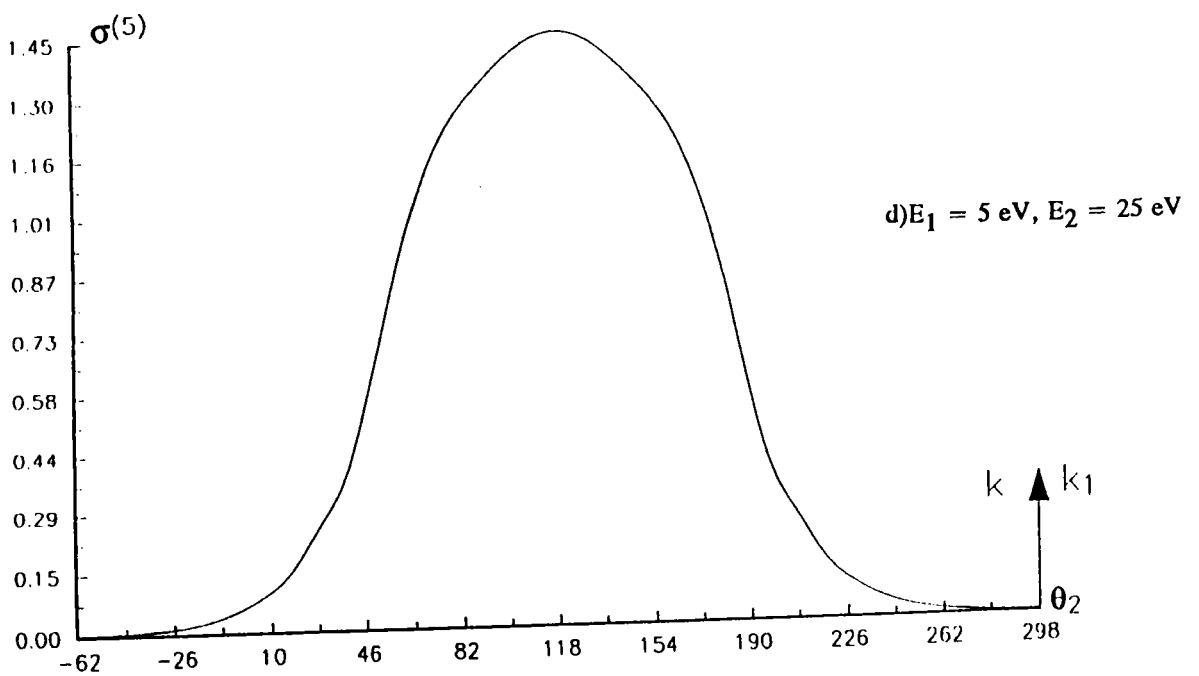
**Fig. 12** Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de  $\text{H}^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)







**Fig. 12** Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de  $H^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_1 = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)



a)  $E_1 = 10 \text{ eV}, E_2 = 10 \text{ eV}$

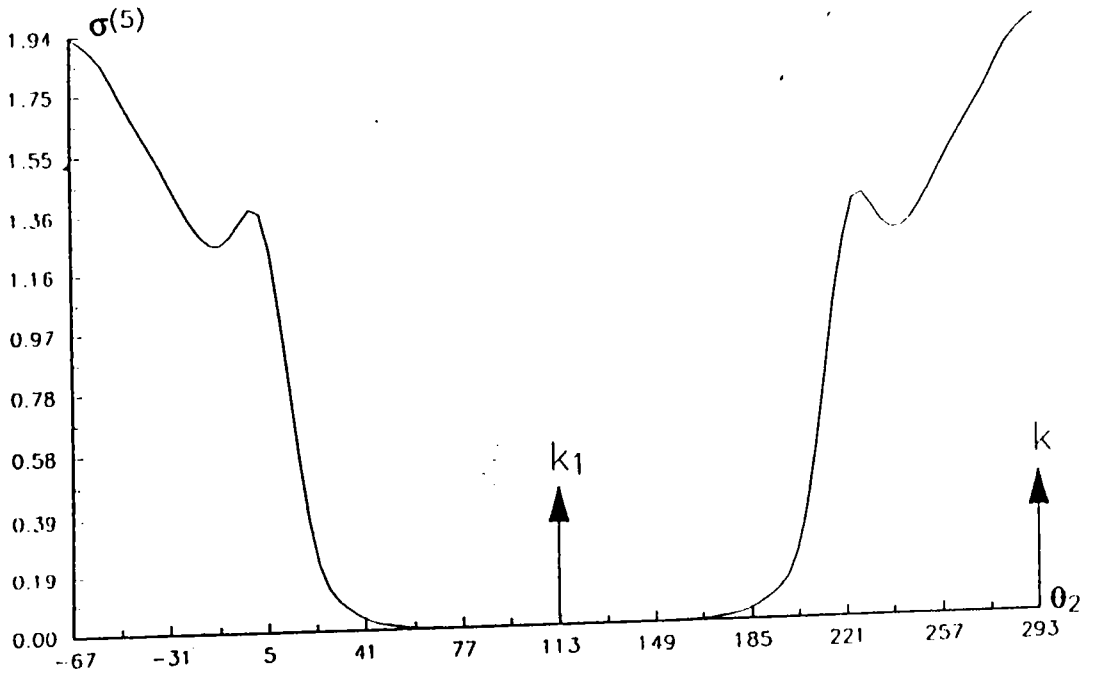
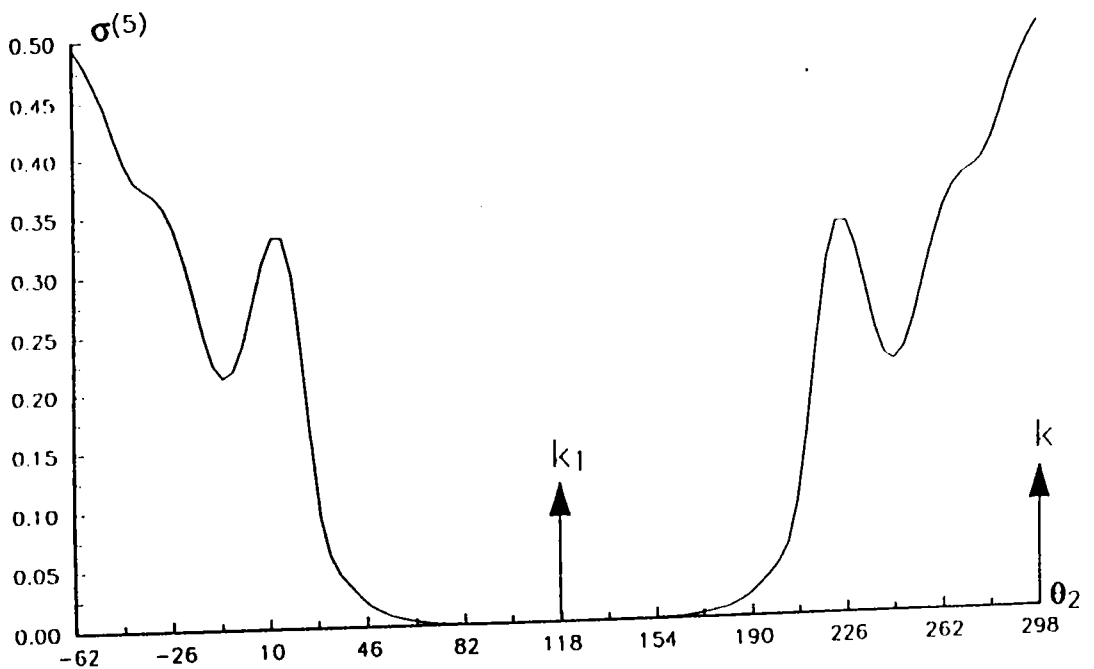


Fig. 13 Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de  $H^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)

c)  $E_1 = 15 \text{ eV}, E_2 = 15 \text{ eV}$



b)  $E_1 = 5 \text{ eV}, E_2 = 15 \text{ eV}$

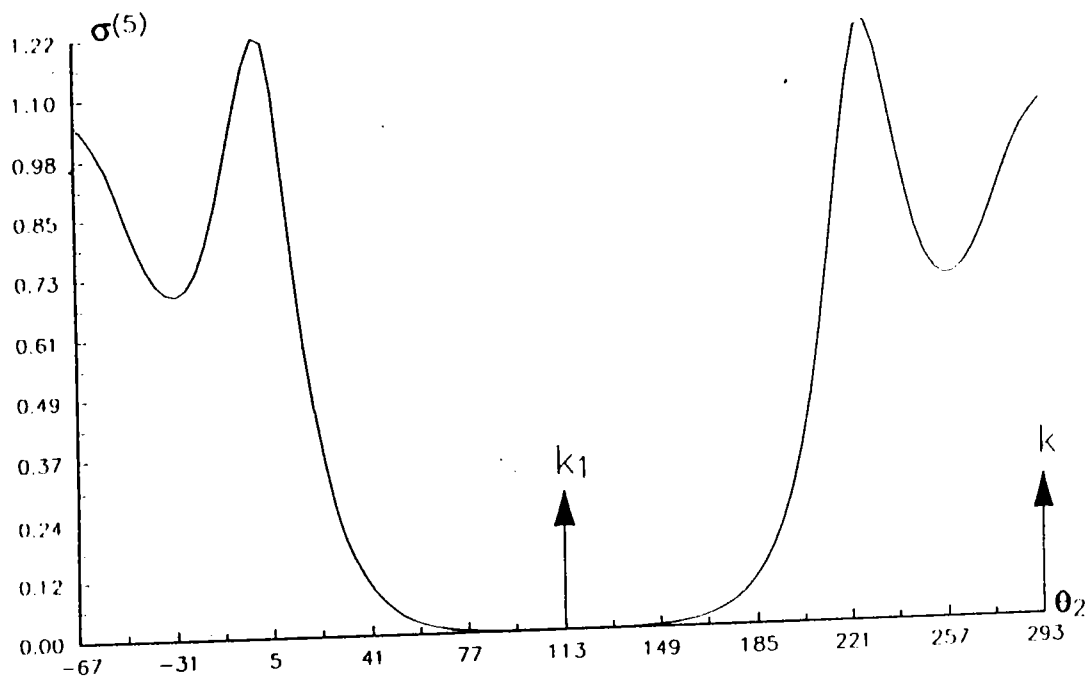
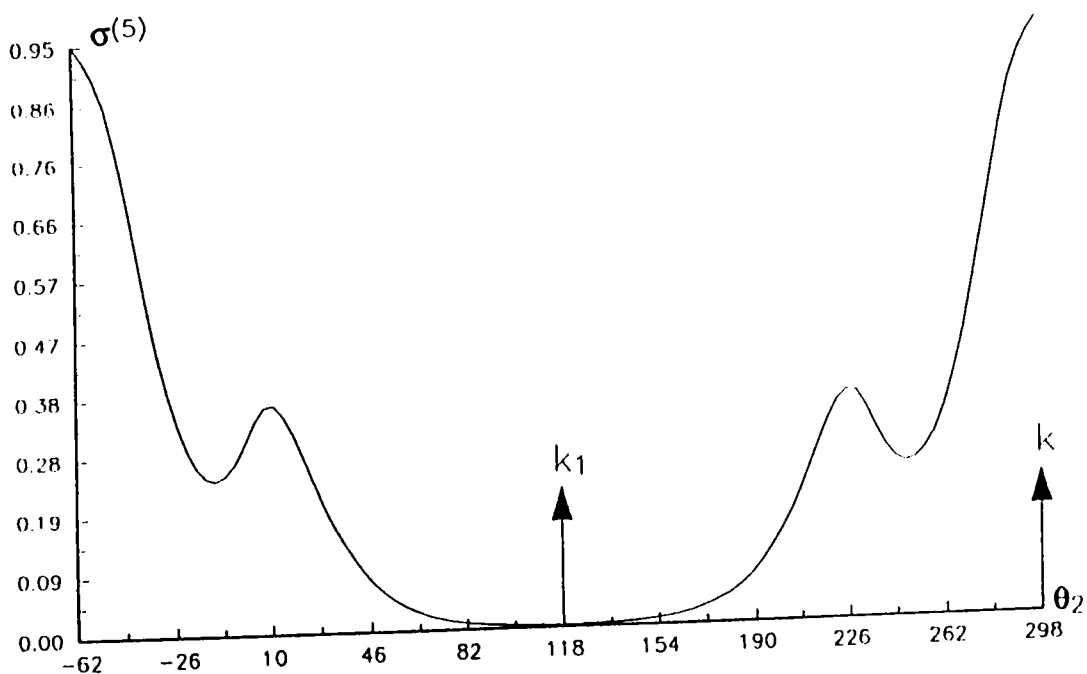


Fig. 13 Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de  $H^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)

d)  $E_1 = 5 \text{ eV}, E_2 = 25 \text{ eV}$



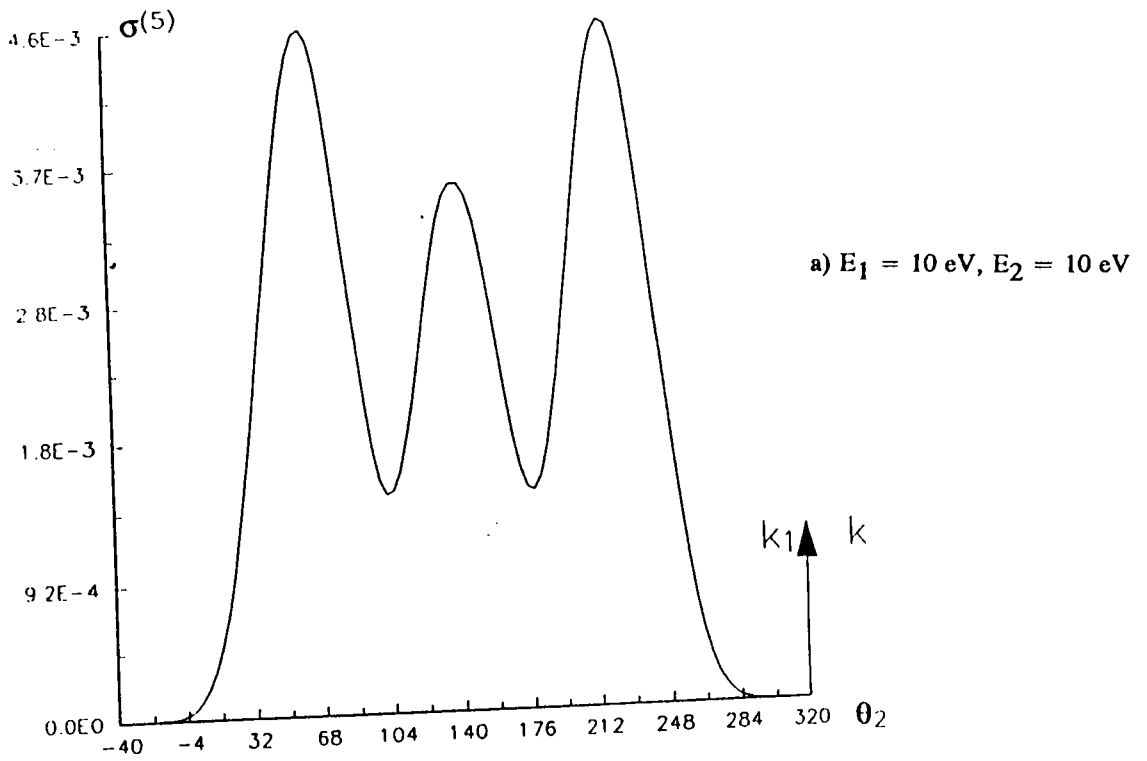
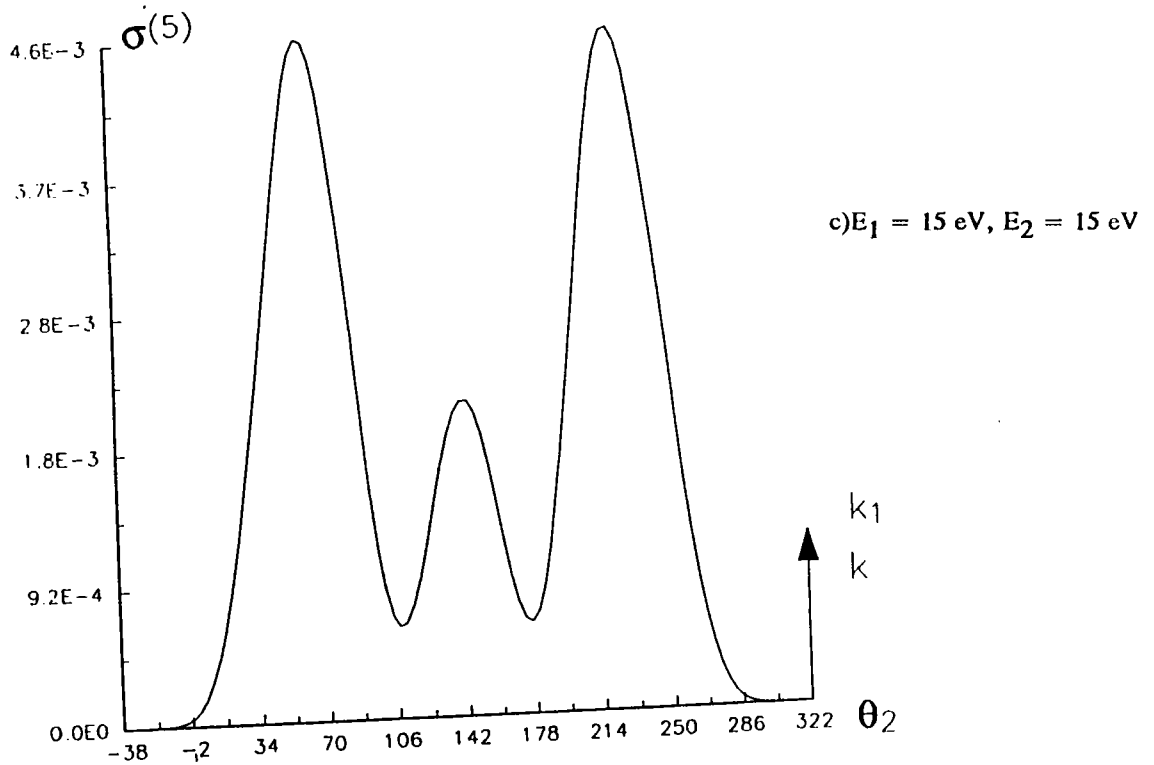
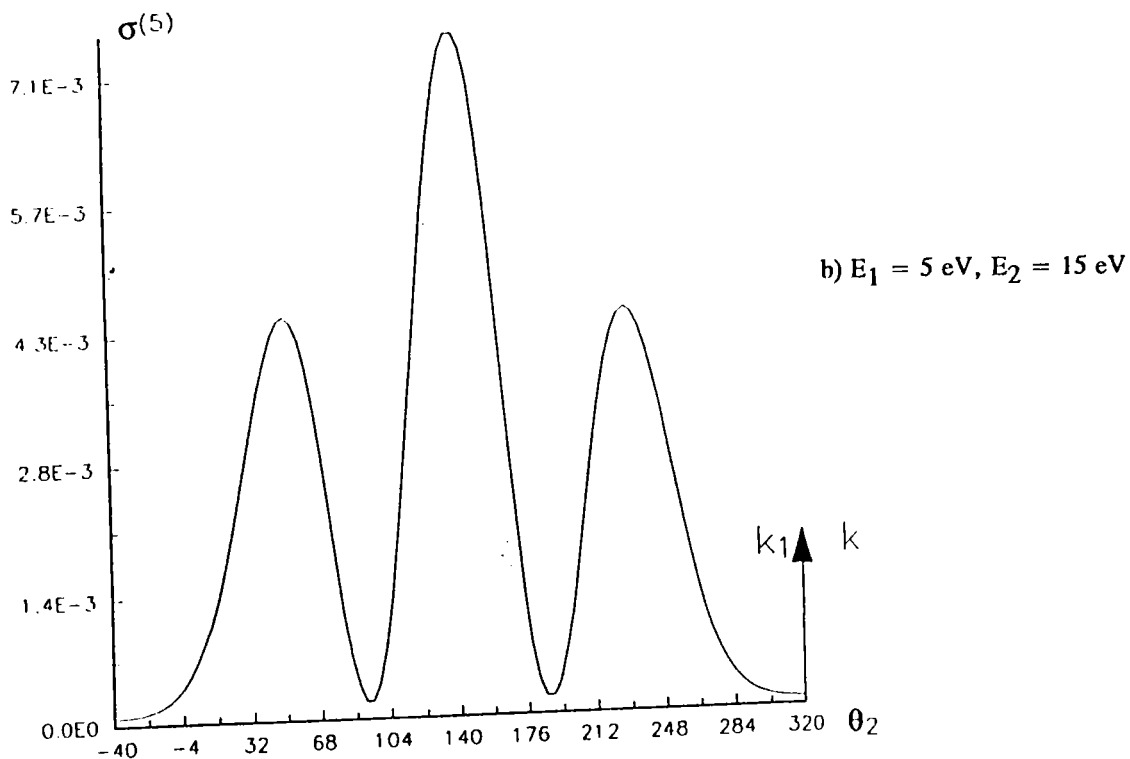
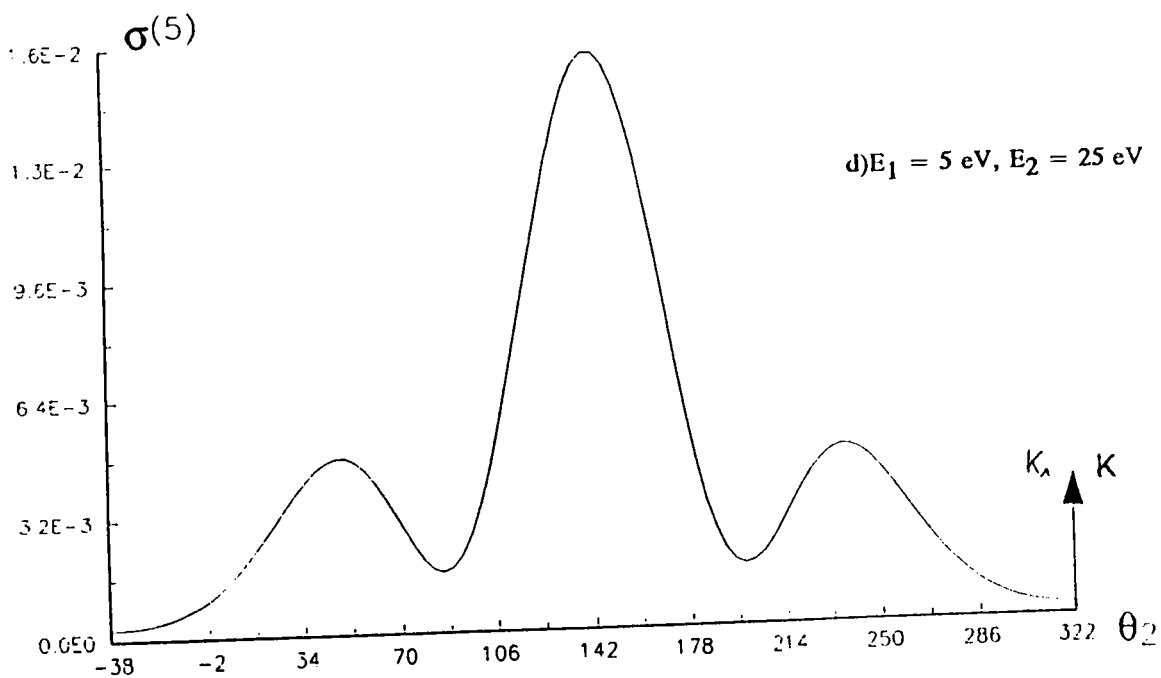


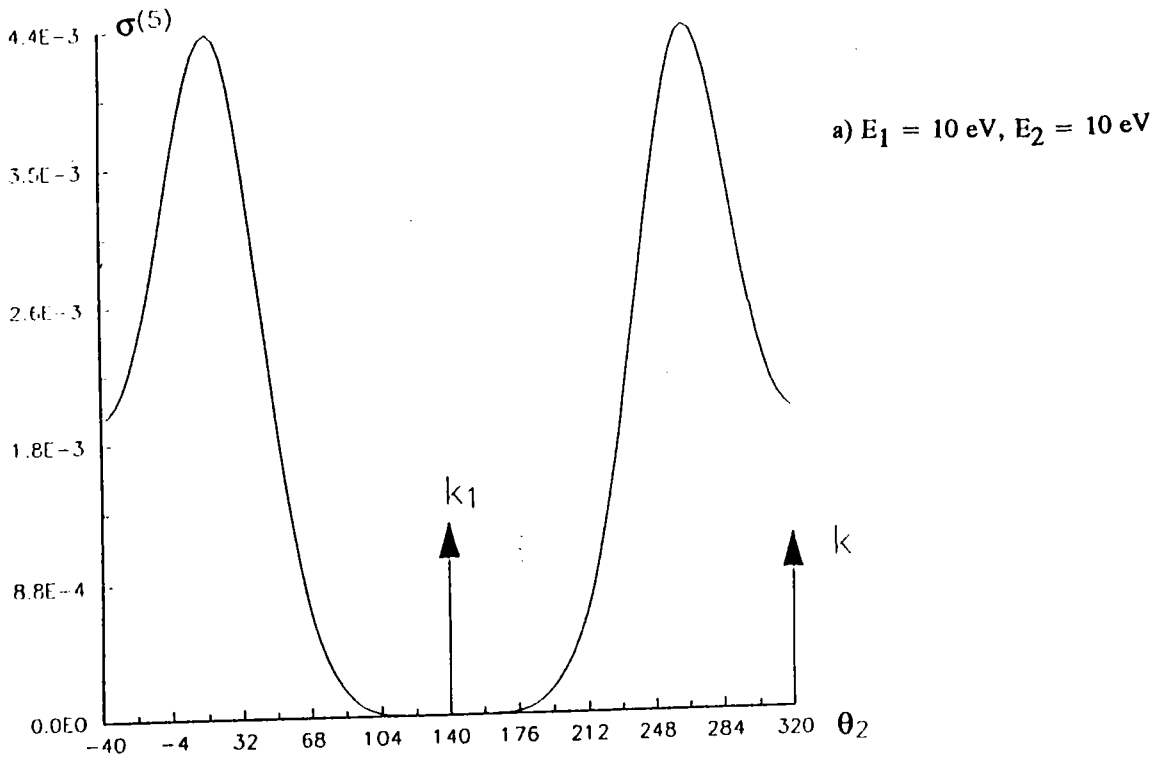
Fig. 14 Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)



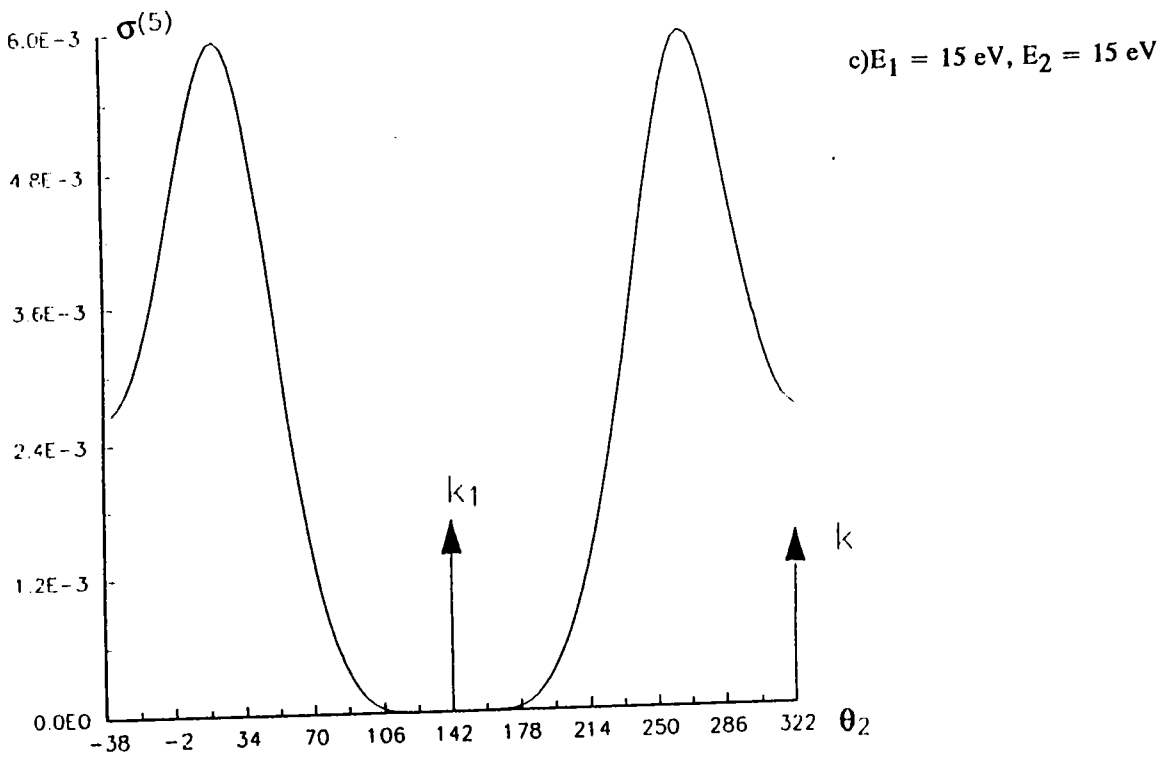


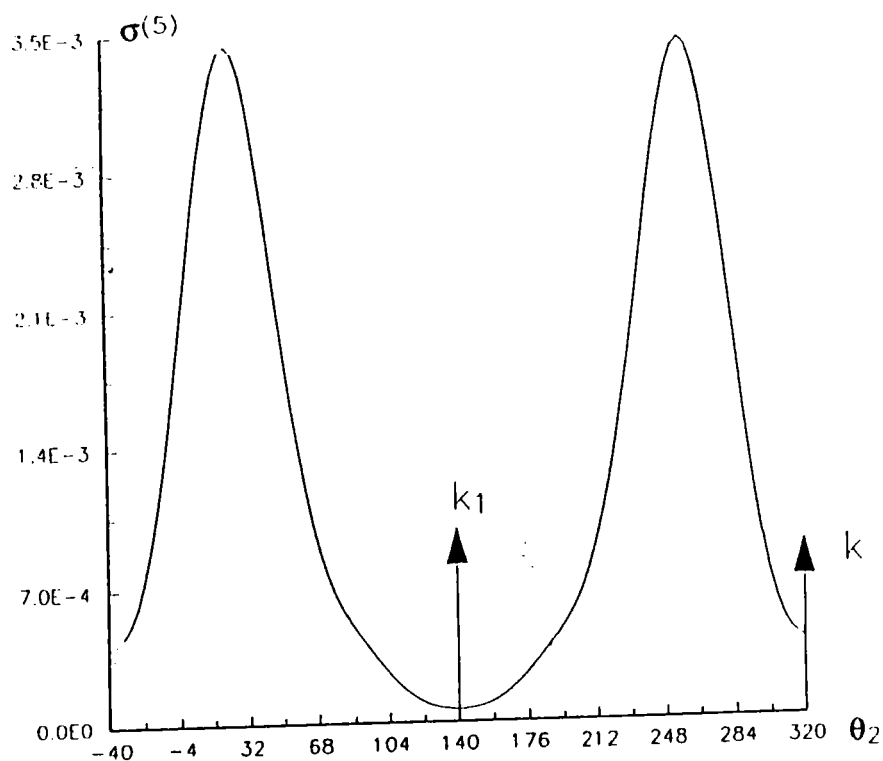
**Fig. 14** Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)





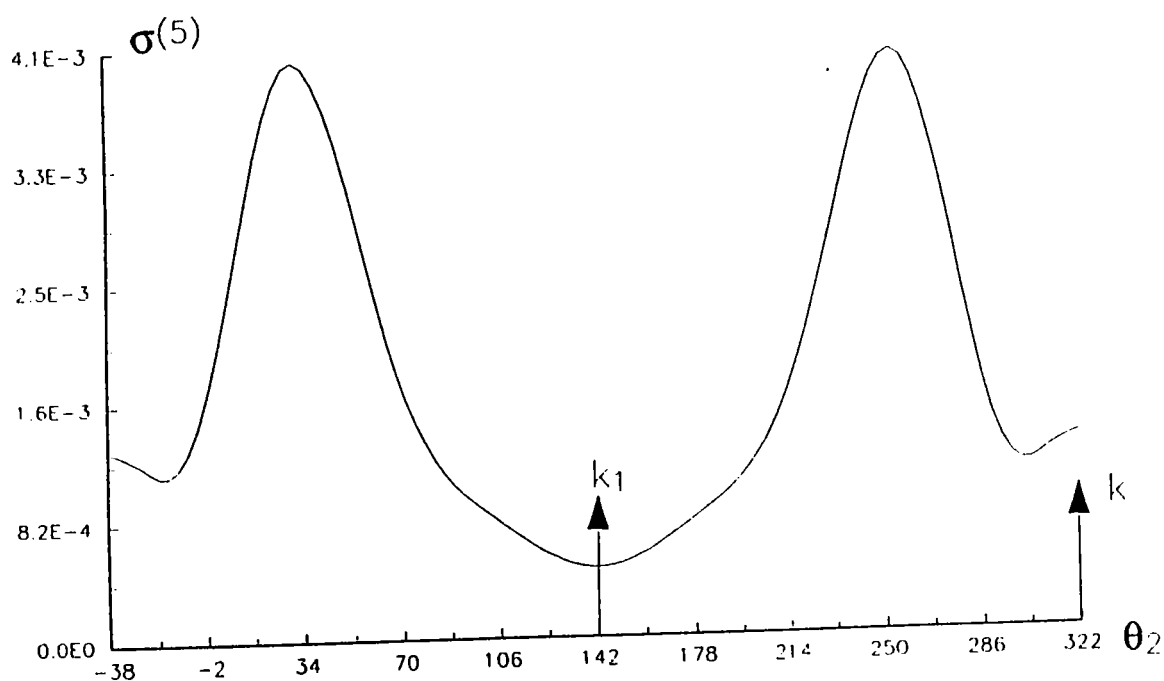
**Fig. 15** Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_1 = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)





b)  $E_1 = 5 \text{ eV}$ ,  $E_2 = 15 \text{ eV}$

Fig. 15 Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final)



d)  $E_1 = 5 \text{ eV}$ ,  $E_2 = 25 \text{ eV}$

Le cas où  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$  (premier électron éjecté dans une direction opposée au transfert) est intéressant aussi. On observe trois pics, 1 dans une direction parallèle au transfert, les deux autres dans une direction perpendiculaire.

Fig 14 et 15, nous faisons les mêmes calculs mais pour He. On constate que si le premier électron est éjecté selon une direction parallèle au transfert d'impulsion (Fig 14(b) et (d)), le deuxième électron est éjecté selon une direction opposée au transfert d'impulsion (comme pour  $H^-$ , Fig. 12(b) (d)) mais a aussi des possibilités d'être éjecté selon une direction perpendiculaire au transfert.

La figure 15 montre d'autres différences par rapport à la figure 13. Ces résultats montrent que la double ionisation de  $H^-$  et He peut donner des distributions angulaires différentes.

### 3 ) Utilisation d'une fonction d'onde initiale non corrélée.

Nous représentons ici la section efficace différentielle en prenant pour fonction d'onde représentant l'état initial :

$$\Phi_i \left( \begin{matrix} \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \end{matrix} \right) = N \left[ \frac{\text{sh} \lambda r_1}{\lambda r_1} \frac{\text{sh} \lambda' r_2}{\lambda' r_2} + \frac{\text{sh} \lambda' r_1}{\lambda' r_1} \frac{\text{sh} \lambda r_2}{\lambda r_2} \right] e^{-z r_1} e^{-z r_2}$$

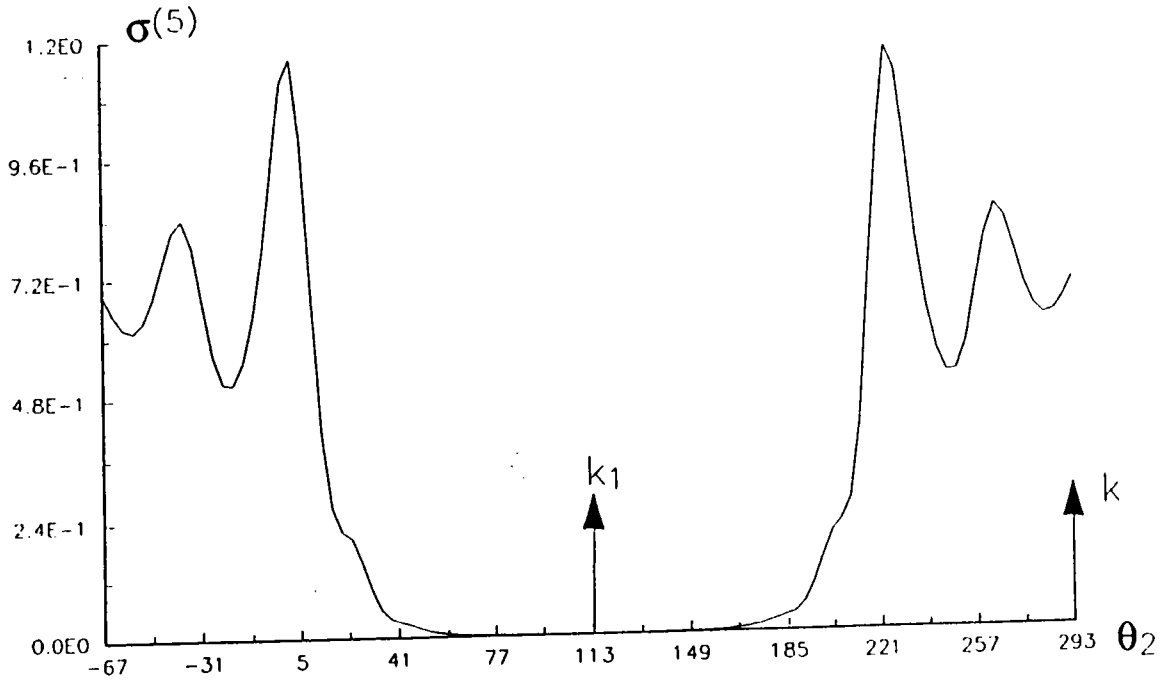
Cette fonction d'onde ne prend pas en compte le terme de corrélation  $e^{-\beta r_{12}}$ .

Fig 16 et 17, on constate qu'il n'y a pas de grosses différences avec une fonction corrélée de l'état initial, excepté pour  $H^-$  où de nouveaux pics apparaissent (fig 16b).

Ces pics sont dus à la non prise en compte du terme  $e^{-\beta r_{12}}$  qui joue un rôle essentiel dans la détermination d'une bonne fonction d'onde de l'état fondamental de  $H^-$ . Il faut effectivement se souvenir que l'énergie de corrélation de  $H^-$  est bien supérieure à celle de He et nécessite une description très précise des effets de corrélation angulaire et radiale.

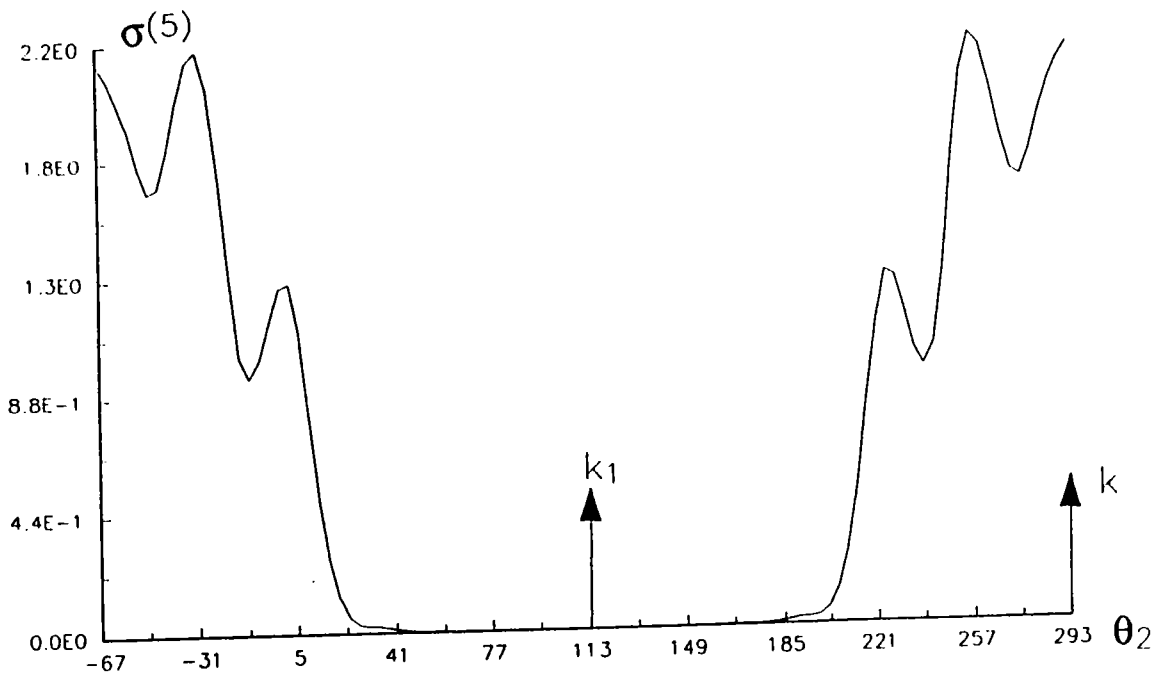


b)  $E_1 = 5 \text{ eV}$ ,  $E_2 = 15 \text{ eV}$



**Fig. 16** Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de  $\text{H}^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final, état initial non corrélé)

a)  $E_1 = 10 \text{ eV}$ ,  $E_2 = 10 \text{ eV}$



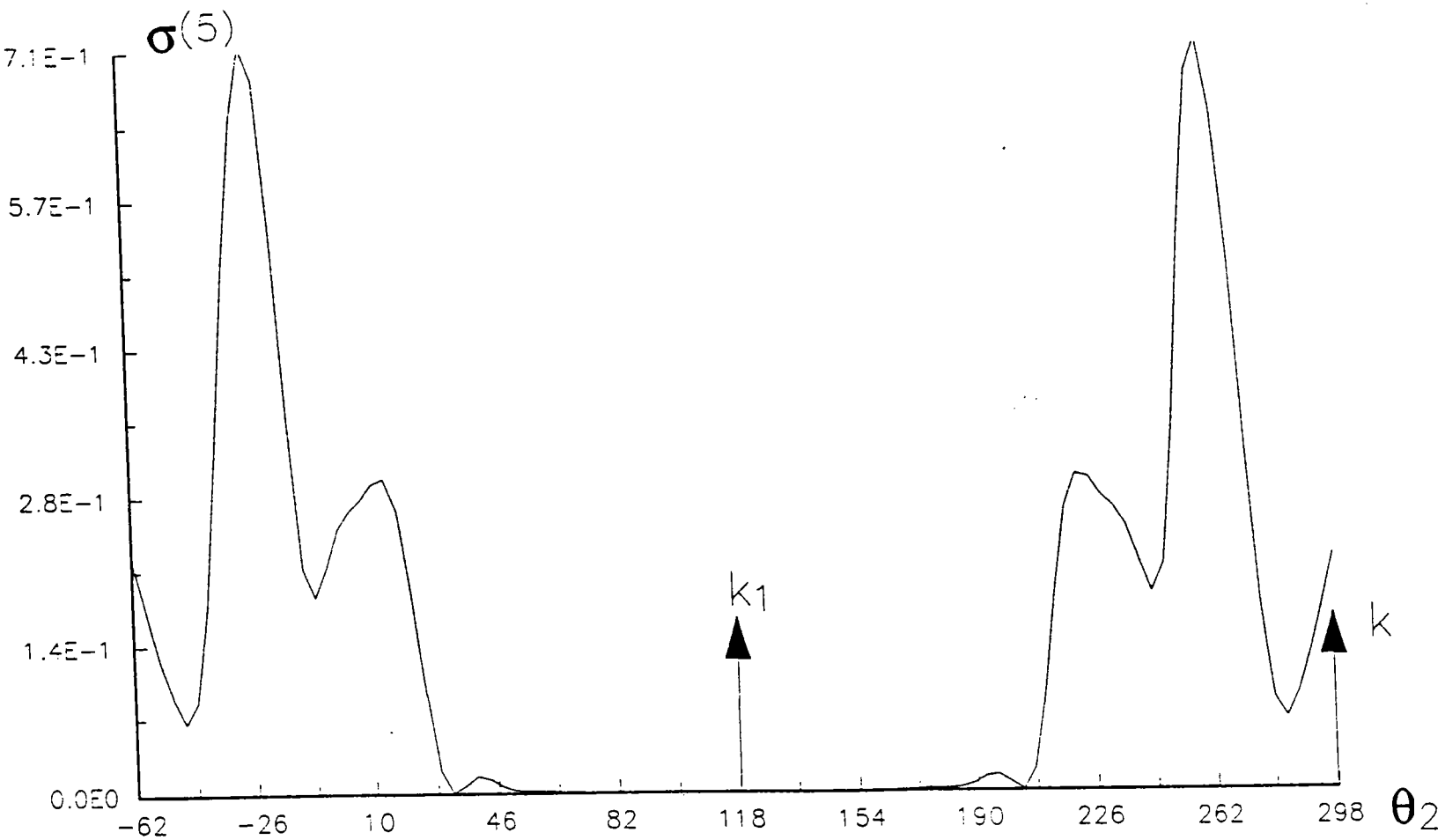
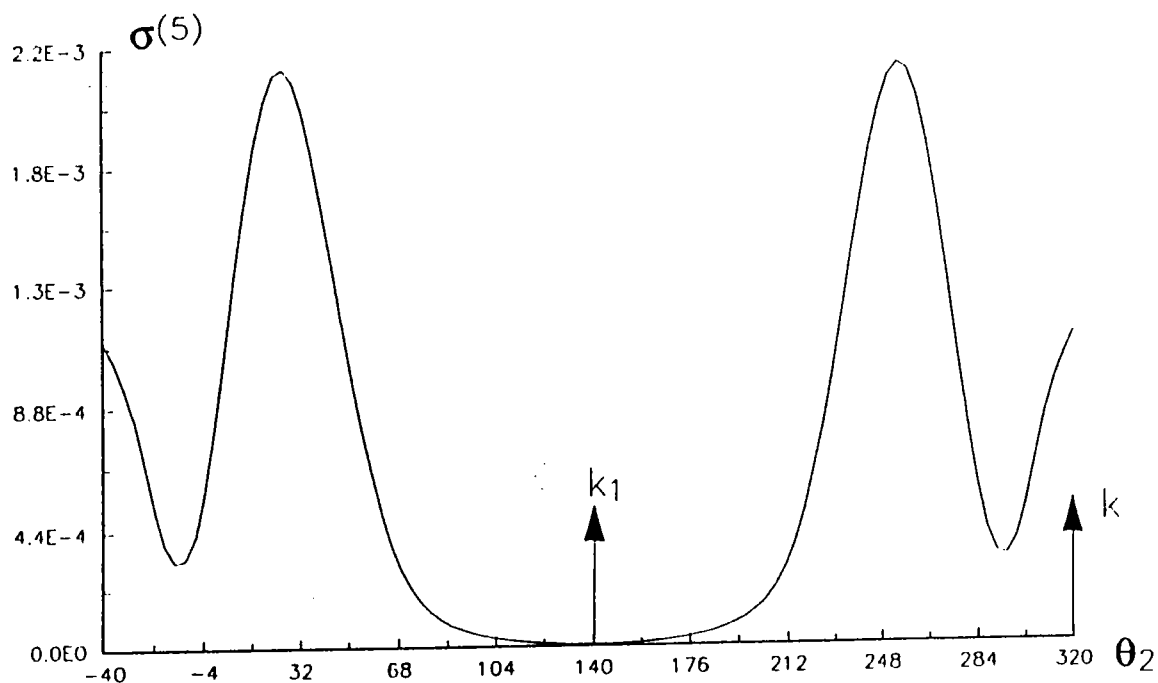


Fig. 16 Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de  $\text{H}^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_1 = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_2 + 180^\circ$ ,  $\theta_2 = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final, état initial non corrélé)

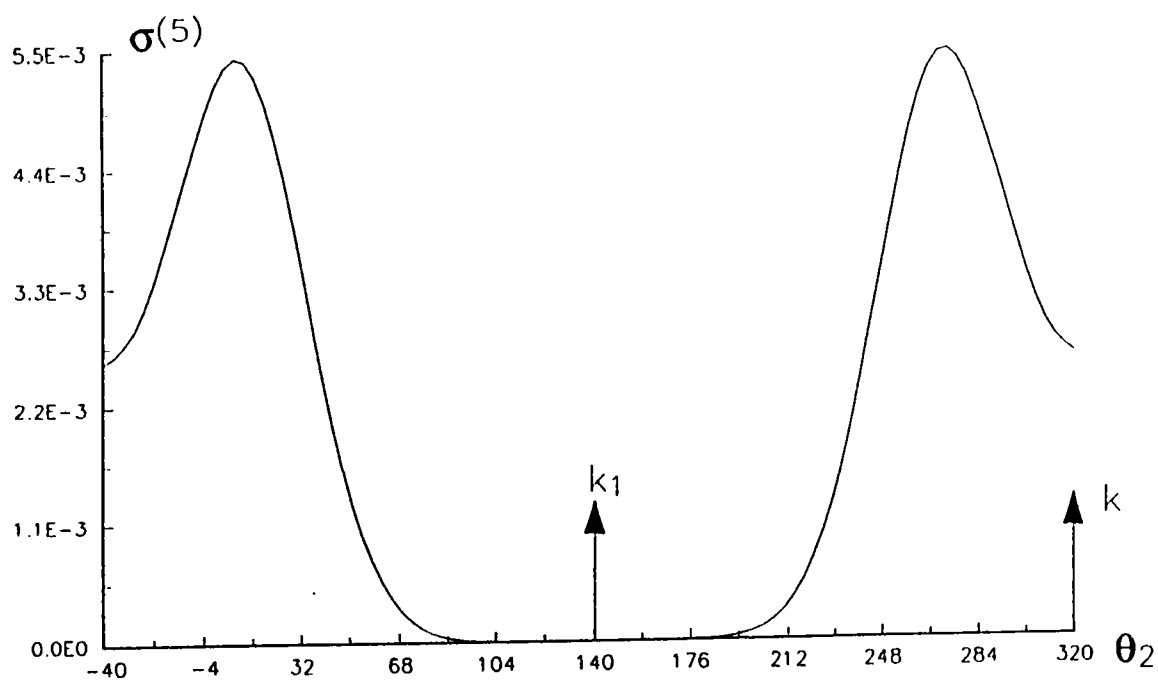
c)  $E_1 = 15 \text{ eV}$ ,  $E_2 = 15 \text{ eV}$

b)  $E_1 = 5 \text{ eV}, E_2 = 15 \text{ eV}$



**Fig. 17** Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000 \text{ eV}$ ,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final, état initial non corrélé)

a)  $E_1 = 15 \text{ eV}, E_2 = 15 \text{ eV}$



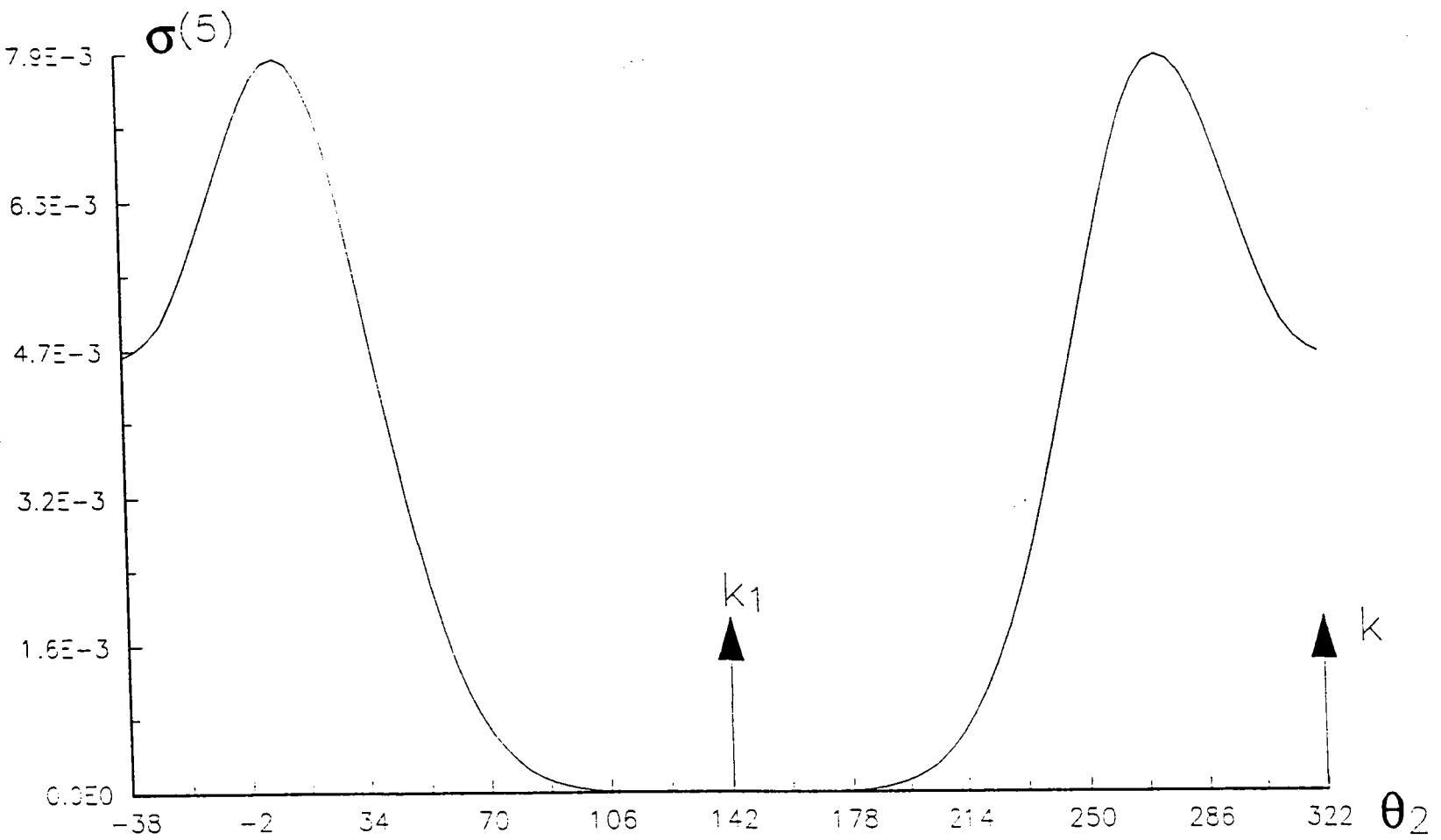


Fig. 17 Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_1 = 5000$  eV,  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final, état initial non corrigé)

c)  $E_1 = 15$  eV,  $E_2 = 15$  eV

#### 4 ) Modification de l'état final.

Nous effectuons ici, pour le cas où  $E_1 = 5\text{eV}$   $E_2 = 15\text{eV}$ ,  $\theta_s = 0,5^\circ$  et  $\vec{k}_1$  perpendiculaire à  $\vec{k}$  (le deuxième électron sort avec une direction perpendiculaire au transfert) une comparaison entre différentes fonctions représentant l'état final.

$$\text{a) } \varphi_{f2c} = M' e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_2} \chi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$\text{avec } M' = \exp\left[-\frac{1}{2}\pi(\alpha_1 + \alpha_2)\right] \Gamma(1 - i\alpha_1) \Gamma(1 - i\alpha_2) / (2\pi)^3$$

$$\text{et } \chi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \prod_{j=1}^2 {}_1F_1\left[i\alpha_j, 1; -i(\vec{k}_j \vec{r}_j + \vec{k} \vec{r}_j)\right]$$

$$\text{b) } \varphi_{fapBBK} = C e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \vec{r}_2} \chi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

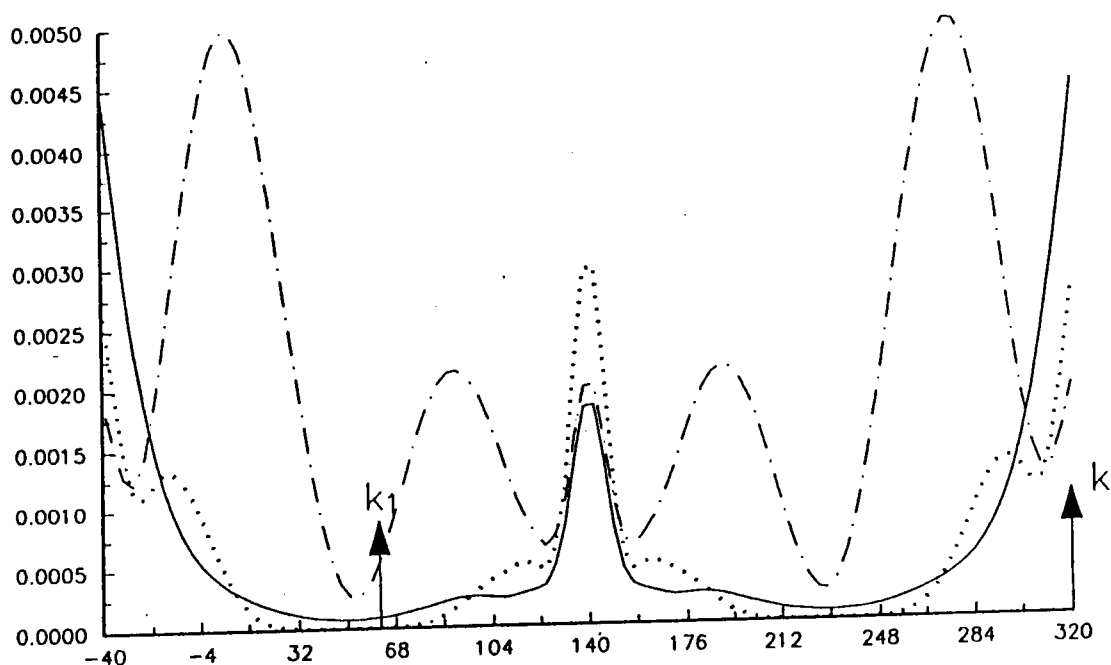
avec C, constante définie au II, pour la fonction BBK.

$\varphi_{f2c}$  est une fonction comprenant deux fonctions hypergéométriques décrivant les deux électrons éjectés mais ne tient pas compte de l'interaction entre les deux électrons.

$\varphi_{fapBBK}$  est ce qu'on appelle la fonction BBK approchée. Pour cela, on supprime la troisième hypergéométrique tenant compte de la corrélation entre les deux électrons éjectés tout en gardant le coefficient C dans lequel intervient  $e^{-\alpha_2 r_{12}}$ . On dispose ainsi d'une petite information sur la corrélation de l'état final.

Sur la figure 18, on compare ainsi ces fonctions avec la fonction BBK, pour la double ionisation de He et  $H^-$ .

a)

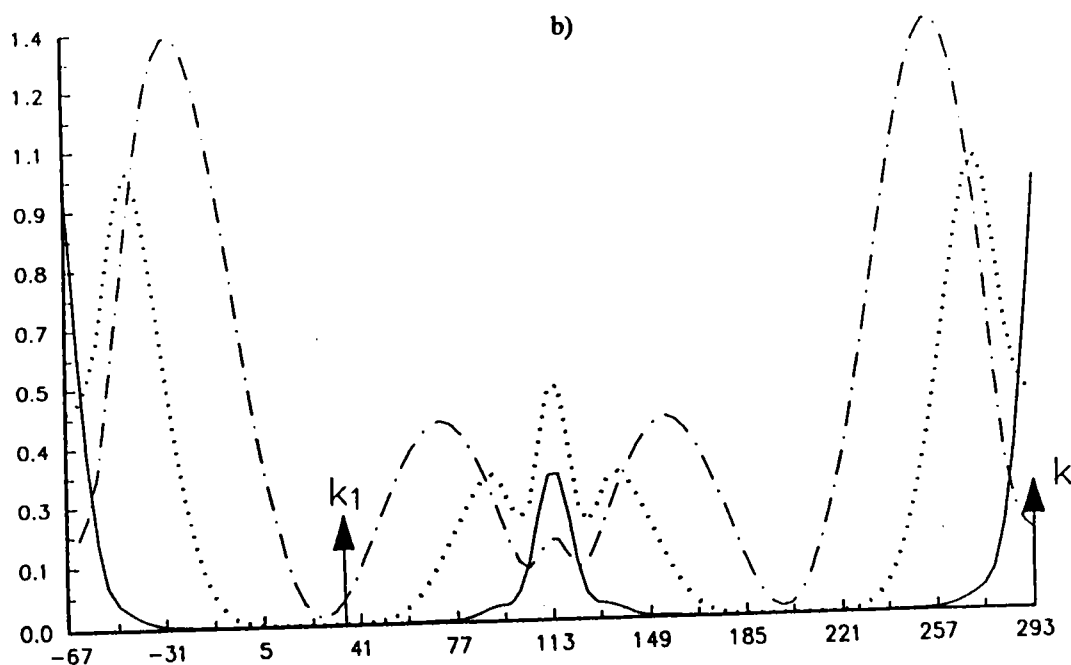


**Fig. 18** Comparaison entre les différents modèles représentant l'état final.

a) Variation de la section efficace différentielle de la double ionisation de He en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 15$  eV,  $E_2 = 15$  eV,  $\theta_1 = \theta_k + 90^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$ . Trait plein : modèle BBK, trait pointillé : BBK approximé (\*500), trait tireté : deux ondes coulombiennes (\*10).

b) Variation de la section efficace différentielle de double ionisation de  $H^-$  en fonction de l'angle du deuxième électron éjecté  $\theta_2$ ,  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 15$  eV,  $E_2 = 15$  eV,  $\theta_1 = \theta_k + 90^\circ$ ,  $\theta_s = 0.5^\circ$ . Trait plein : modèle BBK, trait pointillé : BBK approximé (\*10000), trait tireté : deux ondes coulombiennes (\*100).

b)



On peut remarquer que  $\varphi_{f2c}$  ne donne pas les mêmes directions d'éjection du deuxième électron alors que  $\varphi_{fapBBK}$  donne approximativement la même direction mais pas la même amplitude. Ce résultat est en accord avec les résultats de Joulakian et Dal Cappello [1993] : la distribution angulaire donnée par la section efficace quintuplement différentielle dépend fortement de la description de l'état final et faiblement de celle de l'état initial.

### 5 ) Variation de la section efficace différentielle en fonction des deux angles $\theta_1$ et $\theta_2$ .

Nous considérons ici le cas où :

$$\theta_s = 0,5^\circ$$

(a)  $E_1 = 10\text{eV}$ ,  $E_2 = 20\text{eV}$  Fig. 19,  $\text{H}^-$  et fig. 20, He

(b)  $E_1 = 15\text{eV}$ ,  $E_2 = 15\text{eV}$  Fig. 21,  $\text{H}^-$  et fig. 22, He

La section efficace quintuplement différentielle est tracée en fonction des deux angles des électrons éjectés  $\theta_1$  et  $\theta_2$ .

On obtient ainsi pour le cas (a) la probabilité maximale pour la détection des deux électrons éjectés pour les différents angles suivants :

He		$\text{H}^-$	
$\theta$	$\theta_2$	$\theta$	$\theta_2$
30°	270°	10°	240°
60°	200°	50°	160°
220°	80°	190°	80°
260°	20°	230°	0°

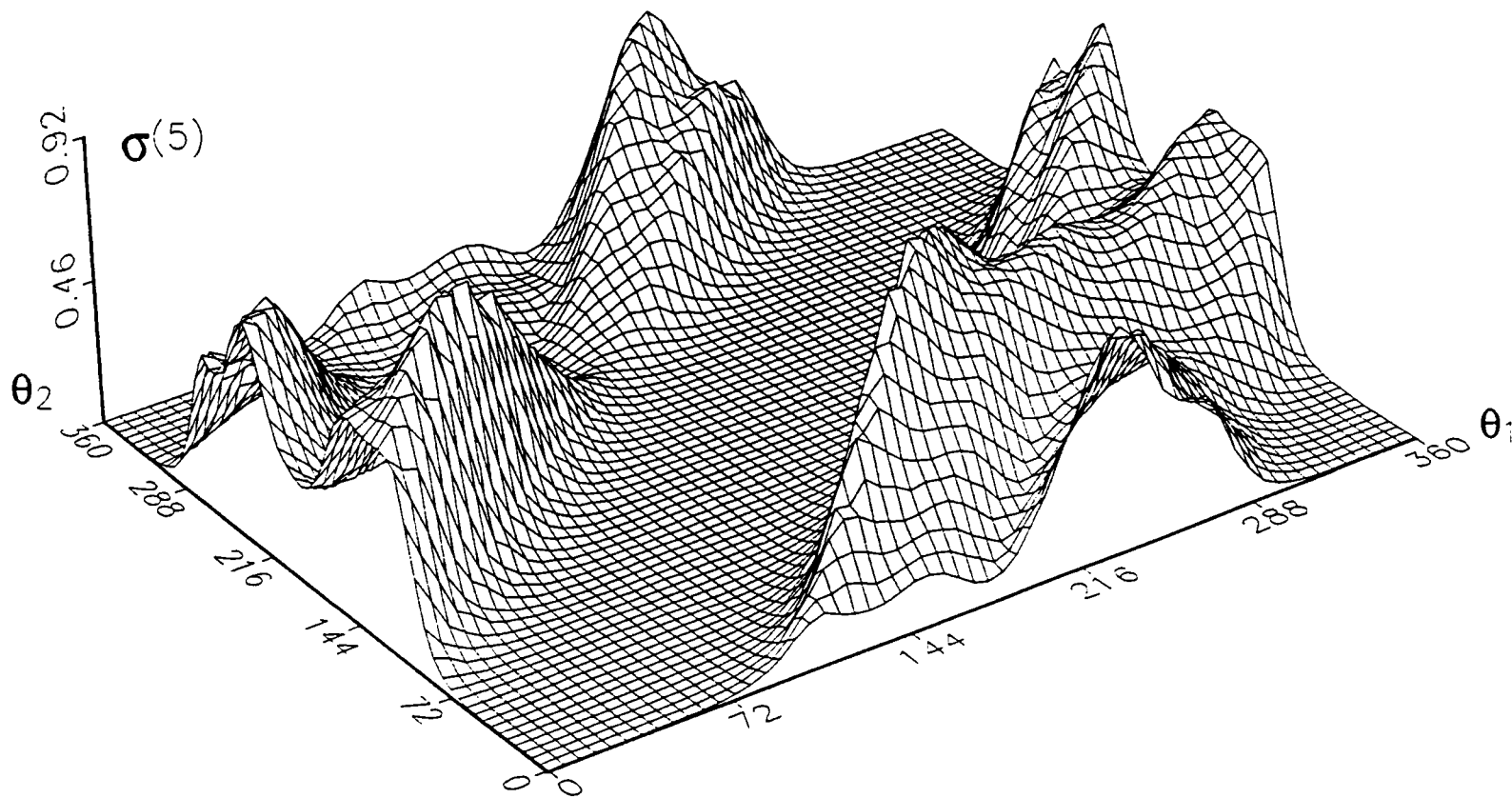


Fig. 19 Variation de la section efficace différentielle de  $H^-$  en fonction des angles  $\theta_1$  et  $\theta_2$  des deux électrons éjectés avec  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 10$  eV,  $E_2 = 20$  eV,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final).



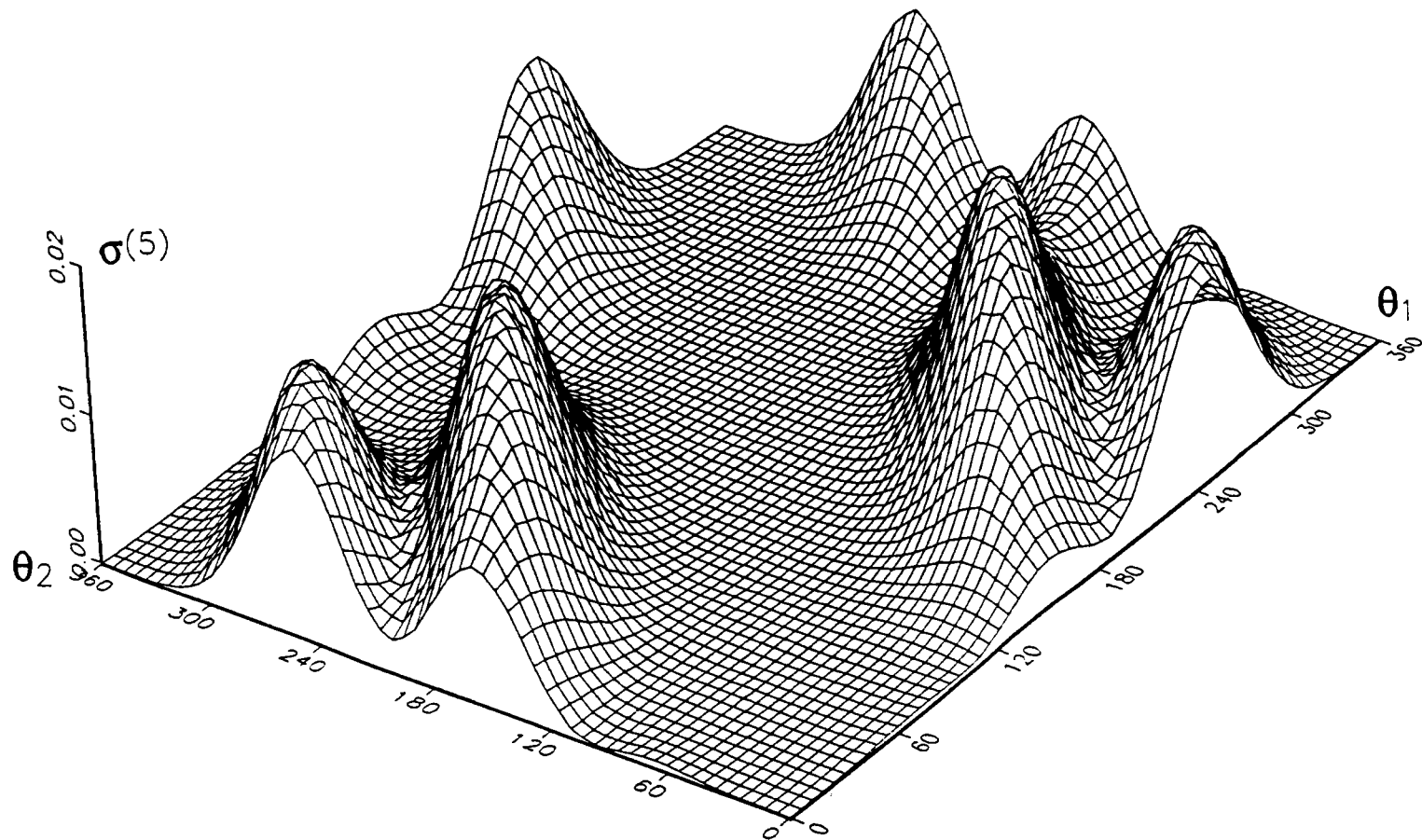


Fig. 20 Variation de la section efficace différentielle de He en fonction des angles  $\theta_1$  et  $\theta_2$  des deux électrons éjectés avec  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 10$  eV,  $E_2 = 20$  eV,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final).

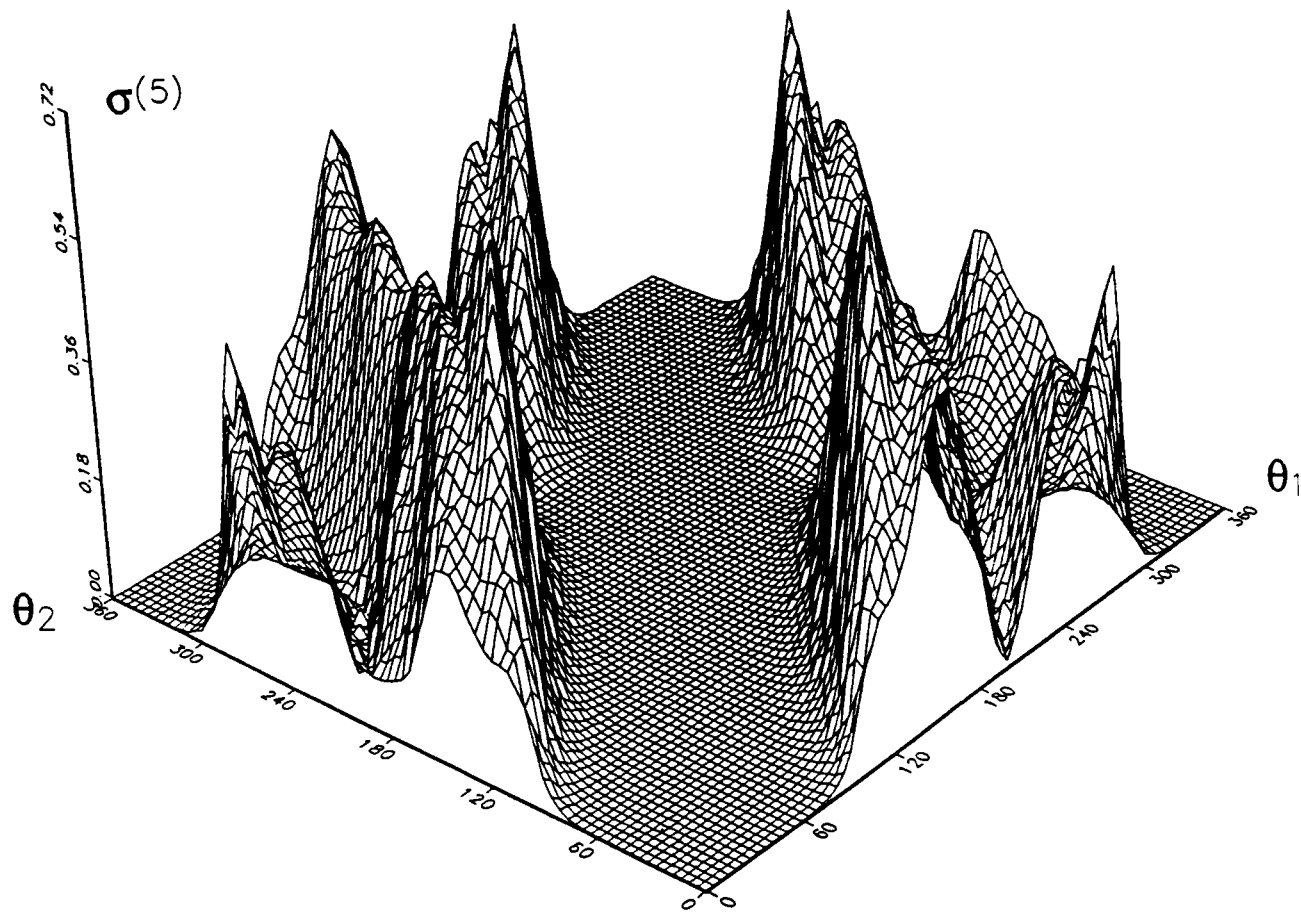


Fig. 21 Variation de la section efficace différentielle de  $H^-$  en fonction des angles  $\theta_1$  et  $\theta_2$  des deux électrons éjectés avec  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 15$  eV,  $E_2 = 15$  eV,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final).

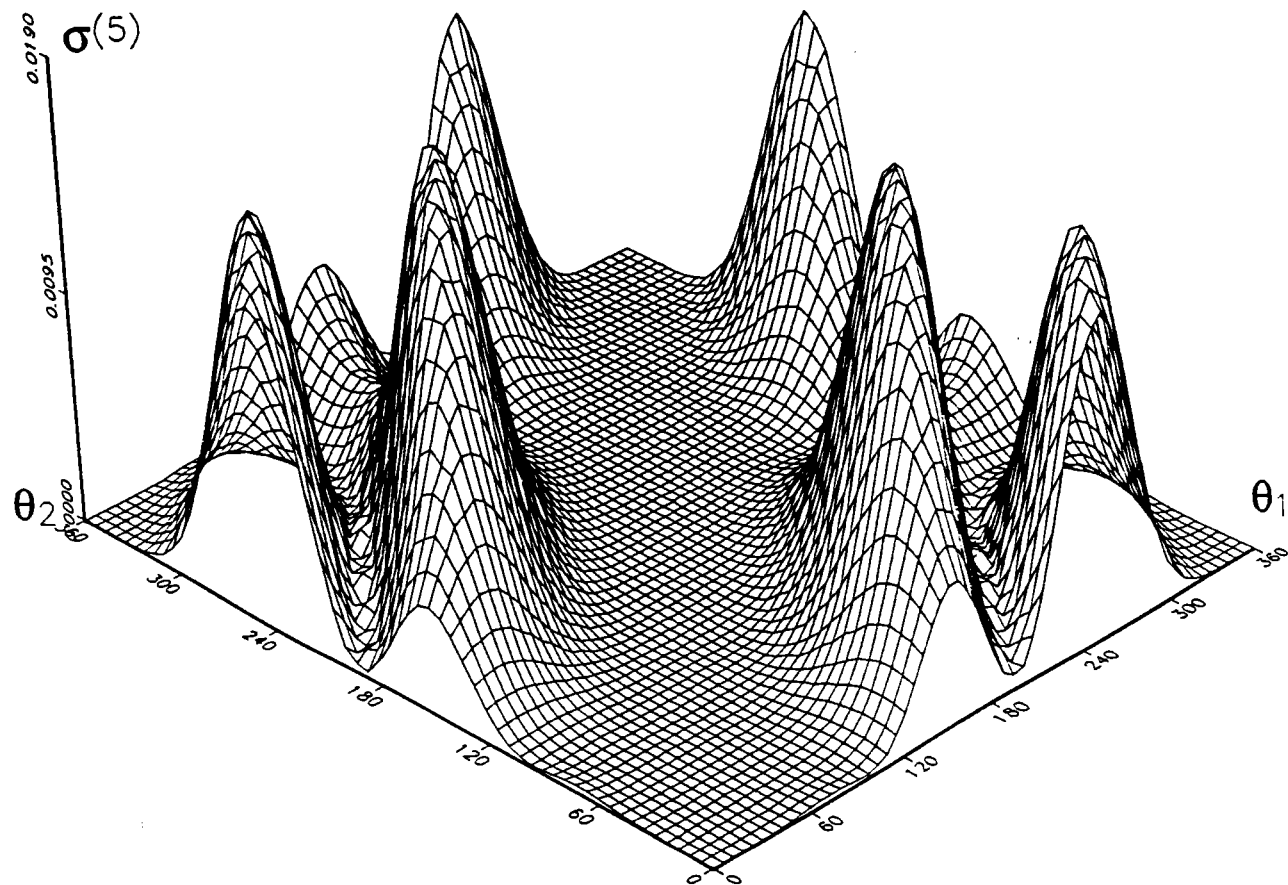


Fig. 22 Variation de la section efficace différentielle de He en fonction des angles  $\theta_1$  et  $\theta_2$  des deux électrons éjectés avec  $E_i = 5000$  eV,  $E_1 = 15$  eV,  $E_2 = 15$  eV,  $\theta_s = 0.5^\circ$  (modèle BBK pour l'état final).

## B ) Ionisation double : vers les expériences (e,(3-1)e).

### 1 ) Représentation pour différentes énergies

Actuellement, des expériences de double ionisation de He sont en cours et permettront de réaliser des mesures dans le cas de collision (e,(3-1)e).

Dans ce genre de manipulation, on envoie un faisceau d'électrons incidents sur un gaz d'hélium et on détecte les deux électrons éjectés de la cible en coïncidence. L'électron diffusé n'est pas détecté, c'est pourquoi l'on parle d'expérience (e,(3-1)e).

En intégrant ainsi la section efficace quintuplement différentielle sur l'angle solide de l'électron diffusé, on obtient la section efficace quadruplement différentielle représentative de ce type de résultat :

$$\sigma^{(4)} = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 d\left(\frac{k_1^2}{2}\right) d\left(\frac{dk_2^2}{2}\right)} = \int \frac{d^5\sigma}{d\Omega_d d\Omega_1 d\Omega_2 d\left(\frac{k_1^2}{2}\right) d\left(\frac{k_2^2}{2}\right)} d\Omega_d$$

Différents calculs sont présentés afin de comparer avec l'expérience dont les conditions cinématiques sont :

$-\theta_1 = 90^\circ$	$E_i = 5525 \text{ eV}$		
Fig.23, 25	$E_1 = 7 \text{ eV}$	$E_2 = 28 \text{ eV}$	$180^\circ < \theta_2 < 330^\circ$
Fig.24, 26	$E_1 = 17,5 \text{ eV}$	$E_2 = 17,5 \text{ eV}$	

Le modèle BBK précédemment décrit (Fig. 23, 24), un modèle à deux ondes coulombiennes et un dernier modèle utilisant la fonction BBK approchée (Fig. 25, 26) sont aussi utilisés pour tester l'importance d'une bonne description de la voie de sortie.

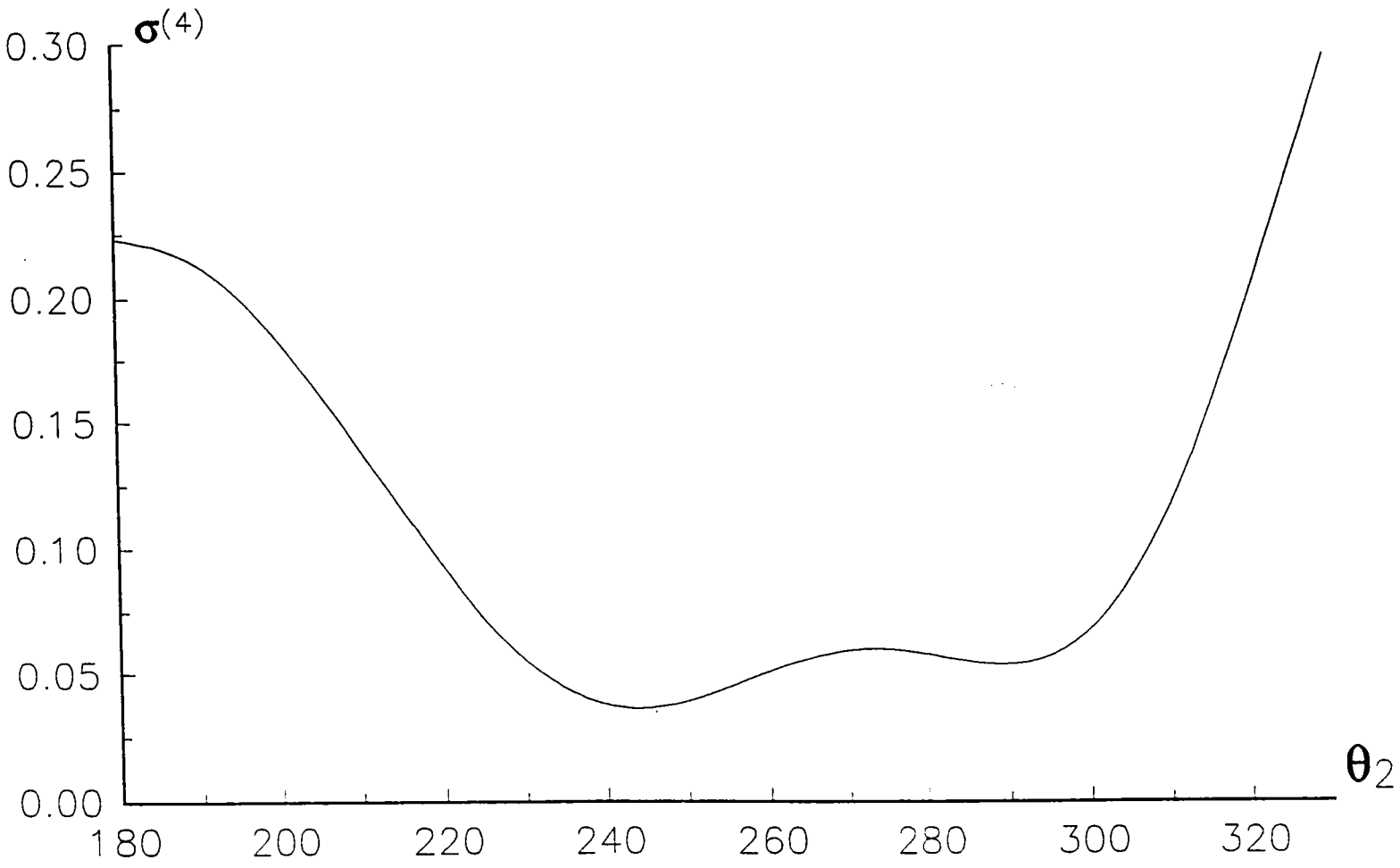
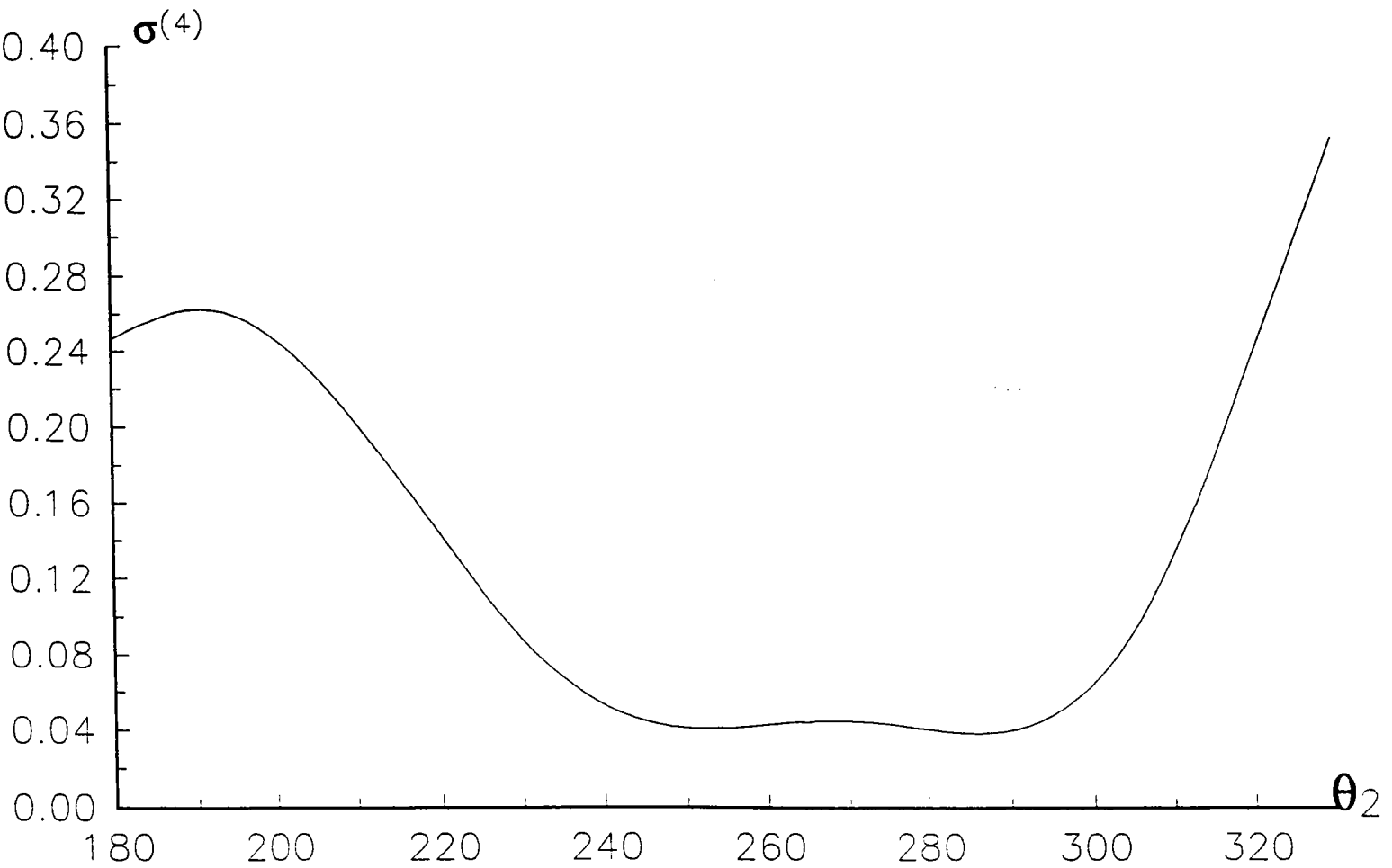
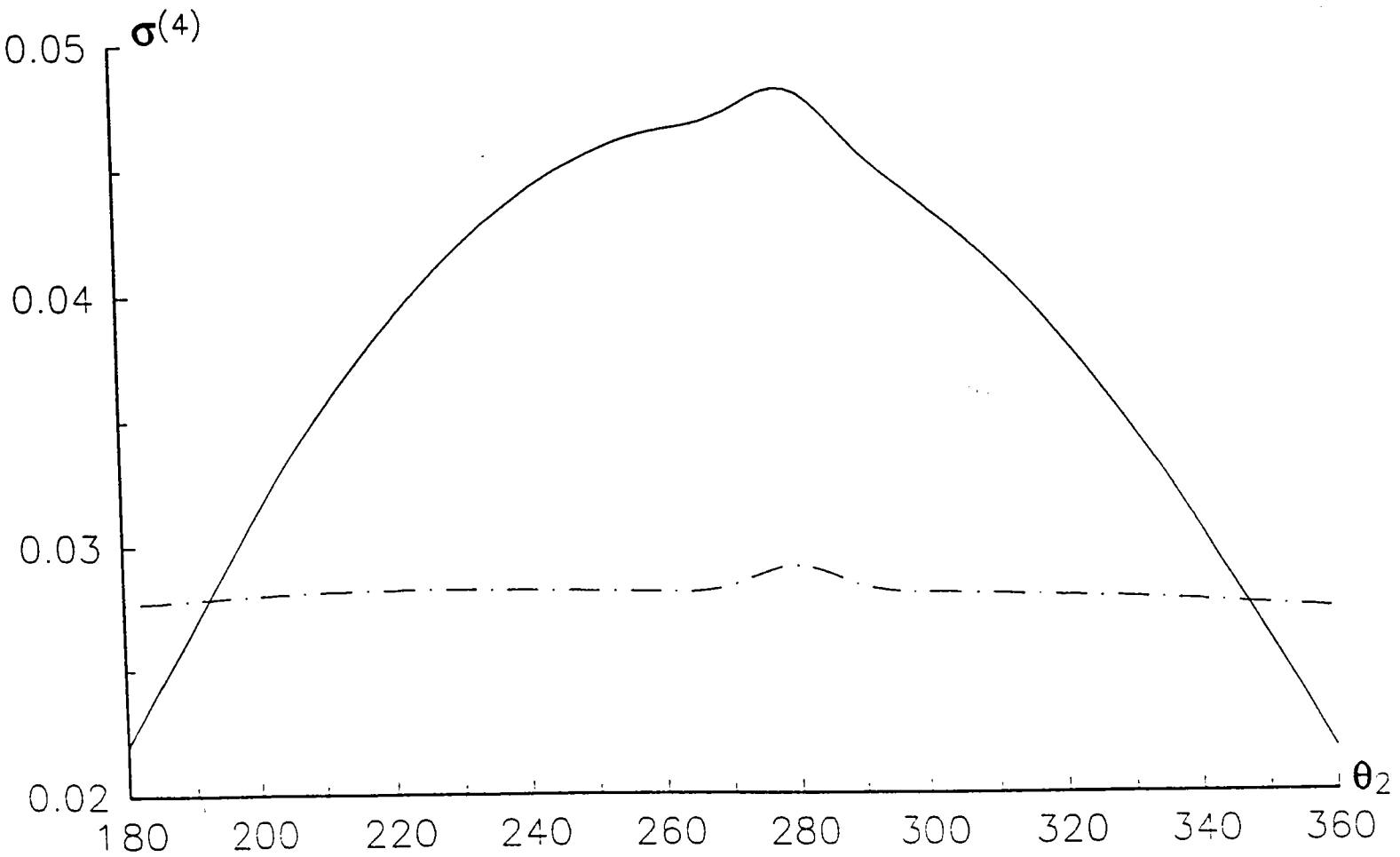


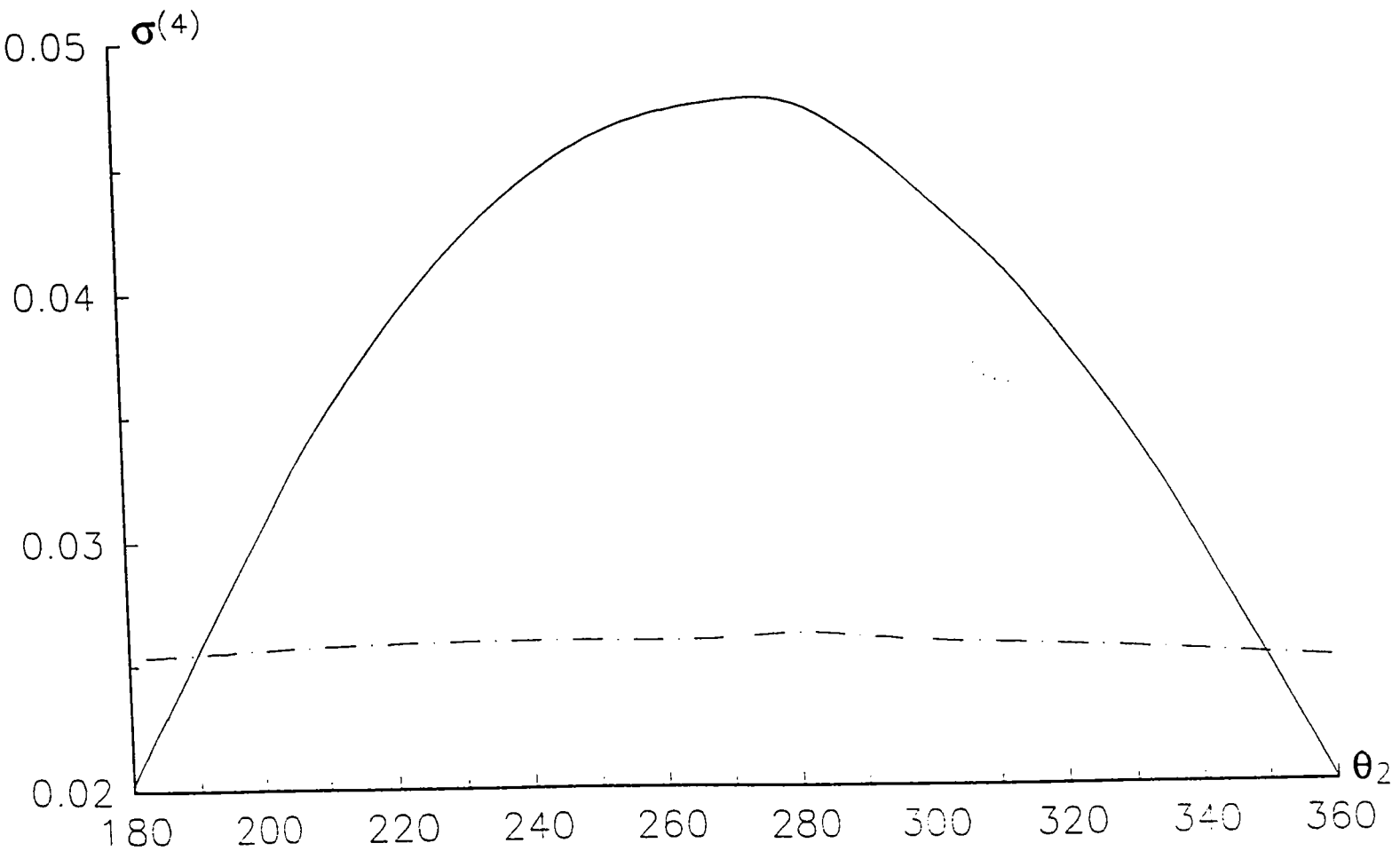
Fig. 23 Variation de la section efficace de la double ionisation de He, intégrée sur le diffusé, en fonction de l'angle  $\theta_2$ , du deuxième électron éjecté avec  $E_i = 5525$  eV,  $E_1 = 7$  eV,  $E_2 = 28$  eV,  $\theta_1 = 90^\circ$  (modèle BBK pour l'état final).



**Fig. 24** Variation de la section efficace de la double ionisation de He, intégrée sur le diffusé, en fonction de l'angle  $\theta_2$ , du deuxième électron éjecté avec  $E_1 = 5525$  eV,  $E_1 = 17.5$  eV,  $E_2 = 17.5$  eV,  $\theta_1 = 90^\circ$  (modèle BBK pour l'état final).



**Fig. 25** Variation de la section efficace de la double ionisation de He, intégrée sur le diffusé, en fonction de l'angle  $\theta_2$  du deuxième électron éjecté avec  $E_1 = 5525$  eV,  $E_1 = 7$  eV,  $E_2 = 28$  eV,  $\theta_1 = 90^\circ$ . Trait plein : modèle BBK approximé, trait tireté : modèle à deux ondes coulombiennes (10).



**Fig. 26** Variation de la section efficace de la double ionisation de He, intégrée sur le diffusé, en fonction de l'angle  $\theta_2$ , du deuxième électron éjecté avec  $E_i = 5525$  eV,  $E_1 = 17.5$  eV,  $E_2 = 17.5$  eV,  $\theta_1 = 90^\circ$ . Trait plein : modèle BBK approximé, trait tireté : modèle à deux ondes coulombiennes (1/10).



On constate ainsi une différence entre les différents modèles, le modèle à deux ondes coulombiennes a une très faible variation d'amplitude et le modèle avec la fonction BBK approchée présente seulement un pic.

## 2 ) Utilisation de charges variables

Comme proposé par Dal Cappello et Le Rouzo [1991], on peut remplacer dans la description de l'état final les coefficients  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  par une expression dépendante des énergies incidentes.

On prend ainsi

$$\alpha_1 = -Z / k_1 \text{ avec } Z = 2 - k_1(k_1^2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2) / |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|^3$$

$$\alpha_2 = -Z' / k_2 \text{ avec } Z' = 2 - k_2(k_2^2 - \vec{k}_1 \cdot \vec{k}_2) / |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|^3$$

L'apport d'un modèle avec des charges variables permet de rendre compte des situations très dissymétriques. Ainsi, pour un électron éjecté de faible énergie (5 eV) et un électron éjecté de forte énergie (100 eV), il semble plus judicieux de les décrire par des ondes coulombiennes avec des charges variables qui tiennent compte de leurs vitesses relatives plutôt que par deux charges fixées  $Z_1 = Z_2 = 2$  (modèle BBK initial).

On utilise les fonctions BBK approchée et deux ondes coulombiennes pour la description de l'état final.

$$-\theta_1 = 90^\circ \quad E_i = 5525 \text{ eV}$$

$$\text{Fig.27 } E_1 = 7 \text{ eV}$$

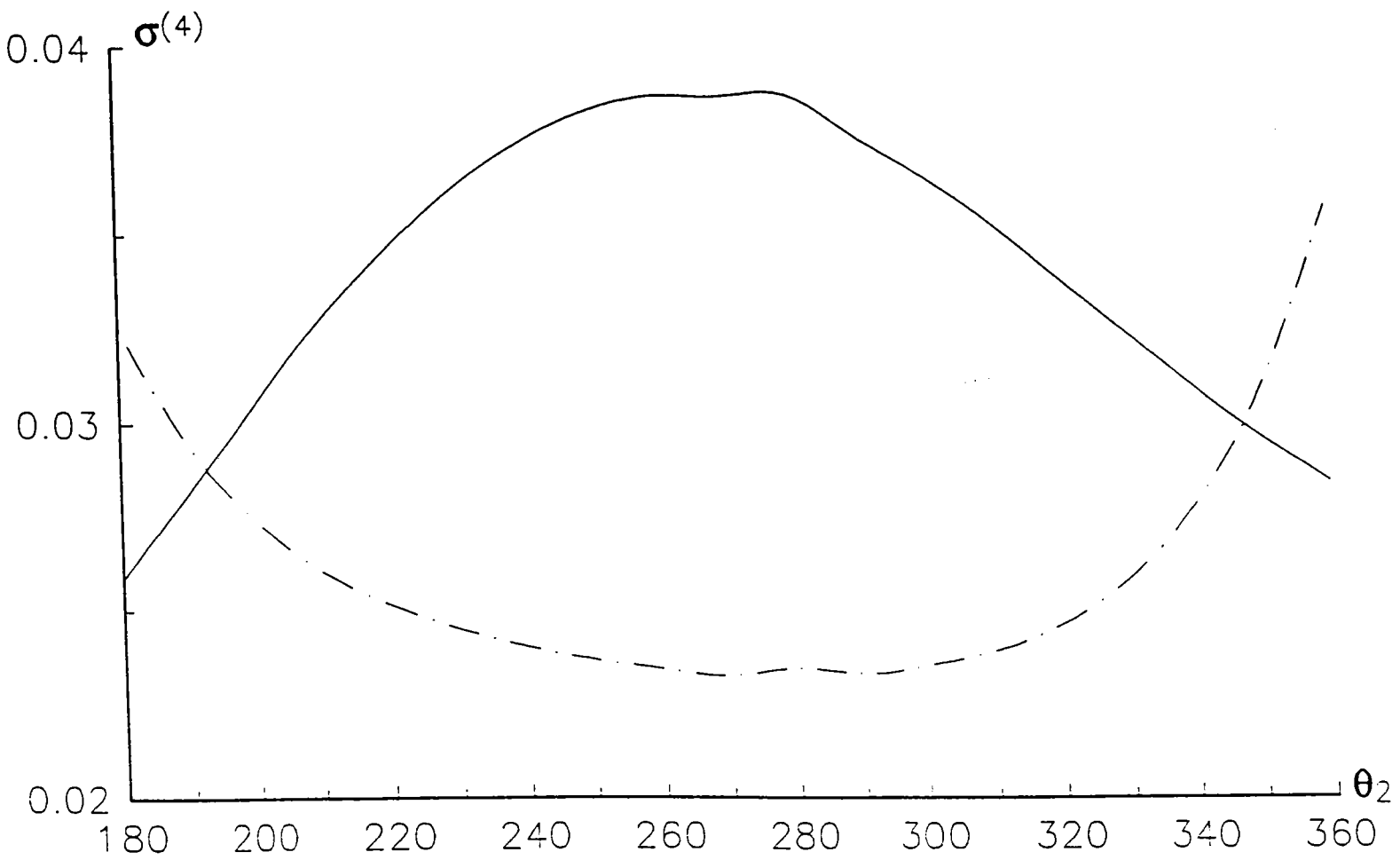
$$E_2 = 28 \text{ eV}$$

$$180^\circ < \theta_2 < 360^\circ$$

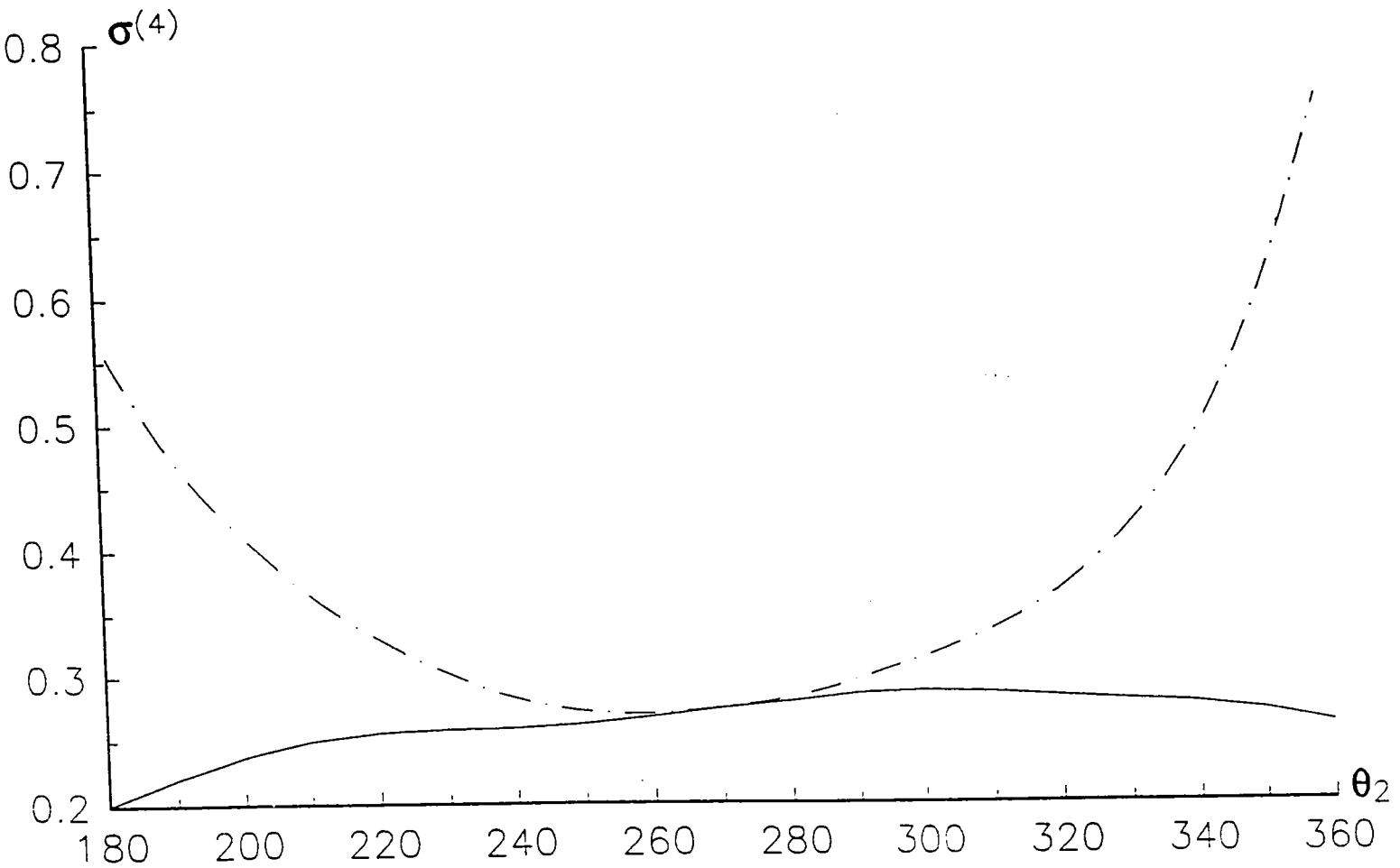
$$\text{Fig.28 } E_1 = 17,5 \text{ eV}$$

$$E_2 = 17,5 \text{ eV}$$

Pour des problèmes de temps de calcul, l'utilisation de la fonction BBK n'a pas pu encore être réalisé.



**Fig. 27** *Utilisation de charges variables. Variation de la section efficace de la double ionisation de He, intégrée sur le diffusé, en fonction de l'angle  $\theta_2$  du deuxième électron éjecté avec  $E_1 = 5525$  eV,  $E_2 = 28$  eV,  $\theta_1 = 90^\circ$ . Trait plein : modèle BBK approximé, trait tireté : modèle à deux ondes coulombiennes (/10).*



**Fig. 28** Utilisation de charges variables. Variation de la section efficace de la double ionisation de He, intégrée sur le diffusé, en fonction de l'angle  $\theta_2$  du deuxième électron éjecté avec  $E_1 = 5525$  eV,  $E_1 = 17.5$  eV,  $E_2 = 17.5$  eV,  $\theta_1 = 90^\circ$ . Trait plein : modèle BBK approximé, trait tireté : modèle à deux ondes coulombiennes.

En analysant les courbes de variation de la section efficace quadruplement différentielle, on constate que :

- seul le modèle BBK donne des variations sensibles et présente une différence par rapport aux autres modèles : il donne un minimum pour  $\theta_2 \approx 250^\circ$  alors que le modèle BBK approximé donne un maximum
- le modèle à deux ondes coulombiennes présente une section efficace pratiquement constante
- l'introduction de charges variables n'améliore pas sensiblement le comportement des modèles.

Les résultats préliminaires ( et non publiés à ce jour) de Lahmam-Bennani et col semblent présenter une structure semblable à celle prévue par le modèle BBK.

## CONCLUSION

L'étude des distributions angulaires des électrons éjectés lors de la double ionisation de l'atome d'hélium de l'ion hydrogène a permis d'établir un certain nombre de résultats nouveaux :

- la section efficace multiplement différentielle dans le cas de  $H^-$  est plus grande que celle correspondant à He. Ce résultat confirme celui déjà obtenu expérimentalement sur les sections efficaces totales
- les distributions angulaires dépendent fortement de la description de l'état final et faiblement de celle de l'état initial. Ce résultat établi par Joulakian et Dal Cappello en 1993 pour He a été confirmé ici pour  $H^-$
- les distributions angulaires obtenues dans le cas de la double ionisation de  $H^-$  peuvent différer de celles obtenues pour He
- l'utilisation des fonctions corrélées de type Pluinage pour décrire l'état initial d'atomes ou d'ions de type hélium a permis d'une part de confirmer les résultats de Joulakian et Dal Cappello [1993] sur He et de réduire le temps de calcul. Ce gain de temps devrait nous permettre d'accéder aux sections efficaces sur  $H^-$  qui ont été mesurées expérimentalement.

Il nous resterait à étudier la double ionisation produite par des électrons de plus faible énergie. Dans le cas de  $H^-$ , il s'agirait de prendre en compte les effets de distorsion de trajectoire de l'électron incident (et diffusé) soumis au potentiel de l'ion  $H^-$  (respectivement  $H^+$ ) en continuant de négliger les interactions électron diffusé-électrons éjectés (on suppose encore que l'électron diffusé est bien plus rapide que chaque électron éjecté). Ensuite, il nous faudrait évaluer les probabilités des mécanismes TS1 et TS2 qui ne devraient plus être négligeables pour une énergie incidente de 1keV.

## REFERENCES

- Abramovitz M et Steigun A. I. : Handbook of Mathematical Functions, New-York : Dover (1972)
- Amaldi U., Egidi A., Marconero R. et Pizella G., Rev. Sci. Instrum **40**, 1001 (1969)
- Aubert-Frecon M. et Le Sech C., J. Chem. Phys. **74**, 2931 (1981)
- Bethe H. A. , Ann. der Phys. **5**,325 (1930)
- Bethe H. A., Ann. Physik **37**, 863 (1930)
- Bonham R. A. et Kohl D. A., J. Chem. Phys. **45**, 2471 (1966)
- Brandsen B. H. et Joachain C. J., Physics of Atoms and Molecules (Longman 1983)
- Brauner M., Briggs J. S. et Klar H., Z. Phys. D **11**, 257 (1989)
- Brauner M., Briggs J. S. et Klar H., J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **22**, 2265 (1989)
- Byron F. W., Joachain C. J., Phys. Rev. Lett. **16**, 1139 (1966)
- Byron F. W. Jr, Joachain C. J., Phys. Rev. A **164**, 1 (1967)
- Byron F. W., Joachain C. J., Phys. Report volume **179**, 213 (1989)
- Carlson T. A., Krause M. O., Phys. Rev. A **140**, 1057 (1965)
- Carlson T. A., Krause M. O., Phys. Rev. A **140**, 1655 (1965)
- Carlson T. A., Phys. Rev. **156**, 42 (1967)
- Crothers D. S. F. et Mc Carrol R., Proc. Phys. Soc. **86**, 753 (1965)
- Dal Cappello C. et Le Rouzo H., Phys.Rev. A **43**, 1395 (1991)
- Defrance P., Claeys W. et Brouillard F., J. Phys. B : At. Mol. Phys. **15**, 3509 (1982)
- Dulieu O. et Le Sech C., Z. Phys. D : At. Mol. Clus. **13**, 9 (1987)
- Ehrhardt H., Schulz M., Tekaas T. et William K., Phys. Rev. Letters **22**, 89 (1969)
- Ehrhardt H., Fischer M. et Jung K., Zeit. Phys. A **304**, 119 (1982)
- Freund D. E., Huxtable B. D. et Morgan J. D., Phys. Rev. A **29**, 980 (1984)
- Garibotti G. et Miraglia J. E. , Phys. Rev. A **21**, 572 (1980)
- Godunov A. L. , Kunikev Sh. D., Mileev V. N. et Senashenkev S. : proc 13th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions (Berlin 1983) ed. J. Eichler (Amsterdam) Abstracts p. 380
- Goldberger M. L. et Watson K. M. : "collision theory" 3rd edition by John Willey & sons, New York (1957)

Hafid H., Thèse de l'Université de Metz (1994)

Hda H., Thèse de l'Université de Metz (1994)

Hirschfelder J. O., *J. Chem. Phys.* **39**, 3145 (1963)

Hugues A. L. et Mc Millen J. H. , *Res. Rev.* **39**, 585 (1932)

Hylleraas E. A., *Z. Phys. D* **48**, 469 (1928)

Hylleraas E. A., *Z. Phys. D* **54**, 347 (1929)

Hylleraas E. A., *Z. Phys. D* **71**, 739 (1931)

Joachain J. C., *quantum collision theory* (North Holland. comp, Amsterdam) (1975)

Joulakian B., Dal Cappello C. et Brauner M., *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 2863 (1992)

Joulakian B., Dal Cappello C., *Phys. Rev A* **47**, 3788 (1993)

Kato T., *Commun. Pure Appl. Math.* **10**, 151 (1957)

Krause M. O. et Carlson T. A., *Phys. Rev.* **158**, 18 (1967)

Krause M. O., Carlson T. A. et Dismukes R. D., *Phys. Rev.* **170**, 37 (1968)

Lahmam-Bennani A. , Wellenstein H. F. , Dal Cappello C., Rouault M., Duguet A., *J. Phys. B* **16**, 2219 (1983)

Lahmam-Bennani A., Dupré C., Duguet A., *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1582 (1989)

Lahmam-Bennani A. , *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys* **24**, 2401 (1991)

Lahmam-Bennani A., Ehrhardt H., Dupré C., *J. Phys. B* **24**, 2465 (1991)

Langmuir J. J. et Jones T., *Phys. Rev.* **31**, 357 (1928)

Le Sech C., *Chem. Phys. Lett.* **200**, 369 (1992)

Massey H. S. W. et Mohr C. B. O., *Proc. Roy. Soc. A* **140**, 613 (1933)

Mc Guire J. H. et Weaver L., *Phys. Rev. A* **16**, 41 (1977)

Mc Guire J. H., *Phys. Rev. Letters* **49**, 1153 (1982)

Mc Guire J. H., *J. Phys. B* **17**, L779 (1984)

Mittleman M. H., *Phys. Rev. Letters* **16**, 498, 779 (1966)

Mittleman M. H., *Phys. Rev. Letters* **16**, 840 (1966)

Moumeni A., Dulieu O. et Le Sech C., *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **23**, L739 (1990)

Nagy P. , Skutlitz A., Schmidt V., *J. Phys. B* **13**, 1249 (1980)

Peart B. et Dolder T. K., *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **2**, 1169 (1969)

Peart B., Walton D. S. et Dolder T. K., *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **4**, 88 (1971)

Pekeris C. L. *Phys. Rev.* **112** ,1649 (1958)

Pekeris C. L. *Phys. Rev.* **115** ,1216 (1959)

Pekeris C. L. *Phys. Rev.* **126** ,1470 (1962)

- Pekeris C. L., Schiff B. et Lipson H., Phys. Rev. **126**, 1057 (1962)
- Peterkop R. K., Izv Akad Nauk Latv SSR N°9 **79**, (1960)
- Pluvinage P., J. Phys. Radium **12**, 789 (1951)
- Roothan C. C. J. et Weiss A. W., Rev.Mod. Phys.**32**, 194 (1960)
- Rudberg E. , Proc. Roy. Soc. A (London) **129**, 628 (1930)
- Rudge M. R. H. et Seaton M. J., Proc. Phys. Soc. **83**, 680 (1964)
- Rudge M. R. H. , Rev. Mod. Phys. **40**, 564 (1968)
- Schultz M. , J. Phys. B **6**, 2580 (1973)
- Shah M. B. , Elliot D. S. , Mc Callion P., Gilbody H. B., J. Phys. B **21**, 2751 (1988)
- Siebbeles L. D. A., Marshall D. P. et Le Sech C., J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **26**, L321 (1993)
- Smirnov F. Yu, Pavlitchenkov A. V., Levin V. G. et Neudatchin V. G., J. Phys. B : At. Mol. Phys. **11**, 20 (1978)
- Tweed R. J., Z. Phys. D **23**, 309 (1992)
- Vainhstein L., Presnyakov L. et Sobellman I., Sov. Phys. JETP **18**, 1383 (1964)
- Whelan C. T. , Walters H. R. J., Hanssen J., Dreizler R. M., Z. Phys. D **14**, (1989)
- Yu D. T., Rachadi S., Jureta J. et Defrance P., J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **25**, 4593 (1992)



# ANNEXES

## CALCUL DE $N(t_3)$ :

Pour calculer  $N(t_3)$ , on utilise l'intégrale

$$I = \int \frac{e^{-ar_1}}{r_1} \frac{e^{-br_2}}{r_2} e^{-\beta r_{12}} e^{-i\vec{q}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{-i\vec{q}_2 \cdot \vec{r}_2} \prod_{j=1}^2 {}_1F_1 \left[ -i\alpha_j, 1; i(k_j r_j + \vec{k}_j \cdot \vec{r}_j) \right] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

qui se ramène à :

$$I = -16\pi^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty \frac{ds}{\sigma_0} \left( \frac{\sigma_0 + \sigma_2}{\sigma_0} \right)^{i\alpha_2} \left( \frac{\sigma_0 + \sigma_1}{\sigma_0} \right)^{i\alpha_1} {}_2F_1 \left[ i\alpha_1, i\alpha_2, 1, \frac{\sigma_1 \sigma_2 - \sigma_0 \sigma_{12}}{(\sigma_0 + \sigma_2)(\sigma_0 + \sigma_1)} \right]$$

## EXPRESSION DES $\sigma$ et $\sigma'$ NECESSAIRES AU CALCUL DE L'INTEGRALE I:

$$\sigma_0 = (s^2 + 2\beta s) \left[ (a+b)^2 + (\vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2 \right] + 2s \left[ b(\beta^2 + q_1^2 + a^2) + a(\beta^2 + q_2^2 + b^2) \right]$$

$$+ [q_1^2 + (\beta + a)^2] [q_2^2 + (\beta + b)^2]$$

$$\sigma_1 = (s^2 + 2\beta s) \left[ -2i k_1 (a+b) + 2\vec{k}_1 \cdot (\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \right] + 2s \left[ 2b(\vec{q}_1 \cdot \vec{k}_1 - ia k_1) - i k_1 (\beta^2 + q_2^2 + b^2) \right]$$

$$+ 2 [q_2^2 + (\beta + b)^2] \left[ \vec{q}_1 \cdot \vec{k}_1 - i k_1 (a + \beta) \right]$$

$$\sigma_2 = (s^2 + 2\beta s) \left[ -2ik_2(a+b) + 2\vec{k}_2(\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \right] + 2s \left[ 2a(\vec{q}_2 \vec{k}_2 - ibk_2) - ik_2(\beta^2 + q_1^2 + a^2) \right] \\ + 2 \left[ q_1^2 + (\beta + a)^2 \right] \left[ \vec{q}_2 \vec{k}_2 - ik_2(b + \beta) \right]$$

$$\sigma_{12} = (s^2 + 2\beta s) \left[ 2\vec{k}_1 \vec{k}_2 - 2k_1 k_2 \right] + 2s \left[ -2ik_2(\vec{q}_1 \vec{k}_1 - iak_1) - 2ik_1(\vec{q}_2 \vec{k}_2 - ibk_2) \right] \\ + 4 \left[ \vec{q}_1 \vec{k}_1 - ik_1(a + \beta) \right] \left[ \vec{q}_2 \vec{k}_2 - ik_2(b + \beta) \right]$$

$$\sigma'_0 = \frac{d\sigma_0}{d\beta} = 2s \left[ (a+b)^2 + (\vec{q}_1 + \vec{q}_2)^2 \right] + 4\beta(b+a) + 2(\beta+a) \left[ q_2^2 + (\beta+b)^2 \right] \\ + 2(\beta+b) \left[ q_1^2 + (\beta+a)^2 \right]$$

$$\sigma'_1 = \frac{d\sigma_1}{d\beta} = 2s \left[ -2ik_1(a+b) + 2\vec{k}_1(\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \right] - 2sik_1 2\beta + 2 \times 2(\beta+b)(\vec{q}_1 \vec{k}_1 - ik_1(a+\beta)) \\ - 2ik_1 \left[ q_2^2 + (\beta+b)^2 \right]$$

$$\sigma'_2 = \frac{d\sigma_2}{d\beta} = 2s \left[ -2ik_2(a+b) + 2\vec{k}_2(\vec{q}_1 + \vec{q}_2) \right] - 2sik_2 2\beta + 4(\beta+a) \left[ \vec{q}_2 \vec{k}_2 - ik_2(b+\beta) \right] \\ - 2ik_2 \left[ q_1^2 + (\beta+a)^2 \right]$$

$$\sigma'_{12} = \frac{d\sigma_{12}}{d\beta} = 4s(\vec{k}_1 \vec{k}_2 - k_1 k_2) - 4ik_1 \left[ \vec{q}_2 \vec{k}_2 - ik_2(b + \beta) \right] - 4ik_2 \left[ \vec{q}_1 \vec{k}_1 - ik_1(a + \beta) \right]$$

### ALGORITHME DE CALCUL DE $F(a, b, c, \omega)$ :

$$F(a, b, c, \omega) = 1 + \frac{ab}{c} \omega + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)1 \cdot 2} \omega^2 + \dots$$

La série converge assez rapidement.

On utilisera cette formule lorsque  $\omega$  est très petit, afin d'avoir une convergence très rapide.

Pour un  $\omega$  quelconque, on cherche la formule de transformation tel que l'on se ramène à un  $\omega$  le plus petit possible.

on utilise :

$$F(\alpha, \beta, \gamma, \omega) = (1 - \omega)^{-\alpha} F(\alpha, \gamma - \beta, \gamma, \frac{\omega}{\omega - 1})$$

$$F(\alpha, \beta, \gamma, \omega) = \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha) \Gamma(\gamma - \beta)} F(\alpha, \beta, \alpha + \beta - \gamma + 1, 1 - \omega)$$

$$+(1 - \omega)^{\gamma - \alpha - \beta} \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} F(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma - \alpha - \beta + 1, 1 - \omega)$$

$$F(\alpha, \beta, \gamma, \omega) = (1-\omega)^{-\alpha} \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta) \Gamma(\gamma-\alpha)} F\left(\alpha, \gamma-\beta, \alpha-\beta+1, \frac{1}{1-\omega}\right)$$

$$+ (1-\omega)^{-\beta} \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma-\beta)} F\left(\beta, \gamma-\alpha, \beta-\alpha+1, \frac{1}{1-\omega}\right)$$

$$F(\alpha, \beta, \gamma, \omega) = \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(\beta) \Gamma(\gamma-\alpha)} (-1)^\alpha \omega^{-\alpha} F\left(\alpha, \alpha+1-\gamma, \alpha+1-\beta, \frac{1}{\omega}\right)$$

$$+ \frac{\Gamma(\gamma) \Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\gamma-\beta)} (-1)^\beta \omega^{-\beta} F\left(\beta, \beta+1-\gamma, \beta+1-\alpha, \frac{1}{\omega}\right)$$

Le produit des fonctions gamma se calculera en utilisant :

$$\frac{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\gamma) \Gamma(\beta-\gamma)} = \prod_{k=0}^{\infty} \left[ \left(1 + \frac{\gamma}{\alpha+k}\right) \left(1 - \frac{\gamma}{\beta+k}\right) \right]$$

Ici aussi, cette série converge rapidement.

## (e–3e) differential cross section of $H^-$ : use of Pluvinage type correlated wavefunctions

P Lamy†, C Dal Cappello†, B Joulakian† and C Le Sech‡

† Institut de Physique, Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions, Technopôle Metz 2000, Rue Arago, France

‡ Université Paris-Sud, Bâtiment 351, Laboratoire des Collisions Atomiques et Moléculaires, Orsay, France

Received 31 March 1994, in final form 20 May 1994

**Abstract.** Double ionization of helium and  $H^-$  is investigated theoretically by using correlated wavefunctions for the target and the double continuum. The results show that the differential cross section for  $H^-$  is bigger than for helium and reveal some different angular distributions. Typical experimental situations are proposed.

### 1. Introduction

The double ionization of atoms and molecules is actually the subject of an increasing number of theoretical and experimental investigations (McGuire 1982, Andersen *et al* 1986). The first measurements of the fully differential cross sections (Lahmam-Bennani *et al* 1989) on argon have shown that this kind of experiments, called (e–3e), are feasible. They consist in detecting the three outgoing electrons of the final state (one scattered and two ejected) in coincidence.

These experiments are very sensitive to the electronic correlation in the initial state (Byron and Joachain 1967, Smirnov *et al* 1978) and in the final state (Dal Cappello and Le Rouzo 1991, Joulakian *et al* 1992, Hda *et al* 1994).

The purpose of our paper is to apply the correlated double continuum wavefunction to the determination of the five-fold differential cross section (5DCS) of the double ionization of  $H^-$ .

An interesting way of looking at interelectronic correlation has been introduced by Pluvinage (1951). In his approach, the wavefunction  $\varphi$  for two electrons moving respectively in the potentials  $V_1$  and  $V_2$  and interacting through their Coulombic potential  $1/r_{12}$  can be represented with a good accuracy by a product of functions:  $\varphi = \Phi\Omega$ . The function  $\Phi$  represents the orbital motion of the two free electrons ignoring each other and  $\Omega$  is a Coulombic wavefunction describing the electronic interaction as a *mutual diffusion* due to the  $1/r_{12}$  term. Following this approach, it has been shown that an accurate function  $\varphi$  can be obtained for ground and excited states of some atoms and molecules (Pluvinage 1951, Walsh *et al* 1959, Aubert-Frecon *et al* 1981, Le Sech 1992). This idea has also been extended by Vainhstein *et al* (1964) and Crothers and McCarroll (1965) to describe the Coulombic interaction of the incoming electron with the electrons of the atomic target in the studies of electron–atom collisions. More

recently, Brauner *et al* (1989a,b) have built the wavefunction for two electrons in the continuum taking for  $\varphi$  a product of three Coulombic wavefunctions, first proposed by Garibotti and Miraglia (1980).

The originality of the present work lies in the fact that we have used correlated wavefunctions obtained by the same procedure for bound and double continua (Joulakian *et al* 1992) giving a consistent description of the initial and final states in the present problem. The particular form of these functions permits us to avoid some analytical difficulties in the determination of the basic integral.

We find that the differential cross section of  $H^-$  is bigger than that of the double ionization of helium.

## 2. Theory

We restrict our calculation to the domain of high incident energy where the fact that  $H^-$  is not neutral will have small effect on the description of the incident electron by a plane wave. We use a first-order term in the Born series of  $T$  matrix.

The double ionization of helium and  $H^-$  presents for the theorist the simplest situation because of the absence of bound electrons in the final state, but is experimentally most difficult.

For given wavevectors  $k_i, k_s, k_1, k_2$  of the incident, scattered and the two ejected electrons respectively, the SDCS will be given (in atomic units) by

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 d(\frac{1}{2}k_1^2) d(\frac{1}{2}k_2^2)} = \frac{(2\pi)^4 k_s k_1 k_2}{k_i} |T_f|^2$$

where the  $\Omega$  and the  $k$  represent, respectively, the solid angles and the moduli of the different wavevectors. The conservation of energy imposes

$$\frac{1}{2}k_i^2 = I^{2+} + \frac{1}{2}k_s^2 + \frac{1}{2}k_1^2 + \frac{1}{2}k_2^2$$

where  $I^{2+}$  represent the energy for double ionization.

$T_f$  represents the  $T$ -matrix element given by  $r_1$  and  $r_2$

$$T_f = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle$$

where the integration runs over all space and spin coordinates.

Here  $V$  represents the interaction between the incident electron designated by  $r_0$  and the atomic ones designated by  $r_1$  and  $r_2$ :

$$V = -\frac{Z}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \quad \text{where } Z=2 \text{ for helium and } Z=1 \text{ for } H^-$$

and  $r_{ij} = |r_i - r_j|$ .

$\Psi_f$  and  $\Psi_i$  represent the wavefunctions describing the whole system in its final and initial states respectively.

In the experiments of Lahmam-Bennani *et al* (1989) and Ford *et al* (1993), very high energies (5 keV and 3.6 keV) are used for the incident electron. In these cases, a plane wave description of the colliding electron is justified.

### 1. The initial state wavefunction

The initial state, which consists of the incident electron and the bound electrons, will be described by the product of a plane wave describing the incident electron and a correlated Pluinage type wavefunction describing the two bound ones:

$$|\Psi_i\rangle = \left| \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0}}{(2\pi)^{3/2}} \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle.$$

The underlying mathematical approach in the determination of correlated wavefunction  $\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , i.e. having an explicit dependence upon the interelectronic distance  $r_{12}$ , following Pluinage (1951), is the concept of semi-separability of the Schrödinger equation. For some special potentials,  $V_1$ ,  $V_2$  and  $V_{12}$ , the Schrödinger equation is said to be semi-separable if one can solve exactly the two equations below:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_1 + V_1 + V_2\right)\Phi_n = \epsilon_n \Phi_n \quad \left(-\frac{1}{2}\Delta_1 + V_{12}\right)\Omega(r_{12}) = k^2 \Omega(r_{12}).$$

In this case, the wavefunction  $\varphi$ , having appropriate boundary conditions, can be deduced with a good accuracy as a product of  $\Phi_n$  and  $\Omega$ . Following these ideas, we wrote down the wavefunction for helium and H<sup>-</sup> in the present work as

$$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N(1 + B e^{-\beta r_{12}}) \left[ \frac{\sinh \lambda r_1}{\lambda r_1} \frac{\sinh \lambda' r_2}{\lambda' r_2} + \frac{\sinh \lambda r_2}{\lambda r_2} \frac{\sinh \lambda' r_1}{\lambda' r_1} \right] e^{-z r_1} e^{-z r_2}.$$

Details for the explicit determination of the function  $\varphi$  are given by Moumeni *et al* (1990) and Siebbeles *et al* (1993). One can check that the function  $\varphi$  fulfils the cusp conditions of Kato (1957) and gives an energy  $E = -2.899$  au for the ground state of helium and  $E = -0.524$  au for the ground state of H<sup>-</sup>.

### 2.2. The final state wavefunction

We will consider situations where the scattered electron is always fast (about 5 keV) and the ejected electrons leave the atom with small energies (from 5 to 30 eV).

The scattered electron will be described by a plane wavefunction, as the incident electron and the two ejected electrons by the correlated double continuum BDK wavefunction (Brauner *et al* 1989a,b, Joulakian *et al* 1992) in its general form orthogonalized with respect to the initial state wavefunction  $\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ :

$$\langle \Psi_f | = \left\langle \frac{e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}_0}}{(2\pi)^{3/2}} \langle \Phi_f | - \langle \Phi_f | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \right| \quad \text{with } \langle \Phi_f | = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \varphi_f(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) |$$

where  $\varphi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = M e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  and

$$\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \prod_{j=1}^2 \int_0^\infty {}_1F_1[i\alpha_j, 1; -i(k_j r_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)] {}_1F_1[i\alpha_{12}, 1; -i(k_{12} r_{12} + \mathbf{k}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12})].$$

The constant  $M$  is

$$M = \exp\left[-\frac{1}{2}\pi(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_{12})\right] \Gamma(1 - i\alpha_1) \Gamma(1 - i\alpha_2) \Gamma(1 - i\alpha_{12}) / (2\pi)^3$$

where  $\alpha_1 = -Z/|\mathbf{k}_1|$ ,  $\alpha_2 = -Z/|\mathbf{k}_2|$ ,  $\alpha_{12} = 1/|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$  with  $Z = 2$  for helium and  $Z = 1$  for H<sup>-</sup>.

Replacing the terms defined above in the equation for  $T_f$  and performing the integration over  $r_0$  using Bethe's result

$$\frac{e^{ik \cdot r_0}}{k^2} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik \cdot r}}{|r - r_0|} dr$$

we can write

$$T_f = \frac{1}{2\pi^2 k^2} [\langle \Phi_f | e^{ik \cdot r_1} + e^{ik \cdot r_2} | \varphi_i(r_1, r_2) \rangle - Z(k) \langle \Phi_f | \varphi_i(r_1, r_2) \rangle]$$

with  $k = k_1 - k_2$ , and

$$Z(k) = \langle \varphi_i(r_1, r_2) | e^{ik \cdot r_1} + e^{ik \cdot r_2} | \varphi_i(r_1, r_2) \rangle$$

$$T_f = A \left\{ -Z(k)[G(k_1, k_2) + G(k_2, k_1)] + [G(k - k_1, k_2) + G(k - k_2, k_1)] \right. \\ \left. + [G(k_1, k - k_2) + G(k_2, k - k_1)] \right\}$$

$G(k_1, k_2)$  can be given in terms of the following basic integral:

$$I(a, b, k_1, k_2, \beta) = \int \frac{e^{-ar_1}}{r_1} \frac{e^{-br_2}}{r_2} e^{-\beta r_{12}} e^{-ik_1 \cdot r_1} e^{-ik_2 \cdot r_2} \chi^*(r_1, r_2) dr_1 dr_2.$$

We obtain:

$$G(k_1, k_2) = B \left[ \begin{array}{l} I(c_1, c_2, k_1, k_2, \beta) + I(c_1, c_3, k_1, k_2, \beta) \\ + I(c_3, c_2, k_1, k_2, \beta) + I(c_3, c_4, k_1, k_2, \beta) \\ + I(c_2, c_1, k_1, k_2, \beta) + I(c_3, c_1, k_1, k_2, \beta) \\ + I(c_2, c_3, k_1, k_2, \beta) + I(c_4, c_3, k_1, k_2, \beta) \end{array} \right] \\ + \left[ \begin{array}{l} I(c_1, c_2, k_1, k_2, 0) + \dots \\ I(c_2, c_1, k_1, k_2, 0) + \dots \end{array} \right]$$

with  $c_1 = Z - \lambda$ ,  $c_2 = Z - \lambda'$ ,  $c_3 = Z + \lambda$ ,  $c_4 = Z + \lambda'$ .

Following Brauner *et al* (1989a,b), we write the basic integral in the form

$$I(a, b, k_1, k_2, \beta) = N(0) + \frac{\sinh(\pi a_{12})}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{e^y}{1 + e^y} e^{ia_{12}y} [N(y) - N(0)]$$

In our case,

$$N(y) = -16\pi^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty ds f(s) {}_2F_1[ia_1, ia_2, 1, q]$$

presents only one derivation instead of three. Here  $f(s)$ ,  $q$ ,  $s$  have been defined Brauner *et al* (1989).



### 3. Results

We have restricted ourselves to the coplanar geometries in the conditions of the Orsay experiments of high incident energy (5 keV). We specify the directions of the different wavevectors by the angles which they form with the incident electron direction.

As a first verification, we have obtained the sDCS of He which has the same angular distribution as Joulakian *et al* (1992) who use Hylleraas type wavefunction.

In figures 1 and 2, we give the sDCS of the double ionization of  $H^-$  in the cartesian representation, where the ejection angle  $\theta_2$  is taken as the variable. Here, the first outgoing electron comes out respectively in a direction parallel or anti-parallel to the momentum transfer  $k = k_1 - k_2$  ( $\theta_1 = \theta_k$  or  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$ ).

The domain of energy for the detection of the two ejected electrons is quite large (1–100 eV) but we have observed that for ejection energy values of the order of 25 eV, the sDCS is  $10^{-3}$  smaller than if the ejection energy values are of the order of 2 eV. But we must note that for very small energy, we are at the limit of our model and also we examine typical situations, where the energies are equal ( $E_1 = E_2 = 15$  eV or 10 eV) and unequal ( $E_1 = 5$  eV,  $E_2 = 25$  eV or 15 eV).

When we examine figure 1, we can observe that the sDCS is biggest if: (i) the energies of the two electrons are small, (ii) the energies of the electron ejected are different.

It is also interesting to note that the probability of the ejection of the two electrons is maximal in a direction perpendicular to the momentum transfer (if  $\theta_1 = \theta_k$ ) for equal energies but maximal in a direction opposite to the momentum transfer for unequal energies.

The case of  $\theta_1 = \theta_k + 180^\circ$  is interesting too (figure 2). We observe three peaks in a direction parallel and perpendicular to the momentum transfer.

In figures 3 and 4, we make the same calculations with He. We can note (figure 3(b) and (d)) that if we consider the case of the first electron outgoing in a direction parallel to the momentum transfer, the second electron is ejected in a direction antiparallel to the momentum transfer (as for the case of  $H^-$ , figure 1(b) and (d)) and has some possibilities to be ejected in a direction almost perpendicular. Figure 4 exhibits other differences when compared with figure 2. These results show that the double ionization of  $H^-$  and He can lead to different angular distributions.

In figures 5 and 6, we have done some calculations with an uncorrelated initial wavefunction (without the term  $e^{-\beta r_{12}}$ ) for typical situations with He and  $H^-$ . As a matter of fact, we see no large difference when comparing to the results given by a correlated wavefunction for the initial state, except for  $H^-$  (figure 5(b)) where some new peaks appear.

In figure 7, we compare the BBK wavefunction with a function described by two hypergeometric functions and with an approximated BBK wavefunction. We consider here a typical situation for the double ionization of He and  $H^-$ . We can see that the wavefunction with two hypergeometric functions does not give the same direction and that the approximated BBK wavefunction gives approximately the same direction but not the same amplitude. This result agrees with preliminary results found by Joulakian and Dal Cappello (1993): the angular distribution given by the sDCS depends strongly on the description of final state and slightly on those of the initial state.

In figures 8 and 9, we consider the case of  $\theta_1$  and  $\theta_2$  variable and  $E_1 = 10$  eV,  $E_2 = 10$  eV,  $\theta_k = 0.5^\circ$ . We give the sDCS and we can observe the maximal probability for a detection of the two outgoing electrons: see table 1.

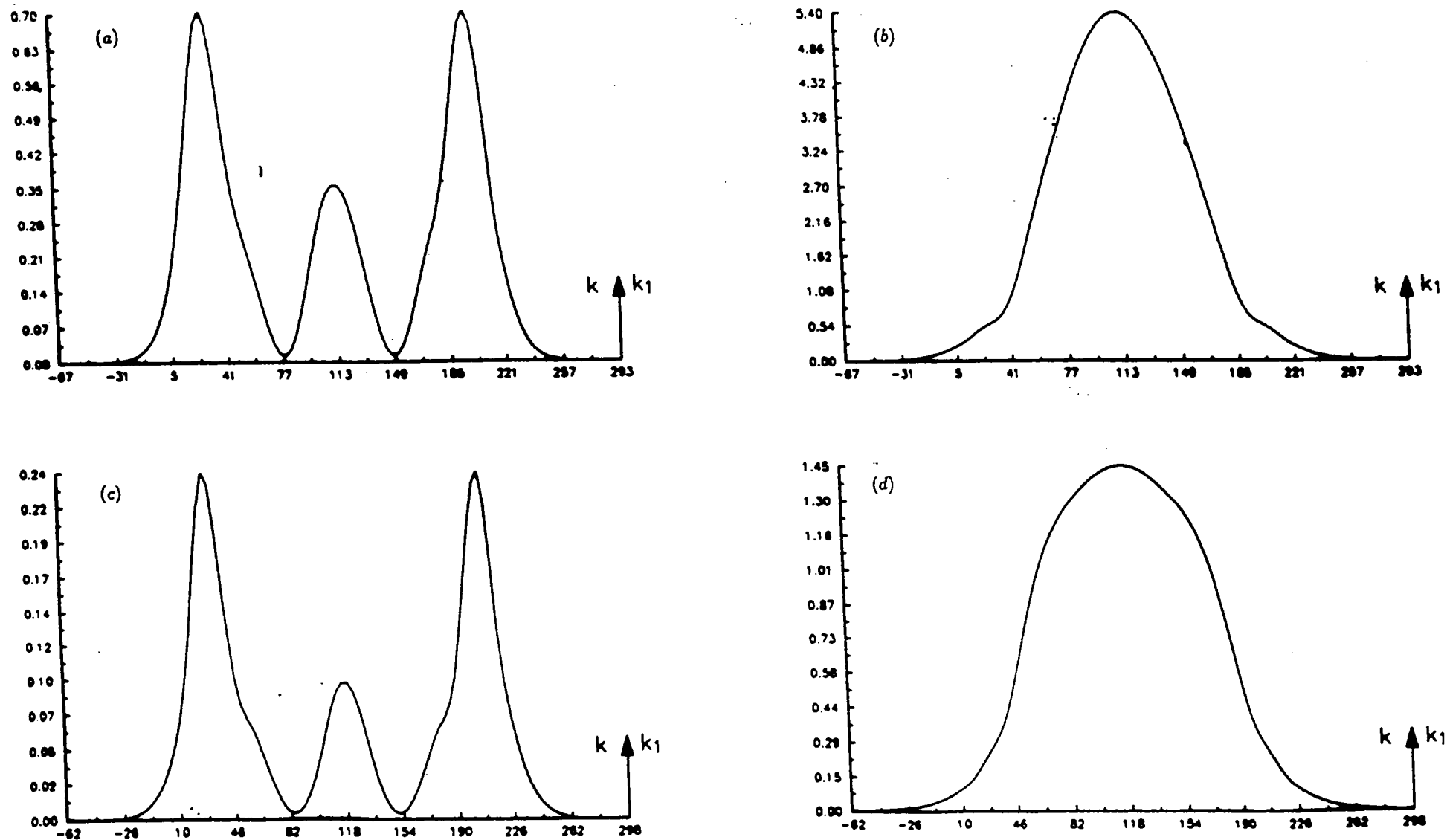
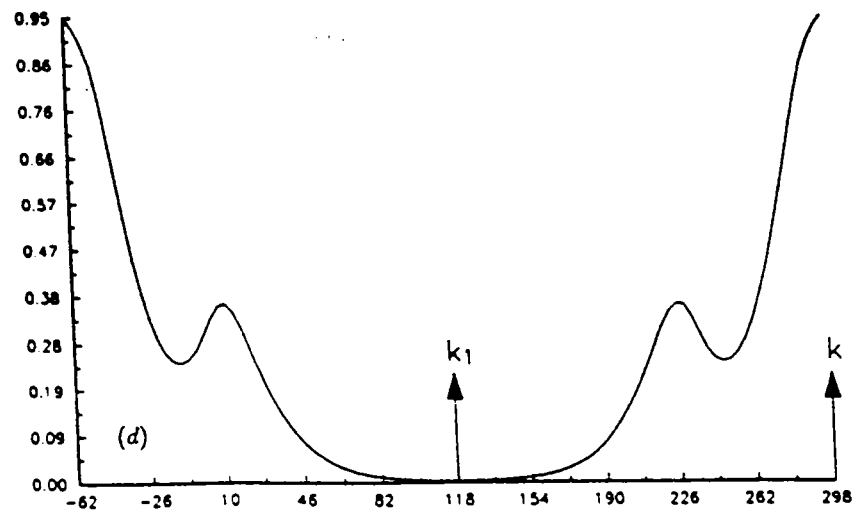
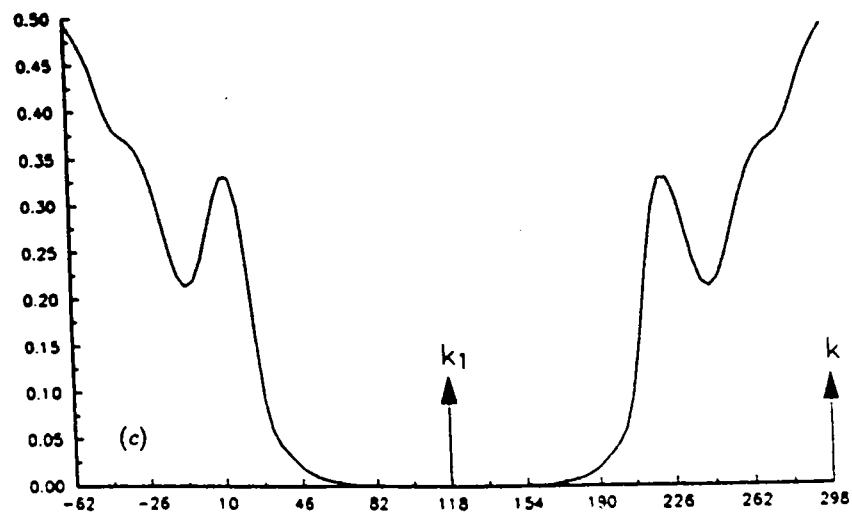
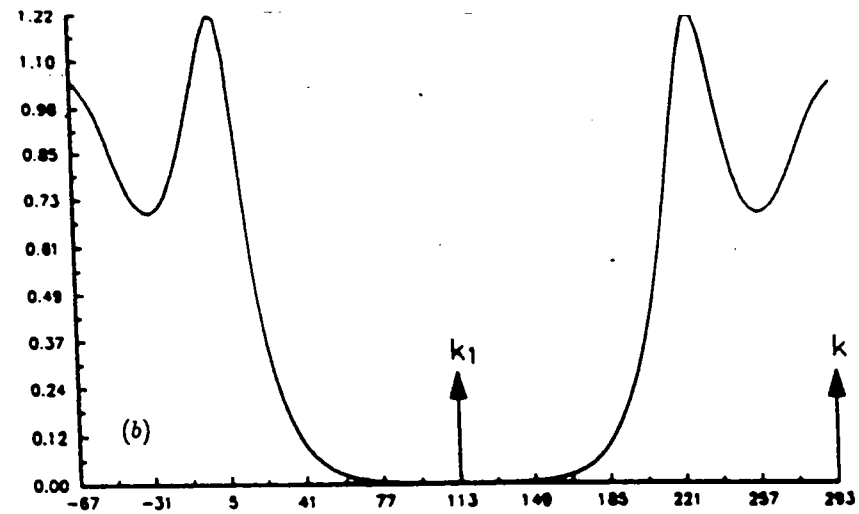
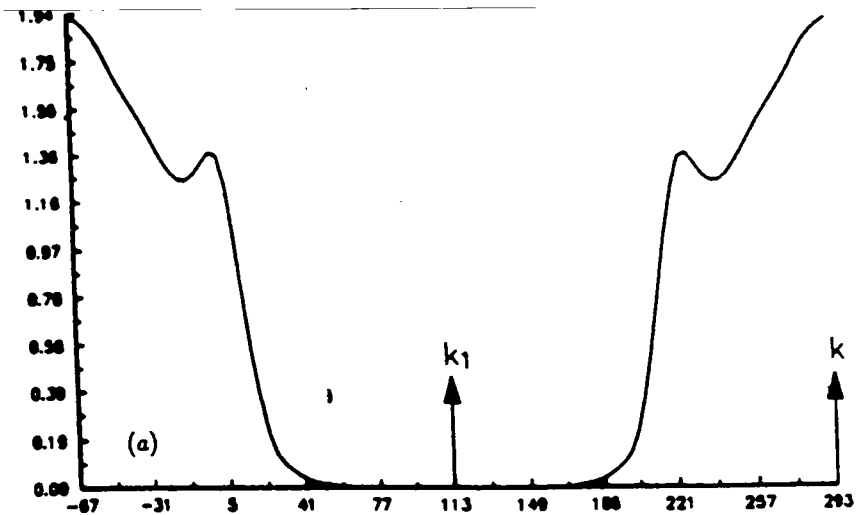


Figure 1. The SDCS of the double ionization of  $H^-$  in terms of the ejected electron angle  $\theta_2$  for different values of the ejection energies with  $k_1$  parallel to  $k$ , the momentum transfer. The incident electron energy is fixed at 5 keV. (a)  $E_1 = E_2 = 10$  eV; (b)  $E_1 = 5$  eV,  $E_2 = 15$  eV; (c)  $E_1 = E_2 = 15$  eV; (d)  $E_1 = 5$  eV,  $E_2 = 25$  eV.



*(e-3e) differential cross section of H<sup>-</sup>*

Figure 2. Same as figure 1 with  $k_1$  antiparallel to  $k$ .

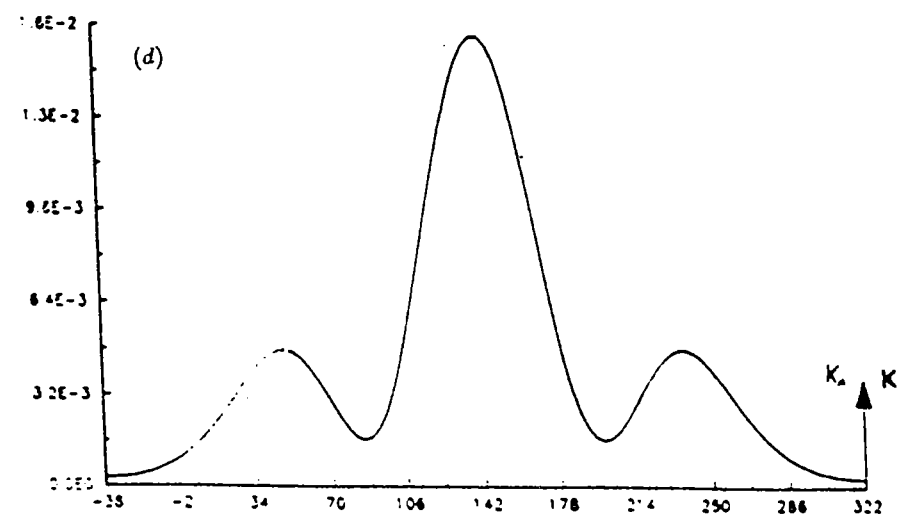
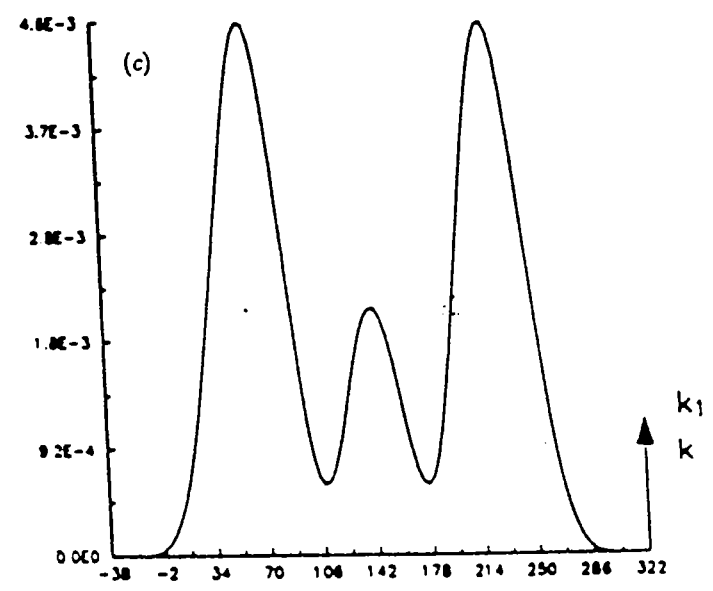
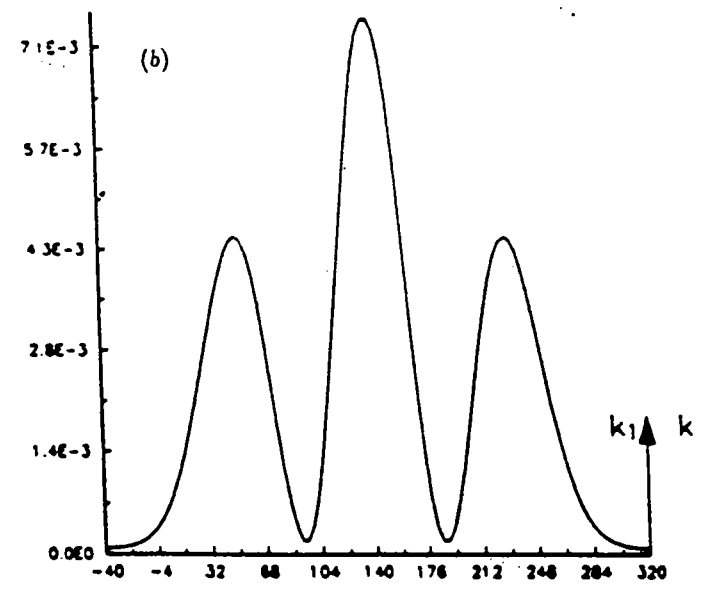
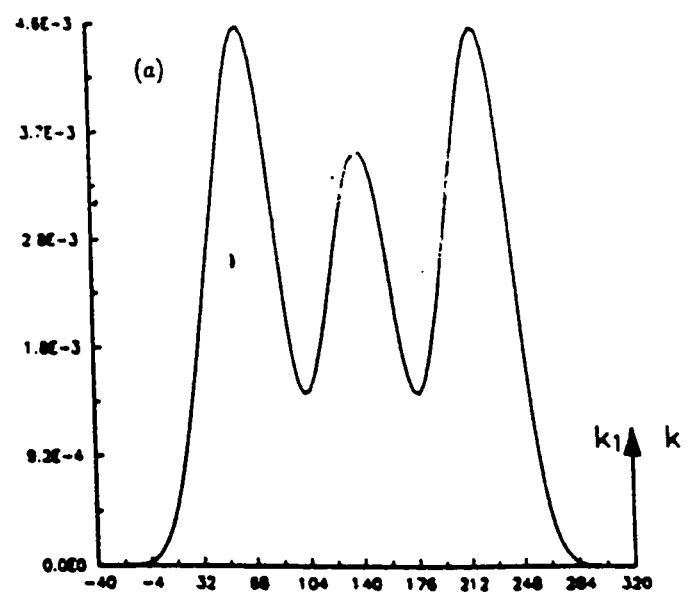


Figure 3. Same as figure 1 but for the double ionization of He.

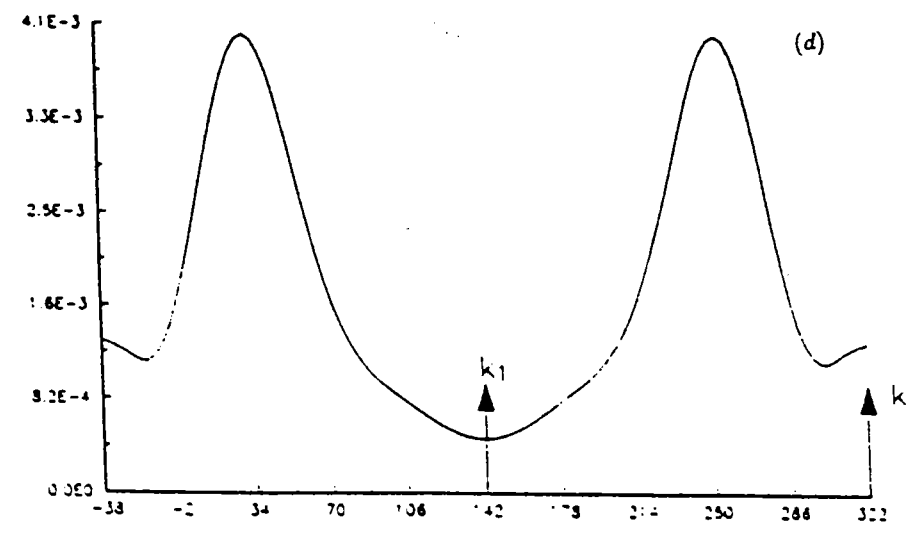
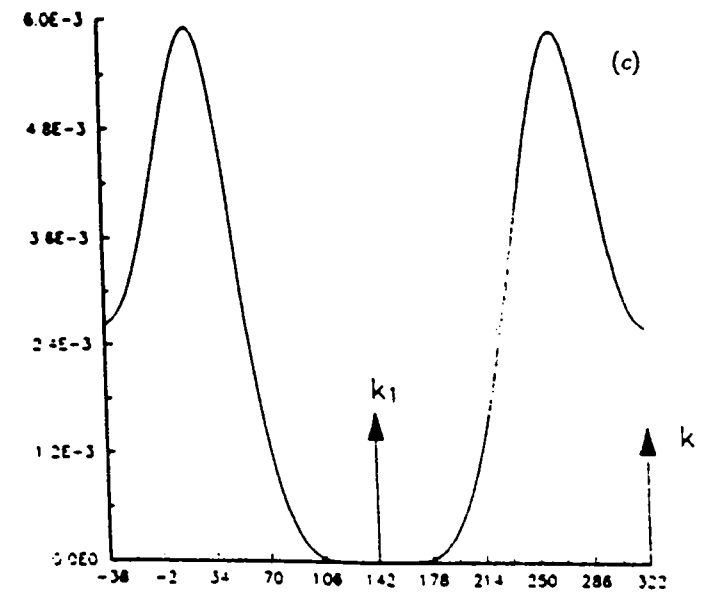
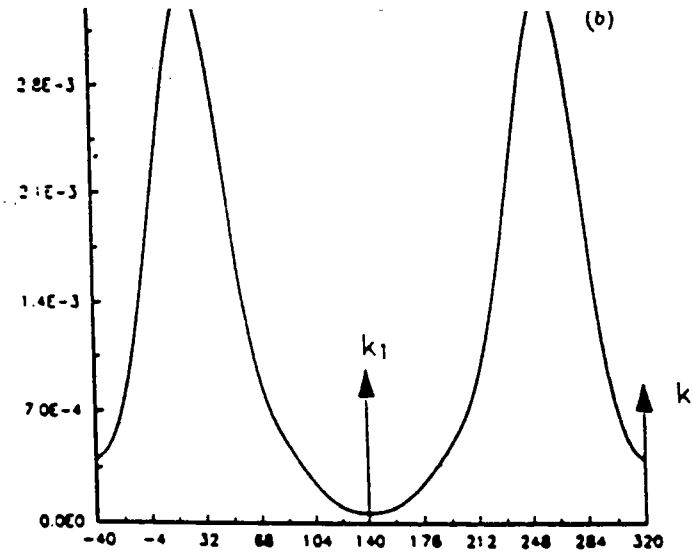
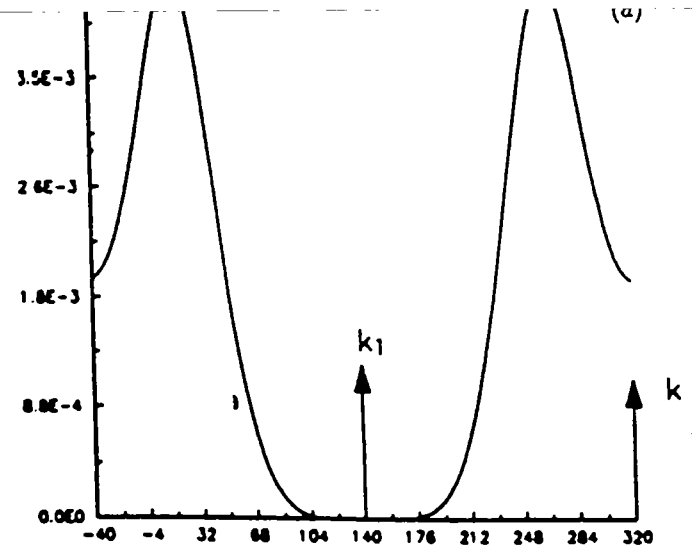


Figure 4. Same as figure 2 but for the double ionization of He.

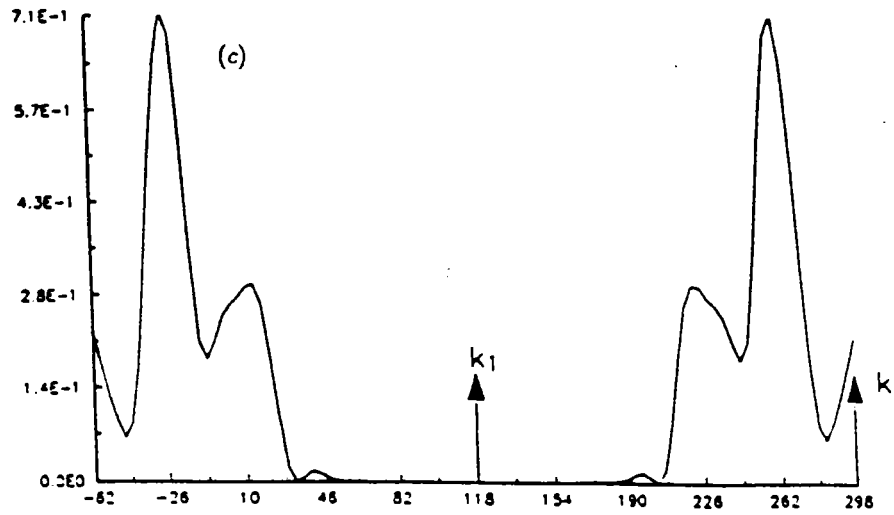
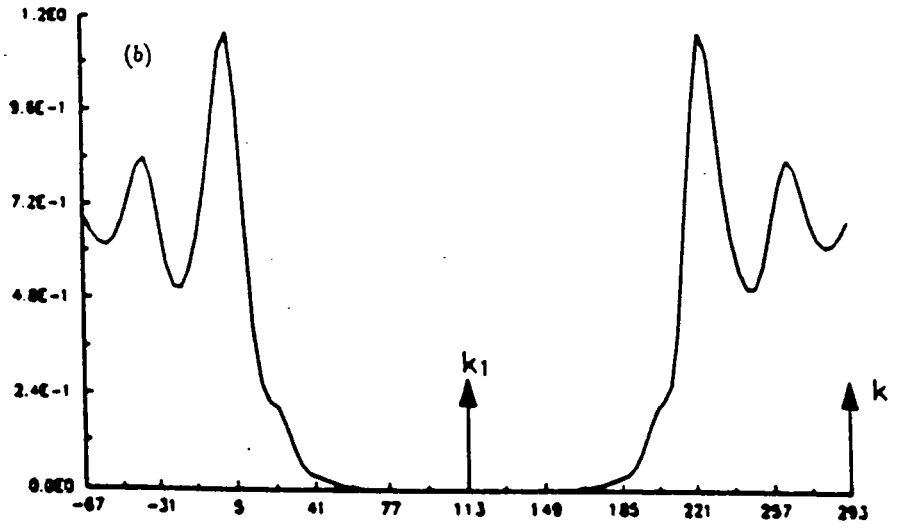
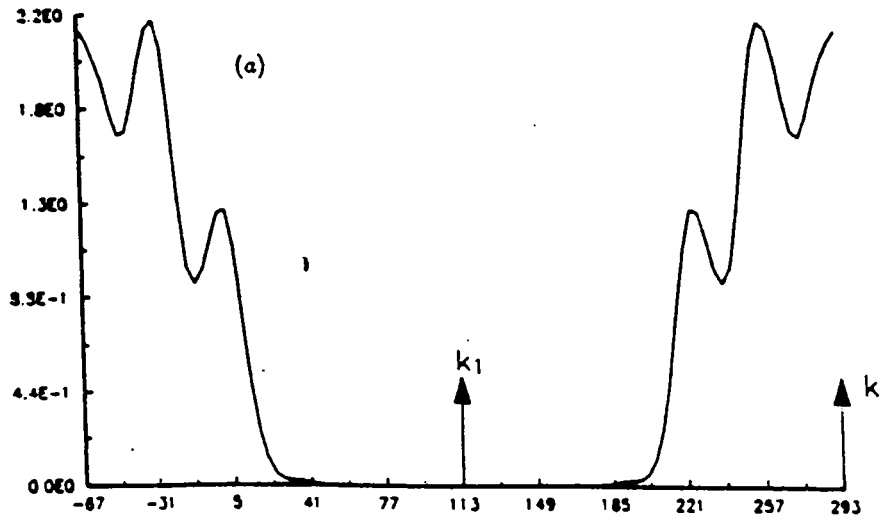


Figure 5. Same as figure 2 with an uncorrelated initial wavefunction.

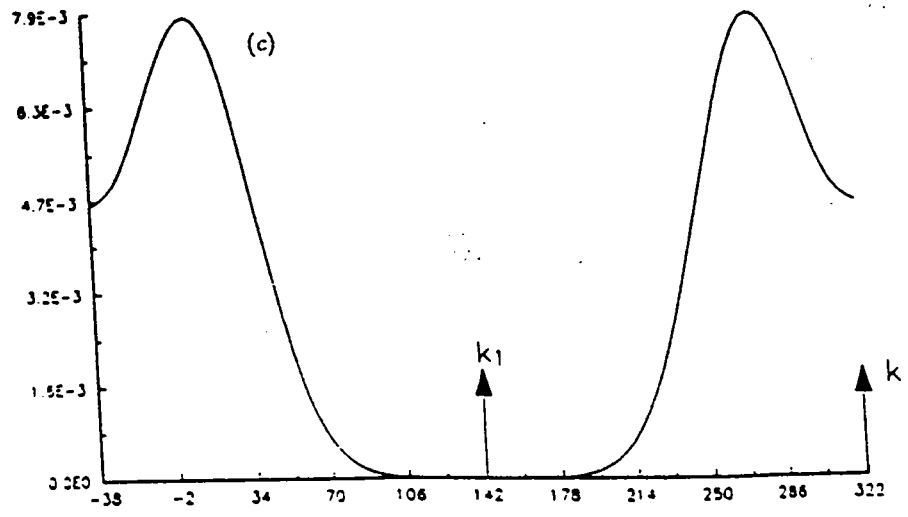
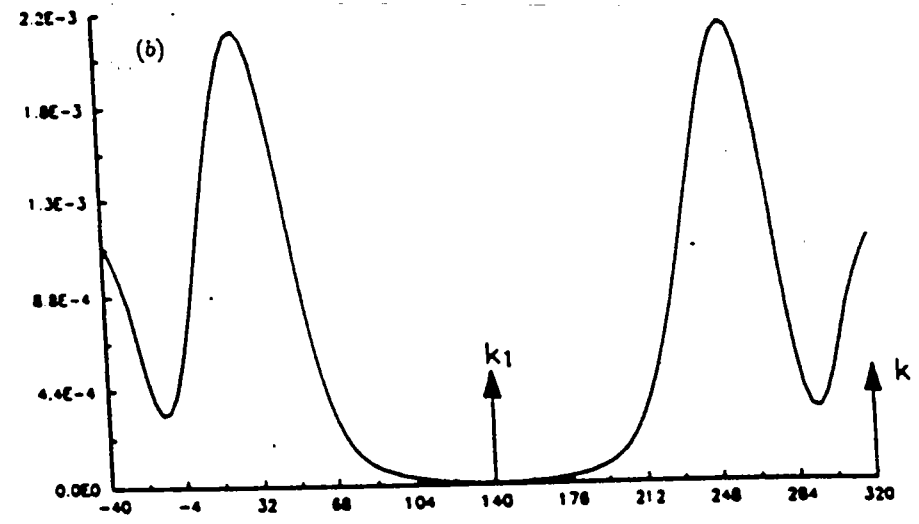
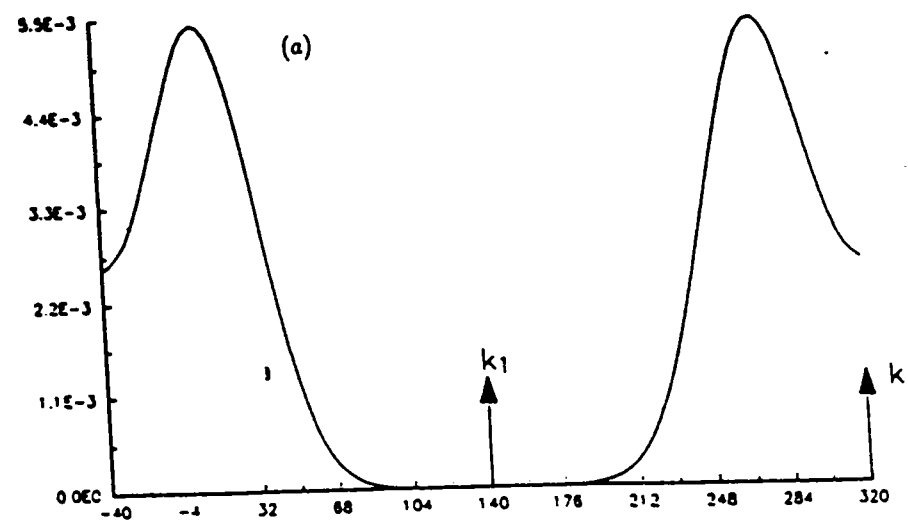


Figure 6. Same as figure 5 but for the double ionization of He.

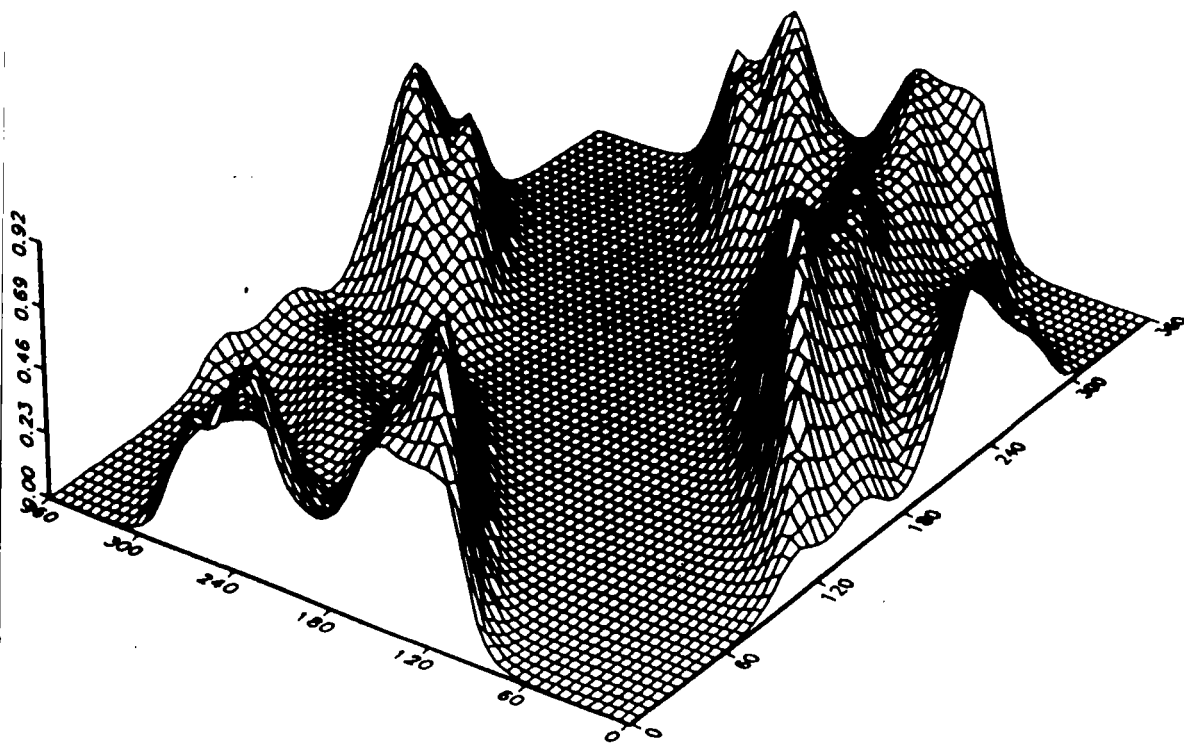


Figure 8. The SDCS of the double ionization of  $H^-$  in terms of two ejection angles,  $\theta_1$  and  $\theta_2$  for fixed ejection energies  $E_1 = 10$  eV,  $E_2 = 20$  eV and scattering angle  $\theta_s = 0.5^\circ$ .

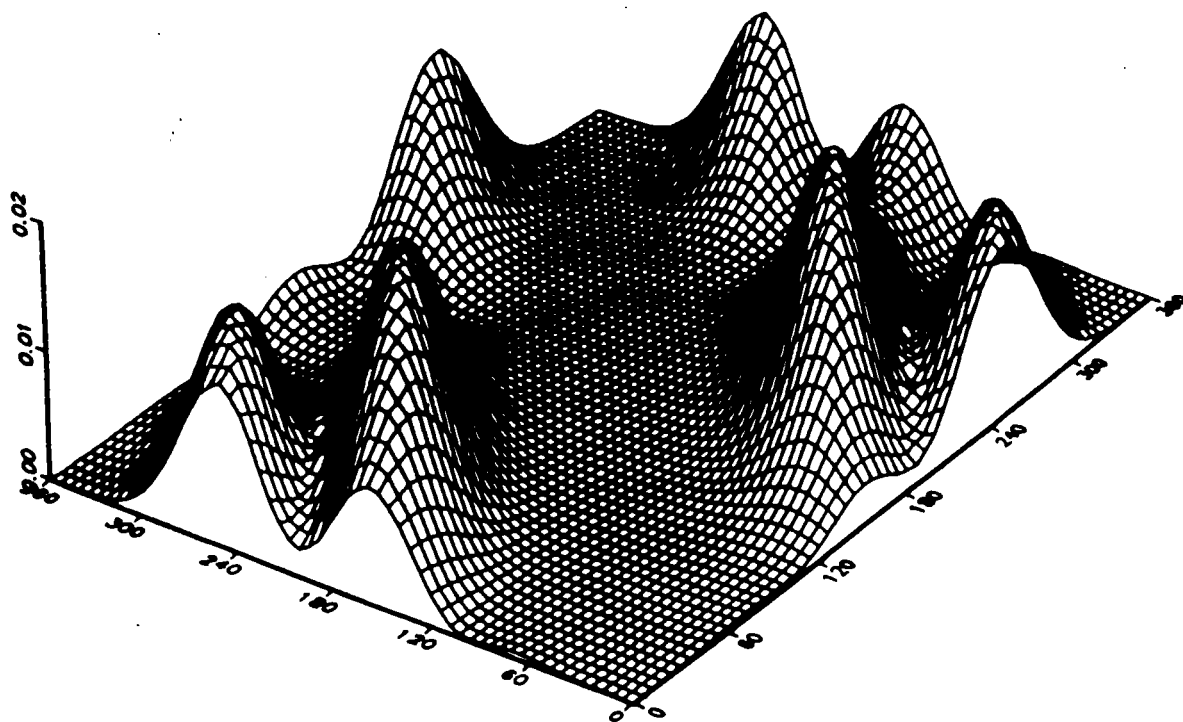
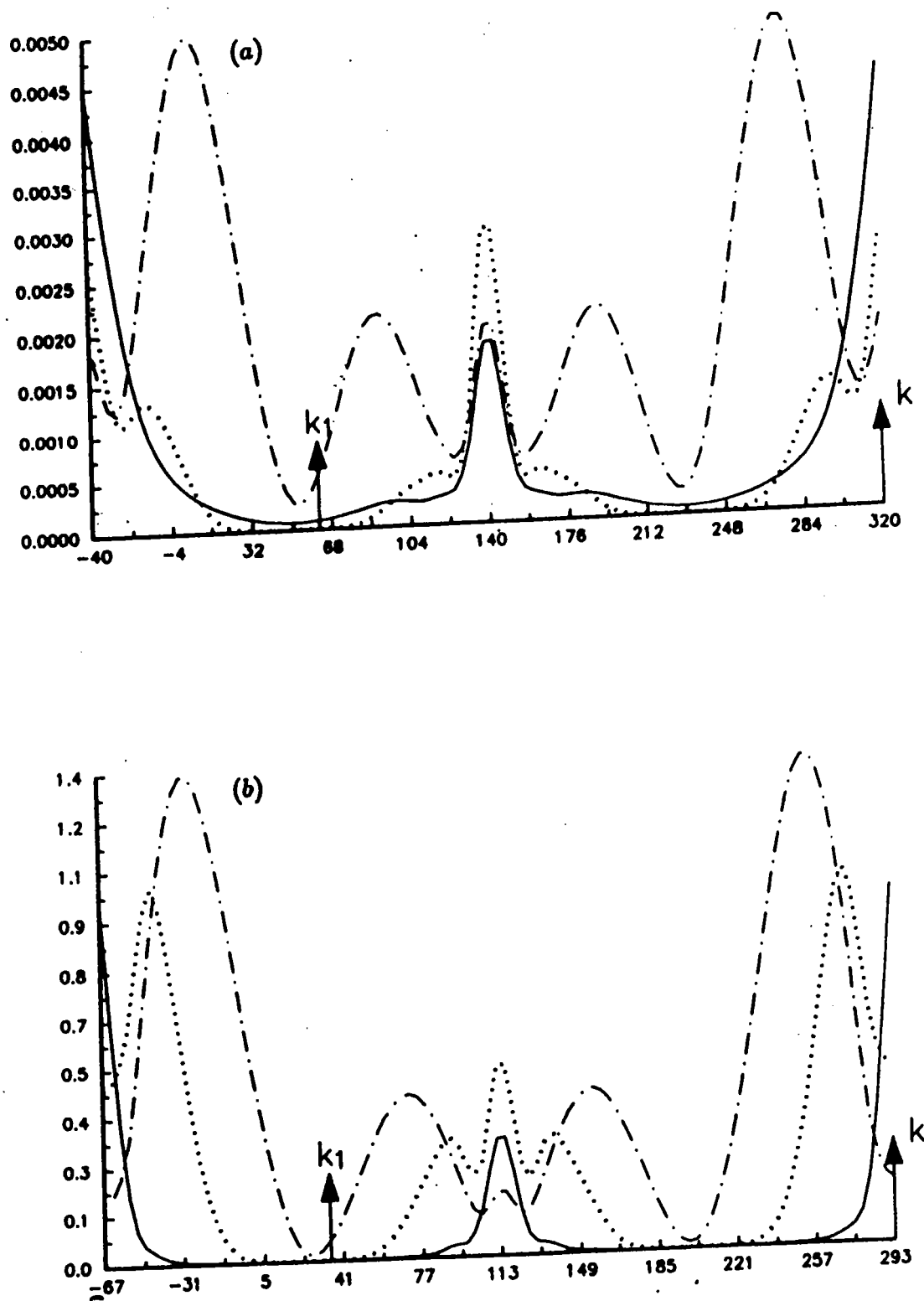


Figure 9. Same as figure 8 but for the double ionization of He.

### Conclusion

We have here performed first Born calculations using correlated initial state wavefunctions together with correlated double continuum wavefunctions. We have determined the space regions for which an experimental detection of the double ionization with a fast electron is maximal.





**Figure 7.** The SDCs of the double ionization of He and  $H^-$ , with  $k_1$  perpendicular to  $k$ , for fixed ejection energies  $E_1 = 5$  eV,  $E_2 = 15$  eV and scattering angle  $\theta_s = 0.5^\circ$ . (a) He: comparison between the BVK wavefunction (full curve) and the two hypergeometric wavefunctions (broken curve,  $\times 10$ ) and the approximated BVK wavefunction (dotted curve,  $\times 500$ ). (b)  $H^-$ : comparison between the BVK wavefunction (full curve) and the two hypergeometric wavefunctions (broken curve,  $\times 100$ ) and the approximated BVK wavefunction (dotted curve,  $\times 10000$ ).

