



**HAL**  
open science

# Etude des processus d'ionisations (e,2e), (e, 3e) et ([gamma], 2e) des systèmes atomiques à deux électrons

Bennaceur Najjari

► **To cite this version:**

Bennaceur Najjari. Etude des processus d'ionisations (e,2e), (e, 3e) et ([gamma], 2e) des systèmes atomiques à deux électrons. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1997. Français. NNT : 1997METZ053S . tel-01777232

**HAL Id: tel-01777232**

**<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01777232>**

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>

N° d'ordre :

S/MZ  
~~97/104~~

# THÈSE THÈSE

PRÉSENTÉE À PRÉSENTÉE À

L'UNIVERSITÉ DE METZ

POUR L'OBTE

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE METZ

PAR

**Bennaceur NAJJARI**

Étude des processus d'ionisations  $(e,2e)$ ,  $(e,3e)$  et  $(\gamma,2e)$  des  
systèmes atomiques à deux électrons

Soutenue le 9 décembre 1997, devant la Commission d'Examen :

O. ROBAUX, Professeur à l'Université de Brest

rapporteur

A. LAHMAM-BENNANI, Professeur à l'Université  
de Paris-sud (Orsay)

rapporteur

P. BERTRAND, Professeur à l'Université de Nancy I

examinateur

B. JOULAKIAN, Professeur à l'Université de Metz

examinateur

C. TAVARD, Professeur à l'Université de Metz

Directeur de Thèse.

– 1997 –

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 177458 0

216590

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	1997/1105
Cote	S/M3 97/53
Loc	Magasin

## Table des matières

**Introduction** ..... 1

### 1 Elément de théorie des collisions

1.1 Introduction ..... 7

1.2 Formalisme opératoire : opérateurs de symétrie ..... 8

1.2.1 Opérateur déplacement ( translation spatiale ) ..... 9

1.2.2 Opérateur d'évolution ( déplacement dans le temps ) ..... 10

1.2.3 Opérateur d'évolution en représentation d'interaction ..... 10

1.3 Préparation de l'état initial ..... 13

1.3.1. Description du mouvement d'une particule isolée ..... 13

1.3.2 Construction du paquet d'onde ..... 15

1.4 Intégration de l'équation de Schrödinger pour un processus de diffusion ..... 17

1.4.1 Description de l'interaction ..... 17

1.4.2 Fonction d'onde dépendante du temps ..... 18

1.4.3 Fonction d'onde indépendante du temps ..... 20

1.4.4 Préparation de l'état final ..... 22

1.5 Matrice de diffusion ..... 22

1.6 Développement de Born ..... 24

1.7 Probabilité de Transition : Matrices S et T ..... 25

1.8 Sections efficaces de diffusion ..... 28

1.9 Forme asymptotique de la fonction d'ondes et amplitude de diffusion ..... 28

1.10 Sections efficaces d'ionisations ..... 30

1.10.1 Sections efficaces différentielles simples ..... 31

1.10.2 Sections efficaces différentielles doubles ..... 32

1.10.3 Sections efficaces différentielles triples ..... 33

1.10.3.1 Section efficace différentielle triple en  $(e,2e)$  ..... 33

1.10.3.2 Section efficace différentielle triple pour un processus de photo double ionisation ..... 34

1.10.4 Sections efficaces différentielles quadruples ..... 34

1.10.5 Sections efficaces différentielles quintuples  $(e,3e)$  ..... 35

1.11 Diffusion par des particules identiques ..... 36

1.11.1 Opérateurs de permutations ..... 36

1.11.2 Constructions de fonctions d'ondes symétrisées ..... 38

1.11.3 Evaluation de la section efficace de diffusion (effets d'échange) ..... 39

a) Géométrie coplanaire asymétrique .....	89
b) Géométries symétriques.....	90
3.4 Résultats et discussios .....	90
3.4.1 Hautes énergies ( $E_0 \geq 600 \text{ eV}$ ).....	91
a) Grand transfert d'impulsion (régime impulsional).....	91
b) Faible transfert d'impulsion (régime dipolaire).....	94
3.4.2 Energies intermédiaires ( $100 \text{ eV} \leq E_0 \leq 600\text{eV}$ ) .....	97
a) Cinématiques asymétriques.....	97
b) Cinématiques symétriques .....	108
3.4.3 Basses énergies ( $26 \text{ eV} \leq E_0 \leq 105 \text{ eV}$ ).....	111
a) Cinématiques asymétriques.....	111
b) Cinématiques symétriques .....	117
3.5 Conclusion .....	121
<b>4 Processus de double ionisation par impact d'électrons et de photons</b>	
4.1 Introduction.....	123
4.2 Double ionisation par impact électronique.....	125
4.2.1 Section efficace différentielle quintuple (e,3e).....	125
4.2.2 Résultats (e,3e).....	128
4.2.3 Sections efficaces différentielles quadruples (e,3-1e).....	147
a- (e,3-1e) de première espèce.....	147
b- (e,3-1e) de deuxième espèce.....	147
4.2.4 Résultats (e,3-1e) 2ème espèce.....	148
4.3 Photo double ionisation (PDI) .....	156
4.3.1 Résultats de ( $\gamma,2e$ ) .....	157
4.4 Conclusion .....	161
<b>Conclusion générale</b> .....	163
<b>Références</b> .....	167
<b>Annexes</b> .....	173

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

2.1 Introduction.....	43
2.2 Antisymétrisation des fonctions d'ondes d'un système à deux électrons.....	43
2.3 Etat fondamental .....	45
2.3.1 Méthodes d'approximations.....	46
2.3.2 Application au problème des systèmes héliumoïdes.....	48
A) Normalisation de la fonction d'onde.....	50
B) Calcul des éléments de matrice de H.....	51
2.3.3 Autres approximations.....	55
2.3.4 Comportement angulaire des deux électrons.....	57
2.4 Description du double continuum.....	59
2.4.1 Modèle de deux ondes coulombiennes .....	61
2.4.2 Correction de la répulsion entre les deux électrons.....	63
2.4.2.1 Charges effectives.....	63
2.4.2.2 Approches semi-classiques.....	64
a) Approximation WKB.....	64
b) Approximation iconale .....	65
c) Série de Glauber.....	67
2.4.2.3 Application au problème d'ionisation de l'atome d'hélium .....	68
2.4.2.4 Modèle de trois ondes coulombiennes (3C).....	70
2.4.2.5 Extension du modèle (3C) de Merkuriev- Redmond.....	73
a) Approximation AM : Alt et Mukhamedzhanov (1993) .....	74
b) Approximation DS3C : Berakdar (1996) .....	75
c) Simplification du modèle DS3C.....	77
2.5 Conclusion .....	77

## 3 (e,2e) à haute, intermédiaire et basse énergie pour l'atome d'hélium

3.1 Introduction.....	79
3.2 Description d'une réaction (e,2e).....	80
3.2.1 Avant la collision.....	81
3.2.2 Après la collision.....	83
3.3 Section efficace différentielle triple .....	84
3.3.1 Calcul de l'élément de matrice $T_f$ .....	85
3.3.2 Géométries et cinématiques de la réaction.....	89

# Introduction

L'analyse des informations qu'apporte la physique des interactions collisionnelles entre particules joue un rôle central dans l'étude, à l'échelle microscopique, de la structure de la matière. Les informations les plus détaillées sur ces interactions relèvent des expériences de diffusion.

L'un des aspects les plus importants de la physique des collisions concerne l'étude de l'ionisation simple ou multiple des systèmes atomiques ou ioniques. Cette ionisation par impact électronique ou photonique a connu des développements considérables depuis les travaux de Niels Bohr (1913 et 1915) dans le cadre d'une théorie classique, puis par Hans Bethe (1930) dans un cadre quantique. Les travaux de ces précurseurs ont été suivis d'une multitude de travaux théoriques et expérimentaux, touchant à un nombre important de disciplines telles que l'astrophysique, la physique des plasmas dans l'étude de la fusion thermonucléaire, l'étude des conséquences d'une irradiation sur les cellules vivantes... et qui impliquent généralement la connaissance des sections efficaces associées.

Les développements expérimentaux ont commencé il y a soixante-dix ans avec Langmuir et Jones (1928), puis Rudberg (1930). Ces auteurs se sont intéressés plus particulièrement à l'analyse de la dépendance en énergie (incidente) des sections efficaces totales. Deux années plus tard Hughes et McMillan (1932) ont pu mesurer les distributions en angle et en énergie des électrons diffusés.

Le sujet n'a ensuite que lentement évolué en raison des difficultés liées à l'expérience. L'étude systématique des processus de simple ionisation n'a commencé qu'avec Ehrhardt *et al* (1969) par les premières mesures des sections efficaces triplement différentielles

d'ionisation de l'atome d'hélium, et simultanément par Amaldi *et al* (1969) sur l'ionisation du carbone. Ces auteurs ont pu détecter en coïncidence les deux électrons provenant de la même réaction et se sont intéressés, dans le cadre d'une géométrie coplanaire et des cinématiques asymétriques pour Ehrhardt et symétrique pour Amaldi, à la distribution angulaire des électrons éjectés sous de faibles énergies. De telles mesures de sections efficaces ont ouvert la voie à de nombreuses expériences du même type sur d'autres cibles atomiques et ont pu servir de test à de multiples modèles théoriques. Aussi, l'étude expérimentale de sections efficaces multiplément différentielles de diffusion, primitivement réalisée avec des électrons incidents rapides, s'est progressivement étendue aux techniques utilisant des rayons X ou  $\gamma$  incidents.

Parallèlement à ces développements expérimentaux, une série de travaux théoriques a développé le formalisme quantique de ces processus, avec le double objectif d'extraire de l'expérience la structure de la cible et de comprendre et d'interpréter les mécanismes réactionnels développés au cours du choc. Cette approche a nécessité la mise en oeuvre d'un ensemble d'approximations spécifiques et nécessaires à une résolution approchée de l'équation de Schrödinger pour des systèmes à plus de deux corps et dans des états non liés. Ces développements ont été plus particulièrement réalisés dans le cadre d'une ionisation par impact électronique. Des études similaires peuvent aussi être conduites pour l'ionisation sous l'impact de photons, telles que celles développées par Dal Cappello et Le Rouzo (1991) et récemment par Pont *et al* (1996).

Les premiers calculs quantiques de sections efficaces ont été effectués par Bethe (1930) et par Massey et Mohr (1933). Ces travaux ont été notamment prolongés, dans le cadre de la première approximation de Born, par d'autres auteurs. Peterkop (1960), puis Rudge et Seaton (1964, 1965) développent une théorie générale de l'ionisation permettant d'obtenir une représentation intégrale de l'amplitude de diffusion, à partir du comportement asymptotique des solutions de l'équation de Schrödinger décrivant les deux électrons émergents en interaction mutuelle et avec l'ion résiduel. Ces descriptions tiennent compte pour la première fois de la portée infinie des interactions. Afin de décrire les corrélations dues aux interactions post-collisionnelles entre les deux électrons dans le continuum, ces auteurs ont également introduit, dans un cadre "semi-classique", la notion de charges effectives. L'analyse des processus dus aux effets d'échange a été étudiée en détail également.



Par ailleurs, les sections efficaces sont soumises à un certain nombre de contraintes, souvent connues sous le terme de règles de somme (après intégration sur un ou plusieurs paramètres) dont la plus connue est celle de Bethe (1930). Tavard (1965) a montré que les sections efficaces différentielles de diffusion (élastique et inélastique), sont en correspondance directe avec l'énergie électronique du diffuseur et permettent notamment d'étudier par cette voie les effets de corrélation dans les cibles atomiques ou les spécificités énergétiques de la liaison dans les molécules.

De nombreux calculs sont basés sur la première approximation de Born (cf: par exemple Schulz 1973 et Geltman 1974). Ils ont aussi été développés, à basse énergie incidente, à des ordres supérieurs (Tweed 1972, 1973a, 1980, Byron et Joachain 1967) sans pour autant fournir un accord satisfaisant avec les mesures expérimentales existantes. Cette situation a motivé le développement de nouvelles autres approximations reposant sur des descriptions différentes des processus collisionnels.

Ces considérations nous ont incité à développer ici une étude systématique des processus d'ionisation simple ou double pour des cibles à deux électrons et plus particulièrement pour l'atome d'hélium, compte tenu du nombre de mesures réalisées sous des conditions énergétiques et cinématiques variées. Notre étude a aussi pour objectif de tenir compte aussi parfaitement que possible des caractéristiques structurales des cibles et des aspects dynamiques des collisions. Nous sommes plus particulièrement intéressé à l'étude des processus  $(e,2e)$ , puis aux processus de double ionisation  $(e,3e)$ ,  $(\gamma, 2e)$  de ces systèmes.

Ces travaux sont réalisés dans le cadre de géométries coplanaires. Les cinématiques  $(e,2e)$  considérées ici correspondent d'une part, à des situations asymétriques envisagées dans les expériences d'Ehrhardt et *al*, Lahmam-Bennani et *al*, et d'autre part, des dispositions symétriques telles que celles de Gélébart et Tweed, dans lesquelles on détecte les deux électrons avec la même énergie et dans des directions sous des angles d'émergence égaux de part et d'autre de la direction d'incidence ( $\theta_A = \theta_B$  ;  $\varphi_A = \pi$  et  $\varphi_B = 0$ ).

Dans le cas des cinématiques asymétriques nous montrons l'importance des effets de corrélations associés au comportement des deux électrons de la cible. Par contre lorsque l'énergie incidente est réduite à une valeur proche de l'énergie du premier seuil

d'ionisation (de l'ordre de 25 eV pour l'hélium) nous constaterons l'importance des effets liés aux corrélations des deux électrons émergents dans la voie de sortie. Cette situation s'accroît lorsqu'on s'approche des conditions d'une cinématique symétrique. Dans ce dernier cas nous mettons en évidence l'existence d'un effet très important non prévu par les première et seconde approximations de Born.

Le présent travail se compose de quatre chapitres. Le premier développe d'une manière générale les éléments de base concernant la théorie des collisions dans sa forme standard, telle que présentée dans l'ouvrage de Goldberger et Watson. Une partie de ce chapitre est consacrée à la définition de sections efficaces (notamment différentielles) caractérisant les différents processus d'ionisation (simples et multiples) des atomes ou ions par impact électronique.

Le deuxième chapitre concerne l'étude des systèmes composés de deux électrons en interaction mutuelle et dans un champ coulombien attractif dû à un ion (ou un noyau) massif. Cette étude comporte deux parties essentielles, après discussion du problème de l'antisymétrisation des états associés aux électrons émergents :

- l'étude et la description des systèmes atomiques ou ioniques à deux électrons, avec la construction d'un ensemble de fonctions propres et de valeurs propres (énergies) susceptibles de décrire la cible (ici, dans son état fondamental) ;
- la description du double continuum associé aux deux électrons émergents (à énergies positives) dans un champ coulombien, utilisant les travaux de Brauner *et al* (1989) et Berakdar (1996) prolongeant ceux de Gariboti *et al* (1980) et de Gudunov *et al* (1983). Ces travaux eux mêmes ont été précédés par ceux de Redmond (voir Rosenberg 1973) et de Merkuriev (1977).

Dans le troisième chapitre nous analyserons en détail le problème de l'ionisation simple de l'hélium. Nous examinerons l'importance des effets, précédemment évoqués, des corrélations des électrons dans la cible avant la collision d'une part, et d'autre part, nous examinerons les effets des corrélations des deux électrons du continuum après la collision. A basse énergie, en tenant compte de l'indiscernabilité des électrons, nous allons montrer les effets liés à ce sujet (échange et capture), en particulier la contribution de la capture aux sections efficaces d'ionisation. Nos résultats seront confrontés à certains calculs théoriques ainsi qu'aux mesures expérimentales existantes.

Enfin, au cours du dernier chapitre notre étude portera sur les processus de double ionisation ( $e,3e$ ) ou ( $\gamma, 2e$ ) des atomes ou ions à deux électrons lorsque cette double ionisation est réalisée, soit par impact électronique, soit par l'absorption d'un photon dont l'énergie dépasse le seuil de double ionisation. En photo double ionisation nos résultats sont confrontés aux quelques expériences existantes.

Compte tenu des difficultés associées aux mesures (quintuplement différentielles) de sections efficaces ( $e,3e$ ) et notamment aux faibles taux de comptage résultant des probabilités de plus en plus faibles de détection d'événements en coïncidences, nous analyserons également enfin les sections efficaces quadruplement différentielles associées (premier chapitre) à une ionisation double dans laquelle sont détectés uniquement, en coïncidence et dans le même plan (ici on envisage une situation coplanaire dans laquelle les angles polaires des deux électrons vérifient  $\varphi_A = \varphi_B = 0$ ), deux électrons dont l'un peut être considéré comme diffusé dans une direction  $\theta_A$  avec une énergie de diffusion  $E_A$  alors que l'autre électron détecté correspond à un seul des deux électrons éjectés dans une direction  $\theta_B$  et avec une énergie  $E_B$ , situation que l'on peut rapprocher d'une étude ( $e,3e$ ) en intégrant sur tous les paramètres cinématiques du second électron éjecté.

# Chapitre 1

## Elément de théorie des collisions

### 1.1 Introduction

Les aspects généraux relatifs aux problèmes de diffusion, et notamment les définitions et méthodes de calcul relatives au concept de section efficace de collision, sont introduites dans ce chapitre.

Envisageons dans ce but deux systèmes initialement isolés et préparés dans des états individuels supposés parfaitement connus (énergie, quantité de mouvement, spin, structure interne...), s'approchant l'un de l'autre pour interagir. Dans la pratique expérimentale, l'un de ces systèmes, appelé projectile, ou particule incidente, peut rencontrer sur sa trajectoire le second système, avec lequel il est alors amené à interagir. Celui-ci est appelé cible lorsqu'il est immobile dans le référentiel du laboratoire (ou peut être considéré comme tel).

Cette interaction conduit généralement à une modification d'au moins une de ces caractéristiques, par exemple (et le plus souvent) la direction de propagation de la particule incidente. Après interaction les deux systèmes se retrouvent à nouveau séparés et dans de nouveaux états (respectant globalement toutes les lois de conservation mises en jeu lors de l'interaction de systèmes isolés), états qu'il restera à identifier à l'aide de détecteurs appropriés. Les mesures effectuées sur les systèmes ainsi formés, et notamment leurs caractéristiques énergétiques, leurs directions d'émergences, leurs états de spin, permettent d'obtenir une information *plus ou moins complète* sur les lois (ou le

potentiel) relatives à cette interaction, lorsque ces lois (ou ce potentiel d'interaction) sont inconnues (Goldberger et Watson 1967 et Joachain 1975). Elles pourront aussi nous renseigner sur la structure initiale interne des particules, notamment celle de la cible (voir par exemple Lahmam-Bennani *et al* 1989, Tavard et Najjari 1996) lorsque celle-ci est à déterminer.

La description des phénomènes de diffusion implique la définition du *concept de sections efficaces* de collision (totale ou différentielles), concept indépendant du flux de particules incidentes et finalement rapporté à une seule particule-cible, et pour lequel pourront être rapprochées les mesures expérimentales et les modèles théoriques, qui nécessitent le calcul d'amplitudes de diffusion (voir Ehrhardt *et al* 1980 et Schubert *et al* 1979).

Ces derniers calculs peuvent être réalisés à partir d'une analyse du comportement asymptotique des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger décrivant le système complet (analyse formulée par exemple par Peterkop 1977, Rudge 1968 et Rudge et Seaton 1965, analyse qui consiste en une représentation intégrale de l'amplitude de diffusion). La méthode des ondes partielles (voir Mott et Massey 1965) en fournit une autre approche. Enfin, le calcul de l'amplitude de diffusion peut être développé dans le cadre d'une théorie formelle reposant sur la définition des matrices S et T de Heisenberg (par exemple Rosenberg 1973). Cette dernière méthode sera plus particulièrement détaillée au chapitre suivant.

Dans un but de simplification de la présentation, tous les calculs seront développés dans le système des unités atomiques (de Hartree). La comparaison des calculs avec les mesures existantes sera également réalisée, en échelle absolue, dans ce même système.

## 1.2 Formalisme opératoire : opérateurs de symétrie

Nous allons tout d'abord rappeler quelques propriétés relatives aux opérateurs de translation spatiale et temporelle ce qui nous permettra dans la suite de simplifier l'exposé du calcul des sections efficaces de diffusion.

### 1.2.1 Opérateur déplacement ( translation spatiale )

Un premier objectif consiste à montrer qu'une translation d'ensemble des particules constituant un système isolé est réalisable à l'aide d'un opérateur unitaire, dit opérateur translation. En conséquence et pour ce système, il sera possible ultérieurement de séparer exactement, sous forme d'un produit, les caractéristiques des mouvements internes de celui de son centre de masse.

Dans ce but, et pour notre système *isolé* en translation (constitué de N particules ne se trouvant pas dans un champ extérieur), on considère qu'il est décrit par un vecteur d'état global  $|\psi\rangle$ . Considérons tout d'abord le cas d'un *système à une particule*. La fonction d'onde stationnaire associée est donnée, dans l'espace des positions, par la projection  $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$  ;  $\mathbf{r}$  représente ici le vecteur position de la particule du système. Une translation arbitraire  $\mathbf{a}$  du système permet de transformer l'état de celui-ci en  $|\psi'\rangle$  et la fonction d'onde associée devient  $\psi'(\mathbf{r})$ . Dans une telle transformation le vecteur  $\mathbf{r}$  subit un accroissement  $\mathbf{a}$  de sorte que

$$\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \quad (1.1)$$

En développant en série de Taylor le second membre de l'égalité (1.1)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) &= \psi(\mathbf{r}) + \sum_i a_i \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{r}) + \sum_{i,j} \frac{a_i a_j}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} \psi(\mathbf{r}) + \\ &+ \dots + \sum_{i_1 \dots i_p} \frac{a_{i_1} \dots a_{i_p}}{p!} \frac{\partial^p}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_p}} \psi(\mathbf{r}) + \dots \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(\mathbf{a} \cdot \nabla)^p}{p!} \psi(\mathbf{r}) = \exp(\mathbf{a} \cdot \nabla) \psi(\mathbf{r}) = D_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.2)$$

à l'aide des relations (1.1) et (1.2), on trouve que l'opérateur déplacement  $D_{\mathbf{a}}$  permettant de transformer  $\psi(\mathbf{r})$  en  $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$  n'est autre que  $\exp(\mathbf{a} \cdot \nabla)$ .

Lorsque le système comporte N particules, on établira aisément que l'opérateur translation s'écrit :

$$D_{\mathbf{a}} = \prod_{\mu=1}^N \exp(\mathbf{a} \cdot \nabla_{\mu}) = \exp(\mathbf{a} \cdot \sum_{\mu} \nabla_{\mu}) = \exp(i \mathbf{a} \cdot \rho) \quad (1.3)$$

dans la mesure où, en représentation de Schrödinger, l'opérateur quantité de mouvement totale  $\rho$  du système s'écrit :

$$\rho = \sum_{\mu} \mathbf{p}_{\mu} = -i \sum_{\mu} \nabla_{\mu} . \quad (1.4)$$

L'opérateur translation spatiale  $D_{\mathbf{a}}$ , dont l'expression générale est donnée par l'équation (1.3), est manifestement un opérateur unitaire. Il est également linéaire, c'est-à-dire que  $D_{\mathbf{a}}(\lambda\psi(\mathbf{r}) + \gamma\phi(\mathbf{r})) = \lambda D_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) + \gamma D_{\mathbf{a}}\phi(\mathbf{r})$  pour tout  $\lambda, \gamma \in \mathbf{C}$ .

### 1.2.2 Opérateur d'évolution ( déplacement dans le temps )

L'évolution d'un système physique se traduit par l'application d'un opérateur linéaire. Cet opérateur nous permettra de transformer à partir d'un instant donné  $t_0$  l'état du système  $\psi(t_0)$  en un autre état  $\psi(t_0 + \tau)$ .  $\tau$  étant un intervalle de temps fini et quelconque.

De par la définition d'un tel opérateur noté  $U_{\tau}$ , on doit vérifier :

$$U_{\tau} \psi(t_0) = \psi(t_0 + \tau). \quad (1.5)$$

On peut démontrer, d'une manière analogue à celle développée pour le calcul de  $D_{\mathbf{a}}$ , que l'opérateur évolution peut se mettre sous la forme (développée dans l'annexe A )

$$\psi(t_0 + \tau) = U_{\tau} \psi(t_0) = e^{-iH\tau} \psi(t_0), \quad (1.6)$$

où  $H$  représente l'opérateur hamiltonien du système.

### 1.2.3 Opérateur d'évolution en représentation d'interaction

Etudions à présent les effets d'un potentiel perturbatif sur l'évolution du système. L'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit

$$i \dot{\Psi}(t) = H \Psi(t). \quad (1.7)$$

Pour des raisons de simplification, nous supposons que le hamiltonien  $H$  du système ne dépend pas du temps (Goldberger et Watson 1967), et l'intégration de l'équation (1.7) permet d'écrire :

$$\Psi(t) = e^{-iH(t-t_0)} \Psi(t_0). \quad (1.8)$$

L'équation (1.8) est analogue à (1.6), elle décrit l'évolution du système dans le temps.

Supposons à présent que le hamiltonien  $H$  s'écrive comme la somme de deux opérateurs : l'opérateur  $K$ , dont on connaît les états stationnaires ainsi que les valeurs propres correspondantes et l'opérateur  $V$ , qui représente une perturbation, de sorte que

$$H = K + V. \quad (1.9)$$

Les solutions exactes non perturbées  $\chi_a$  correspondant aux états propres de l'opérateur  $K$  ainsi que les valeurs propres des énergies  $E_a$  vérifient l'équation stationnaire suivante :

$$K \chi_a = E_a \chi_a. \quad (1.10)$$

Les états propres, non perturbés, dépendant du temps vérifient l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$i\dot{\phi}_a(t) = K \phi_a(t), \quad (1.11)$$

soit l'équation intégrale analogue à (1.8) et en tenant compte des solutions stationnaires (1.10),

$$\phi_a(t) = e^{-iKt} \phi_a(0) = e^{-iE_a t} \chi_a. \quad (1.12)$$

Dans le but d'étudier les effets de la perturbation due au terme d'interaction  $V$  de l'équation (1.9), on construit pour cela un état  $\Psi_I$  dit état d'interaction

$$\Psi_I = e^{iKt} \Psi(t). \quad (1.13)$$

Après multiplication par le complexe  $i$ , la dérivation par rapport au temps de l'équation (1.13) nous permet d'écrire :



$$i\dot{\Psi}_I(t) = i e^{iKt} \Psi(t) - K e^{iKt} \dot{\Psi}(t). \quad (1.14a)$$

En vertu de l'équation (1.7), on a :

$$\begin{aligned} i\dot{\Psi}_I(t) &= e^{iKt} (H - K) \Psi(t) \\ &= e^{iKt} V \Psi(t). \end{aligned} \quad (1.14b)$$

Si l'on définit par

$$V(t) = e^{iKt} V e^{-iKt}, \quad (1.15)$$

la relation (1.14) devient analogue à l'équation de Schrödinger dépendant du temps définie par la relation (1.7), c'est-à-dire :

$$i\dot{\Psi}_I(t) = V(t) \Psi_I(t). \quad (1.16)$$

La nouvelle équation (1.16) est dite équation de Schwinger (Joachain 1975). Elle est écrite en représentation d'interaction, dans la mesure où  $V(t)$  apparaît en place de  $H$ . Il va être possible de lier les deux représentations à l'aide d'un opérateur d'évolution en recherchant la transformation linéaire  $U(t, t_0)$  qui nous permet d'obtenir la fonction  $\Psi_I(t)$  à partir de  $\Psi_I(t_0)$ , ce qui se traduit ici par l'équation linéaire :

$$\Psi_I(t) = U(t, t_0) \Psi_I(t_0). \quad (1.17)$$

Les équations (1.8), (1.13) et (1.17) permettent alors de définir  $U(t, t_0)$  comme

$$\begin{aligned} U(t, t_0) \Psi_I(t_0) &= \Psi_I(t) = e^{iKt} \Psi(t) \\ &= e^{iKt} e^{-iH(t-t_0)} \Psi(t_0) \\ &= e^{iKt} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iKt_0} \Psi_I(t_0). \end{aligned} \quad (1.18)$$

On a ainsi défini l'opérateur d'évolution  $U(t, t_0)$  qui permet de connaître l'état du système à l'instant  $t$  à partir de son état initial. Cet opérateur unitaire, (voir Rosenberg 1973), s'écrit

$$U(t, t_0) = e^{iKt} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iKt_0}, \quad (1.19)$$

et se réduit à l'identité si  $H = K$ .

Deux propriétés importantes de cet opérateur se traduisent par les relations

$$U(t_0, t_0) = 1 \quad (1.20)$$

et

$$U(t, t') U(t', t_0) = U(t, t_0). \quad (1.21)$$

Enfin, en reportant l'expression (1.19) dans l'équation (1.16), l'opérateur évolution  $U(t, t_0)$  se trouve satisfaire l'équation suivante :

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = e^{iKt} (-K + H) e^{-iH(t-t_0)} e^{-iKt_0},$$

d'où finalement

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = V(t) U(t, t_0). \quad (1.22)$$

A cette équation correspond l'expression intégrale suivante (Goldberger et Watson 1967)

$$U(t, t_0) = -i \int_{t_0}^t dt' V(t') U(t', t_0) + \text{Cte.} \quad (1.23)$$

En tenant compte de la condition aux limites donnée par la relation (1.20), l'équation (1.23) peut être mise sous la forme :

$$U(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' V(t') U(t', t_0). \quad (1.24)$$

## 1.3 Préparation de l'état initial

### 1.3.1 Description du mouvement d'une particule isolée

Envisageons un système physique isolé (absence de force extérieure), se trouvant localisé dans une région finie de l'espace. Le hamiltonien de ce système est désigné par l'opérateur  $K$ . Cet opérateur indépendant du temps a pour états propres les solutions stationnaires  $\chi_{a,q}$  de l'équation aux valeurs propres

$$K \chi_{a,q} = E_{a,q} \chi_{a,q}. \quad (1.25)$$

Les quantités  $E_{a,q}$  représentent les valeurs propres de l'énergie du système décrit par les états propres  $\chi_{a,q}$ . Les indices  $a$  et  $\mathbf{q}$  donnent toutes les informations sur les états  $\chi_{a,q}$  obtenus lorsqu'on tient compte de toutes les observables que l'on peut associer à l'opérateur  $K$  pour former un ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC).

Pour un système isolé, l'observable impulsion totale  $\rho$  constitue une constante de mouvement. L'opérateur associé doit donc commuter avec l'opérateur hamiltonien  $K$  du système, de sorte que :

$$\rho \chi_{a,q} = \mathbf{q} \chi_{a,q}. \quad (1.26)$$

En effectuant un déplacement d'un vecteur  $\mathbf{a}$  sur le système à l'aide de l'opérateur translation  $D\mathbf{a}$ , on obtient à l'aide de la relation (1.26)

$$D\mathbf{a} \chi_{a,q} = \exp(i\mathbf{a} \cdot \mathbf{q}) \chi_{a,q}. \quad (1.27)$$

Les états propres  $\chi_{a,q}$  peuvent être ainsi construits sous la forme d'un produit "normalisé"

$$\chi_{a,q} = \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} g_a, \quad (1.28)$$

où  $\mathbf{r}$  caractérise la position du centre de masse du système, en mouvement avec la quantité de mouvement totale  $\mathbf{q}$ . La fonction  $g_a$  représente alors l'état interne (structure électronique, spin,...) du système. Elle est indépendante de  $\mathbf{r}$  et reste invariable vis-à-vis de l'opérateur translation  $D\mathbf{a}$ .

En conséquence de cette séparabilité, on pourra définir comme particule un système physique si ce système reste confiné dans une région limitée de l'espace. Dans notre cas, le système décrit par  $\chi_{a,q}$  est dit particule si  $g_a$  tend rapidement vers 0 en dehors de la région de confinement. Autrement dit, le système est une particule si  $g_a$  est normalisable à l'unité dans l'espace.

Pour les états stationnaires décrits par l'équation (1.28), la fonction  $g_a$  ne dépend pas de la position  $\mathbf{r}$ , il en résulte ainsi que la probabilité,  $|g_a|^2 (2\pi)^{-3}$ , de trouver la "particule" en une position  $\mathbf{r}$  dans l'espace est la même pour tous les  $\mathbf{r}$ , ce qui ne localise pas la "particule". Pour cette raison, et si l'on veut associer à (1.28) une particule en translation, il devient nécessaire de constituer une superposition de plusieurs fonctions d'ondes stationnaires, solutions de l'équation (1.25), dont les valeurs  $\mathbf{q}$  diffèrent légèrement. L'interférence entre les divers termes engendre une amplitude sous forme d'une "enveloppe" assurant une localisation de la particule.

### 1.3.2 Construction du paquet d'onde

Dans le but de localiser une particule isolée dans un élément de volume  $\mathcal{V}$ , on a recours à un paquet d'ondes, construit sous forme d'une combinaison d'états  $\chi_{a,\mathbf{p}}$  de l'équation (1.28), de sorte que

$$\begin{aligned} X_{a,\mathbf{q}} &= \int d\mathbf{p} a(\mathbf{q}-\mathbf{p})\chi_{a,\mathbf{p}} \\ &= (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{p} a(\mathbf{q}-\mathbf{p}) \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})g_{a,\mathbf{p}} \end{aligned} \quad (1.29)$$

Les fonctions  $X_{a,\mathbf{q}}$  sont aussi des solutions de l'équation (1.25). Les quantités  $a(\mathbf{q}-\mathbf{p})$  représentent les amplitudes des distributions des états propres  $\chi_{a,\mathbf{p}}$  dans le paquet  $X_{a,\mathbf{q}}$ . L'amplitude  $G(\mathbf{r})$  du paquet d'ondes, donnée par la relation

$$G(\mathbf{r}) = \int d\rho a(\rho) \exp(i\rho\cdot\mathbf{r}), \quad (1.30)$$

est définie à l'intérieur du volume  $\mathcal{V}$ , et s'annule ailleurs. Le paquet d'ondes de l'équation (1.29) s'écrit sous la forme ( Joachain 1975)

$$X_{a,\mathbf{q}} = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{a}\cdot\mathbf{q})g_a G(\mathbf{r}) = \chi_{a,\mathbf{q}} G(\mathbf{r}). \quad (1.31)$$

dont la de normalisation à l'unité est assurée par la fonction  $G(\mathbf{r})$ , ce qui nous permet d'écrire

$$\langle X_{a,\mathbf{q}} | X_{a,\mathbf{q}} \rangle = 1. \quad (1.32)$$

De la relation (1.32) découlent les égalités

$$\int d\mathbf{q} |a(\mathbf{q}-\mathbf{p})|^2 = 1 \quad (1.33)$$

et

$$\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int d\mathbf{r} |G(\mathbf{r})|^2 = 1, \quad (1.34)$$

conformément à l'équation (1.7), la fonction paquet d'ondes dépendante du temps s'écrit

$$\phi_{a,\mathbf{p}}(t) = \exp(-iKt) X_{a,\mathbf{p}} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{-3/2} \int d\mathbf{q} a(\mathbf{p}-\mathbf{q}) \exp(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - E_{a,\mathbf{q}}) g_a. \quad (1.35)$$

La quantité  $E_{a,\mathbf{q}}$  représente l'énergie cinétique ainsi que l'énergie interne (particules avec structure) du système considéré dans l'état  $|a\rangle$ . Le développement de Taylor de  $E_{a,\mathbf{q}}$  au voisinage de  $\mathbf{p}$  nous permet d'écrire

$$E_{a,\mathbf{q}} = E_{a,\mathbf{p}} + (\mathbf{q}-\mathbf{p}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} E_{a,\mathbf{p}}, \quad (1.36)$$

la quantité définie par

$$\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{p}} E_{a,\mathbf{p}} \quad (1.37)$$

représente la vitesse de groupe associée au paquet d'onde  $X_{a,\mathbf{p}}$ .

La substitution de l'expression  $E_{a,\mathbf{p}}$ , de l'équation (1.36), dans l'équation (1.35) nous permettra d'écrire la fonction d'onde dépendante du temps

$$\phi_{a,\mathbf{p}}(t) = \exp(-i E_{a,\mathbf{p}} t) \chi_{a,\mathbf{p}} G(\mathbf{r}-\mathbf{v}t). \quad (1.38)$$

## 1.4 Intégration de l'équation de Schrödinger pour un processus de diffusion

### 1.4.1 Description de l'interaction

Dans le but de décrire la diffusion de deux systèmes physiques, une schématisation plus simple du problème consiste à supposer que l'un des deux systèmes est considéré comme une particule simple ou élémentaire et on parlera dans la suite de particule incidente ou projectile pour désigner le premier système, alors que le second, en général atome, ion ou molécule, sera désigné par le nom de particule cible. Pour des raisons de simplification dans les notations on supprimera les variables de positions. Le paquet d'ondes associé à ces deux particules donné par l'équation (1.29), s'écrit ici

$$\begin{aligned} X_a &= \int d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 a_P(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1) a_C(\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2) \chi_{a_1, \mathbf{q}_1} \chi_{a_2, \mathbf{q}_2} \\ &= G_P(\mathbf{r}_1) G_C(\mathbf{r}_2) \chi_a, \end{aligned} \quad (1.39)$$

$\chi_a = \chi_{a_1, \mathbf{p}_1} \chi_{a_2, \mathbf{p}_2}$  représente l'état stationnaire propre du hamiltonien  $K$  du système complet avant l'interaction (l'équation 1.25). L'indice  $a$  représente tous les paramètres (nombres quantiques, quantités de mouvement totales) qui définissent l'état complet du système.

L'évolution dans le temps est donnée par la relation (1.12)

$$\phi_a(t) = e^{-iKt} X_a \quad (1.40)$$

ou encore à l'aide de la relation (1.38) (voir Rosenberg 1973)

$$\phi_a(t) = \exp(-i E_a t) \chi_a G_P(\mathbf{r}_1 - \mathbf{v}_1 t) G_C(\mathbf{r}_2 - \mathbf{v}_2 t). \quad (1.41)$$

L'opérateur d'interaction  $V$  (hamiltonien d'interaction) est donné par l'équation (1.9).

$$V = H - K, \quad (1.42)$$

dont l'action sur l'état (1.41) est pratiquement nulle avant le moment  $t_0$  de recouvrement des deux paquets d'ondes associés au faisceau incident et à la particule cible (figure 1.1). Ceci découle du fait que le potentiel d'interaction (1.42) est supposé de courte portée.

Ce qui peut être valable dans le cas d'un potentiel créé par une cible neutre ou en corrigeant par un terme coulombien si on a des cibles ioniques.

## 1.4.2 Fonction d'onde dépendante du temps

La description du processus de diffusion impose à la fonction d'état  $\Psi(t)$  du système complet (équation 1.8) d'être égale à  $\phi_a(t_0) = e^{-iKt_0} X_a$  à l'instant  $t = t_0$ . Ce qu'on peut traduire par la relation

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= e^{-iH(t-t_0)} \phi_a(t_0) \\ &= e^{-iH(t-t_0)} e^{-iKt_0} X_a.\end{aligned}\quad (1.43)$$

Et en vertu de l'équation (1.19) on peut écrire  $U(0, t_0)$  sous la forme

$$U(0, t_0) = e^{iHt_0} e^{-iKt_0}.$$

Il devient

$$\Psi(t) = e^{-iHt_0} \Gamma \quad (1.44)$$

où

$$\Gamma = U(0, t_0) X_a = \Psi(0). \quad (1.45)$$

Utilisant une formulation de l'équation (1.19) avec  $t = 0$ , on retrouve l'équation intégrale vérifiée par  $U(0, t_0)$ ,

$$U(0, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^0 dt' U(0, t') V(t') = 1 - i \int_{t_0}^0 dt' e^{iHt'} V e^{-iKt'}. \quad (1.46)$$

Les équations (1.44) et (1.46) nous permettent d'écrire  $\Gamma$  sous la forme

$$\begin{aligned}\Gamma &= X_a - i \int_{t_0}^0 dt' e^{iHt'} V e^{-iKt'} X_a \\ &= X_a - i \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \int_{t_0}^0 dt' e^{iHt'} V e^{-iE_a t'} \chi_a.\end{aligned}\quad (1.47)$$

Ici on a utilisé pour les deux systèmes les notations

$$A(\mathbf{q}) = A(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = a_p(\mathbf{q}_1 - \mathbf{p}_1) a_c(\mathbf{q}_2 - \mathbf{p}_2)$$

Dans le but de simplifier l'équation (1.47) nous introduisons une famille de fonctions propres  $\psi_\lambda$  associées à l'opérateur hamiltonien  $H$ , telles que

$$\text{et} \quad H \psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda \quad (1.48)$$

$$\sum_\lambda |\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda| = 1, \quad (1.49)$$

$\sum_\lambda$  sous entend la sommation sur tous les éléments de la base des états propres de  $H$ . Si on écrit la fonction  $\Gamma$  dans la nouvelle base, on trouve

$$\Gamma = \sum_\lambda \Gamma_\lambda \psi_\lambda \quad (1.50)$$

$$X_a = \sum_\lambda X_a(\lambda) \psi_\lambda.$$

L'utilisation de l'équation (1.48) permet d'écrire

$$\Gamma_\lambda - X_a(\lambda) = -i \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \int_{t_0}^0 dt e^{i(E_\lambda - E_a)t} \langle \psi_\lambda | V | \chi_a \rangle \quad (1.51)$$

A ce niveau et pour rendre effectif le rôle des paquets d'ondes, une procédure usuelle (Goldberger et Watson 1967) consiste à exprimer l'intégration en  $t$  de l'équation (1.51) en introduisant un facteur d'atténuation sous la forme

$$-i \int_{t_0}^0 dt e^{i(E_\lambda - E_a \mp i\eta)t} = (E_a \pm i\eta - E_\lambda)^{-1} + i \int_{-\infty}^{t_0} dt e^{i(E_\lambda - E_a \mp i\eta)t}, \quad (1.52)$$

expression dans laquelle  $\eta \rightarrow 0^+$ . Après sommation (qui permet de reconstituer les paquets d'ondes) sur tous les états propres  $\{\lambda\}$  du système et en insérant le second terme de cette dernière expression dans la formule (1.51), on pourra considérer une telle contribution comme négligeable alors que  $V\phi_a(t) = 0$  à partir de l'instant  $t$  tel que  $t < t_0 < 0$  car les centres des paquets d'ondes sont alors séparés et leur recouvrement devient nul (Rosenberg 1973). Il ne reste alors qu'à prendre en compte le premier terme, qui devient

$$G^\pm(\eta) = (E_a \pm i\eta - H)^{-1}, \quad (1.53)$$

Ainsi, en vertu des considérations précédentes et à l'aide des équations (1.51), (1.52) et (1.53), l'intégrale

$$I^\pm(\eta) = \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) G^\pm(\eta) \langle \psi_\lambda | V | \chi_a \rangle$$

se réduit à  $\Gamma_\lambda - X_a(\lambda)$  lorsque  $\eta \rightarrow 0^+$ .

La limite ( $\eta \rightarrow 0^+$ ) n'est en fait effectuée qu'après intégration sur tout le spectre  $E_\lambda$ . On définit ainsi, à l'aide des équations (1.53) et (1.54) dans l'équation (1.51) une nouvelle représentation soit une nouvelle famille de quantités  $I^\pm(\eta)$  définie par :



$$\Gamma^\pm = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \Gamma^\pm(\eta). \quad (1.55)$$

Dans la représentation  $\{ \lambda \}$  et d'une manière analogue à l'équation (1.50),

on a :

$$\Gamma^\pm_\lambda(\eta) = \langle \psi_\lambda | \Gamma^\pm(\eta) \rangle \quad (1.56)$$

et

$$\Gamma^\pm(\eta) = \sum_\lambda \Gamma^\pm_\lambda(\eta) \psi_\lambda.$$

L'équation (1.51) se transpose ici sous la forme

$$\Gamma^\pm_\lambda(\eta) = \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \langle \psi_\lambda | 1 + \frac{1}{E_a \pm i\eta - H} V | \chi_a \rangle, \quad (1.57)$$

où  $(E_a \pm i\eta - H)^{-1}$  représente la fonction de Green du hamiltonien  $H$  du système. L'équation (1.57), après sommation sur toutes les valeurs de  $\lambda$  (sommation sur tous les nombres quantiques et intégration sur le spectre  $E_\lambda$ ) devient

$$\Gamma^\pm(\eta) = \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \left( 1 + \frac{1}{E_a \pm i\eta - H} V \right) \chi_a. \quad (1.58)$$

dont la limite pour  $\eta \rightarrow 0^+$  n'est autre que le paquet d'ondes  $\Gamma^\pm$  au moment de l'interaction des systèmes à l'instant  $t = 0$ , choisi comme origine des temps. Une telle approche permet ainsi de raccorder les phases des voies d'entrée et de sortie du processus collisionnel.

### 1.4.3 Fonction d'onde indépendante du temps

Dans le but de décrire les états stationnaires du système au cours de l'interaction, il est convenable d'introduire dans cette étude un ensemble de fonctions stationnaires  $\psi_a^\pm(\eta)$ , définies par

$$\psi_a^\pm(\eta) = \left( 1 + \frac{1}{E_a \pm i\eta - H} V \right) \chi_a. \quad (1.59)$$

Si on note par  $\psi_a^\pm$  la limite

$$\psi_a^\pm = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \psi_a^\pm(\eta), \quad (1.60)$$

on trouve à l'aide des équations (1.55) et (1.60)

$$\Gamma^\pm = \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \psi_a^\pm. \quad (1.61)$$

Les vecteurs d'états  $\psi_a^\pm$  forment une famille de vecteurs d'états stationnaires et répondent à l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

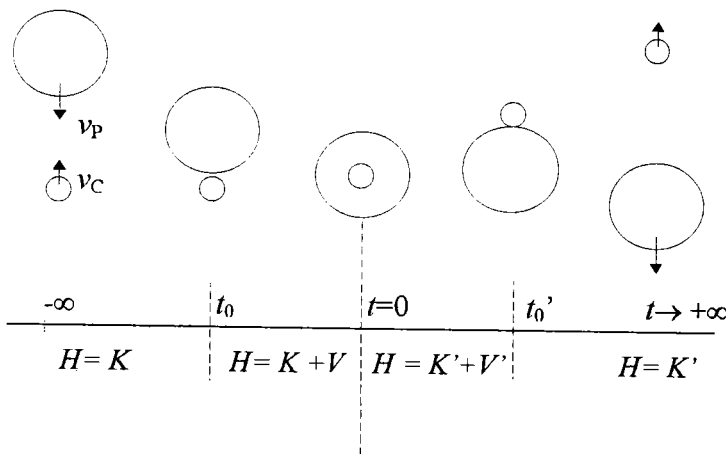
Soit

$$H \psi_a^\pm = E_a \psi_a^\pm, \quad (1.62)$$

avec

$$H \chi_a = (K+V) \chi_a = (E_a + V) \chi_a. \quad (1.63)$$

On appellera voie d'entrée la préparation des deux systèmes non interagissants jusqu'à un instant  $-t_0$  et à partir de laquelle ces deux systèmes vont interagir dans un intervalle de temps  $-t_0, +t'_0$ .



**Figure1.1** Schéma simplifié d'un processus collisionnel au cours du temps entre deux systèmes.

On a décrit le comportement de deux systèmes à partir de leur préparation jusqu'au moment de leur interaction (origine du temps). Il est intuitif de conclure que dans un déroulement normal d'un processus de diffusion (ordre chronologique), l'instant de préparation  $t_0$  précède le moment d'interaction (figure1.1) et on permet pour cela d'écrire

$t_0 = -|t_0|$  ce qui réduira notre utilisation de la notation  $\Gamma^\pm$  à  $\Gamma^+$ . La fonction décrivant l'évolution du système complet sera exprimée par la relation  $\Psi(t) = e^{-iHt} \Gamma^+$ .

#### 1.4.4 Préparation de l'état final

Les deux systèmes décrits précédemment seront détectés dans des états  $\chi_b$  après avoir interagi. De telles particules sont supposées assez séparées dans l'espace de telle sorte que leur interaction mutuelle devient négligeable. Le hamiltonien associé aux nouvelles particules lorsque l'interaction est supprimée se réduit à  $K'$ , de sorte que

$$K' \chi_b = E_b \chi_b. \quad (1.64)$$

Le hamiltonien total  $H$  du système complet peut se décomposer en deux parties

$$H = K' + V', \quad (1.65)$$

$V'$  décrit l'interaction des particules juste avant qu'elles soient décrites par les fonctions  $\chi_b$  (voie de sortie).

Les états  $\chi_b$  aussi bien que  $\chi_a$ , sont des éléments qui vérifient la relation de fermeture

$$\sum_b |\chi_b\rangle\langle\chi_b| = 1 = \sum_b |b\rangle\langle b|. \quad (1.66)$$

### 1.5 Matrice de diffusion

Dans le but d'évaluer la probabilité de trouver les états finaux  $\chi_b$  exigés dans l'état  $\psi_a^\pm$  il est indispensable de réécrire les équations (1.59) et (1.60) définissant la fonction  $\psi_a^\pm$  sous une forme modifiée. Pour cela considérons deux opérateurs inversibles  $A$  et  $B$ , leurs opérateurs réciproques associés  $A^{-1}$  et  $B^{-1}$  vérifient l'identité suivante

$$\frac{1}{A} - \frac{1}{B} = \frac{1}{A}(B - A)\frac{1}{B} = \frac{1}{B}(B - A)\frac{1}{A}, \quad (1.67)$$

en posant  $A = E_a \pm i\eta - H$  et  $B = E_a \pm i\eta - K'$  on trouve à l'aide de la relation (1.67)

$$\frac{1}{E_a \pm i\eta - H} - \frac{1}{E_a \pm i\eta - K'} = \frac{1}{E_a \pm i\eta - K'} V' \frac{1}{E_a \pm i\eta - H},$$

soit

$$\frac{1}{E_a \pm i\eta - H} = \frac{1}{E_a \pm i\eta - K'} \left(1 + V' \frac{1}{E_a \pm i\eta - H}\right). \quad (1.68)$$

L'équation (1.59), à l'aide de l'équation (1.68), peut s'écrire alors

$$\psi_a^* = \chi_a + \frac{1}{E_a + i\eta - K'} \mathcal{S} \chi_a, \quad (1.69)$$

où l'opérateur

$$\mathcal{S} = V + V' \frac{1}{E_a + i\eta - H} V, \quad (1.70)$$

est appelé opérateur ou matrice de diffusion et vérifie la relation de commutation suivante

$$[\rho, \mathcal{S}] = 0. \quad (1.71)$$

La relation de fermeture représentée par l'équation (1.66) permet d'écrire l'équation (1.69) sous la forme

$$\psi_a = \chi_a + \sum_b \frac{\chi'_b}{E_a + i\eta - K'} \langle b | \mathcal{S} | a \rangle, \quad (1.72)$$

où

$$\langle b | \mathcal{S} | a \rangle = \langle \chi'_b | \mathcal{S} | \chi_a \rangle. \quad (1.73)$$

En vertu de la conservation de la quantité de mouvement, telle qu'elle est exprimée par la relation de commutation de l'équation (1.71), on peut réduire l'élément de matrice donné dans l'équation (1.73) à

$$\langle b | \mathcal{S} | a \rangle = \delta(\mathbf{P}_b - \mathbf{P}_a) T_{ba}. \quad (1.74)$$

Ici  $T_{ba}$  représente l'élément de transition *réduit* entre deux états  $a$  et  $b$ .  $\mathbf{P}_a$  et  $\mathbf{P}_b$  sont les quantités de mouvement totales du système complet avant et après la diffusion, et de l'équation (1.74) résulte la conservation de la quantité de mouvement totale, avec

$$\begin{aligned} \rho \chi_a &= \mathbf{P}_a \chi_a \\ \rho \chi'_b &= \mathbf{P}_b \chi'_b. \end{aligned} \quad (1.75)$$

et

## 1.6 Développement de Born

La difficulté dans le calcul de l'élément de matrice associé à l'opérateur de diffusion  $\mathcal{F}$  est due à la présence du hamiltonien  $H$  dans l'expression de  $\mathcal{F}$ , ce qui nécessite par ailleurs des approximations. L'approximation de Born fournit une approche basée sur la théorie des perturbations, permettant de résoudre par itérations les problèmes de diffusion.

Si on porte dans l'expression de  $\mathcal{F}$ , donnée dans l'équation (1.70), le développement de l'équation (1.68) on obtient

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= V + V' \frac{1}{E_a + i\eta - H} V \\ &= V + V \frac{1}{E_a + i\eta - K} V + V \frac{1}{E_a + i\eta - K} V \frac{1}{E_a + i\eta - H} V \\ &= V + V G_o^+ V + V G_o^+ V G^+ V,\end{aligned}\quad (1.76)$$

par itérations successives et on a

$$\mathcal{F} = V + \left[ \sum_{n=1}^{\infty} (V G_o^+)^n \right] V. \quad (1.77)$$

D'après la relation donnée en (1.74) on pourra écrire (1.77), en terme de matrice de transition réduite, sous la forme

$$T = \sum_{n=1}^{\infty} T^{(n)}, \quad (1.78)$$

où

$$T^{(1)} = V, \quad (1.79)$$

premier terme du développement de Born appelé aussi la première approximation de Born. Celle-ci consiste à ne tenir compte dans le développement  $T$  de l'équation (1.78) que du premier terme  $T^{(1)}$  en négligeant les contributions des termes contenant les puissances plus élevées de  $V$ , ce qui est valable dans les processus d'ionisation des cibles atomiques par des électrons quand les vitesses de ces derniers sont très grandes par rapport à celles des électrons liés dans la cible. Dans cette approximation, la fonction d'onde du système projectile-cible se réduit au simple produit des deux fonctions d'onde du projectile et de la cible que ce soit avant ou après la collision.

## 1.7 Probabilité de Transition : Matrices S et T

Du fait qu'il est quasiment impossible d'observer chacune des interactions individuelles entre une particule incidente et une cible au cours du choc, il est alors indispensable de faire appel à une description probabiliste (Goldberger et Watson 1967) du processus de diffusion. Considérons alors l'opérateur unitaire de l'équation (1.19)

$$U'(t,0) = e^{iK't} e^{-iHt},$$

$U'$  coïncide avec  $U$  quand  $K' = K$ . Cette situation est vérifiée pour les diffusions qui conservent le nombre total de corps avant et après la collision. Le système à l'instant  $t$  est décrit par la fonction d'onde dépendante du temps

$$\Psi(t) = e^{-iK't} U'(t,0) U(0,t_0) \chi_a = e^{-iK't} U(t,t_0) \Gamma^+ . \quad (1.80)$$

La forme intégrale de l'opérateur  $U'(t,0)$  est analogue à celle de  $U(t,t_0)$  donnée par l'équation (1.19), il suffit de prendre  $t_0 = 0$  et de remplacer  $K$  par  $K'$  et  $V$  par  $V'$ . On trouve alors

$$U'(t,0) = 1 - i \int_0^t dt' e^{iK't'} V' e^{-iHt'} . \quad (1.81)$$

Introduisons un opérateur indépendant du temps  $S$ , défini par la relation :

$$SX_a = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} U'(t,0) U(0,t_0) X_a, \quad (1.82)$$

$S$  est appelé matrice de Heisenberg (Rosenberg 1973). L'équation (1.82) peut s'écrire sous la forme

$$SX_a = U'(t,0) \Gamma^+ = e^{iK't} \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) e^{-iE_a t} \psi_a^+ . \quad (1.83)$$

Pour simplifier ici le problème on va s'intéresser à un processus de diffusion tel que  $K' = K$  et  $V' = V$  qui correspond d'ailleurs aux situations qui nous concerneront ultérieurement, le cas général pouvait être traité sans complications majeures. En portant l'expression (1.72) dans (1.83) on trouve

$$SX_a = \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \left[ e^{i(K-E_a)t} \chi_a + \sum_b \frac{e^{i(E_b-E_a)t}}{E_a + i\eta - E_b} \chi_b \langle b | \mathcal{T} | a \rangle \right], \quad (1.84)$$

à l'aide de l'équation de Schrödinger (1.63), l'expression (1.84) devient

$$SX_a = \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \chi_a + \sum_b \frac{e^{i(E_b-E_a)t}}{E_a + i\eta - E_b} \chi'_b \langle b | \mathcal{S} | a \rangle. \quad (1.85)$$

En faisant tendre  $t$  à l'infini, et à l'aide de la relation (voir par exemple : Rosenberg 1973)

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{e^{i(E_b-E_a)t}}{E_b - (E_a + i\eta)} = 2i\pi \delta(E_a - E_b), \quad (1.86)$$

on obtient alors

$$\langle \chi'_b | S | \chi_a \rangle = \langle b | S | a \rangle = \delta_{ba} - 2i\pi \delta(E_a - E_b) \langle b | \mathcal{S} | a \rangle. \quad (1.87)$$

La relation ci-dessus avec la relation (1.74) nous permettront de lier S et T en écrivant :

$$\langle \chi'_b | S | \chi_a \rangle = \delta_{ba} - 2i\pi \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_b - \mathbf{P}_a) \langle b | T | a \rangle. \quad (1.88)$$

La conservation des énergies et des quantités de mouvement totales sont assurées par les fonctions  $\delta$  de Dirac. On définit la probabilité de transition du système vers un état  $\chi'_b$  à l'instant  $t$  comme étant la probabilité pour que le système évolue vers un état  $\phi'_b(t)$  et on écrit

$$P_{ba}(t) = |\langle \phi'_b(t) | \Psi(t) \rangle|^2, \quad (1.89)$$

où

$$\phi'_b(t) = e^{-iK't} \chi'_b. \quad (1.90)$$

En tenant compte de la relation  $\Psi(t) = e^{-iK't} S X_a$ , on trouve facilement,

$$P_{ba} = \lim_{t \rightarrow \infty} P_{ba}(t) = |\langle \chi'_b | S | X_a \rangle|^2 \quad (1.91)$$

Dans la suite pour des raisons de simplification la fonction d'onde  $\chi'_b$  sera notée  $\chi_b$  et l'équation (1.91) devient

$$P_{ba} = |\langle \chi_b | S | X_a \rangle|^2, \quad (1.92)$$

et pour des transitions inélastiques ( $a \neq b$ ), l'équation (1.87) se réduit à

$$\langle \chi_b | S | X_a \rangle = -2i\pi \delta(E_a - E_b) \langle b | \mathcal{S} | a \rangle, \quad (1.93)$$

$$\langle \chi_b | S | X_a \rangle = -2i\pi \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_b - \mathbf{P}_a) T_{ba}. \quad (1.94)$$

Pour la clarté de l'exposé, nous allons analyser l'interaction d'un faisceau incident 'P' avec des cibles 'C' que l'on représente par des centres diffuseurs. Les fonctions des paquets d'ondes, avant la réaction, associées au faisceau incident et à la cible s'écrivent respectivement

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}_1 | X_P \rangle &= (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}_1 \mathbf{r}_1) G_P(\mathbf{r}_1), \\ \langle \mathbf{r}_2 | X_C \rangle &= (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{p}_2 \mathbf{r}_2) G_C(\mathbf{r}_2),\end{aligned}\tag{1.95}$$

les équations (1.91) et (1.94) permettent d'écrire

$$\begin{aligned}P_{ba} &= (2\pi)^2 \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) T_{ba} \\ &\times \int d\mathbf{q}' A^*(\mathbf{q}') \delta(E_{a'} - E_b) \delta(\mathbf{P}_{a'} - \mathbf{P}_b) T_{ba'}^*,\end{aligned}\tag{1.96}$$

or

$$\begin{aligned}\delta(E_b - E_a) \delta(E_b - E_{a'}) &= \delta(E_b - E_a) \cdot \delta(E_{a'} - E_a), \\ &\approx \delta(E_b - E_a) \delta(E_{a'} - E_a).\end{aligned}$$

de même pour

$$\delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) \delta(\mathbf{P}_{a'} - \mathbf{P}_b) \approx \delta(\mathbf{P}_{\bar{a}} - \mathbf{P}_b) \delta(\mathbf{P}_{a'} - \mathbf{P}_a).$$

L'état  $|\bar{a}\rangle$  correspond à l'état moyen dans le paquet d'onde  $X_a$  et qu'on pourra confondre par la suite avec l'état  $|a\rangle$ . On note par  $\mathbf{P}_a = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2$  la quantité de mouvement totale dans la voie d'entrée. En confondant les valeurs propres des états  $|\bar{a}\rangle$  avec celles des états  $|a\rangle$  pour les différents opérateurs ( $K, \rho, T \dots$ ), l'équation (1.96) peut se mettre sous la forme

$$P_{ba} = (2\pi)^2 \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) |T_{ba}|^2 I,\tag{1.97}$$

où

$$I = (2\pi)^2 \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\|^{-1} F.\tag{1.98}$$

$F$  étant le flux du faisceau incident supposé parallèle à l'axe  $z$ ,  $\mathbf{v}_1$  et  $\mathbf{v}_2$  désignent les vitesses de groupe des deux paquets d'ondes associés respectivement au faisceau incident et à la cible. L'équation (1.97) avec la substitution de (1.98) permet d'écrire la probabilité  $P_{ba}$  sous la forme :

$$P_{ba} = (2\pi)^4 \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) |T_{ba}|^2 \frac{F}{|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|},\tag{1.99}$$



et si on veut tenir compte de la contribution de toutes les voies de sortie, c'est-à-dire de tous les états  $|b\rangle$  (du discret et du continuum), on doit réécrire (1.99) sous la forme

$$\left(\sum_b \int\right) P_{ba} = (2\pi)^4 \frac{F}{k_{i,rel}} \left(\sum_b \int\right) \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) |T_{ba}|^2, \quad (1.100)$$

où  $\vec{k}_{i,rel}$  représente le vecteur quantité de mouvement, du système incident, mesuré dans le référentiel lié au centre de masse du système projectile-cible.

## 1.8 Sections efficaces de diffusion

Il est très habituel de présenter les mesures expérimentales des probabilités de transition sous forme d'une section efficace de diffusion. Celle-ci est reliée à la probabilité de transition définie en (1.100) par la relation (Goldberger et Watson 1967).

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{1}{F} \left(\sum_b \int\right) P_{ba} \\ &= (2\pi)^4 \frac{1}{k_{i,rel}} \left(\sum_b \int\right) \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) |T_{ba}|^2. \end{aligned} \quad (1.101)$$

Cette quantité est appelée section efficace totale relative à tous les canaux  $|b\rangle$ . Elle a la dimension d'une surface et mesure le rapport du nombre  $N_S$  de particules diffusées (détectées au cours de l'expérience) par le flux  $F$  de particules incidentes et par le nombre total  $N_T$  de particules cibles.

## 1.9 Forme asymptotique de la fonction d'onde et amplitude de diffusion

Pour des raisons de simplification nous développons le calcul pour un processus de diffusion d'une particule incidente de masse  $m = 1$  u.a. interagissant avec une cible de masse  $M \gg m$ . La fonction d'onde associée au système est donnée par l'équation (1.72)

$$\psi_a^+ = \chi_a + \left(\sum_b \int\right) \frac{\chi_b}{E_a + i\eta - K'} \langle b | \mathcal{T} | a \rangle, \quad (1.102)$$

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \chi_a \rangle = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2)], \quad (1.103a)$$

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \chi_b \rangle = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2)], \quad (1.103b)$$

avec

$$\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 = \mathbf{P}_a \quad \text{et} \quad \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{P}_b.$$

La conservation des quantités de mouvement permet de relier les quantités définies ci-dessus en imposant

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2. \quad (1.104)$$

$\mathbf{q}_2 = 0$  : la cible de masse  $M \gg m$  est initialement au repos dans le système du centre de masse.

La relation de conservation des quantités de mouvement (1.104) permet d'écrire l'élément de matrice de transition  $T_{ba}$  sous la forme

$$T_{ba} = \langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | T | \mathbf{q}_1, \mathbf{0} \rangle. \quad (1.105)$$

A l'aide de la relation (1.74), la fonction d'onde stationnaire de l'équation (1.102) s'écrit

$$\psi_a^+ = \chi_a + (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 (E_a + i\eta - E_b)^{-1} \exp[i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)] \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}_1) T_{ba}, \quad (1.106)$$

et la forme asymptotique de l'équation (1.106), en tendant  $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  à l'infini, peut s'écrire :

$$\psi_a^+ = \chi_a + (2\pi)^{-3} \exp(i\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_2) \frac{e^{iq_1 r}}{r} f(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1), \quad (1.107)$$

où  $f$  représente l'amplitude de diffusion directe. En vertu de l'équation (1.44), la fonction d'onde exacte décrivant l'évolution des deux paquets d'ondes, peut se mettre, à l'aide de l'équation (1.107), sous la forme

$$\Psi(t) = \phi_a(t) + \Psi_s(t), \quad (1.108)$$

$\phi_a(t)$  représente le paquet d'ondes non diffusé ;  $\Psi_s(t)$  correspond au paquet d'ondes des particules émises à partir du lieu de l'interaction diffusante. Le résultat donné dans l'équation (1.108) est obtenu à partir d'une analyse du comportement asymptotique de l'équation de Schrödinger.

## 1.10 Sections efficaces d'ionisation

Après avoir défini la relation entre *la section efficace* de diffusion en général, et *l'élément de matrice*  $T_{ba}$  (équation 1.101) caractérisant une transition entre deux états quantiques  $|a\rangle$  et  $|b\rangle$ , nous reprendrons ici le problème plus particulier dans lequel une collision entre un *projectile* (un électron) et *une cible* à  $v$  corps (atome, ion ou molécule ...) implique  $v+1$  corps. L'état final est décrit par la fonction d'onde  $\chi_b$ . Les paramètres cinématiques qui caractérisent cette réaction correspondent aux quantités de mouvement  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_{v+1}$  des  $v+1$  particules de la voie de sortie et les énergies respectives associées  $E_1, E_2, \dots, E_{v+1}$ .

La section efficace de transition s'écrit dans ce cas

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \sum_b \int d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_v d\mathbf{k}_{v+1} \delta(E_a - E_b) \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) |T_{ba}|^2. \quad (1.109)$$

Il est clair que seules sont permises les transitions qui remplissent les relations de conservation de l'énergie

$$E_a = E_b, \quad (1.110)$$

et de la quantité de mouvement

$$\mathbf{P}_a = \mathbf{P}_b. \quad (1.111)$$

où

$$\begin{aligned} E_a &= E_{a_1, q_1} + E_{a_2, q_2} \\ E_b &= \sum_{j=1}^{v+1} E_{b_j, k_j}, \end{aligned} \quad (1.112)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_a &= \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 \\ \mathbf{P}_b &= \sum_{j=1}^{v+1} \mathbf{k}_j. \end{aligned} \quad (1.113)$$

Le symbole  $\sum_b$  dans l'équation (1.109) traduit la contribution de tous les états internes présents dans l'état final  $|b\rangle$  : les états excités du reste de la cible après la collision ou / et les orientations de spin des autres corps élémentaires. L'intégration de l'équation

(1.109) sur  $d\mathbf{k}_{v+1}$ , par exemple, conduit sans aucune difficulté, à l'aide de la fonction  $\delta$ , à une substitution, dans toute l'expression précédente, de la quantité  $\mathbf{k}_{v+1}$  par  $\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 - \sum_{j=1}^v \mathbf{k}_j$ . Ainsi on obtient finalement

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \sum_b \int d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_v \delta(E_b - E_a) |T_{ab}|^2. \quad (1.114)$$

### 1.10.1 Sections efficaces différentielles simples

A partir de l'expression (1.114), on peut définir des sections efficaces simplement différentielles en angle par :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_j} = \frac{(2\pi)^4}{k_{i,rel}} \sum_b \int \prod_{j'=1(\neq j)}^v d\mathbf{k}_{j'} dE_{j'} \rho(E_{j'}) \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2. \quad (1.115)$$

Cette quantité mesure, pour une énergie incidente  $E_0$  donnée, la probabilité de détecter une particule "  $j$  " dans une direction  $\Omega_j$ . Dans le cas où toutes les particules (diffusées et éjectées) sont identiques (des électrons par exemple comme c'est le cas dans notre étude), les quantités mesurées expérimentalement correspondant à l'expression (1.115) sont inséparables et seront notées  $d\sigma/d\Omega$  et la quantité associée

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma}{d\Omega_j} \quad (j = 1, \dots, v), \quad (1.116)$$

est appelée *section efficace simplement différentielle en angle*. Cette quantité présente un intérêt majeur dans l'étude des structures moléculaires : Tavard (1965) a établi pour la première fois, dans l'étude des processus de collision entre un électron et des cibles atomiques ou moléculaires, la relation entre l'énergie totale de la cible diffusante et la section efficace différentielle totale (élastique plus inélastique), ce qui permettait de mesurer l'énergie de liaison des molécules. Quatre années plus tard, Fink et Bonham (1969) ont montré expérimentalement, dans la diffusion des électrons par une cible de néon, la sensibilité des sections efficaces différentielles totales vis-à-vis des corrélations électroniques dans la cible.

Dans le contexte expérimental des travaux antérieurs à 1970, on ne pouvait pas séparer les contributions provenant d'une diffusion cohérente (ou élastique) et celles d'une diffusion incohérente (ou inélastique). En d'autres termes, seules les sections efficaces différentielles totales (élastique plus inélastique) étaient accessibles expérimentalement. Ensuite des mesures séparées (par exemple Duguet 1981) de sections efficaces différentielles de diffusions élastique et inélastique des électrons de hautes énergies d'incidence (25 à 35 keV) ont pu être réalisées.

Lorsqu'on s'intéresse aux aspects spectroscopiques d'une collision, à côté de la section efficace différentielle simple en angle on définit une autre section efficace différentielle simple en énergie (Ehrhardt *et al* 1972a) notée  $d\sigma/dE$  et définie par

$$\frac{d\sigma}{dE} \equiv \frac{(2\pi)^4}{k_i} \sum_b \int \prod_j d\mathbf{k}_j \, d\Omega \rho(E) \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2. \quad (1.117)$$

Cette quantité est fonction de l'énergie incidente  $E_0$  et de l'énergie  $E$  de l'électron détecté. Elle représente la distribution énergétique (intégrée sur tous les angles) des électrons diffusés et éjectés après le processus d'ionisation. Elle présente un grand intérêt dans l'étude de perte d'énergie des photoélectrons dans l'ionosphère terrestre, spectre de dégradation dans la chimie des radiations, etc...

### 1.10.2 Sections efficaces différentielles doubles

A l'aide d'une seconde dérivation de l'une des expressions (1.115) ou (1.117) par rapport à la variable complémentaire (l'énergie pour l'équation 1.115 et l'angle  $\Omega$  pour 1.117) on trouve

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_j dE_j} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \rho(E_j) \sum_b \int \prod_{l=1(\neq j)}^v d\mathbf{k}_l \, \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2. \quad (1.118)$$

Cette quantité, fonction de trois paramètres cinématiques  $E_0$ ,  $E_j$  et  $\Omega_j$  contient plus d'informations relatives à la particule détectée (dans la plupart des cas l'électron). Elle mesure la distribution en *angle* et en *énergie* des particules diffusées ou éjectées après la

collision. Ici, le problème de séparation des processus élastiques et inélastiques ne se pose pas. Dans le cas inélastique et selon les conditions cinématiques (symétrique ou asymétrique) de la réaction, il arrive que l'on puisse définir si la particule détectée est diffusée ou éjectée.

### 1.10.3 Sections efficaces différentielles triples

#### 1.10.3.1 Section efficace différentielle triple en (e,2e)

Pour le processus de simple ionisation par impact électronique, que l'on note (e,2e), dû à une collision d'un électron d'énergie  $E_0$  et d'impulsion  $\mathbf{k}_0$ , plus ou moins rapide, relativement aux électrons dans la cible, avec une cible (atome, ion ou molécule), l'électron incident sera diffusé dans une direction  $\Omega_A$  où il sera détecté par un détecteur A avec une énergie  $E_A$  soit une quantité de mouvement  $\mathbf{k}_A$ . Dans le cas où la perte d'énergie est suffisante la cible éjecte un électron secondaire, détecté en coïncidence à l'aide d'un détecteur B, et dont les paramètres cinématiques seront notés par  $E_B$  pour représenter son énergie,  $\mathbf{k}_B$  pour la quantité de mouvement et par  $\Omega_B$  la direction d'éjection. La description la plus détaillée d'une telle collision est contenue dans la section efficace différentielle triple (SEDT)

$$\frac{d^3\sigma}{dE_A d\Omega_A d\Omega_B} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \sum_b \rho(E_A) \rho(E_B) |T_{ba}|^2. \quad (1.119)$$

Cette quantité s'écrit également sous la forme

$$\frac{d^4\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE_A dE_B} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \sum_b \rho(E_A) \rho(E_B) \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2. \quad (1.120)$$

Elle représente la section efficace la plus différentielle que l'on puisse calculer pour les processus de simple ionisation par impact d'électrons, et dépend des paramètres cinématiques  $E_0$ ,  $E_A$ ,  $E_B$ ,  $\theta_A$ ,  $\theta_B$  et  $\varphi_B$ , ( $\varphi_B$  étant l'angle entre les plans  $(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_A)$  et  $(\mathbf{k}_0, \mathbf{k}_B)$ ). Autrement dit, elle mesure la probabilité pour qu'au cours d'un processus d'ionisation un électron incident d'énergie  $E_0$  et d'impulsion  $\mathbf{k}_0$ , après avoir heurté la cible, produise deux électrons d'énergies  $E_A$  et  $E_B$  et de quantités de mouvement  $\mathbf{k}_A$  et  $\mathbf{k}_B$  dans des di-

reactions respectives  $(\theta_A, \varphi_A)$  et  $(\theta_B, \varphi_B)$ . La détermination expérimentale des SEDT est basée sur la technique de détection en coïncidence dans laquelle les énergies et les angles des deux électrons qui sortent de la réaction, proviennent de la même collision. Les mesures expérimentales des SETD fournissent actuellement les tests les plus sensibles de la théorie de l'ionisation simple. Nous étudierons en détail cette quantité dans le prochain chapitre.

### 1.10.3.2 Section efficace différentielle triple pour un processus de photo double ionisation ( $\gamma, 2e$ )

L'un des processus étudiés dans ce travail (chapitre 4) concerne le processus de photo double ionisation (PDI).

Si à côté du premier électron éjecté, une même cible éjecte un second électron par impact de photons, l'expression (1.119) peut se mettre sous la forme

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_B d\Omega_C dE_B} = \frac{4\pi^2}{\omega} \left( \sum_b \right) \rho(E_B) \rho(E_C) |T_{ba}|^2. \quad (1.121)$$

$\omega$  représente l'énergie du photon. Les détails concernant cette quantité sont repris dans le chapitre 4.

### 1.10.4 Sections efficaces différentielles quadruples

L'objectif de notre travail portera également sur les processus de double ionisation (DI). Dans le chapitre 4 nous verrons en détail l'application aux systèmes à deux électrons tels que He, H<sup>-</sup> et Li<sup>+</sup>. Parmi les différentes sections efficaces différentielles qui caractérisent le processus de la double ionisation, on s'intéresse plus particulièrement dans ce paragraphe aux sections efficaces différentielles quadruples. On remarque deux catégories de ces sections efficaces :

- ( $e, 3-1e$ ) de première espèce où l'on détecte en coïncidence les deux électrons éjectés en ignorant le diffusé, la section correspondante s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{d^4\sigma}{d\Omega_B d\Omega_C dE_B dE_C} &= \frac{(2\pi)^4}{k_i} \left( \sum_b \right) \int d\mathbf{k}_A \rho(E_B) \rho(E_C) \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2 \\ &= \frac{(2\pi)^4}{k_i} \left( \sum_b \right) \int d\Omega_A \rho(E_A) \rho(E_B) \rho(E_C) |T_{ba}|^2. \end{aligned} \quad (1.122)$$

Elle est fonction des paramètres cinématiques, l'énergie de l'électron incident  $E_0$  ainsi que les énergies et les directions  $E_B, E_C, \Omega_B, \Omega_C$  des électrons détectés. Elle mesure les distributions énergétiques et angulaires des deux électrons éjectés après la collision.

-(e,3-1e) de seconde espèce où l'on détecte en coïncidence un électron diffusé et l'un des deux électrons éjectés. La section efficace associée s'écrit, (Joulakian et Dal Cappello 1993) :

$$\frac{d^4\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE_A dE_B} = \frac{(2\pi)^4}{k_j} \left( \sum_b \right) \int d\Omega_C \rho(E_A) \rho(E_B) \rho(E_C) |T_{ba}|^2. \quad (1.123)$$

Elle est fonction des paramètres cinématiques, l'énergie de l'électron incident ainsi que les énergies et les directions  $E_A, E_B, \Omega_A, \Omega_B$  des électrons détectés. Elle représente les distributions énergétiques et angulaires des deux électrons l'un diffusé et l'autre éjecté après la collision.

Ces deux quantités sont nettement séparables de point de vue expérimental, vu la différence des énergies des électrons diffusés et celles des électrons éjectés.

### 1.10.5 Section efficace différentielle quintuple (e,3e)

Toujours dans le cadre de la double ionisation, une des sections efficaces différentielles qui caractérise ce phénomène est la section efficace cinq fois différentielle dans une géométrie coplanaire. Elle est définie après dérivation de l'expression (1.122) par rapport à la direction de l'électron diffusé ou de l'expression (1.123) par rapport à la direction de l'éjecté, par :



$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B d\Omega_C dE_A dE_B} = \frac{(2\pi)^4}{k_{i,rel}} \rho(E_A) \rho(E_B) \rho(E_C) |T_{ba}|^2, \quad (1.124)$$

elle est analogue à l'expression

$$\frac{d^6\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B d\Omega_C dE_A dE_B dE_C} = \frac{(2\pi)^4}{k_{i,rel}} \rho(E_A) \rho(E_B) \rho(E_C) \delta(E_a - E_b) |T_{ba}|^2. \quad (1.125)$$

Elle est fonction de l'énergie incidente  $E_0$  et des énergies  $E_A$ ,  $E_B$  et  $E_C$  des électrons diffusés et éjectés, ainsi que de leurs directions de détection respectives  $\Omega_A$ ,  $\Omega_B$  et  $\Omega_C$ . Elle mesure la distribution énergétique et angulaire des électrons diffusés et éjectés d'une même ionisation double. Nous retournerons sur ce sujet dans le chapitre 4.

## 1.11 Diffusion par des particules identiques

Consacrons la dernière partie de ce chapitre aux problèmes de symétrisation dans les systèmes contenant des particules identiques et leur implication dans la description des processus de diffusion et notamment la section efficace de diffusion. On constatera (chapitre 3) que ces effets deviennent de plus en plus importants dans les phénomènes d'ionisation, dès que l'on s'approche de situations cinématiques symétriques.

### 1.11.1 Opérateurs de permutation

En mécanique quantique comme en mécanique classique, une permutation dans un système physique de deux particules identiques n'affecte en aucun cas les *propriétés dynamiques* de ce système. Pour cela, nous considérons un système quantique de  $N$  particules identiques décrit à un moment donné par la fonction d'onde stationnaire  $\psi_\lambda(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$  de l'équation (1.48).  $\xi_k = (\mathbf{r}_k, \sigma_k)$  désigne conventionnellement l'ensemble du vecteur position  $\mathbf{r}_k$  et de la composante de spin  $\sigma_k$  de la  $k$ ème particule. En raison de leurs identités, une permutation quelconque  $P_{ij}$  de deux particules ( $i$  et  $j$  par exemple), n'affecte pas le hamiltonien total  $H$  du système, ce qui nous permet d'écrire :

$$P_{ij}^{-1} H P_{ij} = H. \quad (1.126)$$

Cette permutation permet également de décrire un autre état du système qui est absolument équivalent à l'état antérieur du point de vue physique. La fonction d'onde associée ne peut changer que d'un facteur de phase  $\alpha$ , de sorte que

$$P_{ij} \psi_\lambda(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \lambda \psi_\lambda(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) = \alpha \psi_\lambda(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N). \quad (1.127)$$

Une seconde application de l'opérateur  $P_{ij}$  nous permet de retourner à l'état précédent. Ceci nous conduit à envisager deux éventualités :  $\alpha = \pm 1$

$$\psi_\lambda(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_i, \dots, \xi_N) = \pm \psi_\lambda(\xi_1, \dots, \xi_i, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N). \quad (1.128)$$

D'une manière générale, pour un système de  $N$  particules identiques, on constate  $N!$  permutations différentes. Notons par  $Q$  une de ces permutations transformant  $\xi_i$  en  $\xi_{Qi}$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Elle est obtenue comme produit de permutations simples telle que  $P_{ij}$  interchangeant à la fois deux éléments (équation 1.127). D'après l'équation (1.126), il est évident que

$$[Q, H] = 0, \quad (1.129)$$

$Q$  est une constante de mouvement du système (de  $N$  particules identiques), il en découle ainsi que les états propres  $\psi_\lambda(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$  du hamiltonien  $H$  sont également des états propres de  $Q$ , on obtient,

$$Q \psi_\lambda(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \psi_\lambda(\xi_{Q1}, \xi_{Q2}, \dots, \xi_{QN}) = \delta_Q \psi_\lambda(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N). \quad (1.130)$$

De par la définition de  $Q$  et la relation (1.128), on distingue deux familles de systèmes, l'une pour laquelle  $\delta_Q = 1$  pour toutes les permutations  $Q$  (et on parle de fonction d'onde symétrique). L'autre pour laquelle  $\delta_Q = \pm 1 = (-)^{\pi_Q}$ ,  $\pi_Q$  étant le nombre de permutations  $P_{ij}$  dans  $Q$ , change de signe à chaque permutation de deux particules et la fonction d'onde est dite dans ce cas antisymétrique.

Le choix de description d'un système de particules identiques par une fonction d'onde symétrique ou antisymétrique dépend de la nature des particules (principe de Pauli), plus précisément leurs spins.

Par la suite, nous examinerons l'expression de l'élément de matrice (1.74) lorsque la particule incidente est indiscernable des particules de la cible. Seuls les effets d'échange liés aux conséquences du principe de Pauli seront considérés (on négligera les effets des interactions liées aux spins).

### 1.11.2 Construction de fonctions d'ondes symétrisées

Afin de décrire un système de  $N$  particules identiques, on est mené à construire des fonctions d'ondes symétrisées à partir de celles non symétrisées. Ceci est obtenu en faisant appel à un opérateur symétrisation  $\mathcal{S}$  que l'on peut définir par

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_Q \delta_Q \quad Q. \quad (1.131)$$

On constate deux opérateurs possibles pour des systèmes de  $N$  particules identiques,

$$\mathcal{S}_A = \frac{1}{N!} \sum_Q (-1)^{\pi_Q} Q \quad (\text{antisymétrique})$$

et

$$\mathcal{S}_S = \frac{1}{N!} \sum_Q Q \quad (\text{symétrique}). \quad (1.132)$$

La fonction symétrisée est donnée par :

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{S}(\lambda)} &= C \mathcal{S} \psi_\lambda \\ &= \frac{C}{N!} \sum_Q \delta_Q \psi_\lambda(\xi_{Q1}, \xi_{Q2}, \dots, \xi_{QN}) \end{aligned} \quad (1.133)$$

$C$  étant une constante de normalisation que l'on détermine en écrivant  $\langle \psi_{\mathcal{S}(\lambda)} | \psi_{\mathcal{S}(\lambda)} \rangle = 1$ . En négligeant les interactions entre les particules, la fonction d'onde  $\psi_\lambda$  du système peut

être construite à partir des  $N$  fonctions individuelles  $\chi_{\lambda_1}(\xi_1)$ ,  $\chi_{\lambda_2}(\xi_2)$ , ... et  $\chi_{\lambda_N}(\xi_N)$  des  $N$  particules,

$$\psi_{\lambda}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \chi_{\lambda_1}(\xi_1) \chi_{\lambda_2}(\xi_2) \dots \chi_{\lambda_N}(\xi_N), \quad (1.134)$$

dans ce cas l'équation (1.133) s'écrit

$$\psi_{\mathcal{D}A}(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \chi_{\lambda_1}(\xi_1) & \chi_{\lambda_2}(\xi_1) & \dots & \chi_{\lambda_N}(\xi_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \chi_{\lambda_1}(\xi_N) & \chi_{\lambda_2}(\xi_N) & \dots & \chi_{\lambda_N}(\xi_N) \end{vmatrix} \quad (1.135)$$

pour un système antisymétrique, et

$$\psi_{\mathcal{D}S}(\lambda) = \frac{C_S}{\sqrt{N! n_1! n_2! \dots}} \sum_P \chi_{\lambda_1}(\xi_{P1}) \chi_{\lambda_2}(\xi_{P2}) \dots \chi_{\lambda_M}(\xi_{PN}) \quad (1.136)$$

pour un système symétrique,  $n_j$  étant le nombre de particules existant dans des états  $\lambda_j$ . Un cas particulier très important, celui de deux particules identiques dans deux états  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$ . L'opérateur symétrisation de l'équation (1.132) se réduit ici à  $\mathcal{D} = \frac{1}{2} [1 \pm Q_{12}]$ . La fonction d'onde symétrisée s'écrit :

$$\psi_{\mathcal{D}} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_{\alpha_1}(\xi_1) \chi_{\alpha_2}(\xi_2) \pm \chi_{\alpha_1}(\xi_2) \chi_{\alpha_2}(\xi_1)] \quad (1.137)$$

Finalement, on pourra remarquer que toutes ces propriétés de symétrisation et d'antisymétrisation ainsi appliquées aux fonctions d'ondes peuvent être transposées aux paquets d'ondes associés.

### 1.11.3 Evaluation de la section efficace de diffusion (effets d'échange)

A présent, nous sommes en mesure d'évaluer la section efficace de diffusion de particules identiques dont l'état initial est supposé être  $\phi_{\mathcal{D}(\alpha)}(t_0)$ , une forme symétrisée de  $\phi_{\alpha}(t_0)$

$$\begin{aligned}
\phi_{\mathcal{S}(a)}(t_0) &= \frac{C}{N!} \sum_P \delta_P P \phi_a(t_0) \\
&= \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) e^{-iE_a t_0} \frac{C}{N!} \sum_P \delta_P P \chi_a \\
&= \int d\mathbf{q} A(\mathbf{q}) e^{-iE_a t_0} \chi_{\mathcal{S}(a)}.
\end{aligned} \tag{1.138}$$

La matrice de diffusion  $T$  de l'équation (1.74) est définie en termes d'états symétrisés par l'élément de matrice

$$\begin{aligned}
T_{S(b',a)} &= \langle S(b') | T | S(a) \rangle \\
&= \left\langle \chi_{S(b')} \left| V + V \frac{1}{E_a + i\epsilon - H} \right| \chi_{S(a)} \right\rangle.
\end{aligned} \tag{1.139}$$

La condition de conservation de la quantité de mouvement totale permet de réduire l'expression (1.129) comme dans l'équation (1.74)

$$\langle \mathcal{S}(b') | \mathcal{F} | \mathcal{S}(a) \rangle = \delta(\mathbf{P}_b - \mathbf{P}_a) T_{\mathcal{S}(b',a)}, \tag{1.140}$$

on peut démontrer facilement que l'élément

$$\begin{aligned}
T_{\mathcal{S}(b',a)} &= \langle \mathcal{S}(b') | T | \mathcal{S}(a) \rangle \\
&= \frac{CC'}{N!} \sum_P \delta_P \langle P(b) | T | a \rangle.
\end{aligned} \tag{1.141}$$

Afin de simplifier l'expression (1.141), nous allons nous intéresser à un cas très important dans le cadre de la diffusion des particules élémentaires simples par des systèmes ayant une structure un peu plus compliquée. Considérons pour cela un système de  $N = N_0 + 1$  particules identiques dont les  $N_0$  particules sont liées de manière à ce qu'elles forment un atome, ion ou une molécule. L'autre particule se trouve dans un état de continuum. L'état du système total ainsi formé est décrit par la fonction d'onde

$$\chi_a(\xi_0, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N_0}) = \chi_{a1}(\xi_0) \chi_{a2}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N_0}). \tag{1.142}$$

La fonction d'onde symétrisée correspond à la projection

$$\chi_{S(a)} = \frac{C}{N!} \sum_P \delta_P P \chi_{a1}(\xi_0) \chi_{a2}(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N_0}), \quad (1.143)$$

$$\chi_{S(a)} = \frac{1}{\sqrt{N_0+1}} \left[ 1 + \sum_{j=1}^{N_0} \delta_j Q_{oj} \right] \chi_a. \quad (1.144)$$

En tenant compte dans l'expression (1.141) de tous les arguments qui ont permis de réduire l'expression (1.143) en (1.144), l'élément de matrice sera réduit alors à

$$\begin{aligned} T_{S(b,a)} &= \frac{1}{N_0!} \sum_Q \delta_Q \langle Q(b) | T | a \rangle \\ &= \langle b | T | a \rangle + \sum_{j=1}^{N_0} \delta_j \langle Q_{oj}(b) | T | a \rangle. \end{aligned} \quad (1.145)$$

Le premier terme de l'équation (1.145) représente l'amplitude de diffusion directe et le second terme représente l'amplitude de diffusion avec toutes les possibilités d'échange. Dans l'annexe B, nous analyserons en détail les effets associés à la présence de particules identiques dans les processus de diffusion et en particulier dans l'ionisation des cibles d'hydrogène et d'hélium par impact d'électrons.

# Chapitre 2

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

### 2.1 Introduction

L'étude des systèmes atomiques (ou ioniques) à deux électrons constitue l'un des objectifs importants de ce mémoire, avec des structures d'états liés dans lesquelles nous analysons l'effet des corrélations (radiales et/ou angulaires) des deux électrons dans l'état fondamental en fonction de la charge  $Z$  du noyau. D'autre part, l'aspect dynamique des corrélations quand ces électrons sont dans un continuum et en présence d'un champ coulombien sera étudié. Tout d'abord nous allons procéder à l'étude de l'antisymétrisation des fonctions d'ondes susceptibles de décrire ces systèmes.

### 2.2 Antisymétrisation des fonctions d'ondes d'un système à deux électrons

L'équation de Schrödinger associée au mouvement de deux électrons

$$\left[ \Delta_1 + \Delta_2 + 2E + 2Z \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) - \frac{2}{r_{12}} \right] u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (2.1)$$

reste invariante lorsqu'on permute les coordonnées du premier avec celles du second électron (l'équation 1.133). Cependant,  $u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  et  $u(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$  possèdent les mêmes propriétés et vérifient la même équation différentielle (2.1). Comme dans l'équation (1.135), on peut définir ici deux fonctions d'ondes

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \pm u(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1), \quad (2.2)$$

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

Afin de décrire complètement les systèmes à deux électrons, nous devons tenir compte des spins de ces derniers. La fonction d'onde complète dépend naturellement des coordonnées des spins des deux électrons. Du fait que l'équation (2.1) ne comporte pas de terme de spin, le hamiltonien correspondant reste indifférent, ce qui est valable dans le cadre de l'approximation non relativiste. Il est possible alors de construire la fonction totale comme étant le produit de deux fonctions

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2). \quad (2.3)$$

En terme de spin total  $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$  et de sa projection  $S_z = s_{1z} + s_{2z}$  sur l'axe  $z$ , on peut construire les quatre états de spin comme états propres aux opérateurs  $\mathbf{S}^2$  et  $S_z$  dont les valeurs propres sont respectivement  $S(S+1)$  et  $M_s$  où  $S = 1, 0$  et  $M_s = -S, -S+1, \dots, S$ .

Les fonctions d'ondes de spin possibles correspondent aux trois (triplet) états orthogonaux symétriques avec  $S=1$  et  $M_s = -1, 0$  ou  $1$

$$\begin{aligned} \chi_{T+1}(\sigma_1, \sigma_2) &= \alpha(1)\alpha(2) \quad \text{si} \quad M_s = 1, \\ \chi_T(\sigma_1, \sigma_2) &= S_{T-1}(1,2) = \beta(1)\beta(2) \quad \text{si} \quad M_s = -1 \text{ et} \\ S_{T0}(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \quad \text{si} \quad M_s = 0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

et un état antisymétrique singulet ( $S = 0$  et  $M_s = 0$ ) orthogonal aux trois ci-dessus



$$\chi_s(\sigma_1, \sigma_2) = S_s(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] . \quad (2.5)$$

Les fonctions d'ondes totales pour un système atomique à deux électrons s'écrivent

$$\psi_T(\xi_1, \xi_2) = [u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - u(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \chi_T(\sigma_1, \sigma_2), \quad (2.6a)$$

pour les états triplets et

$$\psi_S(\xi_1, \xi_2) = [u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + u(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \chi_S(\sigma_1, \sigma_2), \quad (2.6b)$$

pour l'état singulet.

Nous allons nous intéresser par la suite à cette dernière fonction, afin de décrire l'état fondamental des différents systèmes à deux électrons. Dans la suite du problème, nous porterons notre intérêt sur la partie orbitale en ignorant toute composante de spin.

## 2.3 Etat fondamental

Dans cette partie, nous proposons de construire un ensemble de fonctions propres susceptibles de représenter l'état fondamental d'un système atomique de deux électrons liés qui interagissent mutuellement et avec un noyau selon un potentiel de la forme

$$V = V_{en} + V_{ee} , \quad (2.7)$$

$V_{en}$  et  $V_{ee}$  sont respectivement l'énergie potentielle électrons-noyau et l'énergie d'interaction des deux électrons. Comme il a été mentionné dans le chapitre 2, on peut séparer le mouvement de l'état interne (les deux électrons) et celui du centre de masse. Ce dernier sera confondu avec le noyau de l'atome vu sa très grande masse.

En unités atomiques de Hartree, les deux termes de l'équation (2.8) peuvent s'écrire :

$$V_{en} = -Z \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right), \quad V_{ee} = \frac{1}{r_{12}} . \quad (2.8)$$

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

Le hamiltonien du système peut s'écrire sous la forme

$$H = K_1 + K_2 + V_{en} + V_{ee} , \quad (2.9)$$

$K_i$  est l'opérateur énergie cinétique du  $i$ ème électron et s'écrit, en unité atomique de Hartree,

$$K_j = -\frac{1}{2} \Delta_j \quad (j = 1, 2) \quad (2.11)$$

où  $\Delta_i$  est l'opérateur laplacien du  $i$ ème électron.

Compte tenu de la présence du terme  $V_{ee}$  dans l'expression du hamiltonien, l'équation (2.9) ne permet pas de séparer les mouvements des deux électrons et il n'existe pas de solutions analytiques exactes.

### 2.3.1 Méthodes d'approximations

A la différence des solutions du problème de l'atome de l'hydrogène, les solutions de l'équation différentielle (2.1) des systèmes à deux électrons ne peuvent être formulées qu'avec des expressions approchées. La construction des fonctions propres  $u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  et des énergies propres  $E$  correspondantes peut être réalisée à l'aide des méthodes d'approximations à savoir la méthode des perturbations, la méthode variationnelle de Ritz et parfois leur combinaison simultanée.

#### a) Méthode des perturbations

Afin de pouvoir résoudre approximativement à l'aide de la méthode des perturbations l'équation de la forme générale

$$H\varphi = E\varphi \quad (2.11)$$

où  $H$  est le hamiltonien pour lequel on ne peut pas exprimer explicitement ni l'état propre  $\psi$  ni la valeur propre  $E$ , on doit écrire le hamiltonien  $H$  sous la forme,  $H = H_0 + \lambda H_1$  où :

$$H_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + V_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.12a)$$

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

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

$$H_0 = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + V(r_1) + V(r_2), \quad (2.12b)$$

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

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

$$(H_0 + \lambda H_1 - E)\varphi = 0, \quad (2.13)$$

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

$$E = \sum \lambda^n E_n, \quad \varphi = \sum \lambda^n \varphi_n. \quad (2.14)$$

L'état non perturbé  $\varphi_0$  et l'énergie  $E_0$  associée vérifient l'approximation d'ordre zéro donnée par l'équation

$$(E_0 - H_0)\varphi_0 = 0. \quad (2.15)$$

### b) Méthode variationnelle

L'une des méthodes les plus convenables au traitement du problème de l'état fondamental de l'atome d'hélium est la procédure variationnelle de Ritz. Elle consiste, afin de résoudre de manière approchée l'équation (2.11), de choisir une fonction d'essai  $\varphi_\lambda$  de sorte que l'expression intégrale

$$E(\lambda) = \langle \lambda | H | \lambda \rangle / \langle \lambda | \lambda \rangle, \quad (2.16)$$

soit minimale. Quand la fonction  $\varphi_\lambda$  coïncide avec une des solutions propres  $\varphi$  de l'équation (2.11),  $E(\lambda)$  devient l'énergie propre  $E$  associée. Lorsque cette fonction diffère légèrement de la fonction  $\varphi$ , la fonction  $E(\lambda)$  devient légèrement supérieure à  $E$ .

Considérons un état *fondamental*  $\varphi_g$  correspondant à un niveau d'énergie  $E_g$  le plus bas. En écrivant  $\varphi_\lambda$  sous la forme

$$\varphi_\lambda = \varphi_g + \delta\varphi_h, \quad (2.17)$$

$\varphi_h$  une fonction propre de  $H$ , orthogonale à l'état  $\varphi_g$ , dont l'énergie propre  $E_h$  associée satisfait la condition  $E_h \geq E_g$ . L'expression (2.16) devient

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \langle \varphi_g + \delta\varphi_h | H | \varphi_g + \delta\varphi_h \rangle / \langle \varphi_g + \delta\varphi_h | \varphi_g + \delta\varphi_h \rangle \\ &= E_g + \delta^2(E_h - E_g) + 0(\delta^4) \geq E_g. \end{aligned} \quad (2.18)$$

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

### 2.3.2 Application au problème des systèmes héliumoïdes

Pour chaque  $Z$  compris entre 1 et 15 (afin de négliger les effets relativistes), nous construisons cinq fonctions susceptibles de décrire l'état fondamental d'un système atomique ou ionique à deux électrons. Ces fonctions d'ondes sont obtenues systématiquement à partir du principe variationnel.

**a)** la première va consister à établir les paramètres d'une fonction analytique du type Hylleraas (Tweed 1973)

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N_0 \exp[-\alpha(r_1 + r_2)], \quad (2.19a)$$

où  $N_0$  est un facteur de normalisation. Cette fonction ne contient aucune corrélation, ni radiale, ni angulaire.

**b)** la seconde tentera de prendre en compte les corrélations angulaires des mouvements électroniques, avec la plus simple des fonctions

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N_1 \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] e^{\gamma r_{12}}, \quad (2.19b)$$

$r_{12}$  désigne ici la distance mutuelle entre les deux électrons.

**c)** par comparaison avec le problème des hydrogénoïdes où la fonction d'onde peut-être déterminée à partir de l'examen du comportement à l'origine ( $r \rightarrow 0$ ) des solutions radiales

$$\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2Z}{r} + E \xrightarrow{r \rightarrow 0} \left( \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2Z}{r} \right),$$

soit

$$\left( \frac{1}{r} \frac{d}{dr} + \frac{Z}{r} \right) \psi = 0,$$

d'où

$$\psi = N e^{-Zr}.$$

Pour  $\rho \rightarrow 0$  on a également

$$-\Delta_\rho + \frac{1}{\rho} - \varepsilon \xrightarrow{\rho \rightarrow 0} -\frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho},$$

par suite

$$\chi(\rho) = N \exp(\rho/2).$$

Le comportement à l'origine justifie d'écrire une solution approchée possible, sous la forme :

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N \exp[-Z(r_1 + r_2)] \exp(\rho/2). \quad (2.19c)$$

Cette expression possède la propriété remarquable de satisfaire aussi le théorème du viriel (Bethe et Salpeter 1957). La forme de cette fonction justifie par ailleurs une généralisation variationnelle représentée par la seconde solution (**b**) dans laquelle le paramètre  $\alpha$  correspond à  $Z$  et  $\gamma = 1/2$ .

Afin de tenir compte des corrélations radiales, on est amené à prendre  $\alpha \neq \beta$ , soit une fonction d'onde de type  $e^{-\alpha r_1} e^{-\beta r_2}$  à la place de la solution (**a**) avec évidemment une symétrisation de celle-ci, ce qui engendre les deux possibilités suivantes :

**d)** une fonction ne tenant compte que des corrélations radiales avec  $\gamma = 0$

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N [\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2)]; \quad (2.19d)$$

e) une fonction d'onde tenant compte à la fois des corrélations radiales et angulaires.

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N [\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2)] e^{\gamma \rho}. \quad (2.19e)$$

Les éléments de calcul nécessaires à la recherche des solutions de types (b), (d) et (e) pourront donc également être utilisés pour l'étude du troisième cas (c). Enfin, en imposant  $\gamma = 0$ , on établira immédiatement des solutions de type (a). Par commodité pour les calculs analytiques, on prendra ici de plus l'expression générale

$$u(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N \exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) e^{\gamma \rho}, \quad (2.20)$$

où il faut déterminer  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , de telle sorte que l'élément de matrice du hamiltonien  $H$  soit minimal.

#### A) Normalisation de la fonction d'onde

La normalisation de la fonction d'onde  $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N [\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2)] e^{\gamma \rho}$  impose de satisfaire l'égalité suivante

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = 1. \quad (2.21)$$

Plus généralement, on sera conduit à calculer des intégrales de type

$$I_{l,m,n}(a,b,c) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 r_1^l r_2^m \rho^n \exp(-a r_1 - b r_2) e^{c\rho}, \quad (2.22a)$$

qu'on pourra calculer par dérivations successives en  $a$ ,  $b$  et  $c$  de l'expression  $I_{-1,-1,-1}(a,b,c)$  calculée dans l'annexe B

$$I_{l,m,n}(a,b,c) = (-)^{l+m} \left( \frac{\partial^l}{\partial a^l} \frac{\partial^m}{\partial b^m} \frac{\partial^n}{\partial c^n} \right) I_{-1,-1,-1}(a,b,c), \quad (2.22b)$$

avec évidemment

$$I_{-1,-1,-1}(a,b,c) = (4\pi)^2 [(a+b)(a-c)(b-c)]^{-1}. \quad (2.23)$$

Donc la relation de normalisation ci-dessus devient

$$N^2 = [I_{0,0,0}(a,b,c) + I_{0,0,0}(b,a,c) + 2 I_{0,0,0}(\frac{1}{2}(a+b), \frac{1}{2}(a+b),c)]^{-1}, \quad (2.24)$$

avec

$$I_{0,0,0}(a,b,c) = (4\pi)^2 \left( \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial b} \frac{\partial}{\partial c} \right) [(a+b)(a-c)(b-c)]^{-1}. \quad (2.25)$$

## B) Calcul des éléments de matrice de H

### i) Calcul de l'énergie potentielle

Le calcul de l'énergie potentielle nécessitera, comme dans le cas de la normalisation de la fonction d'essai, la connaissance de l'expression analytique de  $I_{-1,-1,-1}$  et ses différents termes seront obtenus à un facteur près par dérivation en  $a$  et  $b$ , en  $a$  et  $c$  ou en  $b$  et  $c$  respectivement pour les interactions électron-électron, électron 1 - noyau et électron 2 - noyau. Il suffit tout simplement de remarquer que

$$\left\langle u \left| \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right| u \right\rangle = (4\pi N)^2 \left( \frac{\partial}{\partial c} \right) \left( \frac{\partial}{\partial a} + \frac{\partial}{\partial b} \right) [(a+b)(a-c)(b-c)]^{-1} \quad (2.26a)$$

$$\left\langle u \left| \frac{1}{\rho} \right| u \right\rangle = (4\pi N)^2 \left( \frac{\partial}{\partial a} \frac{\partial}{\partial b} \right) [(a+b)(a-c)(b-c)]^{-1}. \quad (2.26b)$$

Les étapes de calcul sont données dans l'annexe B.

### ii) Calcul de l'énergie cinétique

Le calcul de l'énergie cinétique représentée par l'élément de matrice  $\langle \varphi | K | \varphi \rangle$ , va se faire en deux étapes. Dans un premier temps, on examinera l'action de l'opérateur  $K$  sur la fonction d'onde  $\varphi$  (annexe B), ce qui revient à écrire son expression explicitement en fonction des paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $r_1$ ,  $r_2$  et  $\rho$ . La seconde étape consistera à calculer l'intégrale qui correspond au terme  $\langle \varphi | K | \varphi \rangle$ . Tous les résultats sont développés en appendice et conduisent à

$$Ku = \left( -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} - \gamma^2 + \frac{\alpha}{r_1} + \frac{\beta}{r_2} - \frac{2\gamma}{\rho} + \alpha\gamma \frac{r_1^2 - r_2^2 + \rho^2}{2r_1\rho} + \beta\gamma \frac{r_2^2 - r_1^2 + \rho^2}{2r_2\rho} \right) u. \quad (2.27)$$

La relation ci-dessus constitue l'expression de l'opérateur énergie cinétique lorsque celui-ci agit sur la fonction d'onde (2.20).

L'élément de matrice correspondant peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \langle u | K | u \rangle = & \left( -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2} - \gamma^2 \right) I_{0,0,0} + \alpha I_{0,-1,0} + \beta I_{0,-1,0} - 2\gamma I_{0,0,-1} \\ & + \gamma/2 \left[ \alpha (I_{1,0,-1} - I_{-1,2,-1} + I_{-1,0,1}) + \beta (I_{0,1,-1} - I_{2,-1,-1} + I_{0,-1,1}) \right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Il reste donc à déterminer les paramètres  $a = 2\alpha$ ,  $b = 2\beta$  et  $c = 2\gamma$  qui minimisent l'énergie totale du système considéré, tout en vérifiant le théorème du viriel  $-2\langle K \rangle = \langle V \rangle$ .

Pour la première fonction d'onde (a) la minimisation donne directement  $a = b = 2Z-5/8$  et  $c = 0$ . A l'aide du système de coordonnées elliptiques et la distance interparticule

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2 \quad \text{et} \quad u = r_{12}, \quad (2.29)$$

le potentiel  $V$  s'écrit en terme de variables  $s$ ,  $t$  et  $u$

$$V = -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = -Z \frac{4s}{s^2 - t^2} + \frac{1}{u}. \quad (2.30)$$

Par définition les variables  $s$  et  $u$  sont positives, alors que  $t$  peut aussi bien prendre des valeurs positives que négatives. L'élément de volume dans ce cas s'écrit

$$d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u \, dt \, du \, ds, \quad (2.31)$$

le hamiltonien  $H$  du système,

$$H = -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) + V. \quad (2.32)$$

En utilisant le théorème de Green,

$$-\int d\tau \varphi_\lambda^* \Delta \varphi_\lambda = \int d\tau (\nabla \varphi_\lambda)^2 \quad (2.33)$$

et exprimant le gradient  $\nabla$  en terme de  $s$ ,  $t$  et  $u$ , le principe variationnel (2.23) prend finalement la forme



$$N^{-1} \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \{ u(s^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial u} \right)^2 \right] + 2 \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial u} \times \\ \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \varphi_\lambda}{\partial t} \right] - \varphi_\lambda^2 [4Zsu - s^2 - t^2] \} = E(\lambda), \quad (2.34)$$

avec

$$N = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u(s^2 - t^2) \varphi_\lambda^2. \quad (2.35)$$

En première approximation, proposons d'étudier une fonction d'essai simple  $\varphi_\lambda$  ne dépendant que de la variable  $s$ . Ce choix correspond exactement au cas (a) cité plus haut et permet d'écrire

$$\varphi_\lambda(s) = N \exp(-\alpha s) = N \exp[-\alpha(r_1 + r_2)]. \quad (2.36)$$

En intégrant successivement l'expression (2.34) par rapport aux variables  $t$  et  $u$

$$\int_0^\infty ds \left\{ \frac{4}{15} s^5 \left( \frac{d\varphi_\lambda}{ds} \right)^2 - (Z4/3 - 5/12) s^4 \varphi_\lambda^2 \right\} = \frac{4}{15} E(\lambda) \int_0^\infty ds s^5 \varphi_\lambda^2, \quad (2.37)$$

le principe variationnel devient

$$\delta \int_0^\infty ds \left\{ \frac{4}{15} s^5 \left( \frac{d\varphi_\lambda}{ds} \right)^2 - \left( \frac{4}{3} Z - \frac{5}{12} \right) s^4 \varphi_\lambda^2 - \frac{4}{15} E(\lambda) s^5 \varphi_\lambda^2 \right\} = 0. \quad (2.38)$$

A l'aide de l'expression

$$\int_0^\infty ds s^5 \left( \frac{d\varphi_\lambda}{ds} \right)^2 = - \int_0^\infty ds \left\{ s^5 \varphi_\lambda \varphi_\lambda'' + 5 s^4 \varphi_\lambda \varphi_\lambda' \right\} + \left[ s^5 \varphi_\lambda \varphi_\lambda' \right]_0^\infty,$$

l'équation intégrale (2.38) se réduit à l'équation différentielle suivante

$$\varphi_\lambda'' + 5 s^{-1} \varphi_\lambda' + (E + 5 s^{-1} - 25/16 s^{-1}) \varphi_\lambda = 0. \quad (2.39)$$

En portant l'expression (2.36) de  $\varphi_\lambda$  et en remplaçant  $\alpha$  par  $Z-\sigma$  on trouve

$$(Z-\sigma)^2 - 5s^{-1}(Z-\sigma) + 5s^{-1}(Z-5/16) = E(\sigma). \quad (2.40)$$

Le paramètre  $\sigma$  représente l'écrantage partiel de chaque électron en présence de l'autre. Il reste ensuite à minimiser  $E(\sigma)$ . La plus basse valeur propre  $E$  de cette équation est  $-(Z - \frac{5}{16})^2$ . Elle correspond à la fonction d'onde (2.19a) avec un seul paramètre variationnel  $\alpha = Z - \frac{5}{16}$ . Les résultats relatifs au calcul des paramètres  $a$ ,  $b$  et  $c$  des différentes fonctions d'ondes, ainsi que les énergies correspondantes sont donnés sous forme de tableaux (tableaux 2.1). La situation pour laquelle  $a = b = 2Z$  et  $c = 1$  ne figure pas dans ces tableaux.

$Z$	$a$	$E (u.a.)$	<i>Viriel</i>
1	.687500	-.472656	-2
2	1.68750	-2.84766	-2
3	2.68750	-7.22266	-2
4	3.68750	-13.5977	-2
5	4.68750	-21.9727	-2
6	5.68750	-32.3477	-2
7	6.68750	-44.7227	-2
8	7.68750	-59.0977	-2
9	8.68750	-75.4727	-2
10	9.68750	-93.8477	-2
11	10.6875	-114.223	-2
12	11.6875	-136.598	-2
13	12.6875	-160.973	-2
14	13.6875	-187.348	-2
15	14.6875	-215.747	-2

**Tableau 2.1a** Liste des paramètres variationnels correspondant à l'approximation (a) ( $a = b$  et  $c=0$ ) ainsi que les énergies associées. L'angle moyen entre les deux électrons dans la cible est  $90^\circ$ .

$Z$	$a$	$c$	$E (u.a.)$	<i>Viriel</i>
1	.852833	.225888	-.507901	-2
2	.185809(1)	.254746	-.288962(1)	-2
3	.285995(1)	.264064	-.726682(1)	-2
4	.386089(1)	.268647	-.136429(2)	-2
5	.486147(1)	.271371	-.220186(2)	-2
6	.586185(1)	.273175	-.323940(2)	-2
7	.686212(1)	.274458	-.447693(2)	-2
8	.786233(1)	.275417	-.591445 (2)	-2
9	.886249(1)	.276161	-.755197(2)	-2
10	.986262(1)	.276755	-.938949(2)	-2
11	.108627(2)	.277240	-.114270(3)	-2
12	.118628(2)	.277644	-.136645(3)	-2
13	.128629(2)	.277985	-.161020 (3)	-2
14	.138629(2)	.278278	-.187395(3)	-2
15	.148630(2)	.278531	-.215770(3)	-2

**Tableau 2.1b** Liste des paramètres variationnels correspondant à l'approximation (b) ( $a = b$   $c \neq 0$ ) ainsi que l'énergie associée et l'angle moyen entre les deux électrons.

$Z$	$a$	$b$	$E (u.a.)$	$Viriel$
1	.283221	1.03923	-.513303	-2
2	1.18853	2.18317	-2.87566	-2
3	2.07898	3.29491	-7.24875	-2
4	2.98472	4.38973	-13.6230	-2
5	3.90126	5.47341	-21.9975	-2
6	4.82568	6.54910	-32.3723	-2
7	5.75614	7.61870	-44.7471	-2
8	6.69140	8.68348	-59.1220	-2
9	7.63060	9.74431	-75.4969	-2
10	8.57309	10.8018	-93.8718	-2
11	9.51839	11.8565	-114.247	-2
12	10.4661	12.9088	-136.622	-2
13	11.4160	13.9589	-160.997	-2
14	12.3678	15.0072	-187.372	-2
15	13.3213	16.0537	-215.747	-2

**Tableau 2.1d** Liste des paramètres variationnels correspondant à l'approximation (d) ( $a \neq b$  et  $c=0$ ) ainsi que les énergies associées .

$Z$	$a$	$b$	$c$	$E (u.a.)$	$Viriel$
1	.483743	1.07502	.146564	-.523866	-2
2	1.44058	2.20656	.207329	-.289953(1)	-2
3	2.36215	3.29804	.220721	-.727571(1)	-2
4	3.29214	4.37361	.226912	-.136514(2)	-2
5	4.22932	5.43955	.230497	-.220268(2)	-2
6	5.17204	6.49882	.232837	-.324021(2)	-2
7	6.11913	7.55312	.234486	-.447773(2)	-2
8	7.06975	8.60352	.235711	-.591524(2)	-2
9	8.02328	9.65078	.236657	-.755275(2)	-2
10	8.97927	10.6954	.237409	-.939026(2)	-2
11	9.93738	11.7378	.238022	-.114278(3)	-2
12	10.8973	12.7783	.238530	-.136653(3)	-2
13	11.8589	13.8171	.238960	-.161028(3)	-2
14	12.8219	14.8544	.239327	-.187403(3)	-2
15	13.7862	15.8903	.239644	-.215778(3)	-2

**Tableau 2.1e** Paramètres variationnels correspondant à l'approximation (e) ( $a \neq b$  et  $c \neq 0$ ) et les énergies associées ainsi que l'angle moyen.

### 2.3.3 Autres approximations

Posons maintenant que la fonction d'onde  $\varphi$  dépend des trois variables  $s$ ,  $t$  et  $u$ , soit :

$$\varphi_\lambda(s,t,u) = \varphi(\kappa s, \kappa t, \kappa u) \quad (2.41)$$

et à l'aide de l'approximation précédente (2.36) on peut écrire

$$\varphi(s,t,u) = e^{-s/2} \sum_m A_m(s,t) u^m \quad (2.42)$$

Afin de reproduire le premier résultat (2.36) il suffit de prendre tous les  $A_m = 1$  et  $\kappa = 2Z - \frac{5}{8}$ . Un développement de  $A_m(s,t)$  en série de puissances des variables  $s$  et  $t$  permet d'écrire

$$A_m = \sum_{\ell, n} a_{\ell n}^m s^\ell t^{2\ell} \quad (2.43)$$

Afin que la fonction d'onde (2.41) soit symétrique, on ne prend dans le développement de  $A_m$  que des termes en puissances paires de  $t$ . L'énergie associée peut s'écrire :

$$E = \frac{k^2 M - kL}{N}, \quad (2.44)$$

où

$$L = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt (4Zsu - s^2 - t^2) \varphi^2(s,t,u) ,$$

$$M = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \left[ \left( \frac{\partial \varphi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \varphi}{\partial u} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + [2s(u^2 - t^2) \frac{\partial \varphi^2}{\partial s \partial u} + 2t(s^2 - u^2) \frac{\partial \varphi^2}{\partial t \partial u}] \right\}$$

et

$$N = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u(s^2 - t^2) \varphi^2(s,t,u).$$

Pour des systèmes à deux électrons, parmi les méthodes *simples* permettant l'introduction des effets des corrélations dues au terme potentiel répulsif  $r_{12}^{-1}$  des deux électrons, celle qui a été suggérée à l'origine par Hylleraas. Il a ainsi proposé des fonctions d'ondes de type (2.42) qui décrivent *presque parfaitement* ces systèmes, mais leur application dans les calculs des sections efficaces relatives aux problèmes de collisions sont difficiles et relativement impossibles.

Hart et Herzberg (1957) ont utilisé pour décrire les systèmes H, He, Li<sup>+</sup>, B<sup>3+</sup>, O<sup>6+</sup>, Ne<sup>8+</sup> et Mg<sup>10+</sup> la fonction (2.42) dans laquelle ils ont développé les  $A_m$  (pour  $m$  allant de 0 jusqu'à 5) en puissances de  $r_1$ ,  $r_2$  à la place du développement (2.43). On obtient ainsi (Tweed 1973) la fonction de type

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{-\kappa(r_1+r_2)} \sum_l P_l(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) R_l(r_1, r_2). \quad (2.45a)$$

Les harmoniques sphériques

$$P_l(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = \sum_m \frac{4\pi}{2l+1} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}_2)$$

sont dues au termes du développement de  $u = r_{12}$  et permettent de décrire la contribution des corrélations angulaires. Byron et Joachain (1966 et 1967) ont également proposé d'autres fonctions d'ondes plus simples et semblables à l'expression (2.45a),

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{-\kappa(r_1+r_2)} \sum_l P_l(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) (r_1^m r_2^n + r_1^n r_2^m). \quad (2.45b)$$

Les fonctions d'ondes de type (2.45a et b) présentent l'avantage de mieux décrire les systèmes à deux électrons que les fonctions (2.19a-e), mais ne peuvent être adaptées aux problèmes de collision qu'avec un traitement en ondes partielles (Tweed 1980). Dans le tableau 2.2, on montre une comparaison des résultats relatifs à ces deux types de fonctions.

	Byron et Joachain		Hart et Herzberg
	31 paramètres	41 paramètres	
H <sup>-</sup>	0.5264	0.5263	0.5276447
He	2.9018	2.9022	2.9037179
Li <sup>+</sup>	7.2775	7.2781	7.2799054

**Tableau 2.2** Comparaison des énergies, en unités atomiques, données par les deux fonctions qui correspondent aux approximations (2.45a) et (2.45b).

### 2.3.4 Comportement angulaire des deux électrons

Avant de passer à la section suivante, il est intéressant d'analyser le comportement angulaire des deux rayons vecteurs correspondants aux deux électrons de l'atome ou l'ion considéré, ce qui nous amène au calcul de l'élément de matrice  $\langle \varphi | \cos \theta | \varphi \rangle$ . Les calculs sont développés dans l'annexe B et conduisent aux résultats :

$$\langle \varphi | \cos \theta | \varphi \rangle = \langle \varphi | \frac{r_1^2 + r_2^2 - \rho^2}{2r_1 r_2} | \varphi \rangle ; \quad (2.46)$$

soit

$$\langle \varphi | \cos \theta | \varphi \rangle = \frac{N^2}{2} [J_{1,-1,0}(a,b,c) + J_{-1,1,0}(a,b,c) - J_{-1,-1,2}(a,b,c)], \quad (2.47)$$

avec la notation

$$J_{l,m,n}(a,b,c) = I_{l,m,n}(a,b,c) + I_{l,m,n}(b,a,c) + 2 I_{l,m,n}(\frac{1}{2}(a+b), \frac{1}{2}(a+b), c).$$

En appliquant les résultats de l'annexe B on se ramène (par exemple pour la fonction type  $a$ ) à la relation suivante

$$\langle \varphi | \cos \theta | \varphi \rangle = \frac{(4\pi N)^2}{2} \left( \frac{\partial^3}{\partial a^2 \partial c} + \frac{\partial^3}{\partial b^2 \partial c} - \frac{\partial^3}{\partial c^3} \right) [(a+b)(a-c)(b-c)]^{-1}. \quad (2.48)$$

Après dérivations et en appliquant les relations (2.22b) et (2.23), pour la fonction ( $a$ ) par exemple, on trouve facilement

$$\langle \varphi | \cos \theta | \varphi \rangle = 1 - \frac{8x^2}{D}, \quad (2.49)$$

où  $D = 1 + 3x + 4x^2$  et  $x = a/(a-c)$ . La relation (2.49) montre que l'angle  $\theta$  tend vers  $\frac{\pi}{2}$  lorsque  $x$  tend vers 1 et que  $\theta$  tend vers  $\pi$  lorsque  $x$  tend vers  $\infty$ . Autrement dit, les deux électrons du système héliumoïde ont tendance à occuper des directions perpendiculaires quand le paramètre de corrélation  $c$  est égal à 0, alors que ces directions tendent à devenir colinéaires quand  $x$  devient infini. Les résultats numériques qui correspondent aux approximations (2.20a-e) figurent dans le tableau 2.3.

$Z$	( $a$ ) et ( $d$ )	( $b$ )	( $c$ )	( $e$ )
1	90	113.04	100.715	102.496
2	90	100.04	95.2163	95.4930
3	90	96.43	93.4423	93.4853
4	90	94.73	92.5680	92.5430
5	90	93.74	92.0477	91.9981
6	90	93.09	91.7026	91.6436
7	90	92.64	91.4571	91.3950
8	90	92.30	91.2734	91.2111
9	90	92.04	91.1309	91.0697
10	90	91.83	91.0170	90.9576
11	90	91.66	90.9240	90.8666
12	90	91.52	90.8465	90.7912
13	90	91.40	90.7811	90.7278
14	90	91.23	90.7250	90.6738
15	90	91.21	90.6765	90.6271

**Tableau 2.3** Comparaison des angles moyens  $\langle \theta \rangle \approx \cos^{-1} \langle \cos(\theta) \rangle$  (équation 2.46) qui correspondent aux différentes fonctions (2.28a-e).

## 2.4 Description du double continuum

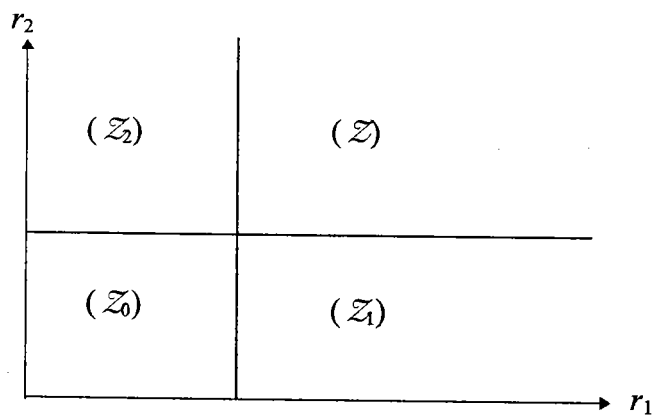
Après avoir décrit dans la seconde partie de ce chapitre l'état initial de la cible, nous allons nous intéresser dans cette partie à la description de l'état final du système constitué de deux électrons dans un double continuum en présence de l'ion résiduel, c'est-à-dire à la résolution de l'équation de Schrödinger à trois corps : un noyau (ou ion résiduel) et deux électrons, l'un diffusé auquel on attribue l'indice "A" et l'autre éjecté "B".

Au cours d'un processus de collision, la cible d'hélium initialement dans son état fondamental décrit par l'une des fonctions citée ci-dessus, se trouve ionisée par un impact d'électron projectile auquel on associe dans la plupart des cas une onde plane. En première approximation, afin de simplifier le problème, nous approximations le potentiel de l'ion  $\text{He}^+$  à un potentiel purement coulombien. Cette approche est de moins en moins valable quand l'ionisation est accompagnée d'une excitation. Les effets de distorsion dus à la présence de l'électron de l'ion résiduel sont négligés dans cette étude.

L'étude des dynamiques de trois particules chargées en mouvement dans un continuum à trois corps est l'une des questions fondamentales non résolues en physique atomique. La simplicité de la forme analytique du potentiel coulombien ainsi que le nombre très réduit de particules mises en jeu ne réduisent pas suffisamment la difficulté du problème, qui réside essentiellement dans la portée infinie du potentiel coulombien. Celle-ci interdit la formation des états asymptotiques *libres* des particules chargées par conséquent, tout état du continuum coulombien de trois corps doit être forcément un état *corrélé*. Geltman (1956) dans le cadre de la double ionisation d'hélium, a décrit l'état final des deux électrons éjectés par le produit de deux coulombiennes normalisées par la fonction  $\delta$  en supposant que les deux électrons sortent après l'ionisation dans des directions opposées et avec la même quantité de mouvement. Une description plus correcte du comportement asymptotique, satisfaisant exactement l'équation de Schrödinger de trois particules chargées quand elles sont suffisamment éloignées, dans la région asymptotique ( $\mathcal{Z}$ ) (figure 2.1), a été proposée par Redmond (non publiée et citée dans Rosenberg 1973). Cette forme asymptotique est obtenue en représentant les trois particules "libres" par des ondes planes modifiées par des phases logarithmiques (Rosenberg 1973). Chaque phase logarithmique décrit une distorsion coulombienne due à l'interaction entre chaque

paire de particules. Redmond proposa également pour l'extension de la forme asymptotique à des régions de petites distances ( $\mathcal{Z}$ ), c'est-à-dire quand les particules deviennent de moins en moins éloignées, de remplacer chaque facteur de phase par une hypergéométrique confluyente appropriée. La fonction d'onde fut considérée plus tard par Merkuriev (1977) et utilisée par la suite dans plusieurs applications par Gariboti et Miraglia (1980) puis Brauner *et al* (1989), Joulakian et Dal Cappello (1993), Hafid (1994) et par de nombreux autres auteurs, récemment Jones et Madison (1997).

Dans la description de Merkuriev-Redmond le problème essentiel, souvent rencontré dans les processus de collisions ionisantes ( $e,2e$ ), ( $e,3e$ ) ou ( $\gamma,2e$ ), se pose dès lors que parmi les trois particules chargées (deux électrons lents et l'ion résiduel), les deux électrons deviennent très proches l'un de l'autre : dans les processus d'ionisations dont il est question ci-dessus, les deux électrons de l'état final se propagent en passant par des zones ( $\mathcal{Z}_0$ ) où ils sont très près l'un de l'autre (figure 2.1) avant d'atteindre le détecteur. Alt et Mukhamedzhanov (1993) Berakdar (1996) ont apporté des corrections permettant d'étendre la description de Redmond à l'origine ( $\mathcal{Z}_0$ ).



**Figure 2.1** Représentation simplifiée des différentes régions asymptotiques pour un processus d'ionisation.

Dans la figure 2.1, nous montrons une représentation simplifiée des différentes régions asymptotiques en fonction des distances  $r_1$  et  $r_2$  qui séparent le noyau et les deux électrons (1) et (2). Dans la zone ( $\mathcal{Z}_0$ ), dite zone de Wannier, les deux électrons sont très proches l'un de l'autre et en même temps du noyau. Dans les régions de Redmond ( $\mathcal{Z}$ ), ( $\mathcal{Z}_1$ ) et ( $\mathcal{Z}_2$ ) les deux électrons sont éloignés l'un de l'autre et en particulier, dans la



région ( $\mathcal{Z}$ ) ils sont situés à des distances infinies du noyau ; dans ( $\mathcal{Z}_1$ ) l'électron (2) est près du noyau alors que l'électron (1) est loin du noyau alors que la situation inverse se présente dans ( $\mathcal{Z}_2$ ).

L'utilisation de la fonction d'onde de type Redmond, pour considérer la répulsion post-collisionnelle entre les électrons qui émergent de la réaction, mène à des calculs assez importants. C'est pour cette raison que divers traitements simplifiés de l'interaction sont souvent utilisés : Franz *et al* (1992) ont remplacé la fonction hypergéométrique confluyente tenant compte de la répulsion des deux électrons par son comportement asymptotique ; Botero et Macek (1992), Hda *et al* (1994), Popov *et al* (1994), Whelan *et al* (1993) puis Nicolas *et al* (1996) ainsi que plusieurs autres auteurs, normalisent leurs sections efficaces à l'aide du facteur de Gamow de la fonction hypergéométrique relative à la répulsion des deux électrons, en remplaçant celle-ci par l'unité.

#### 2.4.1 Modèle de deux ondes coulombiennes

Dans la mesure où nous traitons la répulsion électronique dans le hamiltonien comme une perturbation, les mouvements non perturbés des deux électrons diffusé et éjecté sont séparés et les deux fonctions d'onde associées sont des fonctions purement coulombiennes. Autrement dit, en l'absence de leur interaction post-collisionnelle, les électrons, l'un diffusé de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_A$ , l'autre éjecté de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_B$ , sont décrits par un simple produit de deux fonctions d'ondes décrivant respectivement leurs mouvements individuels :

$$\Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \chi^{(-)}(\eta_A, \mathbf{k}_A | \mathbf{r}_1) \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_2), \quad (2.50)$$

et qui satisfait exactement l'équation de Schrödinger non perturbée

$$[-\Delta_1 - \Delta_2 - 2Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) - 2E] \Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (2.51)$$

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

$$E_f = \frac{k_A^2}{2} + \frac{k_B^2}{2}. \quad (2.52)$$

L'absence de la répulsion coulombienne entre la paire d'électrons dans l'équation (2.51) nous permet de séparer celle-ci en deux équations, une pour la fonction d'onde de chaque électron :

$$\left(\Delta + 2\frac{Z}{r} + k_A^2\right) \chi^{(-)}(\eta_A, \mathbf{k}_A | \mathbf{r}); \quad (2.53a)$$

$$\left(\Delta + 2\frac{Z}{r} + k_B^2\right) \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}). \quad (2.53b)$$

Les solutions exactes de ces deux équations sont des fonctions de Coulomb

$$\chi^{(-)}(\eta, \mathbf{k} | \mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \Gamma(1+i\eta) e^{\pi\eta/2} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) {}_1F_1[-i\eta; 1; -i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+kr)], \quad (2.54)$$

$\eta = Z/k$  ; les fonctions  $\Gamma$  et  ${}_1F_1$  désignent respectivement la fonction gamma et la fonction hypergéométrique confluente (Abramowitz et Stegun 1972). La forme ci-dessus a été introduite par Byron et Joachain (1967). La fonction d'onde totale des deux électrons dans la voie finale peut être écrite, en tenant compte de leur échange possible, de la façon suivante :

$$\Psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi^{(-)}(\eta_A, \mathbf{k}_A | \mathbf{r}_1) \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_2) + (-)^S \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_1) \chi^{(-)}(\eta_A, \mathbf{k}_A | \mathbf{r}_2)], \quad (2.55)$$

S étant le spin total des deux électrons. Notons à nouveau qu'à ce stade de l'étude nous avons négligé la répulsion électrostatique post-collisionnelle entre les électrons sortants. La description des deux électrons dans la région d'interaction, quand leurs vecteurs d'ondes sont comparables, peut conduire à des résultats erronés. Ce qui nécessite une description qui tient compte de cette répulsion électrostatique.

## 2.4.2 Correction de la répulsion entre les deux électrons

### 2.4.2.1 Charges effectives

Afin de compenser le terme de répulsion entre les deux électrons, certains auteurs (par exemple Schulz 1973) ont introduit la notion de charges effectives dans l'équation de Schrödinger en écrivant

$$[\Delta_1 + \Delta_2 + 2\left(\frac{Z_A}{r_1} + \frac{Z_B}{r_2}\right) + k_A^2 + k_B^2] \Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (2.56)$$

et la solution

$$\Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{A} \chi^{(-)}(\eta_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_A) \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_B), \quad (2.57)$$

est semblable à (2.55) avec de nouvelles charges  $Z_A$  et  $Z_B$  au lieu de  $Z$ ,  $\mathcal{A}$  étant l'opérateur d'antisymétrisation. L'équation (2.56) permet une amélioration de l'équation (2.51). Une amélioration possible du modèle lui-même consiste à définir des charges effectives qui tiennent compte de l'écrantage *dynamique* du noyau par les deux électrons. Ces charges effectives dépendent des impulsions des deux électrons et doivent satisfaire l'équation de Peterkop (1962)

$$\frac{Z_A}{k_A} + \frac{Z_B}{k_B} = \frac{Z}{k_A} + \frac{Z}{k_B} - \frac{1}{|\mathbf{k}_A - \mathbf{k}_B|}. \quad (2.58)$$

Cette équation peut-être obtenue en substituant dans l'expression du potentiel total, la position  $r$  par  $k\tau$  (classiquement  $\tau$  a la dimension du temps).

Dal Cappello et Le Rouzo (1991) puis plus récemment Gupta et Srivastava (1995), dans le cadre de la double ionisation, ont utilisé la fonction proposée par Byron et Joachain (1967) dans laquelle ils ont introduit des charges effectives  $Z_A$  et  $Z_B$  à l'aide du traitement de Schweitzer et Klapisch (1987), ou celui de Rudge (1968) et Schulz (1973) :

$$Z_i = Z - k_i(k_i^2 - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_j) |\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j|^{-3}, \quad i \neq j \quad (= A, B). \quad (2.59)$$

Les modèles développés par les auteurs cités ci-dessus tiennent compte de l'interaction entre l'ion et les électrons du continuum mais négligent en partie la répulsion électrostatique entre ces deux électrons. Prendre en compte un tel effet nécessite une autre description plus élaborée.

#### 2.4.2.2 Approches semi-classiques

Quand la longueur d'onde du projectile est petite par rapport aux distances au delà desquelles le potentiel de diffusion varie lentement, le concept classique de la trajectoire possède un sens. Si nous notons par  $r_0$  la portée du potentiel, cette condition se traduit par la relation

$$kr_0 \gg 1. \quad (2.60)$$

Cette condition constitue la base de l'approximation semi-classique de diffusion, elle est d'une grande utilité dans la diffusion des électrons. La condition ci-dessus s'exprime également en terme d'énergie par la relation

$$1 \gg V_0/E, \quad (2.61)$$

où  $E$  constitue l'énergie du projectile et  $V_0$  représente la valeur typique du potentiel diffuseur en  $r_0$ . Considérons à présent la limite de l'équation d'onde indépendante du temps pour le système projectile dans un potentiel de diffusion  $V(r)$

$$(-\nabla^2 + 2V(r) - 2E)\psi(r) = 0. \quad (2.62)$$

##### a) Approximation WKB

L'approximation WKB consiste à écrire la solution de l'équation (2.62) sous la forme  $\psi(r) = e^{iS(r)}$ . En portant cette expression dans l'équation (2.62), celle-ci devient

$$\frac{1}{2} [-i\Delta S + (\nabla S)^2] = E - V(r). \quad (2.63a)$$

Posons  $(\nabla S)^2 = [p(r)]^2$  soit  $\Delta S = \nabla p(r)$ . A la limite classique, c'est-à-dire lorsque  $S$  devient très grand, et  $|\nabla p(r)| \ll |p(r)|^2$ , posons  $S = S_0(r)$ ; l'équation (2.63a) se réduit alors à :

$$\frac{1}{2} (\nabla S_0)^2 = E - V(\mathbf{r}) . \quad (2.63b)$$

$S_0(\mathbf{r})$  n'est autre que la fonction action du système. En optique géométrique, l'équation (2.63b) est appelée *équation iconale* et représente l'équation fondamentale de l'optique géométrique. Par intégration, on peut démontrer que les trajectoires sont normales aux surfaces  $S_0(\mathbf{r}) = \text{Cte}$ . Les normales à ces surfaces sont parallèles au gradient  $\nabla S_0$ , et la solution formelle de l'équation (2.63b) s'écrit

$$S_0(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r} (2E - 2V(\mathbf{r}))^{1/2} , \quad (2.64)$$

la fonction d'onde associée est donnée par

$$\psi_{\text{WKB}}(\mathbf{r}) = \exp\{ i \int d\mathbf{r} (2E - 2V(\mathbf{r}))^{1/2} \} \approx \exp\{ i \int d\mathbf{r} [(2E)^{1/2} - V(\mathbf{r})/(2E)^{1/2}] \} . \quad (2.65)$$

Cette approximation est applicable également pour calculer les fonctions d'ondes partielles radiales et le déphasage dans les problèmes de diffusions (Langer 1937).

### b) Approximation iconale

La méthode iconale a trouvé ses premières applications en optique. Elle a permis le passage de l'optique physique à l'optique géométrique moyennant un certain nombre d'approximations. Nous allons, dans ce paragraphe, décrire une forme simplifiée de la méthode iconale utilisée dans les problèmes de diffusion de particules rapides par des potentiels faibles. L'équation de Lippmann-Schwinger (Bransden *et al* 1993) associée à l'équation de Schrödinger (2.62) s'écrit d'après le premier chapitre

$$\psi^+(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + 2 \int d\mathbf{r}' G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \psi^+(\mathbf{r}') . \quad (2.66)$$

La fonction de Green  $G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  est donnée (Joachain 1975) par

$$\begin{aligned} G_0^{(+)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') &= -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= -(2\pi)^{-3} \int d\kappa \frac{\exp[i\kappa(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] }{\kappa^2 - k^2 - i\epsilon} \quad \epsilon \longrightarrow 0^+ . \end{aligned} \quad (2.67)$$

En supposant que le potentiel d'interaction varie lentement, la fonction d'onde  $\psi^+(\mathbf{r})$  solution de l'équation (2.62) s'obtient en multipliant l'onde plane  $(2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$  par une fonction  $\phi(\mathbf{r})$ , qui se réduit à l'unité si  $V(\mathbf{r}) = 0$  et telle que

$$\phi(\mathbf{r}) = 1 - 2I(\mathbf{r}),$$

$$\text{et} \quad I(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{R} \int d\kappa \frac{\exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k})\cdot\mathbf{R}]}{\kappa^2 - k^2 - i\epsilon} V(\mathbf{r}-\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}). \quad (2.68)$$

Le résultat ci-dessus est obtenu en portant le changement  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$  dans l'expression de  $\psi^+(\mathbf{r})$ . En introduisant le changement de variable  $\mathbf{p} = \kappa - \mathbf{k}$  dans l'expression de la fonction de Green, celle-ci peut être mise sous la forme

$$G_0^{(+)}(\mathbf{R}) = -(2\pi)^{-3} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) \int d\mathbf{p} \frac{\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R})}{2kp_z - p^2 - i\epsilon} \quad \epsilon \longrightarrow 0^+. \quad (2.69)$$

L'axe  $z$  est choisi dans la direction du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ . Un développement de la quantité  $(2kp_z - i\epsilon + p^2)^{-1}$  en puissances de  $p^2/(2kp_z - i\epsilon)$ , en ne gardant que le premier terme de la série, permet d'écrire la fonction de Green sous la forme

$$G_0^{(+)}(\mathbf{R}) \approx G_0^{(1)}(\mathbf{R}) = -(2\pi)^{-3} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}) \int d\mathbf{p} \frac{\exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R})}{2kp_z - i\epsilon} \quad \epsilon \longrightarrow 0^+. \quad (2.70)$$

Cette approximation est justifiée quand la condition (2.61) est vérifiée. A l'aide du théorème de Cauchy et en posant

$$\Theta(z-z') = \begin{cases} 1, & z > z' \\ 0, & z < z' \end{cases}$$

l'expression de la fonction de Green devient

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \approx G_0^{(1)}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (2ik)^{-1} \exp(ik(z-z')) \delta(\mathbf{b}-\mathbf{b}') \Theta(z-z'). \quad (2.71)$$

L'intégrale  $I(\mathbf{r})$  peut être réduite à son premier terme (Byron et Joachain 1973) et s'écrit dans ce cas

$$I(\mathbf{r}) \approx I^{(1)}(\mathbf{r}) = i(2k)^{-1} \int_{-\infty}^z dz' V(x,y,z') \phi(x,y,z'). \quad (2.72)$$

Reprenons à présent l'équation (2.61) dans laquelle nous remplaçons  $I(\mathbf{r})$  par son expression approchée ci-dessus. La fonction correspondante  $\phi^{(1)}(\mathbf{r})$  satisfait l'équation

$$\phi^{(1)}(\mathbf{r}) = 1 - ik^{-1} \int_{-\infty}^z dz' V(x,y,z') \phi(x,y,z'), \quad (2.73)$$

et par suite

$$\phi^{(1)}(\mathbf{r}) = \exp[- ik^{-1} \int_{-\infty}^z dz' V(x,y,z')]. \quad (2.74)$$

En portant l'expression de  $\phi^{(1)}(\mathbf{r})$  dans  $\psi^+(\mathbf{r})$  la fonction d'onde ainsi obtenue  $\psi_E(\mathbf{r})$  est appelée *fonction d'onde iconale* et s'écrit

$$\psi_E^{(+)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp[i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - ik^{-1} \int_{-\infty}^z dz' V(x,y,z')]. \quad (2.75)$$

Notons que ce résultat, obtenu pour une particule incidente (supposée venant de  $-\infty$ ) qui se trouve diffusée par un potentiel  $V(\mathbf{r})$ , est transposable à une particule s'éloignant de la région de diffusion en remplaçant l'expression ci-dessus par

$$\psi_E^{(-)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp[i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + ik^{-1} \int_z^{\infty} dz' V(x,y,z')]. \quad (2.76)$$

### c) Série de Glauber

La série de Glauber (1959) a été introduite pour évaluer l'amplitude de diffusion dans les problèmes de collision. Elle permet de substituer les termes d'ordres supérieurs dans le développement de Born (en général difficiles à évaluer).

Par la suite, nous proposons un traitement différent de la formulation standard de Glauber, ainsi que celle utilisée auparavant par les auteurs cités ci-dessus, dans laquelle on exprime directement l'amplitude de diffusion sous forme d'un développement dit *développement de Glauber*, appelé aussi *Eikonal Born Series* (EBS), lorsqu'on substitue les termes de puissances élevées dans la série de Born par les termes correspondant du développement de Glauber (voir par exemple Sharma et Srivastava 1987, Byron et Joachain 1973, 1977 et Byron *et al* 1985).

Si on définit la quantité  $\chi_G$ , appelée phase de Glauber, par

$$\chi_G = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' V(x,y,z'), \quad (2.77)$$

la fonction d'onde de Glauber associée peut s'écrire sous la forme

$$\psi_G^{(-)}(\mathbf{b}) = (2\pi)^{-1} \exp[i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b} + ik^{-1}\chi_G]. \quad (2.78)$$

Ici on a utilisé le système de coordonnées cylindriques où  $\mathbf{r} = \mathbf{b} + \mathbf{z}$ . Un développement de l'expression (2.78) en série de puissances de la phase  $\chi_G$  permet d'écrire

$$\psi_G^{(-)}(\mathbf{b}) = (2\pi)^{-1} \exp[i \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}] (1 + ik^{-1}\chi_G - k^{-2}\chi_G^2 + \dots). \quad (2.79)$$

Dans le chapitre 3 nous allons présenter quelques résultats associés.

#### 2.4.2.3 Application au problème d'ionisation de l'atome d'hélium

Pour la clarté de l'exposé, nous considérons le système  $\text{He}^+ + e^- + e^-$  résultant d'une ionisation simple d'un atome d'hélium par impact d'électrons. Supposons a priori que l'un des électrons est plus rapide que l'autre, en prenant par exemple  $k_A > k_B$ . Le hamiltonien total  $H$  de l'équation (2.61) peut s'écrire sous la forme :

$$H = K - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (2.80)$$

$Z$  étant la charge de l'ion  $\text{He}^+$ . Dans la mesure où le projectile est un électron, nous négligeons les effets de masse et l'opérateur énergie cinétique totale  $K$  est donné par la relation

$$K = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2). \quad (2.81)$$

La fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  décrivant le système des deux électrons du double continuum, dans un champ coulombien, qui interagissent mutuellement, est supposée être sous la forme d'un produit de deux fonctions individuelles  $\chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_2)$  et  $\psi_E(\mathbf{r}_1)$  des deux électrons. Ces deux fonctions d'ondes vérifient respectivement les équations suivantes :

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_2}\right) \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}) = \frac{k_B^2}{2} \chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}); \quad (2.82)$$



$$\left(-\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}}\right) \psi_E(\mathbf{r}) = \frac{k_A^2}{2} \psi_E(\mathbf{r}). \quad (2.83)$$

L'électron lent d'impulsion  $\mathbf{k}_B$  est soumis au potentiel de l'ion résiduel et peut être décrit par une onde coulombienne

$$\chi^{(-)}(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} \Gamma(1+i\eta_B) e^{\pi\eta_B/2} \exp(i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2) {}_1F_1[-i\eta_B; 1; -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)], \quad (2.84)$$

avec  $\eta_B = Z/k_B$ . La fonction d'onde décrivant l'électron rapide de quantité de mouvement  $k_A$  peut être obtenue à partir de l'expression (2.76) et s'écrit, dans ce cas sous la forme

$$\psi_E(\mathbf{r}_1) = (2\pi)^{-3/2} \exp[ik_A \cdot \mathbf{r}_1 + ik_A^{-1} \int_{z_1}^{\infty} dz'_1 \left(-\frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}}\right)]. \quad (2.85)$$

L'évaluation de la phase intégrale permet d'écrire

$$\psi_E(\mathbf{r}_1) = (2\pi)^{-3/2} \exp[ik_A \cdot \mathbf{r}_1 + iZk_A^{-1} \ln(r_1 + z_1) - ik_A^{-1} \ln(r_{12} + z_{12})]. \quad (2.86)$$

L'expression ainsi obtenue satisfait la limite asymptotique, c'est-à-dire quand  $k_A \gg 1$  et par conséquent la fonction d'onde totale  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  peut s'écrire

$$\begin{aligned} \psi^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & (2\pi)^{-3} \Gamma(1+i\eta_B) e^{\pi\eta_B/2} \exp(i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2) {}_1F_1[-i\eta_B; 1; -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)] \times \\ & \times \exp(i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1) \exp[iZk_A^{-1} \ln(r_1 + z_1) - ik_A^{-1} \ln(r_{12} + z_{12})]. \end{aligned} \quad (2.87)$$

La fonction d'onde calculée ci-dessus, décrivant le mouvement asymptotique (région ( $\mathcal{Z}$ ) de la figure 2.2) des deux électrons dans le champ coulombien du noyau (ou de l'ion résiduel) et en répulsion mutuelle, tient compte de la portée infinie de l'interaction coulombienne et permet également de :

- satisfaire la limite asymptotique de l'équation de Schrödinger à 3 corps ( problème de Redmond : voir Rosenberg 1973) ;
- décrire correctement les trois interactions coulombiennes mises en jeu dans le processus.

#### 2.4.2.4 Modèle de trois ondes coulombiennes (3C)

Afin de tenir compte de la répulsion entre les électrons dans le continuum, plusieurs auteurs se sont intéressés à ce sujet et nous citons par exemple les travaux de Redmond qui n'ont pas été publiés, Rosenberg (1973), Merkuriev (1977) puis Altick (1983a et b). Brauner *et al* (1989) ont proposé une méthode basée sur celle de Pluvinage (1950, 1951) et ont retrouvé ainsi la fonction d'onde (3C) de Merkuriev-Redmond (voir également Alt et Mukhamedzhanov 1993 et plus récemment Mukhamedzhanov *et al* 1996 et Berakdar 1996).

Cette méthode permet la construction d'une fonction coulombienne à 3 corps (noyau et les deux électrons de la voie finale). Dans le système du centre de masse, le problème peut être décrit à l'aide du système de coordonnées de Jacobi (figure 2.2) : nous désignons par  $T$ , 1 et 2 respectivement le noyau (ou ion) cible et les deux électrons du continuum.

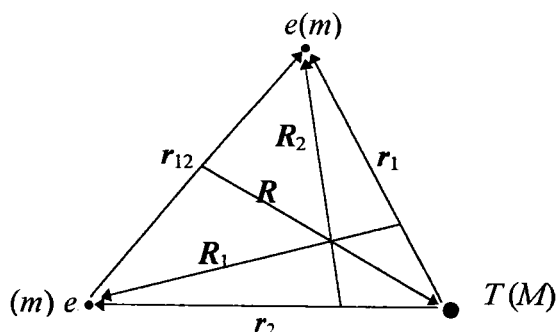


Figure 2.2 Les coordonnées de Jacobi pour un système de deux électrons et un noyau.

Chaque paire de coordonnées  $(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{R})$ ,  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1)$  et  $(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2)$  représente un système de coordonnées complet. Les transformations permettant les passages entre ces coordonnées ainsi que les vecteurs d'ondes conjugués  $(\mathbf{k}_{AB}, \mathbf{K})$ ,  $(\mathbf{k}_A, \mathbf{K}_A)$  et  $(\mathbf{k}_B, \mathbf{K}_B)$  sont données dans l'annexe D.

La fonction d'onde de l'état final  $\Psi_f^{(-)}$  est une solution exacte du problème à 3 corps

$$\left(K - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right) \Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E \Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.88)$$

L'opérateur  $K$  de l'équation (2.88) représente le hamiltonien libre traduisant l'énergie cinétique totale du système, il est diagonalisable et peut-être écrit sous trois formes différentes dans le système de coordonnées de Jacobi (figure 2.2)

$$K = -\frac{1}{2} (\mu_e^{-1} \Delta_{r1} + \nu_T^{-1} \Delta_{R1}) \quad (2.89a)$$

$$= -\frac{1}{2} (\mu_e^{-1} \Delta_{r2} + \nu_T^{-1} \Delta_{R2}) \quad (2.89b)$$

$$= -\frac{1}{2} (\mu^{-1} \Delta_{r12} + \nu^{-1} \Delta_R) . \quad (2.89c)$$

Les masses réduites sont données en fonction des masses  $m$  de l'électron et  $M$  du noyau, et s'écrivent sous la forme :

$$\mu_e = \frac{mM}{m+M} ; \quad \nu_T = \frac{m(m+M)}{2m+M} ;$$

$$\mu = \frac{m}{2} \quad \text{et} \quad \nu = \frac{2mM}{2m+M} .$$

Il est très important de noter que la solution approchée de l'équation de Schrödinger de trois corps (2.61), que nous essayerons de trouver dans la suite, doit satisfaire exactement les conditions aux limites (2.87). Nous reprenons ici l'analyse de Brauner *et al* (1989) basée sur la méthode de Pluinage. Ce dernier, pour séparer l'équation de Schrödinger (2.88), suppose que la fonction d'onde exacte du système peut se mettre sous forme d'un produit de trois fonctions d'ondes

$$\Psi_f^{(-)} = \xi \psi \chi . \quad (2.90)$$

Les fonctions  $\xi$  et  $\psi$  vérifient les sous-équations suivantes

$$\left( K - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} \right) \psi = E_f \psi , \quad (2.91a)$$

dans laquelle on ignore l'interaction entre les deux électrons et

$$\left( K + \frac{1}{r_{12}} \right) \xi = E_f \xi . \quad (2.91b)$$

Cette dernière constitue une équation complémentaire, ayant pour but d'apporter la correction due au potentiel d'interaction post-collisionnelle à l'équation (2.91a).

En substituant l'expression (2.90) dans (2.88) et à l'aide des deux relations (2.91a et b) on trouve une équation supplémentaire

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2}(\mu^{-1}\Delta_{r_{12}} + \nu^{-1}\Delta_R)\chi - \mu^{-1}[(\nabla_{r_{12}} \ln \psi \xi) \nabla_{r_{12}} + (\nabla_{r_{12}} \ln \psi) \cdot (\nabla_{r_{12}} \ln \xi) - \mu E_f] \chi \\
 & - \nu^{-1}[(\nabla_R \ln \psi \xi) \nabla_R + (\nabla_R \ln \psi) \cdot (\nabla_R \ln \xi) - \nu E_f] \chi \\
 & = E_f \chi.
 \end{aligned} \tag{2.91c}$$

La solution exacte de l'équation de Schrödinger (2.88) est donnée par le produit des solutions des équations (2.91a), (2.91b) et (2.91c). Avec évidemment la condition  $M \gg m = 1 \text{ u.a.}$  (dans toute la suite), les vecteurs

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{r}_2 - \mu_0 M^{-1} \mathbf{r}_1 \approx \mathbf{r}_2$$

et

$$\mathbf{R}_2 = \mathbf{r}_1 - \mu_0 M^{-1} \mathbf{r}_2 \approx \mathbf{r}_1$$

Ces approximations permettent aux expressions (2.89a et b) de l'opérateur énergie cinétique  $K$  de se réduire à  $K \approx -\frac{1}{2}(\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2})$ . Celle-ci dans l'équation (2.91a) permet à cette dernière, de s'écrire sous la forme (2.50) dont la solution  $\psi$  est un produit de deux fonctions coulombiennes (2.53a) et (2.53b) relatives aux deux électrons et vérifient (2.54).

D'une manière analogue l'équation (2.89c) peut se mettre sous la forme :

$$K \approx -\Delta_{r_{12}} - \frac{1}{4}\Delta_R$$

et dans (2.91b) permet d'écrire la solution  $\xi$  sous la forme :

$$\xi(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{R}) = (2\pi)^{-3} \Gamma(1+i\eta') e^{\pi\eta'/2} \exp[i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{R})] {}_1F_1[-i\eta'; 1; -i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + \mathbf{k}_{AB} r_{12})], \tag{2.92}$$

où  $\eta' = -\mu / \mathbf{k}_{AB}$ . Le produit  $\xi\psi$  ne satisfait pas la condition asymptotique de Redmond (2.87) et ne décrit pas le système de deux électrons. Une description plus correcte peut être obtenue à partir d'un choix du facteur restant  $\chi$ . Le choix le plus simple est obtenu systématiquement lorsqu'on néglige toutes les dérivées logarithmiques (approximation

valable au moins lorsque  $r_{12} \rightarrow \infty$ ) dans l'équation (2.91c) de sorte que celle-ci peut s'écrire sous le forme

$$(-\Delta_{r_{12}} - \frac{1}{4}\Delta_R)\chi \approx E_f \chi.$$

et par suite la solution est de la forme

$$\chi = \exp[\pm i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{R})]. \quad (2.93)$$

En multipliant  $\chi$  par le produit  $\xi\psi$  permet de trouver la forme finale *souhaitée* de la fonction

$$\Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2)] C(\eta_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_A) C(\eta_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_B) C(\eta', \mathbf{r}_{12} | \mathbf{k}_{AB}), \quad (2.94)$$

avec

$$C(\eta, \mathbf{r} | \mathbf{k}) = \Gamma(1+i\eta) e^{\pi\eta/2} {}_1F_1[-i\eta; 1; -i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + kr)].$$

La forme (2.94) est semblable à celle de Merkuriev-Redmond. Elle est obtenue en négligeant les deux premiers termes du deuxième membre de l'égalité (2.91c). Cette approximation reste valable dans les régions de Redmond ( $r_{12} \rightarrow \infty$ , annexe G).

#### 2.4.2.5 Extension du modèle (3C) de Merkuriev- Redmond

A l'aide des expressions de  $\psi$ ,  $\xi$  et  $\chi$  dans l'équation (2.91c), celle-ci se réduit à

$$\begin{aligned} & \mu^{-1} [(\nabla_{r_{12}} \ln \psi \xi) \nabla_{r_{12}} + (\nabla_{r_{12}} \ln \psi) \cdot (\nabla_{r_{12}} \ln \xi)] \chi \\ & + \nu^{-1} [(\nabla_R \ln \psi \xi) \nabla_R + (\nabla_R \ln \psi) \cdot (\nabla_R \ln \xi)] \chi \\ & = 2E_f \chi, \end{aligned}$$

on trouve

$$\mathbf{H} \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{G}) = 0. \quad (2.95)$$

Les vecteurs  $\mathbf{F}$ ,  $\mathbf{G}$  et  $\mathbf{H}$  vérifient respectivement (annexe G)

$$\mathbf{F} = \nabla_1 \ln \{ {}_1F_1[-i\eta_A, 1, -i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + k_A r_1)] \},$$

$$\mathbf{G} = \nabla_2 \ln \{ {}_1F_1[-i\eta_B, 1, -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)] \},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \nabla_1 \ln\{ {}_1F_1[-i\eta', 1, -i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + k_{AB} r_{12})] \} \\ &= -\nabla_2 \ln\{ {}_1F_1[-i\eta', 1, -i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + k_{AB} r_{12})] \}. \end{aligned}$$

L'extension de la fonction de Redmond sous-entend la recherche d'une fonction d'onde de sorte que l'équation (2.95) soit vérifiée. Nous allons par la suite rappeler les travaux de Alt et Mukhamedzanov (1993) puis ceux de Berakdar (1996).

#### a) Approximation (AM) de Alt et Mukhamedzhanov (1993)

Pour décrire un système de deux électrons dans un double continuum en présence d'un ion résiduel, Alt et Mukhamedzhanov (1993) ont proposé une fonction d'onde ayant la même forme que la solution (2.94)

$$\Psi_{AM}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2)] C(\gamma_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{q}_A) C(\gamma_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{q}_B) C(\gamma', \mathbf{r}_{12} | \mathbf{q}_{AB}), \quad (2.96)$$

Les nouveaux vecteurs d'ondes  $\mathbf{q}$  sont ici des fonctions complexes. Ils dépendent des coordonnées de position des deux électrons et sont donnés par

$$\mathbf{q}_i = \mathbf{k}_i + \mathbf{Q}(\eta', \mathbf{k}_j, \mathbf{r}_i) \quad i \neq j = A, B; \quad (l = 2 \text{ si } i = A \text{ et } l = 1 \text{ si } i = B)$$

et

$$\mathbf{q}_{AB} = \mathbf{k}_{AB} + \mathbf{Q}(\eta_A, \mathbf{k}_A, \mathbf{R}) - \mathbf{Q}(\eta_A, \mathbf{k}_B, \mathbf{R}).$$

Ici nous avons posé  $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$  étant le vecteur position du centre de masse relatif aux deux électrons et

$$\mathbf{Q}(\eta, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = i r P^{-1} {}_1F_1[-i\eta + 1; 2; -i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + k r)] \{ {}_1F_1[-i\eta; 1; -i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + k r)] \}^{-1} (\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{r}})$$

représente la modification *locale* apportée au vecteur d'onde. Dans la mesure où on se place dans des régions asymptotiques le vecteur  $\mathbf{Q}$  peut être remplacé par  $\mathbf{Q}_{asy}$ , avec

$$\mathbf{Q}_{asy} = r P^{-1} (k r + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^{-1} (\hat{\mathbf{k}} + \hat{\mathbf{r}}),$$

P étant le périmètre du triangle formé par les trois particules. Le présent modèle (AM) est difficile à appliquer dans les processus d'ionisation des systèmes ayant plus d'un électron, vue la dépendance des *quantités de mouvements* en coordonnées de position. Il semble également, à première vue, que la fonction d'onde  $\Psi_{AM}^{(-)}$  de l'équation (2.95) ne satisfait pas la condition de normalisation (annexe F). Cela explique peut-être les résultats de Jones *et al* (1997). Ces auteurs ont appliqué le modèle (AM) dans l'ionisation de l'hydrogène et ont abouti à des résultats non satisfaisants.

b) Approximation DS3C : Berakdar (1996)

Cette approximation a pour objectif d'étendre la solution (2.94) au delà des régions de Redmond, en particulier dans la zone  $(\mathcal{Z}_0)$ . Dans le but de trouver une telle forme asymptotique et afin d'en tirer la fonction d'onde décrivant le système à des distances finies, nous considérons la forme asymptotique (2.94) comme un point de départ. Afin d'établir explicitement les conditions de validité de cette description, Berakdar a proposé d'écrire la solution exacte de l'équation (2.88) sous la forme :

$$\Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)[1-f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)] \quad (2.97)$$

Cette relation dans (2.88) permet d'écrire

$$[(1-f)(\Delta_1 + \Delta_2 + 2E - 2V)] \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [(\Delta_1 + \Delta_2)f + 2(\nabla_1 f \cdot \nabla_1 + \nabla_2 f \cdot \nabla_2)] \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.98a)$$

et après avoir substitué l'expression (2.94) de  $\Psi_{3C}^{(-)}$  dans (2.98a) et à l'aide des résultats de l'annexe G, la fonction  $f$  satisfait l'équation

$$[\Delta_1 + 2(i\mathbf{k}_A + \mathbf{F} + \mathbf{H}) \cdot \nabla_1 + \Delta_2 + 2(i\mathbf{k}_B + \mathbf{G} - \mathbf{H}) \cdot \nabla_2]f - 2\mathbf{H} \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{G})(1-f) = 0. \quad (2.98b)$$

La solution exacte  $\Psi_f^{(-)}$  peut être substituée par  $\Psi_{3C}^{(-)}$  si  $f = 0$  (équation 2.95) et d'après l'équation (2.98b) ceci est vérifié lorsque le terme hétérogène

$$\mathcal{R} = \mathbf{H} \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{G}) \quad (2.99)$$

est nul. Systématiquement la solution  $\Psi_{3C}^{(-)}$  ne peut être exacte que si  $\mathcal{R} \rightarrow 0$  ce qui est vérifié lorsque  $r_{12} \rightarrow \infty$  (annexe G). D'une manière générale, la solution de l'équation (2.98b) est donnée par

$$f = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_2') \mathcal{R} (1-f),$$

où  $G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  est la fonction de Green. Elle est solution de l'équation

$$[\Delta_1 + 2(i\mathbf{k}_A + \eta_A \mathbf{F} + \eta' \mathbf{H}) \cdot \nabla_1 + \Delta_2 + 2(i\mathbf{k}_B + \eta_B \mathbf{G} - \eta' \mathbf{H}) \cdot \nabla_2] G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 2 \delta(\mathbf{r}_1) \delta(\mathbf{r}_2),$$

dont la résolution est très compliquée. Dans le but de trouver approximativement une expression analytique de la fonction d'onde approchée, nous allons introduire de nouveaux paramètres de Sommerfeld  $\gamma_A$ ,  $\gamma_B$  et  $\gamma'$  au lieu de  $\eta_A$ ,  $\eta_B$  et  $\eta'$  de sorte que  $\mathcal{R}$  soit nul. Pour cela, nous sommes conduit à supposer que les charges de ces paramètres dépendent des coordonnées de position des particules. C'est-à-dire que la solution exacte de l'équation (2.88) a la forme (2.94) et est donnée par

$$\Psi_{DS3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2)] C(\gamma_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_A) C(\gamma_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_B) C(\gamma', \mathbf{r}_{12} | \mathbf{k}_{AB}), \quad (2.100)$$

avec les nouveaux paramètres locaux de Sommerfeld

$$\gamma_i = Z_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) k_i^{-1} \quad i = A, B$$

et

$$\gamma' = Z'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) k_{AB}^{-1}$$

Les charges effectives sont données par Berakdar (1996)

$$Z_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Z - \frac{1}{16} \{3 + [\cos 4\alpha(r_1, r_2)]^2\}^2 r_{12} r_1^2 (r_1 + r_2)^{-3},$$

où  $\alpha(r_1, r_2) = \cos^{-1} [r_1(r_1^2 + r_2^2)^{-1/2}]$ ,

$$Z_B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Z_A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

et

$$Z'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1 + Z_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) r_{12} r_1^{-1} + Z_B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) r_{12} r_2^{-1}.$$



### c) Simplification du modèle (DS3C)

Pour finir ce chapitre, nous allons proposer une approximation permettant de rendre le modèle DS3C plus facilement applicable. Pour cela, nous allons utiliser l'approximation classique  $\mathbf{r} \approx \mathbf{k}\tau$  dans les charges effectives ci-dessus. Celles-ci deviennent (Berakdar et Briggs 1994)

$$\underline{Z}_A(k_A, k_B) = Z - \frac{1}{8} \{3 + [\cos 4\alpha(k_A, k_B)]^2\}^2 k_{AB} k_A^2 (k_A + k_B)^{-3},$$

$$\underline{Z}_B(k_A, k_B) = \underline{Z}_A(k_B, k_A)$$

et

$$\underline{Z}' = 1 + 2\underline{Z}_A(k_A, k_B) k_{AB} k_A^{-1} + \underline{Z}_B(k_A, k_B) k_{AB} k_B^{-1}.$$

Cette approximation sera utilisée par la suite et plus particulièrement dans le chapitre 3. Elle portera le nom de DS3C.

## 2.5 Conclusion

Nous avons décrit dans ce chapitre les procédures nécessaires pour la résolution approchée du problème de Schrödinger à trois corps. Dans un premier temps, nous avons déterminé les fonctions d'ondes susceptibles de décrire des systèmes à deux électrons dans leurs états fondamentaux ( $1s^2 \ ^1S$ ), tels que H, He, Li<sup>+</sup> .... Enfin, nous avons également étudié le problème du double continuum provenant d'une collision ionisante, dans lequel on a établi les relations entre les différentes approximations (WKB, iconale, Glauber et la fonction (3C) de Merkuriev-Redmond). Les prolongements à l'origine (AM) de Alt et Mukhamedzhanov et (DS3C) de Berakdar ont été également évoqués. Ces modèles semblent donner des solutions approchées les mieux adaptées à l'étude des problèmes d'ionisation. Ils décrivent d'une manière rigoureuse la corrélation dans le double continuum. Dans les chapitres 3 et 4, nous reviendrons sur les applications des modèles (3C) et (DS3C) dans les calculs des sections efficaces d'ionisation et nous verrons les domaines d'application de chaque modèle.

## Chapitre 3

### (e,2e) à haute, intermédiaire et basse énergie pour l'atome d'hélium

#### 3.1 Introduction

L'étude des systèmes à deux électrons, développée au chapitre 2 (l'état fondamental de la cible et l'état du double continuum permettant de décrire les deux électrons en présence de leur répulsion et l'attraction d'un noyau ou ion résiduel), est en fait destinée à l'étude des sections efficaces triplement différentielles caractérisant les collisions ionisantes. Parmi les premières mesures les plus significatives des sections efficaces différentielles triples (SED<sub>T</sub>) d'ionisation d'atomes par impact d'électrons, on cite les premières expériences faites par le groupe d'Ehrhardt sur les atomes d'hélium. Sur le plan théorique, plusieurs méthodes (par exemple : ondes distordues DWBA, série iconale de Born EBS ...) décrivent quantitativement les distributions angulaires observées par les expérimentateurs. Elles permettent, à des énergies incidentes données, de reproduire les deux pics respectivement appelés binaire et de recul, qui apparaissent dans les SED<sub>T</sub>. Mais, à basses énergies ( $E_0 < 100$  eV), le problème devient difficile : ces méthodes (DWBA de

Whelan *et al* 1993) ne donnent pas les positions précises de ces pics mais aussi elles ne prévoient pas l'existence du second pic d'arrière (à grands angles) quand il existe, ce qui révèle l'insuffisance de ces théories.

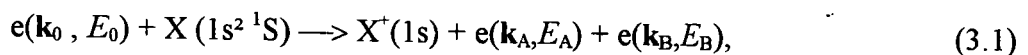
L'étude proposée dans ce chapitre concerne les systèmes atomiques ou ioniques à deux électrons. Elle se propose d'apporter des corrections plus ou moins importantes aux (SED) et d'étendre leur calcul à des énergies très basses (quelques électronvolts au delà du seuil d'ionisation 24.6 eV pour l'atome d'hélium). La procédure adoptée dans cette étude théorique est basée sur la méthode proposée par Brauner *et al* (1989) pour l'ionisation de l'atome de l'hydrogène. Les problèmes posés résident dans la difficulté de constructions des états initiaux et finaux relatifs au calcul de l'élément de matrice de transition (amplitude de diffusion) entre ces états.

Nous aurons ainsi pour objectif l'étude du rôle de différentes fonctions d'ondes décrivant l'état lié de la cible et d'autre part, celle des effets *dynamiques* post-collisionnels des deux électrons dans la voie de sortie. Ces derniers sont très importants lorsque les énergies incidentes deviennent faibles et dans des conditions de cinématiques symétriques.

Enfin, dans le domaine de très basses énergies, nous étudierons la contribution de la capture de l'électron incident, aux SED d'ionisation de l'atome d'hélium. A ces énergies nous citons les travaux de Botero et Macek(1992) et Whelan *et al* (1993) sur l'hélium et également de Nicolas *et al* (1996) sur l'hydrogène. Ces auteurs ont étudié les effets de polarisation de la cible par le faisceau incident et normalisé leurs SED par le facteur de Gamow, ce qui ne promet pas une bonne amplitude des SED (Whelan *et al* 1993). Nos résultats théoriques seront également comparés au modèle CCC (Convergent Close Coupling) de Bray *et al* (1995) et les mesures de Röder (Röder *et al* 1996 et Bray 1997).

### 3.2 Description d'une réaction (e,2e)

Considérons la réaction suivante



où  $X$  peut être un atome d'hélium ou un ion isoélectronique dans son état fondamental, dans laquelle un électron incident de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_0$  parallèle à l'axe  $z$  et d'énergie  $E_0$  heurte une cible d'hélium supposée immobile et dans son état fondamental. Celle-ci, après la collision émet deux électrons : l'un rapide de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_A$  et d'énergie  $E_A$  et l'autre lent de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_B$  et d'énergie  $E_B$ , qui émergent de la réaction et sont détectés en coïncidence, c'est-à-dire avec prise en compte du temps de trajet vers leurs détecteurs.

Les conservations des énergies et des quantités de mouvements totales (chapitre 1)  $E_i = E_f$  et  $\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_f$  se traduisent ici, en négligeant l'énergie cinétique de l'ion résiduel après la réaction, par les deux équations :

$$E_0 + W_X = W_{X^+} + E_A + E_B \quad (3.2)$$

et

$$\mathbf{k}_0 + \mathbf{p} = \mathbf{k}_A + \mathbf{k}_B + \mathbf{k}_{recul} , \quad (3.3)$$

$W_X$  et  $W_{X^+}$  désignent respectivement les énergies de l'état fondamental de la cible et d'ionisation totale de l'ion résiduel ;  $\mathbf{p}$  est la quantité de mouvement de l'électron (actif) dans la cible et  $\mathbf{k}_{recul}$  étant la quantité de mouvement de recul transférée à l'ion résiduel après le choc. Le transfert d'impulsion est défini par  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_A$ .

### 3.2.1 Avant la collision

Dans la première voie de la réaction (voie d'entrée) on considère un électron incident qui entre en collision avec un atome d'hélium dont le noyau est pris comme origine des coordonnées. La fonction d'onde  $\Psi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  décrivant le système complet est donnée par la solution de l'équation de Schrödinger

$$H\Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_i \Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) , \quad (3.4)$$

$$E_i = \frac{1}{2}k_0^2 + W_{He} \quad (3.5)$$

$H$  représente le hamiltonien total du système.  $\Psi_i$  décrit le mouvement du projectile et des électrons de la cible. Elle est approchée au produit  $\Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \approx \psi(\mathbf{k}_0|\mathbf{r}_0)\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , solutions respectives des deux équations :

$$(\Delta_0 + 2 \frac{Z-2}{r_0} + k_0^2) \psi(\mathbf{k}_0 | \mathbf{r}_0) = 0 ; \quad (3.6)$$

$$[\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} + W_X] \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0 , \quad (3.7)$$

dont on peut au moins établir des solutions approchées, telles que celles proposées dans le chapitre précédent.

Dans le cas d'une cible d'hélium ( $Z = 2$ ), les solutions des deux équations (3.6) et (3.7) s'écrivent respectivement

$$\psi(\mathbf{k}_0 | \mathbf{r}_0) = (2\pi)^{-3/2} \exp(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0), \quad (3.8)$$

pour décrire l'électron incident et

$$\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N \{ \exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) + \exp(-\beta r_1 - \alpha r_2) \} \exp(\gamma r_{12}), \quad (3.9)$$

pour décrire l'atome d'hélium dans son état fondamental. Cette fonction d'onde a été étudiée dans le chapitre 2. Les différentes valeurs retenues pour les paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont présentées dans les tableaux (2.2a-e).

Dans le cas de l'ionisation des ions, l'onde plane  $\psi(\mathbf{k}_0 | \mathbf{r}_0)$  (3.8) de la particule incidente doit être remplacée par une onde coulombienne (Roy *et al* 1982 et récemment Jia *et al* 1997).

$$\psi(\eta_0, \mathbf{k}_0 | \mathbf{r}_0) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) C^*(\eta_0, -\mathbf{k}_0 | \mathbf{r}_0) \quad (3.10)$$

$C^*$  est le complexe conjugué de la fonction

$$C(\eta, \mathbf{k} | \mathbf{r}) = \exp(\frac{1}{2} \pi \eta) \Gamma(1-i\eta) {}_1F_1[-i\eta; 1; -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] \quad (3.11)$$

où  $\eta_0 = (Z - 2)/k_0$ . Roy *et al* (1982) et Jia *et al* (1997) dans l'ionisation simple de l'ion  $\text{He}^+$ , et Biswas et Sinha (1994 et 1995) dans l'ionisation simple du  $\text{Li}^+$  ( $Z = 3$ ) ont montré qu'à des énergies incidentes relativement élevées les effets de la distorsion coulombienne du potentiel apparent  $\lambda/r_0$ , dus à l'ionité  $\lambda$  de la cible, disparaissent rapidement dès lors que l'énergie incidente du projectile devient de plus en plus élevée.

### 3.2.2 Après la collision

Après la collision (dans la voie de sortie de la réaction 3.1), les deux électrons qui émergent de la réaction sont détectés en coïncidence. Dans le cas où l'un des électrons est plus rapide que l'autre les manifestations d'échange peuvent être démontrées très faibles. L'électron émergent le plus rapide sera qualifié de diffusé, sa quantité de mouvement est  $\mathbf{k}_A$ , son énergie  $E_A$  et il est émis dans la direction  $(\theta_A, \phi_A)$  que l'on détecte à l'aide d'un détecteur (A). Le second électron, qui est lent, est appelé électron éjecté. Il est détecté à l'aide d'un deuxième détecteur (B), avec une quantité de mouvement  $\mathbf{k}_B$  et d'énergie  $E_B$  dans la direction  $(\theta_B, \phi_B)$ . Quand les énergies des deux électrons sortants sont égales il n'y a aucune raison de faire cette distinction et il faudra prendre en compte les conséquences d'un possible échange. La fonction d'onde du système ainsi formé obéit à l'équation de Schrödinger suivante

$$H \Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_f \Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) , \quad (3.12)$$

où

$$E_f = (k_A^2 + k_B^2) + W_{\text{He}^+} . \quad (3.13)$$

$W_{\text{He}^+}$  étant le seuil d'ionisation totale de l'ion résiduel. Le hamiltonien  $H_f$  décrit ici les deux électrons du continuum et l'électron de l'ion résiduel et s'écrit sous la forme :

$$H = -\frac{1}{2}(\Delta_0 + \Delta_1 + \Delta_2) - Z \left( \frac{1}{r_0} + \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_1} \right) + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} + \frac{1}{r_{21}} . \quad (3.14a)$$

Alors que le dernier l'électron (indiqué  $\mathbf{r}_2$ ) restera au voisinage du noyau lorsque les deux autres électrons (0 et 1) s'en éloignent, ceci nous permet de supposer que  $r_2 \ll r_i$  ( $i = 0, 1$ ). Dans ce cas le hamiltonien

$$H = H_f + V_f , \quad (3.14b)$$

avec

$$H_f = -\frac{1}{2}(\Delta_0 + \Delta_1) - \left( \frac{Z-1}{r_0} + \frac{Z-1}{r_1} \right) + \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_2} , \quad (3.15a)$$

où

$$V_f = -\frac{1}{r_0} - \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{02}} + \frac{1}{r_{12}} \quad (3.15b)$$

décrit le potentiel de distorsion. Le comportement moyen de ce potentiel est à décroissance exponentielle et  $V_f$  peut être négligé par la suite. La solution  $\Psi_f$  peut ainsi être mise sous la forme d'un produit

$$\Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2), \quad (3.16)$$

avec  $\psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1)$  la fonction d'onde, décrivant les deux électrons dans le double continuum (définie dans la troisième partie du chapitre 2) et s'écrit

$$\psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] C(\eta_A, \mathbf{k}_A | \mathbf{r}_0) C(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_1) C(\eta_{AB}, \mathbf{k}_{AB} | \mathbf{r}_{01}). \quad (3.17a)$$

Par ailleurs

$$\varphi(\mathbf{r}_2) = 2Z^{3/2} e^{-Zr_2} Y_{00} \quad (3.17b)$$

décrit l'ion résiduel dans son état fondamental, où  $Y_{00} = (4\pi)^{-1/2}$  représente la première harmonique sphérique.

### 3.3 Section efficace différentielle triple

Dans le premier chapitre on a défini la section efficace différentielle triple (SEDТ). Elle caractérise la fonction

$$\text{SEDТ} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE_A} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE_B} = (2\pi)^4 k_A k_B k_0^{-1} \sum_S |T_{S,fi}|^2. \quad (3.18)$$

$T_{S,fi}$  représente l'amplitude de diffusion, tenant compte des effets *d'échange* des trois électrons dans l'entrée et la sortie de la réaction (3.1). Ces contributions proviennent de l'opérateur d'antisymétrisation des fonctions d'ondes décrivant les trois électrons dans les deux voies dans une situation d'indiscernabilité.

En appliquant les résultats du chapitre 1, détaillés dans l'annexe E, on se ramène pour l'ionisation simple de l'atome d'hélium, lorsqu'on exclut toute sorte d'interaction dépendante de spin, à l'expression suivante de la SEDT

$$\begin{aligned} \text{SEDT} &= (2\pi)^4 k_A k_B k_0^{-1} (T_0^2 + T_1^2) \\ &= (2\pi)^4 k_A k_B k_0^{-1} \left( \frac{1}{2} |2f - g - h|^2 + \frac{3}{2} |g - h|^2 \right), \end{aligned} \quad (3.19)$$

dans la mesure où le faisceau incident est non polarisé et où les spins émergents ne sont pas détectés. Les notations  $f$ ,  $g$  et  $h$  désignent respectivement les amplitudes de diffusion directe, d'échange et de capture. Il convient de noter que lorsque le projectile atteint des vitesses très élevées par rapport à celles des électrons de la cible, les effets d'échange et de capture deviennent négligeables. Elles dépendent en particulier des quantités de mouvement des électrons après le processus d'ionisation et sont données par

$$f(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) = \langle \psi_{f\ 012}^- | V_i | \psi_i \rangle \text{ pour l'amplitude de diffusion directe,}$$

$$g(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) = \langle \psi_{f\ 102}^- | V_i | \psi_i \rangle \text{ pour l'amplitude de diffusion d'échange}$$

et 
$$h(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) = \langle \psi_{f\ 120}^- | V_i | \psi_i \rangle \text{ pour l'amplitude de diffusion de capture.}$$

On peut vérifier que les amplitudes  $f$  et  $g$  vérifient l'égalité de Peterkop (1961)

$$g(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) = f(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_A). \quad (3.20)$$

Cette amplitude d'échange  $g$  correspond à un processus direct d'ionisation à grand transfert d'impulsion. Alors que dans le cas du terme de capture  $h$ , nous avons un processus de double ionisation avec un transfert complet d'impulsion : l'électron incident est piégé par le noyau résiduel après avoir transmis la totalité de son énergie à la cible qui à son tour éjecte ses deux électrons.

Dans le cadre de la première approximation de Born et des approximations de Bethe, nous avons les possibilités d'utiliser des fonctions d'ondes variées pour décrire la cible dans son état fondamental, et discuterons des effets de corrélations associées.

### 3.3.1 Calcul de l'élément de matrice $T_{fi}$



Le travail qui va suivre sera limité au cas de l'atome d'hélium. L'amplitude de diffusion est donnée par l'élément de matrice

$$T_{fi} = \langle \psi_f^- | V_i | \psi_i \rangle, \quad (3.21)$$

où  $V_i$  est l'interaction perturbative dans la voie d'entrée, donnée par l'équation (3.7b).  $\psi_i$  décrit l'état initial du système avant la collision et la fonction  $\psi_f^-$  décrit exactement le système total dans son état final après la collision, cette fonction peut être déterminée à l'aide de la méthode de Born ou de la méthode des ondes partielles (des ondes distordues). Nous allons mettre en oeuvre ici les situations discutées au chapitre 2.

- **deux ondes planes** pour les électrons diffusé et éjecté ( $\eta_A = \eta_B = \eta_{AB} = 0$ )

Cette approximation consiste à remplacer dans l'équation (3.17a) les paramètres  $\eta_A$ ,  $\eta_B$  et  $\eta_{AB}$  par 0, c'est-à-dire les deux électrons du continuum sont décrits par deux ondes planes. Cette description est valable dans les processus d'ionisation par impact d'électrons rapides et à grand transfert d'impulsion. Elle sert de test pour la description des cibles atomiques, et fut utilisée à l'origine par Wetzell (1933) et Veldre (1966) dans le cadre de l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène. Les différents calculs relatifs à l'amplitude d'ionisation de l'atome d'hélium sont développés dans les annexes C et H,

$$\begin{aligned} f &= (2\pi)^{-9/2} \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1}) \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \varphi(\mathbf{r}_2) \\ &= A_0 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \{ \exp[-\alpha r_1 - (\beta + Z) r_2] + \exp[\beta r_1 - (\alpha + Z) r_2] \} \exp(\gamma r_{12}) \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) (-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1}), \end{aligned}$$

avec  $A_0 = (2\pi)^{-9/2} 2Z^{3/2} N Y_{00}$  et en utilisant le résultat de la transformée de Bethe

$$\int d\mathbf{r}_0 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) [-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1}] = (4\pi)k^{-2} [-2 + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2)],$$

nous pouvons écrire également  $f$  sous la forme

$$f = A_0 [J_0(\alpha, \beta, Z) + J_1(\beta, \alpha, Z) + J_2(\alpha, \beta, Z)],$$

où

$$J_m(\alpha, \beta, Z) = f_m(\alpha, \beta + Z) + f_m(\beta, \alpha + Z). \quad (m = 0, 1 \text{ ou } 2)$$

En utilisant également les notations de l'annexe C, les quantités  $f_m$  sont données par

$$f_0(a,b) = -8\pi k^{-2} I(a,b,c ; \mathbf{k}_B, \mathbf{0}),$$

et

$$f_1(a,b) = 4\pi k^{-2} I(a,b,c ; \mathbf{k}_B - \mathbf{k}, \mathbf{0})$$

$$f_2(a,b) = 4\pi k^{-2} I(a,b,c ; \mathbf{k}_B, -\mathbf{k}).$$

L'intégrale  $I(a,b,c ; \mathbf{p}, \mathbf{q})$  est donnée dans l'annexe C par la relation (C8d), soit

$$\begin{aligned} I(a,b,c ; \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-a r_1 - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2) \exp(c r_{12}) \\ &= (4\pi)^2 (\mathcal{D}^3_{abc}) \int_0^\infty dx [Ax^2 + Bx + C]^{-1}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

l'intégrale (3.22) dépend du produit AC et de B et l'amplitude de diffusion directe s'écrit alors dans le cadre de l'approximation des ondes planes

$$f = 4\pi A_0 k^{-2} \{ -2 J(\alpha, \beta, Z, \gamma ; \mathbf{k}_B, \mathbf{0}) + J(\alpha, \beta, Z, \gamma ; \mathbf{k}_B - \mathbf{k}, \mathbf{0}) + J(\alpha, \beta, Z, \gamma ; \mathbf{k}_B, -\mathbf{k}) \}.$$

avec

$$J(\alpha, \beta, Z, \gamma ; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = I(\alpha, \beta + Z, \gamma ; \mathbf{p}, \mathbf{q}) + I(\beta, \alpha + Z, \gamma ; \mathbf{p}, \mathbf{q}).$$

et se réduit dans le cas où l'on néglige les corrélations angulaires entre les deux électrons dans la cible, à

$$\begin{aligned} f &= N^* \{ -2\alpha(\beta+Z)^{-3} [\alpha^2 + k_B^2]^{-2} + \alpha(\beta+Z)^{-3} [\alpha^2 + |\mathbf{k}_B - \mathbf{k}|^2]^{-2} + \\ &\quad + \alpha(\beta+Z) [\alpha^2 + k_B^2]^{-2} [(\beta+Z)^2 + k^2]^{-2} + (\alpha \leftrightarrow \beta) \}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

avec  $N^* = 32 (2\pi)^3 A_0 k^{-2}$  et le symbole  $(\alpha \leftrightarrow \beta)$  sous-entend l'écriture d'une seconde contribution analogue à la première, avec substitution du paramètre  $\alpha$  par  $\beta$  et vice versa.

- **une onde plane pour le diffusé et une onde coulombienne pour l'éjecté**

$$(\eta_B \neq 0, \eta_A = \eta_{AB} = 0)$$

Cette approximation reste valable dans le cadre de simple ionisation par impact d'électrons rapides et avec faible transfert d'impulsion. Dans ce cas l'électron éjecté, d'énergie très basse (par rapport au diffusé), va ressentir le champ coulombien de l'ion résiduel. Les expressions précédentes deviennent

$$f = M_B (2\pi)^{-9/2} \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1}) \times \\ \times \exp(-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \varphi(\mathbf{r}_2)$$

avec

$$M_B = \exp\left(\frac{1}{2} \pi \eta_B\right) \Gamma(1+i\eta_B). \\ f = 2M_B (2\pi)^{-7/2} k^2 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) [-2 + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2)] \times \\ \times \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \varphi(\mathbf{r}_2).$$

En utilisant les résultats de l'annexe C (l'équation C11), l'expression de  $f$  ci-dessus devient

$$f = 4\pi M_B A_0 k^2 \{ -2 K(\alpha, \beta+Z, \gamma, \mathbf{k}_B, \mathbf{0}, \mathbf{k}_B) + K(\alpha, \beta+Z, \gamma, \mathbf{k}_B, -\mathbf{k}, \mathbf{k}_B) + \\ + K(\alpha, \beta+Z, \gamma, \mathbf{k}_B - \mathbf{k}, \mathbf{0}, \mathbf{k}_B) + (\alpha \leftrightarrow \beta) \}$$

L'intégrale  $K$  est donnée dans l'annexe C par la relation (C20).

- **deux ondes coulombiennes (2C)**

Les détails de calcul des amplitudes de diffusion avec deux ondes coulombiennes pour décrire deux électrons dans le continuum, sont dus à Roy *et al* (1980). Ces auteurs, à l'aide de résultats de Nordsieck (1954) et de Lewis (1957), ont pu calculer les sections efficaces d'ionisation de l'atome d'hydrogène à des énergies incidentes intermédiaires. Ces résultats sont tout à fait transposables au problème de l'ionisation simple de l'atome d'hélium si on ignore, d'une part le troisième terme du potentiel (3.7b) et d'autre part la corrélation angulaire dans la cible représentée par le facteur  $\exp(\gamma r_{12})$ . En négligeant ce dernier ( $\gamma = 0$ ) les différents calculs des amplitudes d'ionisation de l'atome d'hélium deviennent relativement simples et ils sont rapportés dans les annexes C et H.

- **fonction 3C de Merkuriev-Redmond et DS3C**

Dans le cadre de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact de protons ou d'électrons, Brauner *et al* (1989) ont pu calculer les amplitudes de diffusion en utilisant des fonctions d'ondes 3C pour décrire les trois particules dans le continuum. Une procédure de calcul analogue a été étudiée par Roy *et al* (1982). Ces auteurs ont pu calculer les sections efficaces d'ionisation de l'ion  $\text{He}^+$  (en décrivant le projectile par une onde coulombienne et les deux électrons dans la sortie par deux autres ondes coulombiennes). Le problème est un peu plus difficile dans le cas de l'hélium atomique, en raison de la

forme du potentiel d'interaction du projectile et de la cible. Les différents résultats sont donnés dans l'annexe E.

Le calcul réalisé avec la fonction DS3C est obtenu en remplaçant les paramètres de Sommerfeld habituels dans 3C par de nouveaux paramètres (Berakdar 1996).

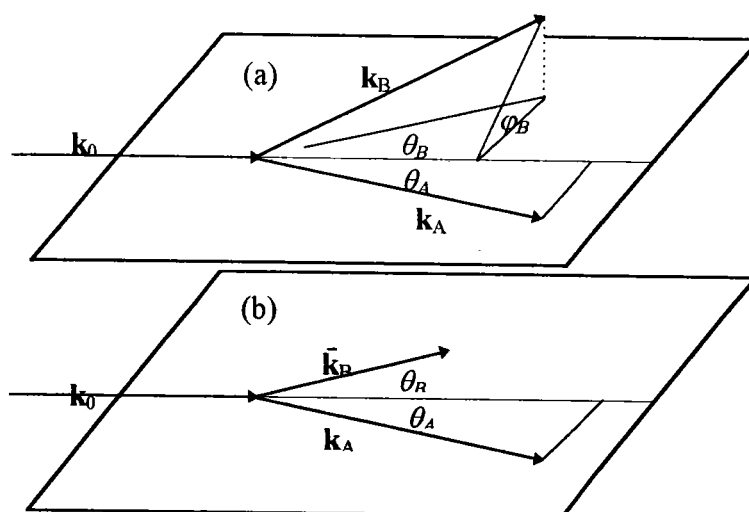
### 3.3.2 Géométries et cinématiques de la réaction

Après avoir défini les différentes expressions de l'amplitude de diffusion correspondant à chacune des approximations proposées ci-dessus, nous allons dans la présente partie nous intéresser aux différentes cinématiques d'ionisation. En général les trois vecteurs  $\mathbf{k}_0$ ,  $\mathbf{k}_A$  et  $\mathbf{k}_B$  ne se trouvent pas dans le même plan. Lorsque l'angle azimutal relatif aux deux électrons émis,  $\phi = \phi_A - \phi_B$  prend les valeurs 0 ou  $\pi$ , la géométrie de la collision est dite coplanaire.

Dans cette étude nous nous intéressons en particulier aux collisions coplanaires (e,2e) à des énergies incidentes basses (quelques eV au delà du seuil d'ionisation), intermédiaires telles que ( $\sim 4$  fois le premier seuil d'ionisation  $\leq E_0 \leq \sim 600$  eV) et hautes ( $600 \text{ eV} \leq E_0 \leq \sim 8$  keV).

Dans la suite nous allons étudier deux cinématiques différentes : une géométrie asymétrique coplanaire (figure 3.1a) et une géométrie symétrique coplanaire (figure 3.2a).

#### a) Géométrie coplanaire asymétrique

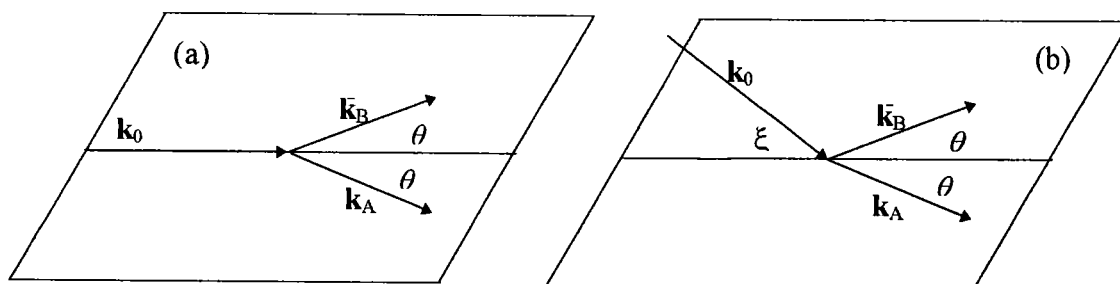


**Figure 3.1** Schéma simplifié d'une réaction (e,2e) dans le cas d'une géométrie : (a) non coplanaire ; (b) coplanaire ( $\phi_B = 0$  et  $\phi_A = \pi$ ) .

Ici, les deux électrons sont détectés dans des directions différentes et avec des vitesses différentes. L'électron *rapide* est diffusé dans une direction  $\theta_A$  que l'on fixe entre 0 et 12 degrés ( $\varphi_A = \pi$  ou 0). Le deuxième électron *lent* est détecté à l'aide d'un détecteur que l'on déplace dans le plan. Cette géométrie décrit les réactions du régime dipolaire des cinématiques à petits transfert d'impulsion. Pour les énergies incidentes élevées (quelques keV) nous nous référons aux expériences absolues du groupe de Lahmam-Bennani et d'un autre côté aux mesures expérimentales d'Ehrhardt pour les énergies incidentes intermédiaires et basses.

## b) Géométries symétriques

Dans le cas de la géométrie symétrique coplanaire, les deux électrons émergents sont détectés en coïncidence sous des angles égaux  $\theta_A = \theta_B = \theta$  de part et d'autre de la direction d'incidence (voir figure 3.2a et b) et avec les mêmes énergies  $E_A = E_B$ . Nous mentionnons ici les expériences de Pochat *et al* (1982 et 83), Rösel *et al* (1991). Ces expériences sont parfois relatives (non normalisées) et se réalisent sur l'atome d'hélium à de grands angles  $\theta$ .



**Figure 3.2** Géométrie (a) coplanaire ( $\xi = 0$ ) ; (b) non coplanaire, d'une cinématique symétrique d'une réaction (e,2e).

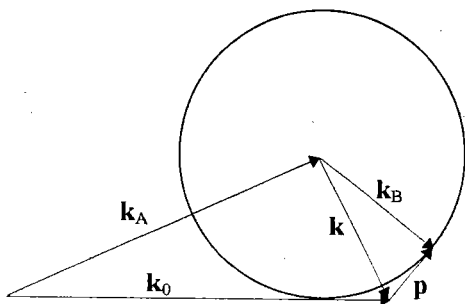
## 3.4 Résultats et discussions

Dans cette partie de ce chapitre, nous présentons les résultats que nous avons obtenus en utilisant les différents modèles cités dans le chapitre 2. Dans un premier temps nous explorons le domaine de hautes énergies d'incidence, dans un second nous nous intéresserons aux énergies intermédiaires et enfin nous étudierons le domaine de très basses énergies (à partir de quelques électronvolts au dessus du seuil d'ionisation)

### 3.4.1 Hautes énergies ( $E_0 \geq 600$ eV )

#### a) Grand transfert d'impulsion (régime impulsionnel).

Cette situation est caractéristique d'une collision binaire entre l'électron incident et l'un des électrons de la cible, de quantité de mouvement initiale  $\mathbf{p}$ . Dans ce cas la conservation des quantités de mouvement  $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_A + \mathbf{p} = \mathbf{k}_B$  montre que lorsqu'on mesure la distribution angulaire de l'électron éjecté en fixant les paramètres  $\mathbf{k}_0$ ,  $\mathbf{k}_A$ ,  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_A$  et  $k_B$  et en variant l'angle d'éjection  $\theta_B$ , le vecteur  $\mathbf{k}_B$  décrit un cercle. Le module du vecteur  $\mathbf{p}$  varie en passant par un minimum réalisé lorsque  $\mathbf{k}_B \parallel \mathbf{k}$  (voir figure 3.3). Ce qui explique le pic des SEDT dans la direction du transfert.



**Figure 3.3** Représentation schématique d'une distribution angulaire d'éjection dans le cadre d'un régime impulsionnel.

Dans le cas de la cible de He ( $1s^2$ ) l'extremum de la distribution  $\chi(\mathbf{p})$  des vitesses dans la cible est obtenu lorsque  $\mathbf{p}$  devient nul (figure 3.4), et conduit à trouver un maximum de la SEDT dans la direction de transfert  $\mathbf{k}$ .

En première approximation de Born, l'amplitude d'ionisation est donnée pour un atome d'hélium par

$$f_{B1} = (2\pi^2)^{-1} k^{-2} \langle \psi_f^- | -2 + \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_2) | \chi_i \rangle$$

L'élément de matrice est calculé dans les deux cas où l'électron éjecté est décrit par une onde plane ou une onde coulombienne. L'état fondamental de la cible est représenté par l'une des fonctions d'ondes ( $\alpha$ -e) données dans le chapitre 2.

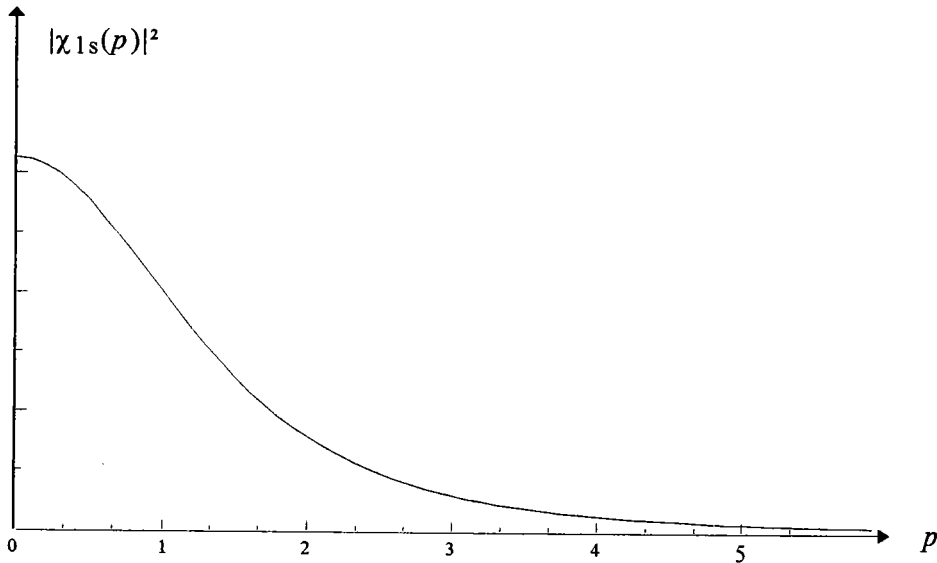
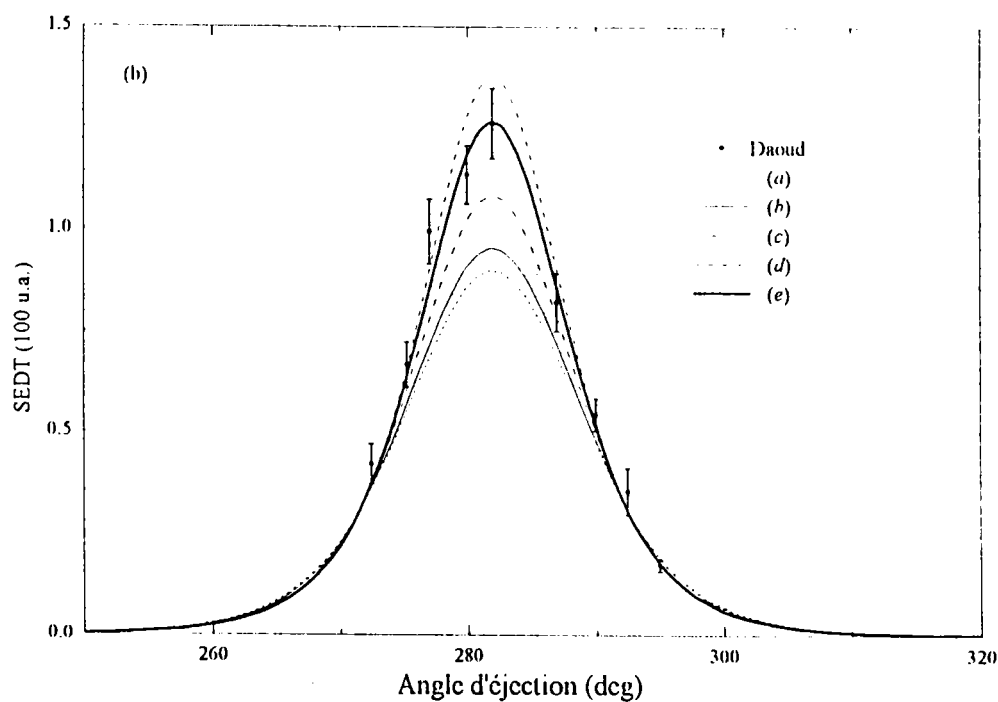
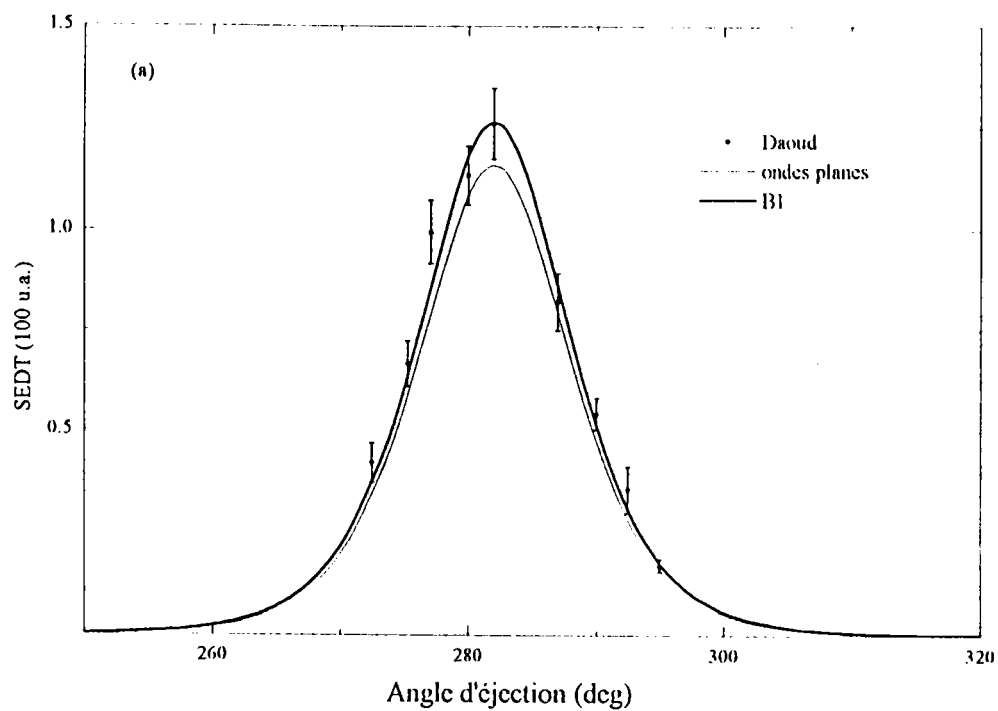


Figure 3.4 représentation de  $|\chi(p)|^2$  en unité arbitraire pour un orbitale (1s).

La figure 3.5a montre la distribution angulaire de la SEDT pour l'atome d'hélium  $\text{He}(1s^2)$  calculée en première approximation de Born. Cette distribution permet de comparer à grand transfert d'impulsion ( $k = 5.2$  u.a.) les mesures expérimentales absolues de Daoud (1985) avec nos calculs effectués avec la fonction (e) pour l'état initial de la cible. L'électron éjecté dans la voie de sortie est décrit par une onde plane puis coulombienne. Les énergies d'incidence  $E_0 = 8361.6$  eV et d'éjection  $E_B = 337$  eV, l'angle de diffusion  $\theta_A = 12^\circ$  et l'angle azimutal  $\phi = \pi$  correspondent aux conditions expérimentales. L'accord est satisfaisant lorsque l'électron éjecté est décrit par une onde coulombienne.

Dans la figure 3.5b et dans les conditions de la figure 3.5a, la SEDT de  $\text{He}(1s^2)$  est représentée en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  et calculée en première approximation de Born. L'électron éjecté est décrit par une onde coulombienne et nous comparons les mesures expérimentales de Daoud (1985) avec nos calculs effectués avec différentes fonctions d'ondes (a-e) de la cible. On remarque un bon accord lorsque la cible est décrite par la fonction (e). Ainsi, à haute énergie et à grand transfert d'impulsion, la première approximation de Born et une bonne description de la cible permettent de décrire la SEDT de façon satisfaisante. A ces énergies, la dynamique de la collision est donc correctement décrite par la première approximation de Born.



**Figure 3.5** SEDT (c, 2c) d'hélium en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  pour  $E_0 = 8361.6$  eV,  $E_B = 337$  eV et  $\theta_\Lambda = 12^\circ$ . Mesures expérimentales de Daoud (1985) comparées avec nos calculs : (a) onde plane et coulombienne, état initial de la cible (e) ; (b) différentes descriptions de l'état fondamental d'hélium (a jusqu'à e).



Ces figures 3.5 montrent la sensibilité des distributions angulaires des SEDT à hautes énergies et à grand transfert d'impulsion, chaque fois que l'on change la fonction d'onde ( $a$  jusqu'à  $e$ ) décrivant la cible. Le désaccord entre nos calculs théoriques (effectués avec les fonctions  $a$  jusqu'à  $d$ ) et les mesures expérimentales de Daoud (1985) est une conséquence des fonctions d'ondes utilisées. Cette méthode est donc un test important relativement à la qualité des fonctions d'ondes décrivant la structure de la cible.

### b) Faible transfert d'impulsion (régime dipolaire)

La distribution angulaire calculée en première approximation de Born par la SEDT d'ionisation, montre deux lobes qui sont répartis de manière symétrique vis-à-vis de la direction de transfert  $\mathbf{k}$ . La présence du second lobe, dit lobe de recul, est principalement due au noyau : l'électron initialement lié quitte la cible après la collision dans la direction de transfert avec une modeste vitesse (faible transfert). Il subit par la suite une réflexion essentiellement élastique due à l'attraction de l'ion résiduel et poursuit alors son chemin dans la direction opposée au transfert. Pour des énergies incidentes très élevées ce phénomène n'est observé expérimentalement qu'à faible transfert d'impulsion.

L'amplitude de diffusion associée, est ici calculée uniquement pour un électron éjecté décrit par une onde coulombienne. L'état fondamental de la cible est représenté par l'une des fonctions d'ondes ( $a-e$ ) données dans le chapitre 2.

Les figures 3.6 représentent la distribution angulaire de la SEDT pour l'atome d'hélium  $\text{He}(1s^2)$ , calculée en première approximation de Born. Cette distribution permet de comparer les mesures expérimentales absolues de Duguet *et al* (1987) avec nos calculs, effectués avec les différentes fonctions ( $a-e$ ). L'électron éjecté est décrit par une coulombienne, les énergies d'incidence  $E_0 = 8028.9$  eV et d'éjection  $E_B = 4.3$  eV, l'angle de diffusion  $\theta_A$  est successivement  $2^\circ$  (a) ;  $1.5^\circ$  (b) ;  $1^\circ$  (c) et  $0.41^\circ$  (d), l'angle azimutal  $\phi_B = \pi$  dans tous les cas.

Les différents cas représentés dans ce travail révèlent un bon accord entre l'expérience et la première approximation de Born (B1), et en particulier lorsque la cible est décrite par la fonction d'onde (cas  $e$ ). Dans les figures 3.6c et 6d une comparaison entre le modèle 3C et B1 montre qu'à ces énergies, les effets post-collisionnels sont négligeables et que la dynamique des collisions est bien décrite par B1.

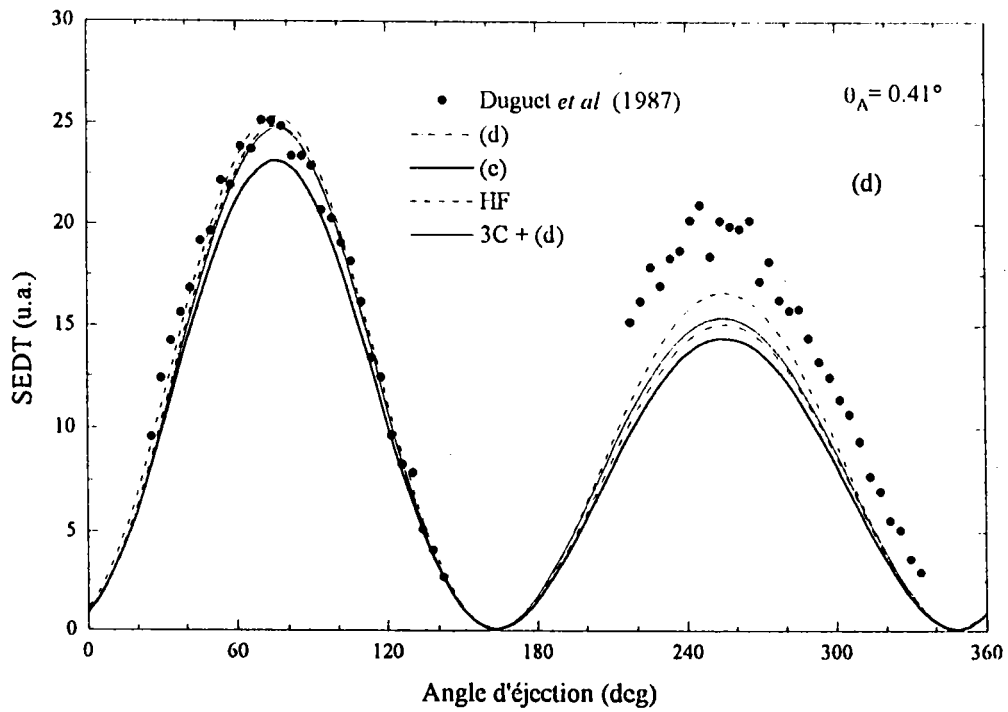
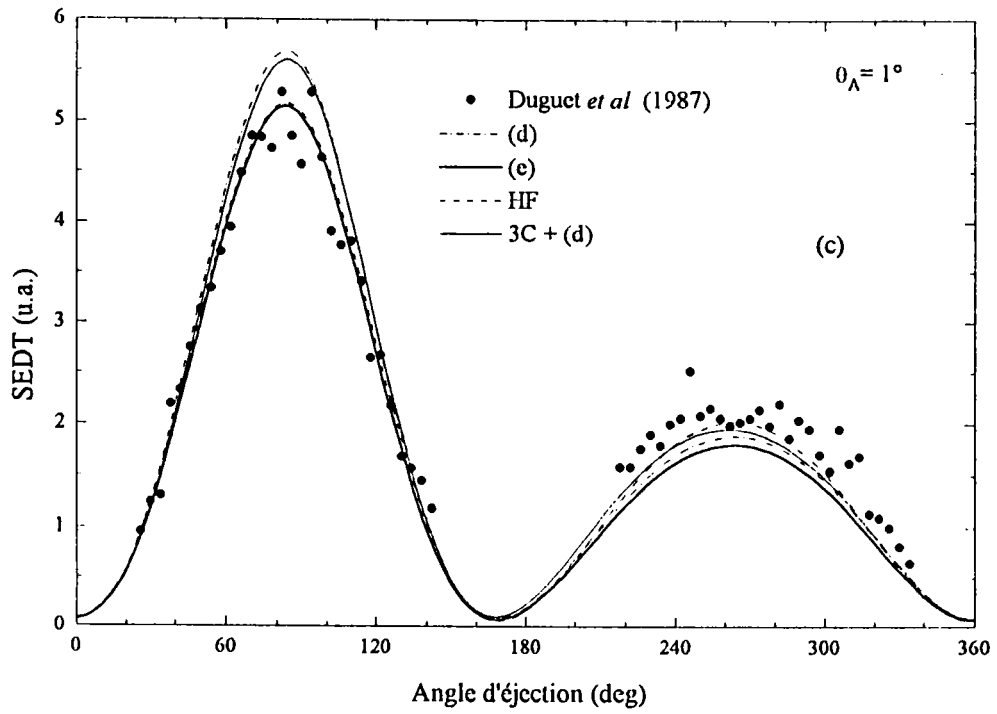
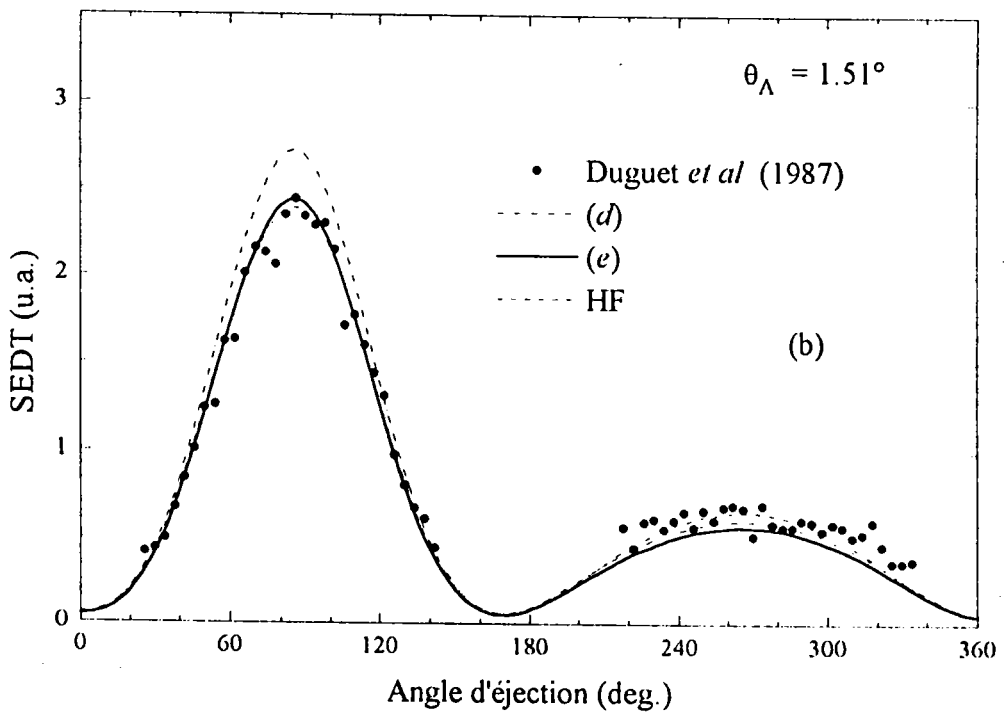
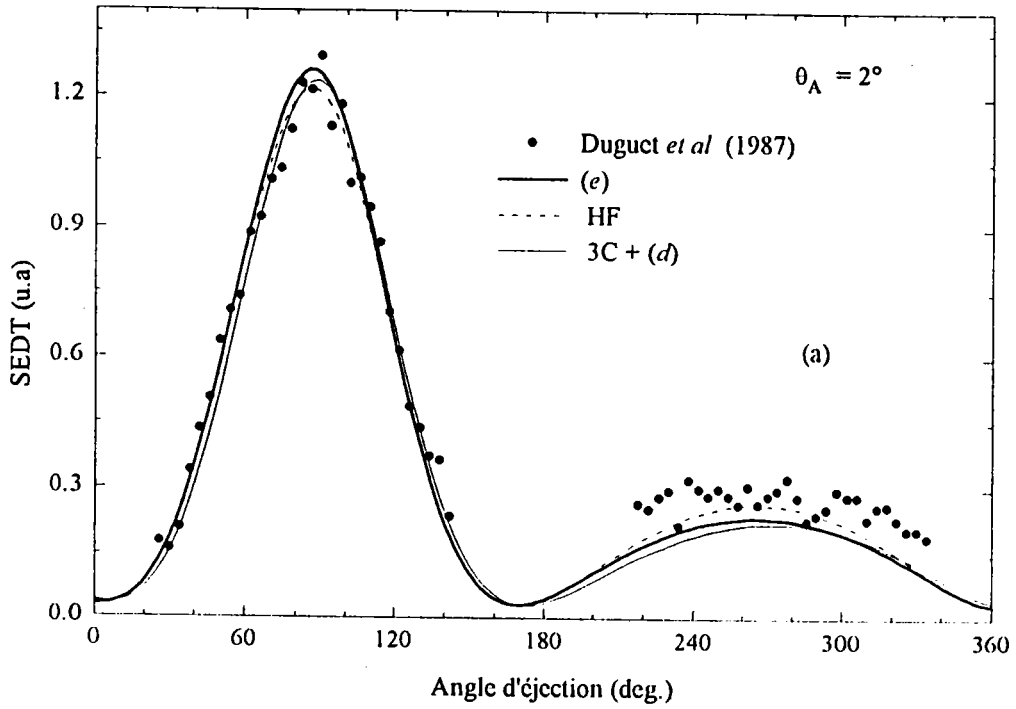


Figure 3.6 (*suite*)



**Figure 3.6** SEDT coplanaire ( $\varphi_A = \pi$  et  $\varphi_B = 0$ ) pour l'ionisation (e,2e) de He en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  à une énergie incidente  $E_0 = 8028.9$  eV et d'éjection  $E_B = 4.3$  eV. L'angle de diffusion  $\theta_A$  est : (a)  $2^\circ$  ; (b)  $1.51^\circ$  ; (c)  $1^\circ$  et (d)  $0.41^\circ$ .

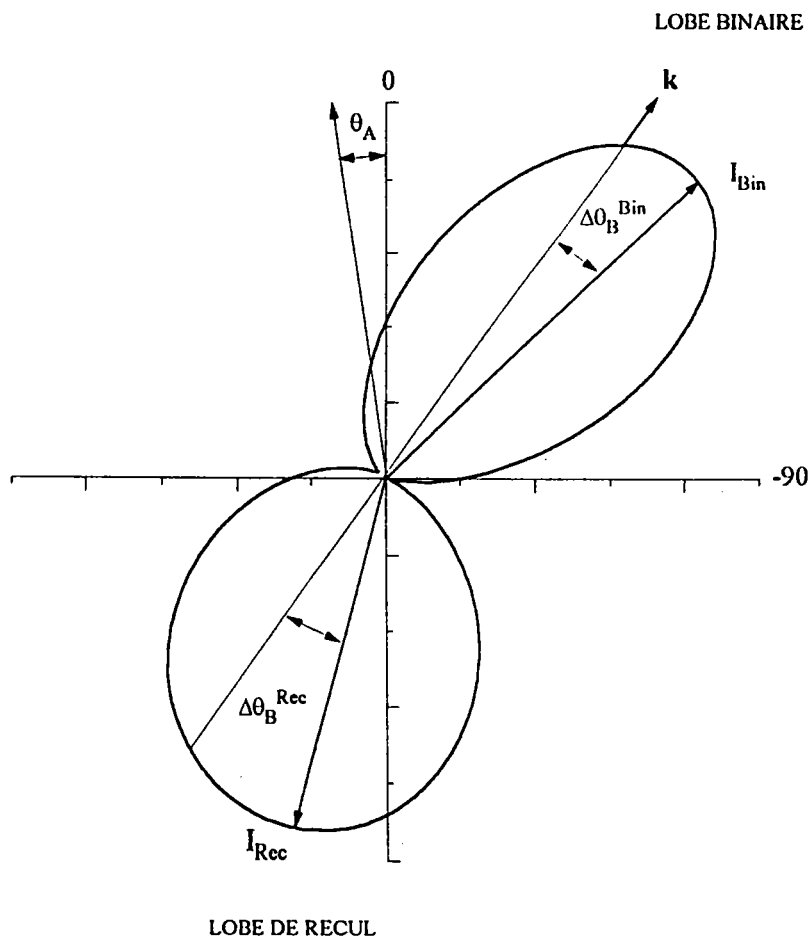
### 3.4.2 Energies intermédiaires ( $100 \text{ eV} \leq E_0 \leq 600 \text{ eV}$ )

#### a) Cinématiques asymétriques

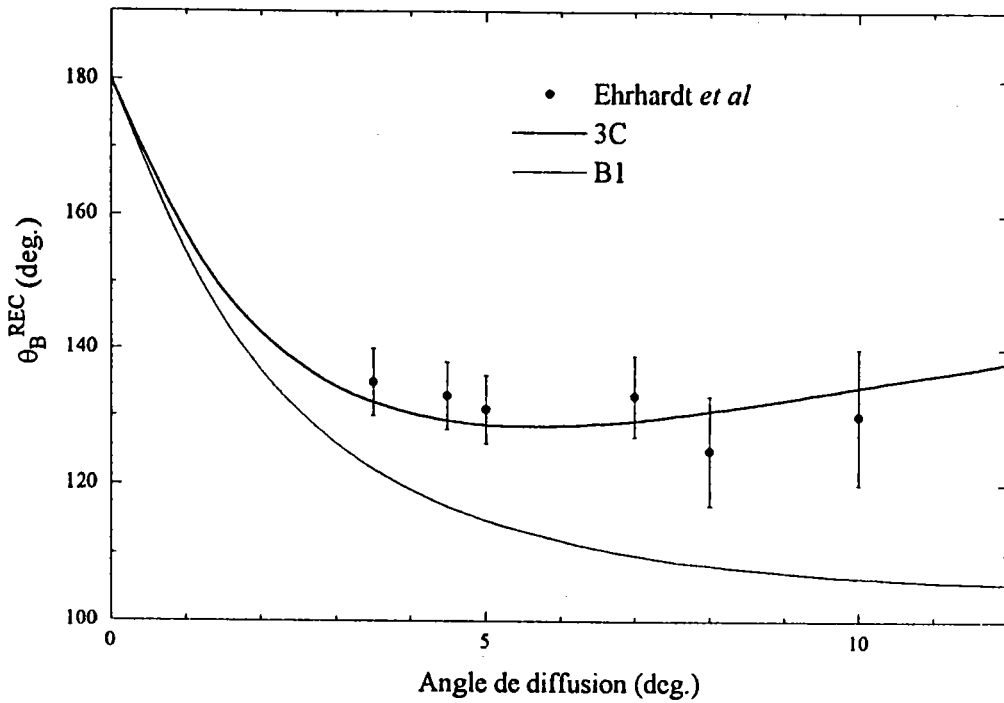
La distribution angulaire de la SEDT d'ionisation pour des énergies d'incidence intermédiaires révèle également deux lobes. A la différences des structures précédentes des SEDT qui sont réparties d'une manière symétrique vis-à-vis des deux directions de transfert ( $\mathbf{k}$ ,  $-\mathbf{k}$ ), la SEDT présente la particularité de repousser chacun des deux lobes binaire et recul vers les grands angles (figure 3.7). Ce phénomène est dû aux corrélations post-collisionnelles (Ehrhardt 1983) des deux électrons du continuum : quand les électrons, diffusé et éjecté, quittent la cible avec des vitesses proches, ils ont tendance à *se repousser* et l'électron éjecté se trouve dévié de la direction de transfert.

Ces effets ont été prévus par plusieurs modèles tels que la seconde approximation de Born (B2), l'approximation semi classique de l'interaction post collisionnelle (PCI) ainsi que la présente description (3C) et d'autres approches qui tiennent compte de l'interaction des électrons dans le continuum. Mais aucun traitement, prétendant bien décrire la cible, se basant sur la première approximation de Born, ne permet de tels résultats. Ce qui permet dans la suite de négliger les corrélations angulaires dans la cible, liées au terme  $\exp(\gamma r_{12})$ . Il a été montré dans les travaux de Piraux (1983) qu'une fonction d'onde de Hartree-Fock décrivant la cible d'hélium dans son état fondamental, donne les mêmes SEDT calculées, dans le cadre de la première approximation de Born, avec une fonction d'onde de type Hylleraas à 56 termes, contenant des corrélations angulaires et radiales.

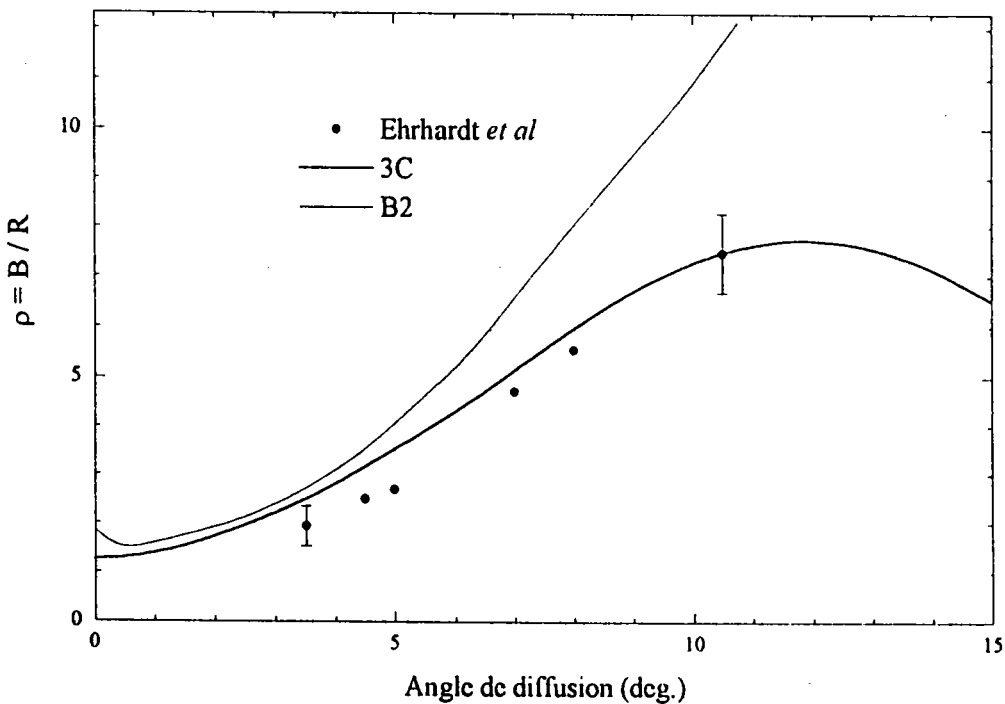
Dans la figure 3.7 nous représentons une situation typique des SEDT de l'atome d'hélium. Les quantités  $I_{\text{Bin}}$  et  $I_{\text{Rec}}$  désignent respectivement l'intensité du lobe binaire et l'intensité du lobe de recul.  $\Delta\theta_{\text{B}}^{\text{Bin}}$  et  $\Delta\theta_{\text{B}}^{\text{Rec}}$  représentent respectivement les variations des positions  $\theta_{\mathbf{k}}$  (direction de transfert) pour le lobe binaire et  $\theta_{-\mathbf{k}}$  (direction opposée au transfert) pour le lobe de recul.



**Figure 3.7** Représentation angulaire ( angle d'éjection ) d'une SEDT obtenue pour des cinématiques asymétriques coplanaires. Les différents paramètres de structure sont définis dans le texte.



**Figure 3.8** Position angulaire du maximum du pic de recul, en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_A$  pour les énergies  $E_0 = 500$  eV et  $E_B = 10$  eV. Les points expérimentaux mesurés par Ehrhardt *et al* comparés avec B1, première approximation de Born et 3C, fonction de Merkuriev-Redmond (notre calcul).



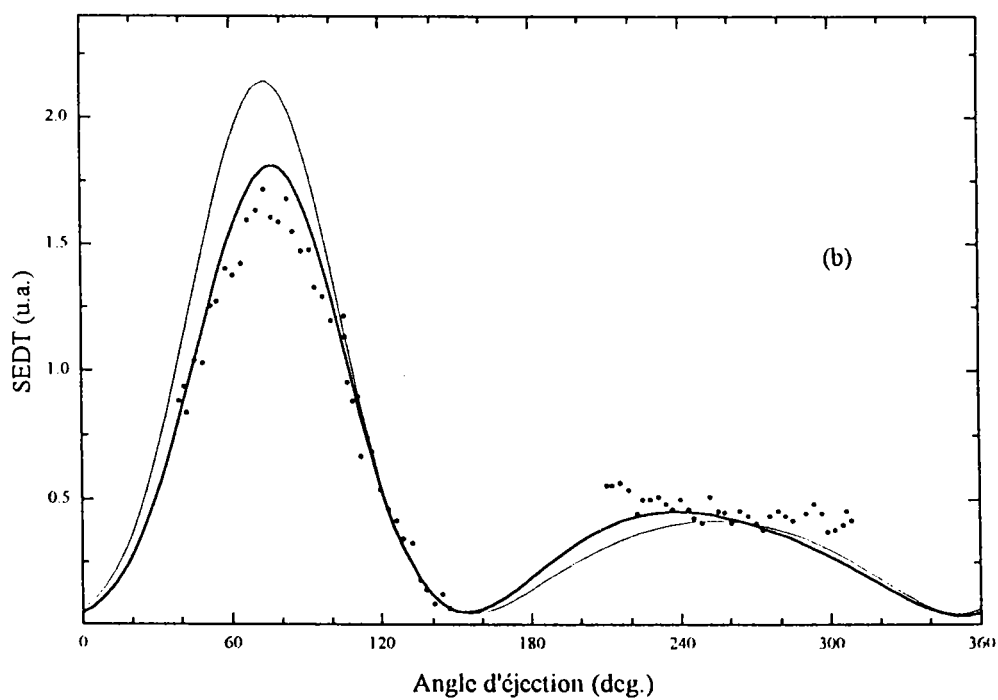
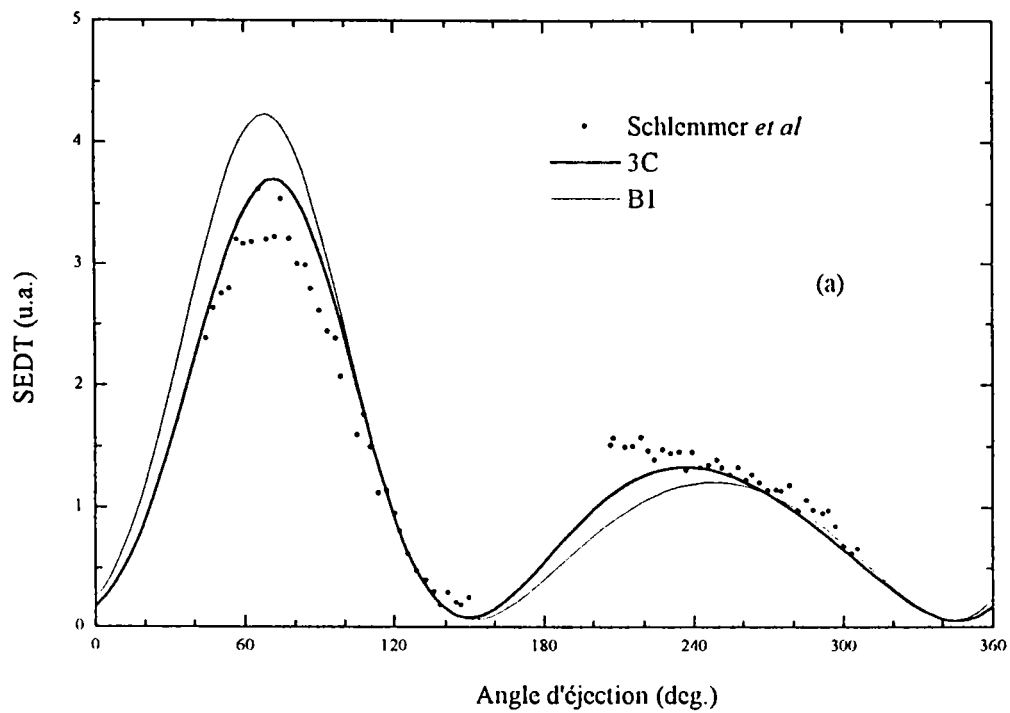
**Figure 3.9** Rapport entre (B) l'intensité du pic binaire et (R) l'intensité du pic de recul, en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_A$  pour les énergies  $E_0 = 500$  eV et  $E_B = 10$  eV. Les points expérimentaux mesurés par Ehrhardt *et al* comparés avec B2, seconde approximation de Born calculée par Piraux *et al* (1985) et notre calcul avec la fonction 3C de Merkuriev-Redmond.

Dans la figure 3.8 on montre la position angulaire du pic de recul pour He(1s<sup>2</sup>) en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_A$  pour une énergie incidente  $E_0 = 500$  eV et d'éjection  $E_B = 10$  eV. Notre calcul avec la fonction 3C montre un très bon accord avec les mesures expérimentales de Ehrhardt *et al* (1980) en s'écartant des résultats donnés en première approximation de Born pour les grands angles de diffusion.

Dans la figure 3.9 nous donnons une comparaison entre le modèle 3C et la seconde approximation de Born B2 (Byron *et al* 1985). Notre calcul montre que, sous les conditions de la figure 3.8, le rapport  $\rho$  entre le pic binaire B et le pic de recul R en fonction de l'angle de diffusion présente un maximum pour  $\theta_A = 12^\circ$ . L'approximation B2 croit rapidement en s'éloignant de l'expérience. Ce désaccord entre l'expérience et B2 est peut-être dû au fait que dans la seconde approximation de Born on ne tient compte que des deux premiers termes du développement de  $T_{fi}$  en puissance de l'interaction des deux électrons diffusé et éjecté dans le continuum.

$\theta_B$ (deg)	B1	B2(1s)	B2(2s)	B2(2p)	B2	EBS	3C
-30	9.67	9.8	9.6	9.1	5.85	5.86	5.58
-50	12.4	12.0	12.0	12.0	9.02	9.04	8.58
-70	10.5	11.0	11.0	10.0	9.40	9.42	8.85
-90	5.82	5.7	6.0	6.3	6.20	6.22	5.78
-110	1.88	1.8	1.9	2.1	2.18	2.20	2.07
-130	0.31	0.29	0.31	0.37	0.41	0.42	0.41
-150	0.51	0.57	0.46	0.63	0.87	0.85	0.93
-170	1.39	1.5	1.3	1.6	2.31	2.30	2.41
30	0.25	0.26	0.23	0.25	0.31	0.30	0.22
50	0.67	0.66	0.67	0.62	0.82	0.79	0.68
70	1.58	1.6	1.6	1.5	1.58	1.57	1.52
90	2.40	2.40	2.30	2.3	2.52	2.54	2.52
110	2.90	3.0	2.80	3.0	3.52	3.59	3.53
130	3.05	3.2	3.0	3.4	4.22	4.30	4.28
150	2.83	3.0	2.7	3.2	4.31	4.38	4.43
170	2.25	2.4	2.1	2.6	3.65	3.67	3.77

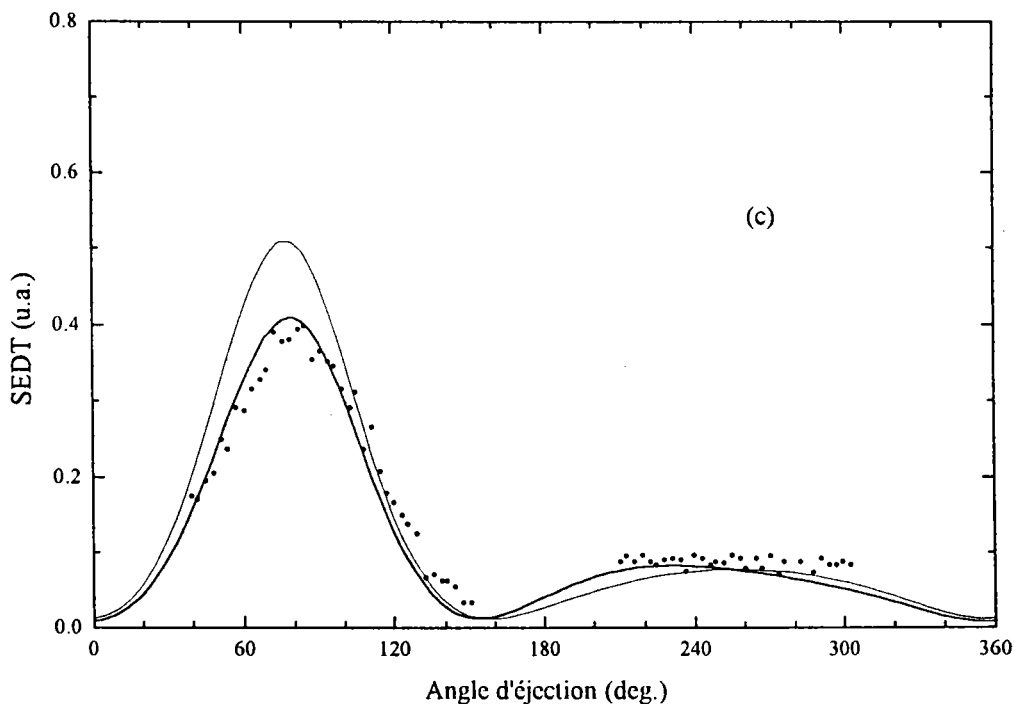
**Tableau 3.1** SEDT de l'hydrogène atomique H(1s) en unités atomiques. Calculs de Byron *et al* (1985) : première approximation de Born (B1) ; secondes approximations de Born *partielles* tenant compte seulement des contributions de l'état fondamental 1s dans B2(1s), 2s dans B2(2s) et 2p dans B2(2p) ; seconde approximation de Born (B2) ; approximation iconale de Glauber (EBS) comparés à notre calcul réalisé avec la fonction 3C de Merkuriev-Redmond.



**Figure 3.10** SEDT (u.a.) de l'hélium pour des énergies incidente  $E_0=600$  eV et d'éjection  $E_B=5$  eV. L'angle de diffusion : (a)  $\theta_\Lambda = 4^\circ$  ; (b)  $\theta_\Lambda = 6^\circ$  et (c)  $\theta_\Lambda = 10^\circ$ .



A titre de comparaison, nous avons également présenté dans le tableau 3.1 quelques résultats des SEDT de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental ( $H 1s^1$ ), pour une énergie incidente de 500 eV, d'angle de diffusion  $\theta_A = 4^\circ$  et l'énergie d'éjection  $E_B = 10$  eV. Cette comparaison permet de confronter notre calcul réalisé avec la fonction de Merkuriev-Redmond (3C) à ceux de Byron *et al* (1985) : en première approximation de Born (B1) ; en seconde approximation *partielle* de Born tenant compte seulement, des contributions de l'état fondamental 1s dans B2(1s), 2s dans B2(2s) et 2p dans B2(2p) ; en seconde approximation de Born (B2) et enfin avec les résultats de l'approximation iconale de Glauber (EBS). Cette dernière, à la différence de l'approximation (B2), contient plus de corrélation (post-collisionnelle) qui se traduit par le troisième terme  $\chi_G^2$  du développement (2.79) du chapitre 2. Une telle correction augmente le lobe de recul ( $\theta_B = 150^\circ$  : tableau 3.1) ce qui apparaît dans les résultats donnés par l'approximation 3C qui contient tous les termes du développement de Glauber.

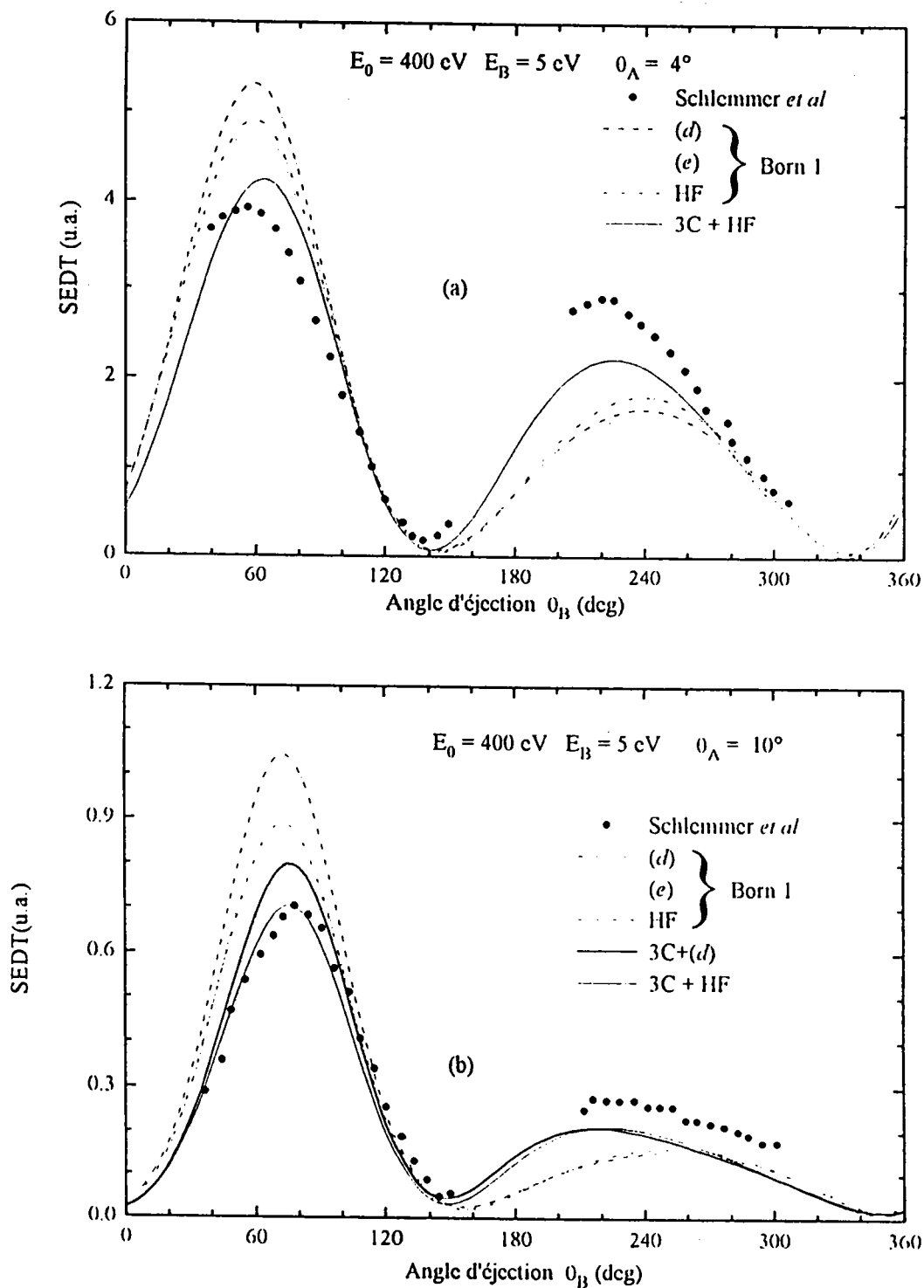


**Figure 3.10 (suite)**

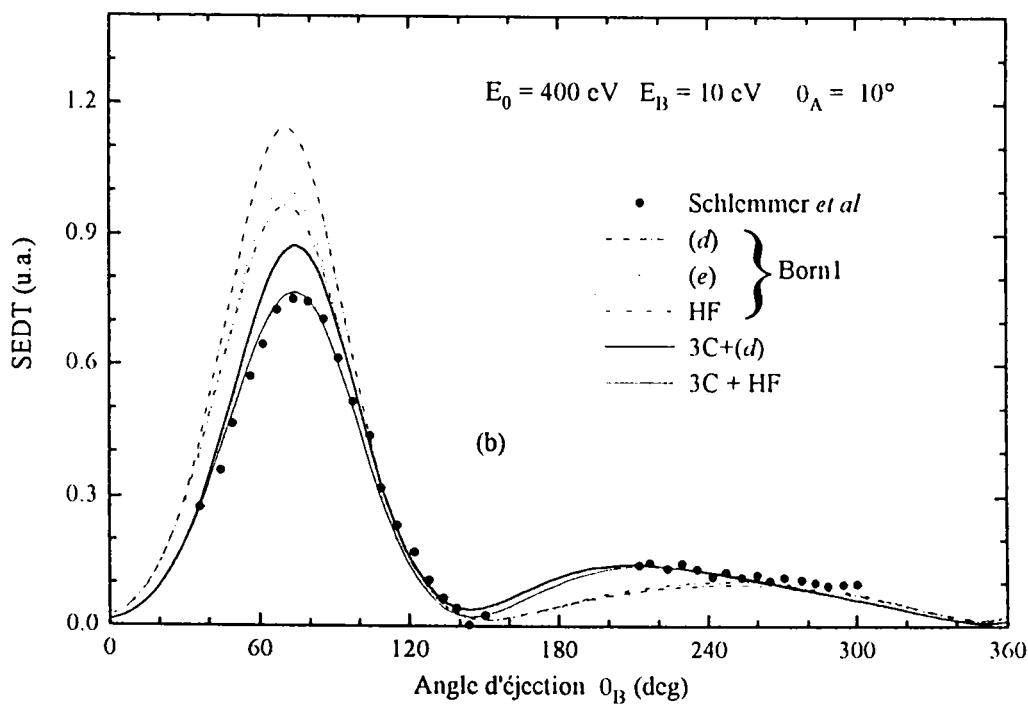
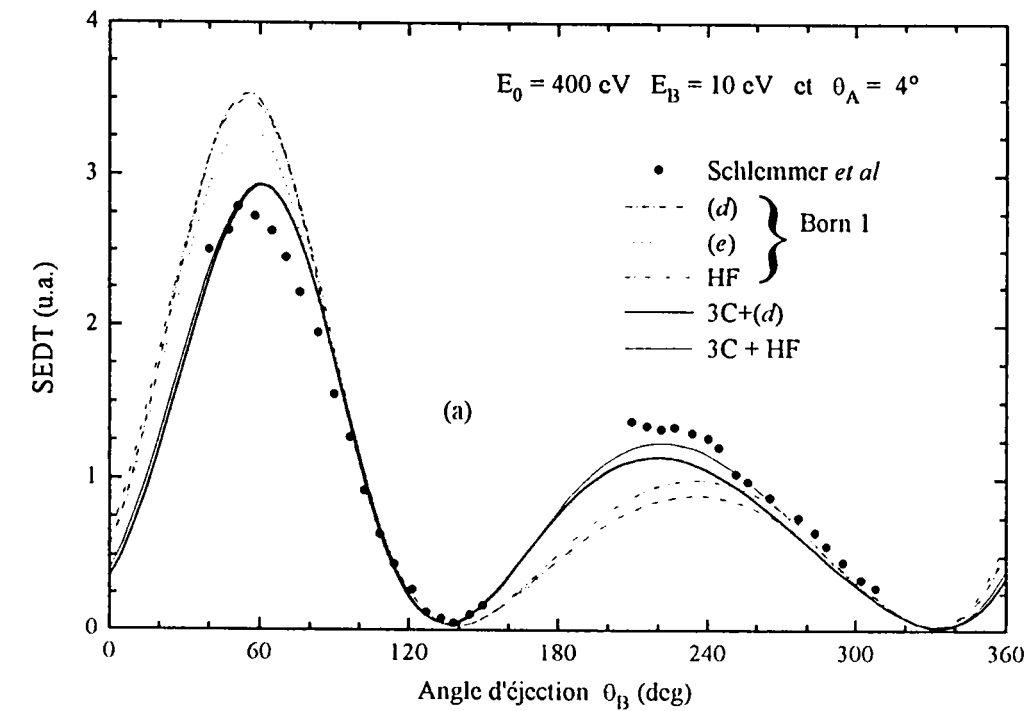
Une série de comparaisons entre le modèle (3C) et la première approximation de Born (figures 3.10-14) montre l'importance des effets post-collisionnels dans le calcul des SEDT pour des énergies incidentes intermédiaires de 600 et 400 eV.

Les figures 3.10 et 11 montrent l'accord entre les mesures absolues de Schlemmer à 400 eV d'incidence des SEDT coplanaires de l'hélium, et notre calcul effectué avec 3C. Il faut noter également, que cet accord diminue dès que l'on réduit l'énergie incidente  $E_0$  (figure 3.13 et 14). C'est-à-dire, en se rapprochant de la zone de Wannier d'une part, (faibles énergies) : on sort du domaine de validité du traitement de Redmond-Merkuriev. D'autre part, les effets de distorsions deviennent non négligeables.

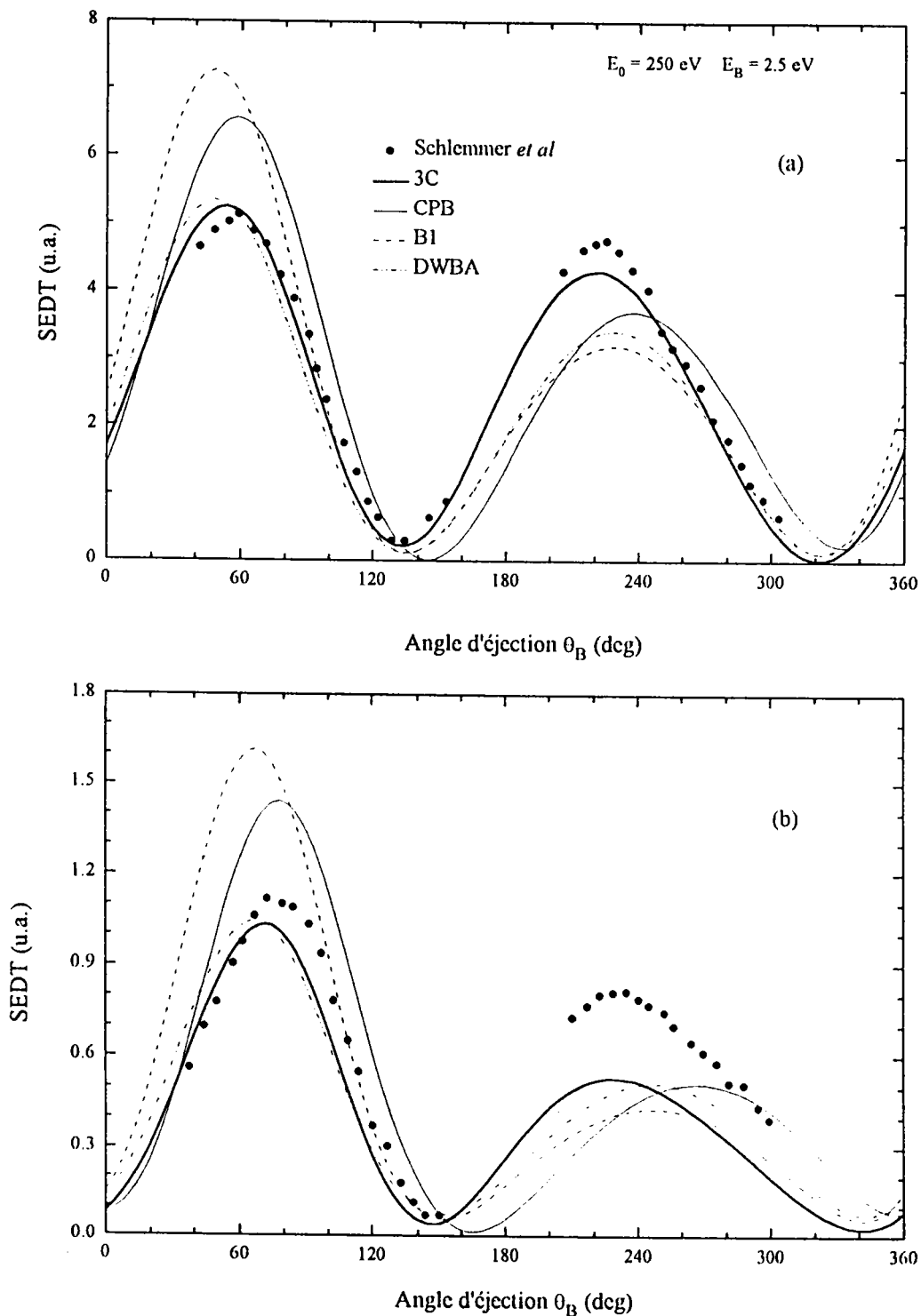
Dans les figures 3.13 et 14 nous avons comparé nos résultats théoriques : B1 ; CPB (Coulomb Projected Born) noté des fois par 2C dans lequel les deux électrons sont décrits par deux ondes coulombiennes ; 3C et DWBA (Distorted Waves first Born Approximation), on remarque l'importance de cette dernière par rapport à B1 et CPB, et que la description 3C reste l'approche qui décrit le mieux (au moins à ces énergies) les processus d'ionisation.



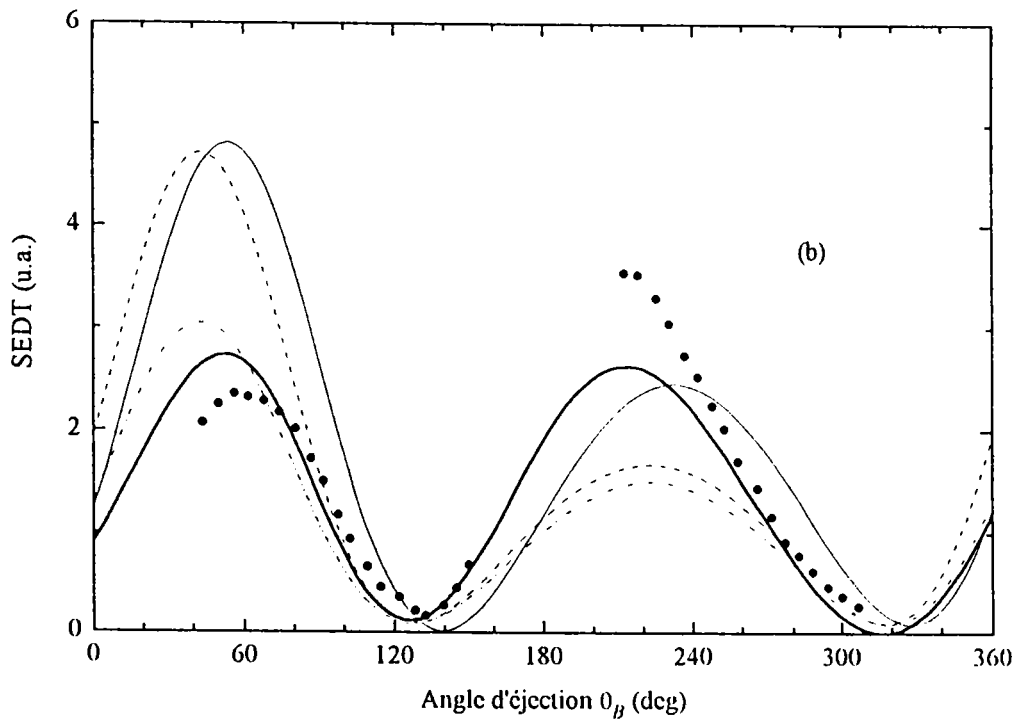
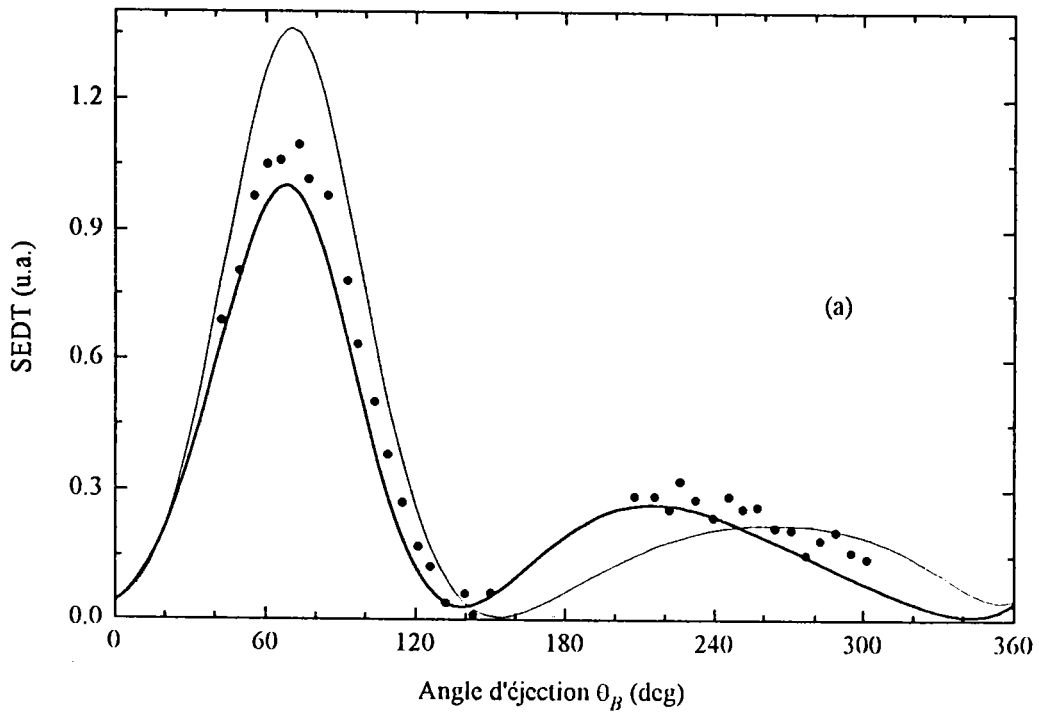
**Figure 3.11** SEDT coplanaire ( $\varphi_A = \pi$  et  $\varphi_B = 0$ ) en unités atomiques, pour la réaction  $\text{He}(e,2e)\text{He}^+$  en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  à une énergie incidente  $E_0 = 400$  eV et d'éjection  $E_B = 5$  eV. L'angle de diffusion  $\theta_A$  est : (a)  $4^\circ$  et (b)  $10^\circ$ . Courbes : Born I (discontinu) (d); (e); - - HF. 3C (plein) — 3C+(d); 3C+HF et • les points expérimentaux de Schlemmer *et al.* (1991).



**Figure 3.12** mêmes situations que celles de la figure 3.11 mais avec  $E_B = 10 \text{ eV}$ . Courbes : Born I (discontinu) - - (d); --- (e); - · - HF; et 3C (plein) — (d); - - - HF et • les points expérimentaux de Schlemmer *et al* (1991).



**Figure 3.13** SEDT coplanaire ( $\varphi_A = \pi$  et  $\varphi_B = 0$ ) en unités atomiques, pour la réaction  $\text{He}(e,2e)\text{He}^+$  en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  à une énergie incidente  $E_0 = 250$  eV et d'éjection  $E_B = 2.5$  eV. L'angle de diffusion  $\theta_A$  est : (a)  $4^\circ$  et (b)  $10^\circ$ . Courbes : - - - B1(1C) ; — CPB(2C) ; - - - notre calcul DWBA ; — 3C et • expérience de Schlemmer *et al*(1991).

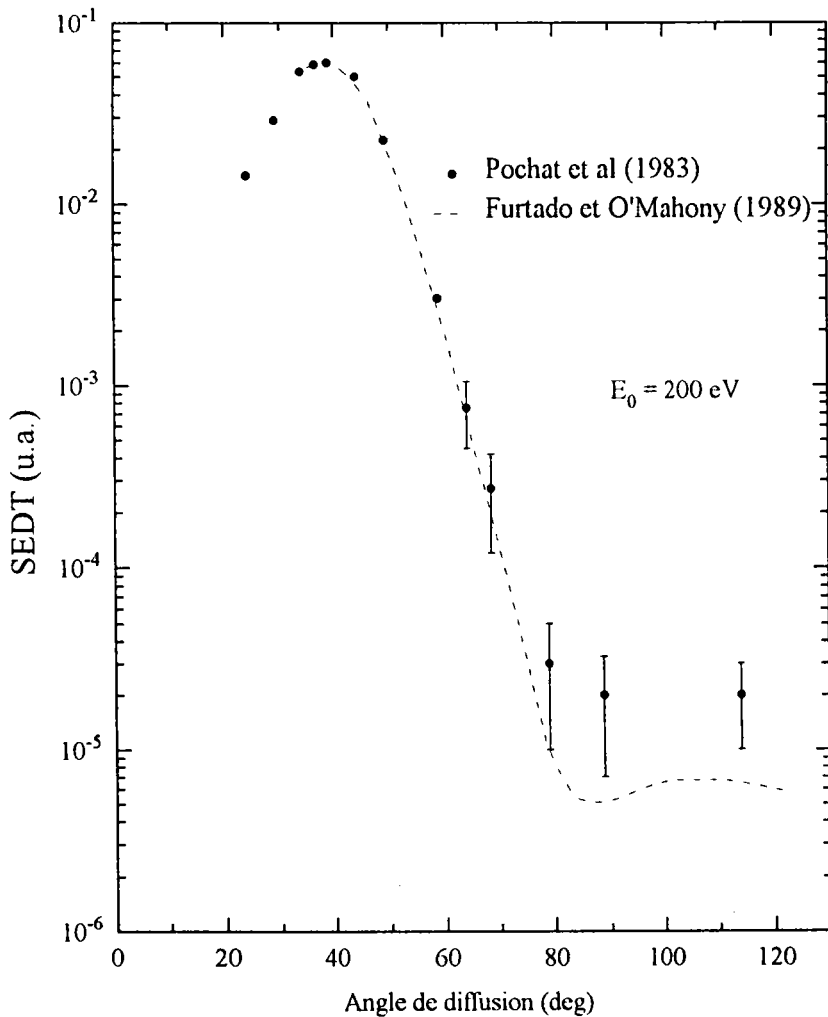


**Figure 3.14** Mêmes notations que celles de la figure 3.13 mais avec : (a)  $E_0 = 250$  eV,  $E_B = 10$  eV et  $\theta_B = 10^\circ$  ; (b)  $E_0 = 150$  eV,  $E_B = 3$  eV et  $\theta_\Lambda = 6^\circ$ .

## b) Cinématiques symétriques

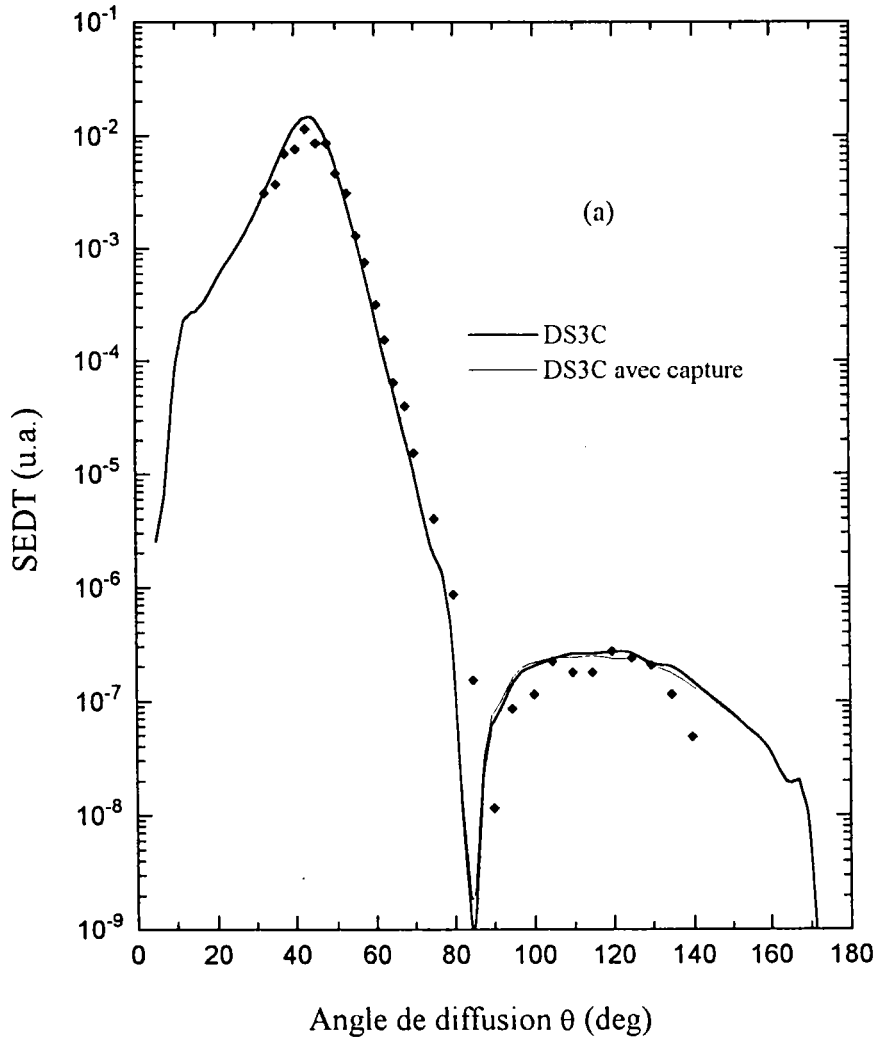
Nous présentons dans cette partie les SEDT d'ionisation de l'atome d'hélium dans une situation de double symétrie ( en énergies et en angles ).

Dans le cadre d'une telle symétrie, les sections efficaces associées représentent deux pics, un situé à  $45^\circ$  et l'autre à  $135^\circ$ . On remarque également un creux au voisinage de  $\theta_A = 90^\circ$ . Cet effet particulier n'a pas été reproduit par les modèles antérieurs de seconde approximation de Born (Mota-Furtado et O'Mahony 1989) et n'avait pas pu être observé dans les expériences de Pochat *et al* (1983) (figure 3.15).



**Figure 3.15** SEDT (u.a.) d'ionisation de l'atome d'hélium en géométrie coplanaire symétrique pour l'énergie incidente de 200 eV. • mesures expérimentales de Pochat *et al* (1983) et - - calcul Born 2 de Furtado et O'Mahony (1989).

A l'aide du traitement DS3C (chapitre 2), en tenant compte des contributions d'échange dans les processus d'ionisation, on a pu reproduire quantitativement les SEDT en fonction de l'angle de diffusion  $\theta_A$  (figures 3.16a-c) pour des énergies d'incidences : (a)  $E_0 = 500$  eV ; (b)  $E_0 = 200$  eV et (c)  $E_0 = 100$  eV.



**Figure 3.16** SEDT (u.a.) d'ionisation de l'atome d'hélium en géométrie coplanaire symétrique pour des énergies incidentes : (a) 500 eV ; (b) 200 eV et (c) 100 eV. Théories : — DS3C ; --- 3C et ..... Botero et Macek (1991). Expériences : ♦ Gélébart et Tweed (1990) et • Frost *et al* (1990).



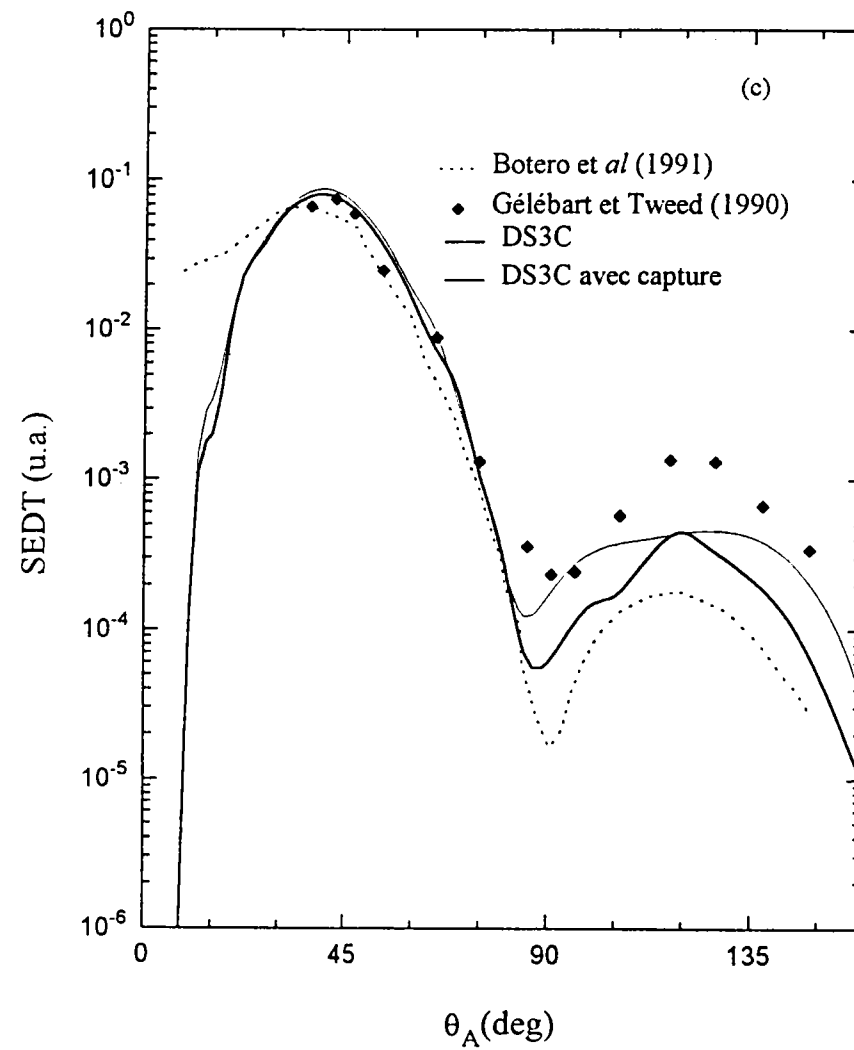
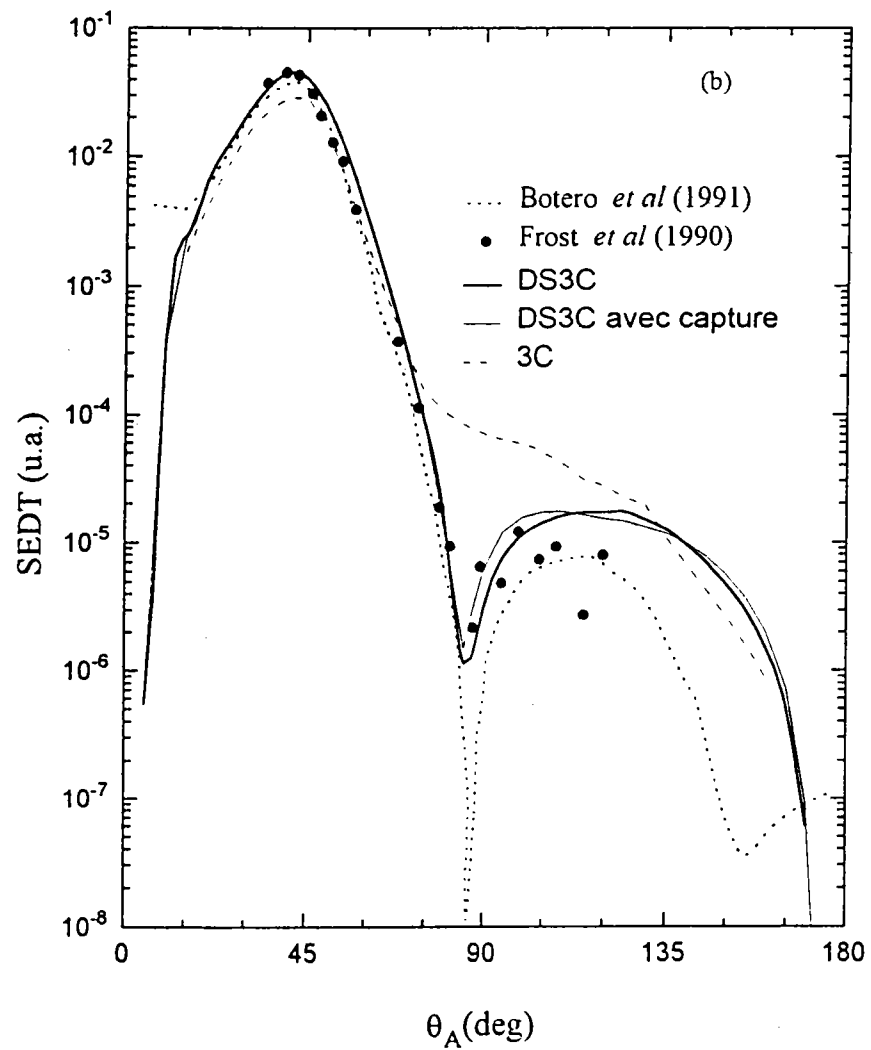


Figure 3.16 Suite

Les confrontations avec les mesures de Gélébart et Tweed (1990) et Frost *et al* (1990) révèlent un accord satisfaisant (figures 3.16a-c) et montrent l'importance des effets de l'écrantage dynamique (DS3C) lorsque les électrons ont tendance à émerger avec les mêmes énergies et dans les mêmes directions de part et d'autre de la direction d'incidence. En effet, dans ces conditions, les électrons (diffusé et éjecté) sont proches l'un de l'autre dans l'espace des impulsions (région de Wannier) et leur description nécessite une correction, de la fonction (3C), due à l'écrantage dynamique.

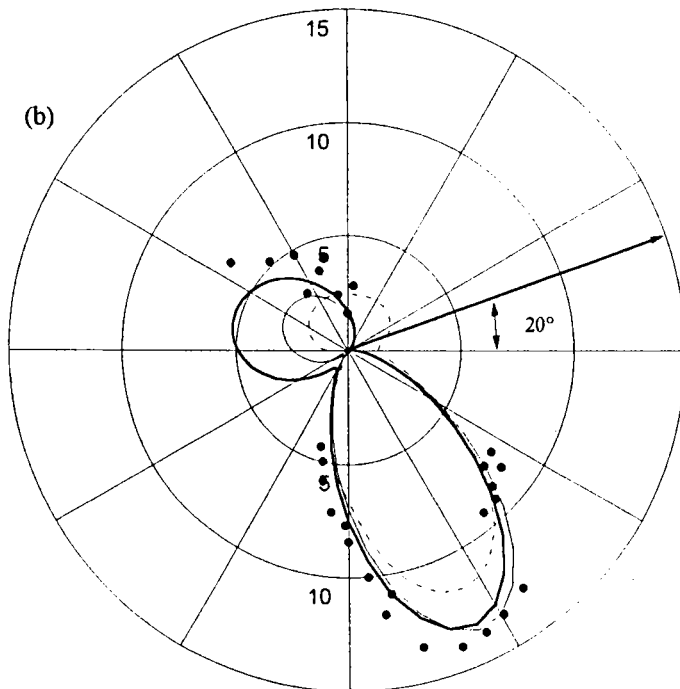
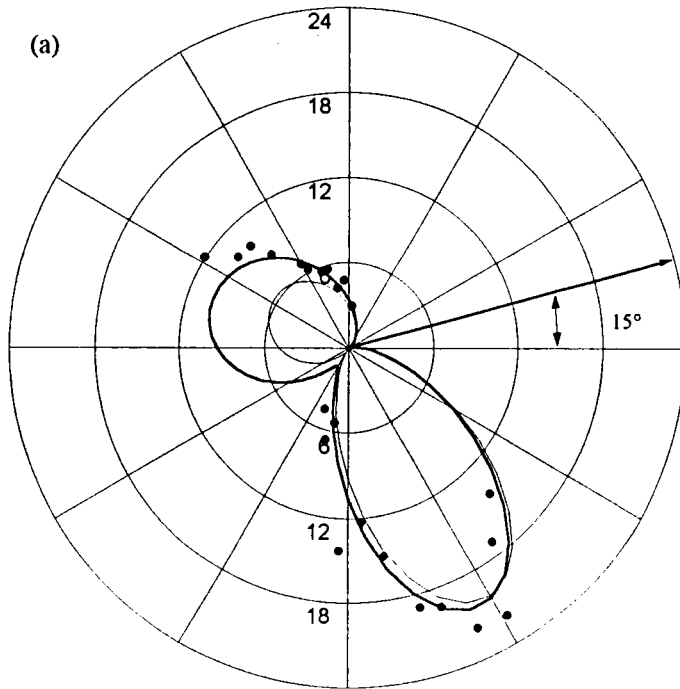
Nous avons également comparé sur les mêmes graphes (figure 3.16b et c) nos calculs avec ceux de Botero et Macek (1991). Ces derniers, à l'aide d'un traitement perturbatif, ont pu reproduire les SEDT symétriques pour une énergie incidente de 200 eV (figure 3.16b), mais à 100 eV leur résultats sous estiment le pic de recul (figure 3.16c).

### 3.4.3 Basses énergies ( $26 \text{ eV} \leq E_0 \leq 105 \text{ eV}$ )

#### a) Cinématiques asymétriques

Pour des énergies incidentes très basses et dans les cas symétrique ou asymétriques, notre étude des distributions angulaires des SEDT d'ionisation présente également deux lobes un binaire et un second pic situé vers les grands angles. Les rapports des maximums de ces deux lobes sont relativement très faibles lorsqu'on est loin du seuil d'ionisation.

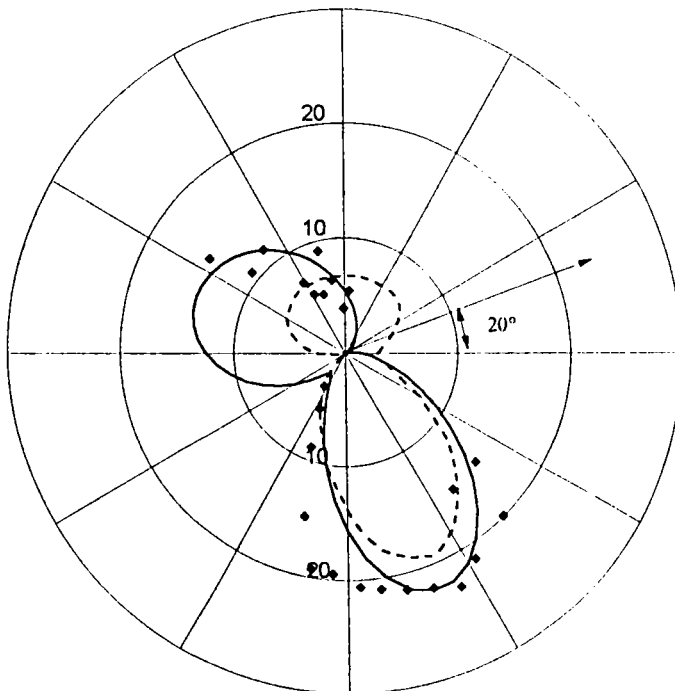
Les figures 3.17a et b montrent les diagrammes polaires des distributions angulaires (en angle d'éjection  $\theta_B$ ) des SEDT de He( $1s^2 \ ^1S$ ) pour une énergie incidente  $E_0 = 105 \text{ eV}$  et d'éjection  $E_B = 10 \text{ eV}$ . L'angle de diffusion est fixé respectivement à : (a)  $\theta_A = 15^\circ$  et (b)  $\theta_A = 20^\circ$ . Notre calcul avec la fonction 3C révèle un très bon accord avec les mesures expérimentales absolues de Beaty *et al* (1978). Nous avons également comparé nos résultats avec ceux de Tweed (1980). Ce dernier tient compte des effets de polarisation de la cible par le flux incident et de distorsion (DWBA) des électrons dans le continuum par l'ion résiduel.



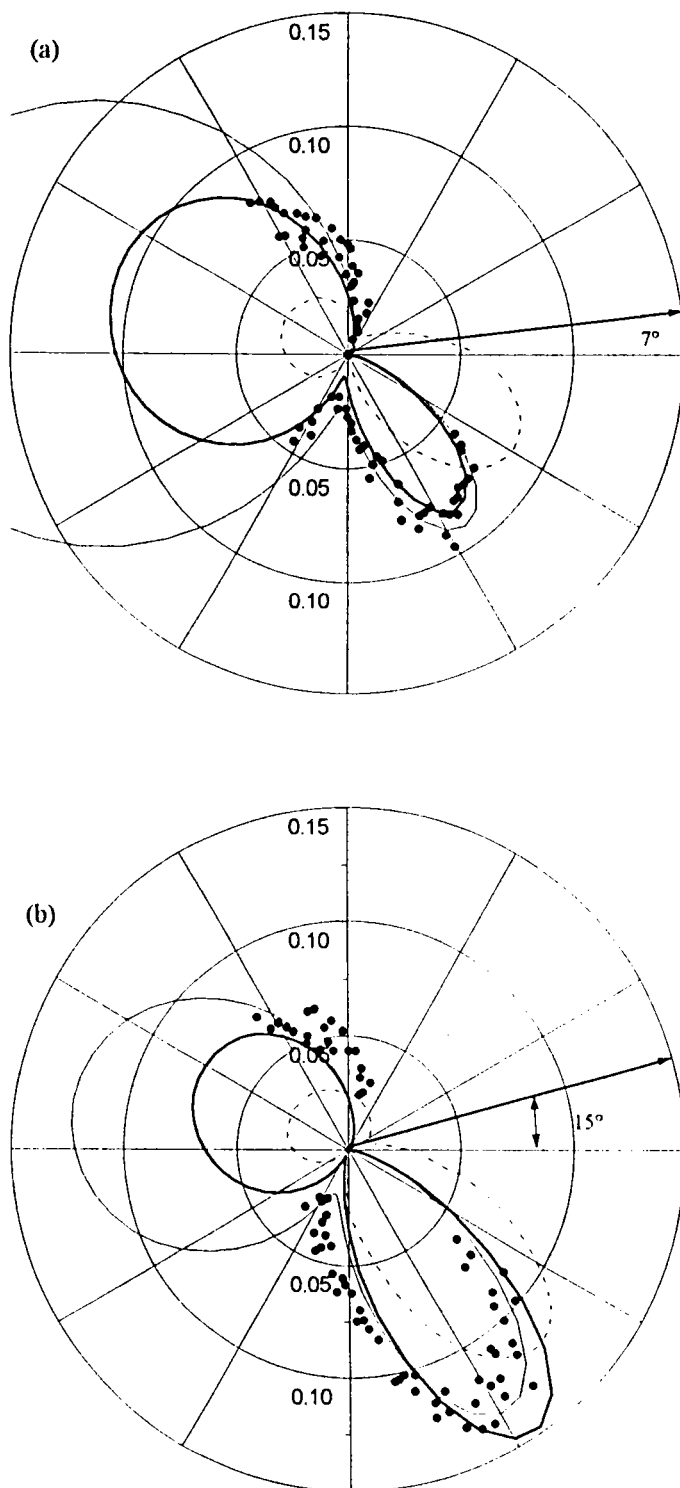
**Figure 3.17** SEDT en échelle  $10^{-24} \text{ m}^2 \text{ sr}^{-2} \text{ eV}^{-1}$  pour des énergies incidente  $E_0 = 105 \text{ eV}$  et d'éjection  $E_B = 10 \text{ eV}$  et pour des angles de diffusion  $\theta_A$  : (a)  $15^\circ$  et (b)  $20^\circ$ .  
 Expérience : • Beaty *et al* (1978). Théories : — DS3C ; — 3C (x1.4) et - - - Tweed (1980) (x 3.8).

Dans les mêmes conditions que la figure 3.17b, mais avec  $E_0 = 100$  eV, la figure 3.18 nous permet de comparer le modèle 3C (nos calculs) et le calcul de Tweed (1980) avec les mesures expérimentales absolues de Beaty *et al* (1978).

Enfin, dans la figure 3.19 nous représentons les SEDT d'hélium en échelle  $\pi a_0^2 \text{sr}^{-2} \text{Ryd}^{-1}$  à  $E_0 = 80.5$  eV,  $E_B = 15$  eV et pour des angles de diffusion fixés respectivement à : (a)  $\theta_A = 15^\circ$  et (b)  $\theta_A = 20^\circ$ . Les comparaisons des modèles 3C, DS3C (nos calculs) et le calcul de Tweed (1980) avec les mesures expérimentales relatives d'Ehrhardt *et al* (1972), montrent l'accord satisfaisant de nos calculs. Ces derniers donnent les bonnes positions ainsi que les bons rapports des deux pics d'éjection. Il s'avère également que la description DS3C est mieux adaptée au processus d'ionisation dans les conditions de la figure 3.19 que dans celles la figure 3.17. Ceci serait dû au fait que, dans les conditions de la figure 3.19 ( $E_B = 15$  et  $E_A = 41$  eV), nous nous rapprochons des cinématiques symétriques ce qui fait apparaître les effets de l'écrantage dynamique.

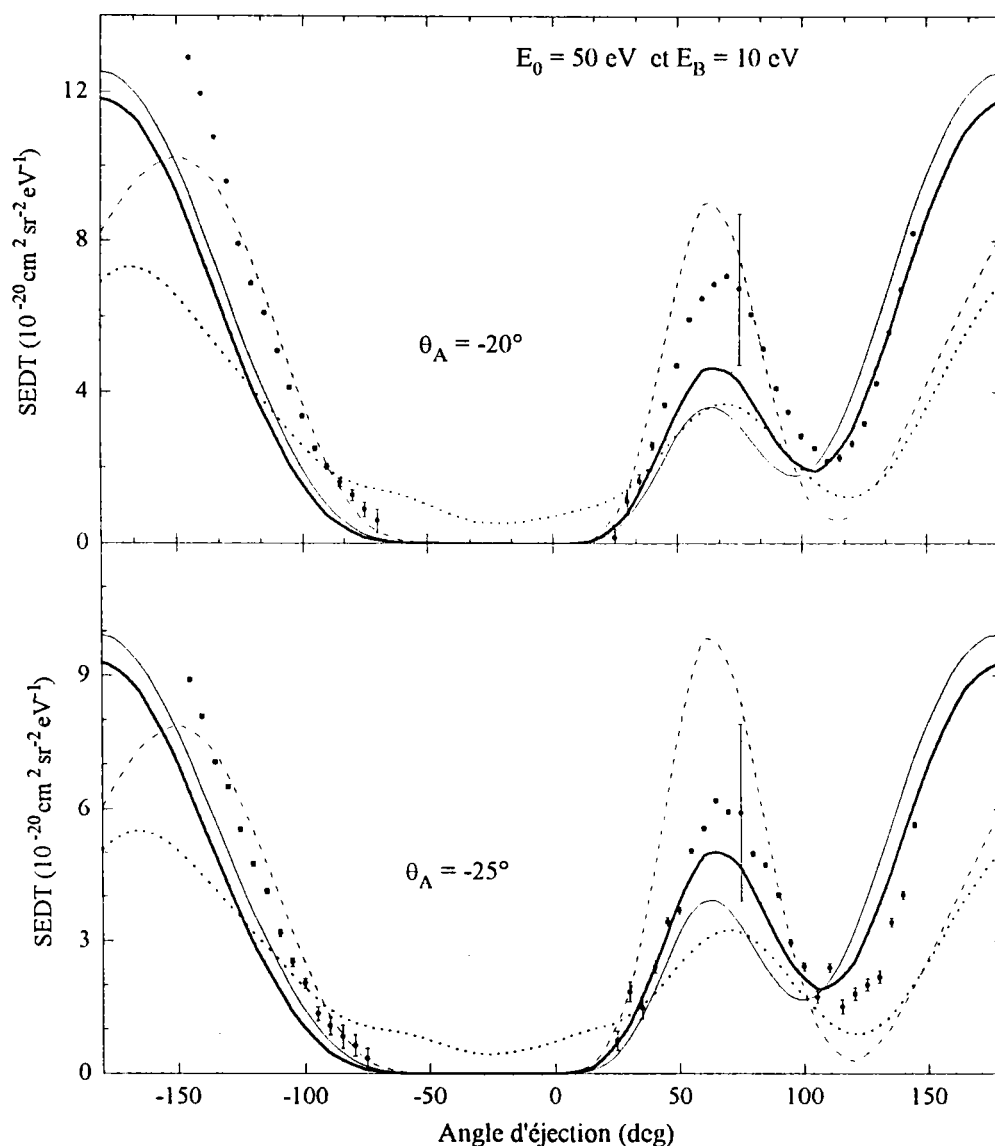


**Figure 3.18** SEDT en échelle  $10^{-24} \text{ m}^2 \text{sr}^{-2} \text{eV}^{-1}$  pour des énergies incidente de 100 eV et d'éjection de 5 eV et pour un angle de diffusion  $\theta_A = 20^\circ$ .  
 Expérience :  $\blacklozenge$  mesures absolues de Beaty *et al* (1978).  
 Théories : ---- Tweed (1980) ( $\times 2.15$ ) ; — 3C( $\times 1.2$ ).



**Figure 3.19** SEDT en échelle  $\pi a_0^2 \text{sr}^{-2} \text{Ryd}^{-1}$ , pour des énergies incidente de 80.5 eV et d'éjection de 15 eV et pour des angles de diffusion  $\theta_\Lambda$  : (a)  $7^\circ$  et (b)  $15^\circ$ . Théories : — DS3C ; - - - 3C( $\times 1.2$ ) et ... à un facteur près, Tweed (1980). Expérience : • mesures relatives d'Ehrhardt *et al* (1972) normalisées à DS3C.

Dans les figures 3.20a-d nous représentons les SEDT d'hélium pour une cinématique asymétrique  $E_0 = 50$  eV,  $E_B = 10$  eV (l'énergie de l'électron le moins rapide) et pour différents angles  $\theta_A$  : (a),  $-20^\circ$  ; (b),  $-25^\circ$  ; (c),  $-30^\circ$  et (d),  $-35^\circ$ . Les mesures expérimentales, en échelle de ( $10^{-20}$  cm<sup>2</sup> sr<sup>-2</sup> eV<sup>-1</sup>), sont celles de Röder *et al* (1996) . Une comparaison des résultats (CCC) de Bray (1997) avec les notres montre un bon accord de ces derniers lorsque l'on tient compte des contributions de la capture dans l'expression de la SEDT. Il apparaît également que l'approximation DS3C surestime les valeurs des SEDT données par l'expérience.



**Figure 3.20** SEDT en échelle de ( $10^{-20}$  cm<sup>2</sup> sr<sup>-2</sup> eV<sup>-1</sup>) de He(e,2e)He<sup>+</sup> pour une énergie incidente  $E_0 = 50$  eV et d'éjection  $E_B = 10$  eV. Les angles de diffusion  $\theta_A$  sont représentés sur les graphes. • mesures absolues de Röder *et al* (1996) ; ..... CCC(99) Bray (1997) ; .... DS3C ; — 3C et — 3C + capture

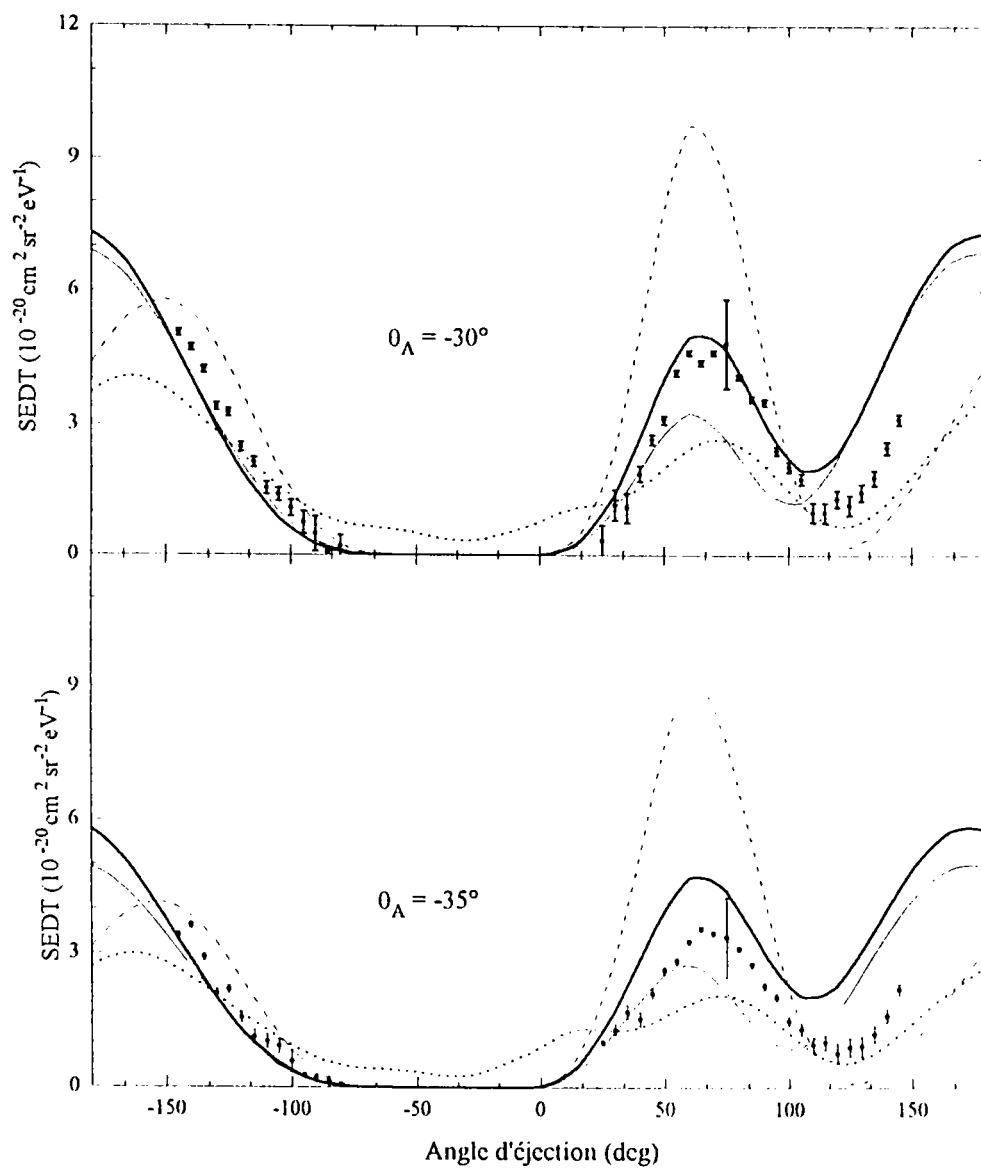
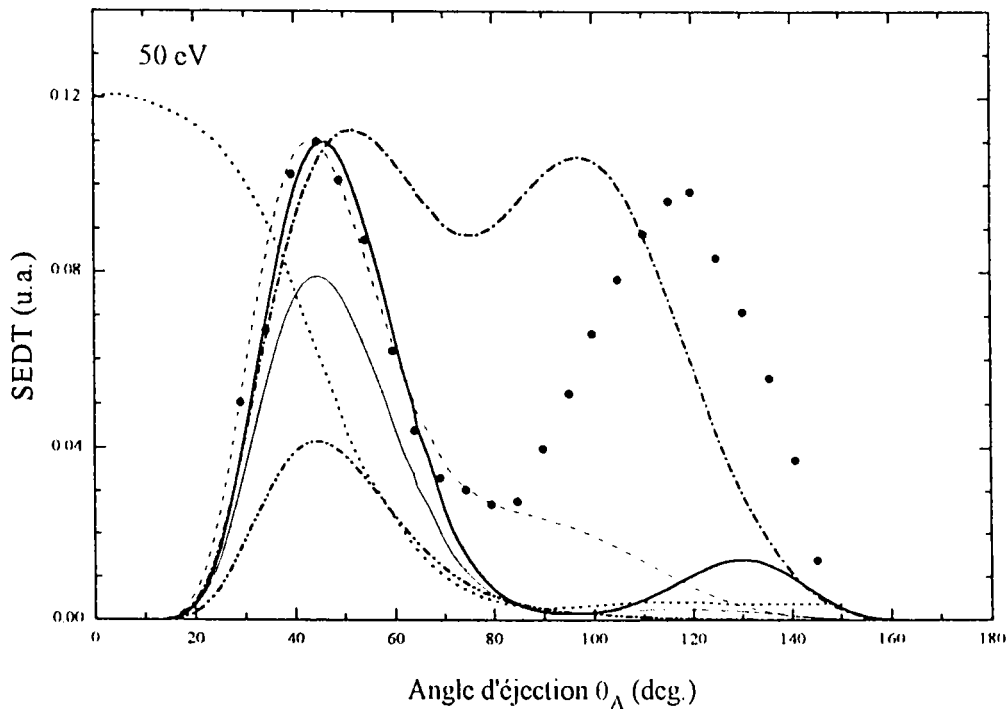


Figure 3.20 (suite)

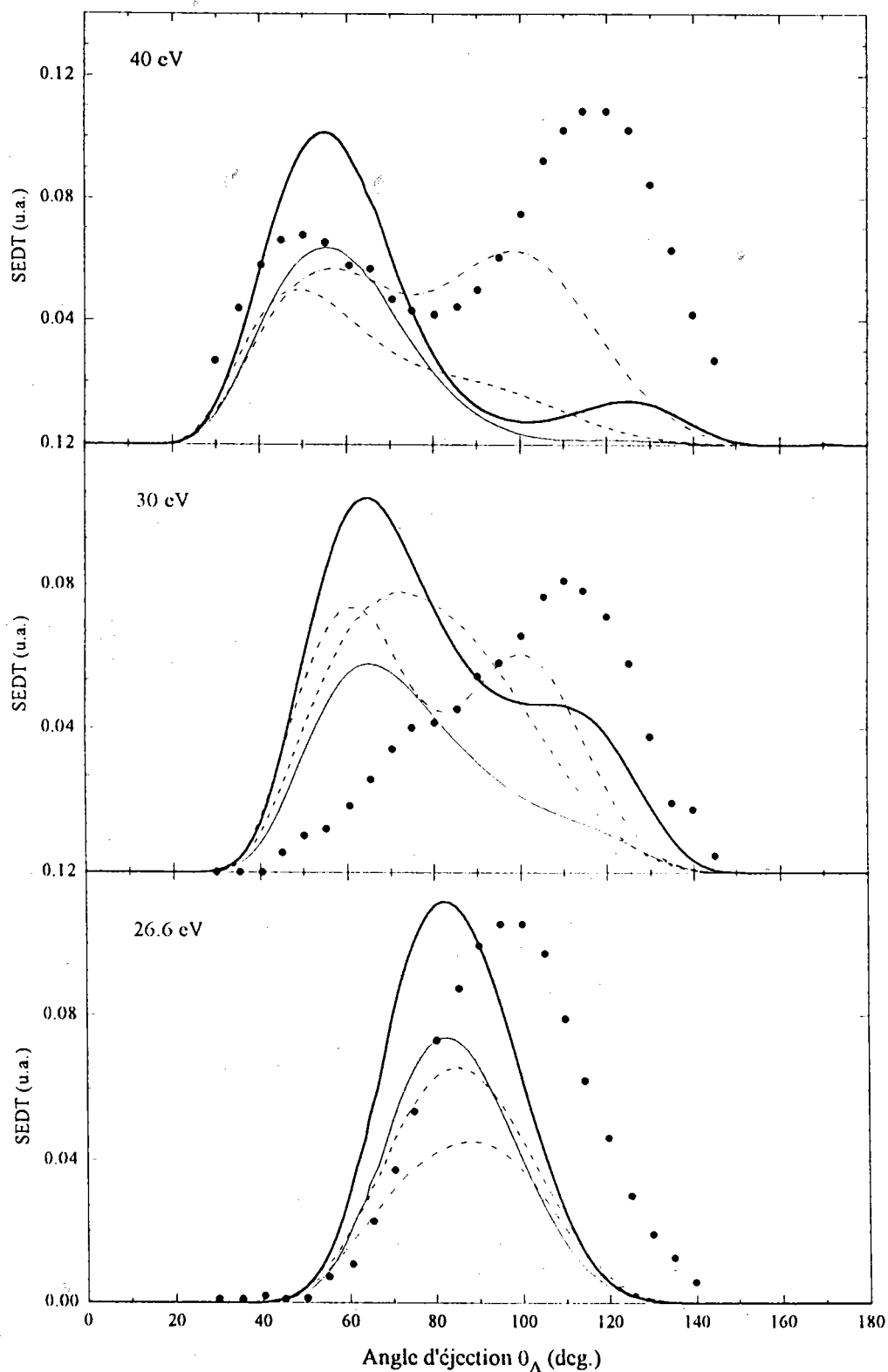
## b) Cinématiques symétriques

A des énergies très basses aucun des modèles antérieurs proposés n'avait pu reproduire quantitativement le comportement des sections efficaces et en particulier le premier pic localisé au voisinage de  $45^\circ$ . Dans la figure 3.21, nous montrons les SEDT d'ionisation d'hélium pour une énergie incidente de 50 eV dans une cinématique symétrique. Les comparaisons entre les calculs DWBA de Whelan *et al* (1993), qui tenaient compte des effets de polarisabilité de l'ion résiduel sur les électrons du continuum, les mêmes calculs effectués par nous, mais normalisés par un facteur  $N_{ce}$  de Gamow ( $N_{ce} = \eta/(e^n - 1)$  où  $\eta = 2\pi\|\mathbf{k}_A - \mathbf{k}_B\|^{-1}$ , voir par exemple Whelan *et al* 1993 et Nicolas *et al* 1996) et les mesures relatives de Rösel *et al* (1991) montrent que l'introduction *partielle* des corrélations post-collisionnelles (assurées par le facteur  $N_{ce}$ ) donne une bonne forme de la distribution des SEDT en ce qui concerne le premier pic. Mais cette approximation ne donne pas ni la bonne amplitude ni le second pic situé vers les grands angles de diffusion.



**Figure 3.21** SEDT d'ionisation d'hélium dans une géométrie coplanaire symétrique à 50 eV. Théories : ..... Whelan *et al* (1993) ( $\times 1/2$ ) ; ..... DWBA avec Gamow ( $\times 10$ ) ; avec capture, — DS3C et ---- 3C( $\times 4$ ) ; sans capture, ..... DS3C et ---- 3C( $\times 6.5$ ). Expérience : • Rösel *et al* (1991) normalisées à DS3C incluant la contribution de capture.





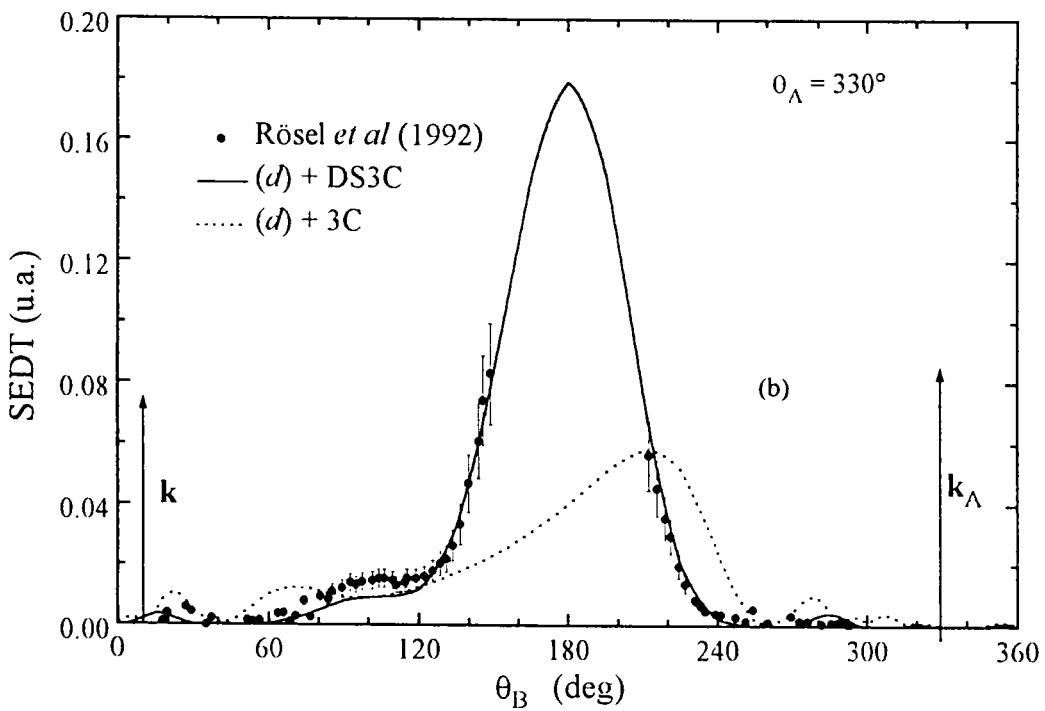
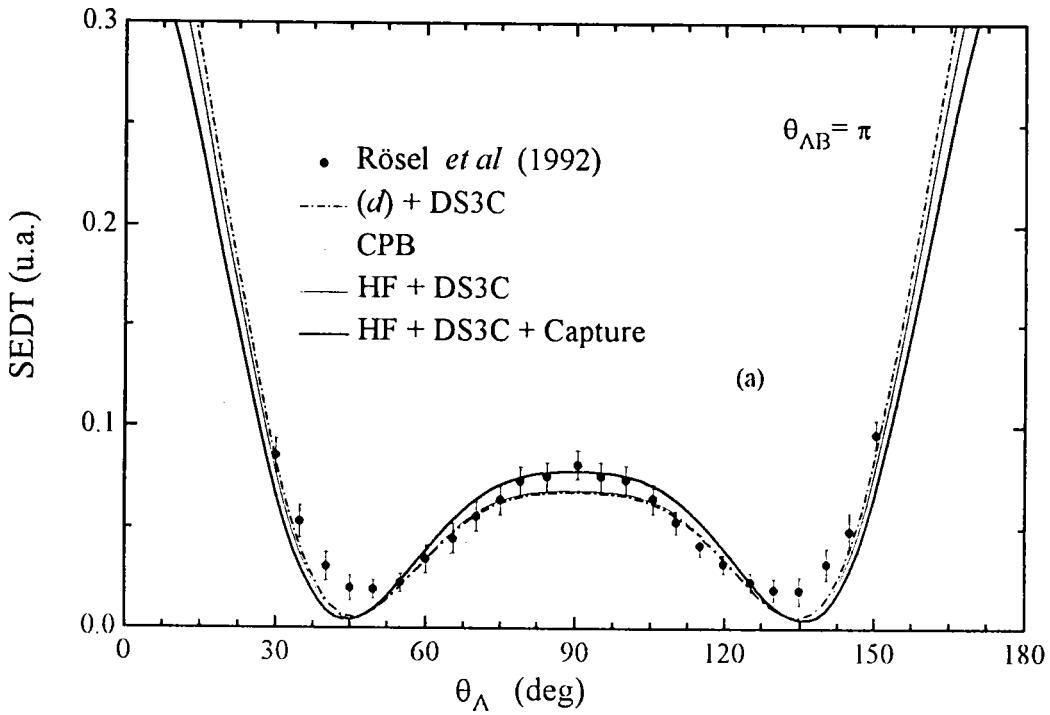
**Figure 3.22** SEDT d'ionisation de He ( $1s^2S$ ) dans une géométrie coplanaire symétrique. Les symboles des courbes sont les mêmes que la figure 3.20. Mesures expérimentales de Rösels *et al* normalisées en :  $\theta_A = 75^\circ$  pour 40 eV et  $\theta_A = 90^\circ$  pour 30 et 26.6 eV avec DS3C tenant compte de la capture  $h$ .  $3C(x30)$  pour 30 eV et  $3C(x10^3)$  pour 26.6 eV.

La comparaison entre la présente théorie (3C et DS3C) et les mesures de Rösler *et al* (1991) semble indiquer que l'introduction du terme de capture dans la description DS3C joue un rôle très important aux faibles énergies incidentes (de 26 eV jusqu'à 4 fois le premier seuil d'ionisation pour l'hélium).

En particulier, le terme de capture a permis de décrire pour la première fois de façon satisfaisante les SEDT et reproduire leurs formes près du seuil d'ionisation en faisant apparaître le second pic à grand angles (figures 3.21 et 22).

On remarque dans le cadre des cinématiques symétriques un déplacement de ces pics, qui se rejoignent à  $90^\circ$  pour des énergies, de diffusion et d'éjection, très faibles (1eV dans le cas de l'hélium). A ces énergies les électrons émergent dans des directions opposées, telles qu'elles ont été prévues par Wannier (1953). Ceci est dû au fait que la répulsion entre les électrons (que nous pouvons qualifier d'effet dynamique) l'emporte sur les effets cinématiques : c'est-à-dire qu'à ces énergies, contrairement à ce qui se passe en régime impulsionnel, le mécanisme de la réaction trouve son origine dans une description dynamique de la collision.

Dans les figures 3.23a et b, nous montrons les SEDT d'hélium pour des énergies de diffusion et d'éjection égales ( $E_A = E_B = E = 1$  eV) dans des géométries respectivement colinéaire  $\theta_A - \theta_B = \pi$  (figure 3.23a) et coplanaire  $\theta_A = 330^\circ$  (figure 3.23b). Ces figures montrent un bon accord entre l'expérience et notre calcul avec DS3C. Cet accord s'améliore en tenant compte de la capture dans une géométrie colinéaire (figure 3.23a).



**Figure 3.23** SEDT d'ionisation d'hélium (a) colinéaire,  $\theta_A - \theta_B = \pi$  et (b) coplanaire,  $\theta_A = 330^\circ$  et  $\varphi_A = 0$ , près du seuil d'ionisation  $E_0 = 26.6$  eV en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  dans le cas symétrique  $E_A = E_B = 1$  eV.

### 3.5 Conclusion

Dans ce chapitre et après avoir étudié les SEDT d'ionisation par impact d'électrons ( $e,2e$ ) nous parvenons aux conclusions suivantes :

- à haute énergie incidente les processus ( $e,2e$ ) sont bien décrits par la première approximation de Born. Ces sections efficaces nous renseignent sur la structure électronique des cibles et permettent également de connaître les distributions des vitesses des électrons dans la cible. A des énergies intermédiaires et basses les fonctions très élaborées pour décrire la cible dans la voie initiale ne permettent pas de rendre compte des différents aspects de la dynamique des collisions. Ces derniers peuvent être inclus dans les calculs à l'aide des traitements tels que B2, 3C ou DS3C par exemple.
- les effets des corrélations dues aux interactions post-collisionnelles entre les deux électrons diffusé et éjecté dans le continuum doivent être pris impérativement en compte. Ces effets s'intensifient dès que les électrons émergents de la réaction ont des vitesses comparables. Il devient alors indispensable de tenir compte de ces interactions dans la description des mouvements des électrons dans le continuum.
- malheureusement, il est très difficile de réaliser une étude tenant compte à la fois des effets liés aux corrélations dans la cible et des effets post-collisionnels.
- les effets de l'écrantage dynamique (DS3C) sont très importants dans des situations de cinématiques symétriques.
- et enfin les contributions de la capture deviennent non négligeables lorsque l'énergie du projectile s'approche du seuil d'ionisation.

## Chapitre 4

# Processus de double ionisation par impact d'électrons et de photons

### 4.1 Introduction

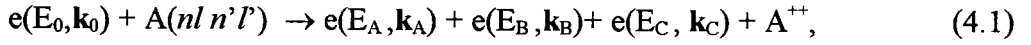
L'étude des processus de double ionisation (DI) a débuté avec les travaux théoriques de Geltman (1956). Cet auteur a tenu compte des corrélations dans la voie de sortie en imposant aux deux électrons éjectés de sortir avec la même quantité de mouvement et dans des directions opposées. Tweed (1972 , 1973) puis Tiwary (1982) ont étudié le processus de DI des systèmes atomiques à deux électrons par impact d'électrons rapides, en calculant les sections efficaces totales associées.

L'intérêt principal de la DI consiste indépendamment de l'étude des corrélations des électrons de la cible, à comprendre les mécanismes d'ionisation (Lahmam-Bennani 1991). Popov *et al* (1994) et Dal Cappello *et al* (1994) ont étudié les effets liés aux corrélations dans la cible (effets de structure) en décrivant les deux électrons dans le continuum (l'état final) par deux ondes planes. Ces fonctions qui ne contiennent pas d'interactions avec l'ion résiduel ni d'interactions mutuelles entre les deux électrons éjectés, ont été introduites dans le but de simplifier les calculs.

## 4.2 Double ionisation par impact électronique

### 4.2.1 Section efficace différentielle quintuple (e,3e)

Dans le premier chapitre, on a défini la section efficace différentielle d'un processus (e,3e) de double ionisation par impact électronique, caractérisé par la réaction



où les indices A, B et C représentent respectivement l'électron diffusé ainsi que les deux électrons éjectés. La cible  $A(nl n' l')$  pourra être ici l'atome d'hélium ou les ions  $H^-$  et  $Li^+$  dans leur état fondamental ( $1s^2$ ). La section efficace associée à cette réaction est cinq fois différentielle et s'écrit

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B d\Omega_C dE_B dE_C} = (2\pi)^4 \frac{k_A k_B k_C}{k_i} |T_{fi}|^2. \quad (4.2)$$

L'évaluation de l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$  a été également abordée dans le premier chapitre. Le calcul repose à la fois sur la description des états initiaux et finaux de la cible, c'est-à-dire

$$T_{fi} = \langle \psi_f | Vi | \psi_i \rangle \quad (4.3)$$

où

$$Vi = -\frac{Z}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \quad (4.4)$$

décrit le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible dans la voie d'entrée. Les états  $\psi_i$  et  $\psi_f^-$  décrivent le système constitué de l'électron projectile et la cible avant et après la collision. Pour des énergies élevées de l'électron projectile (de l'ordre de quelques keV) celui-ci sera décrit dans les deux cas par des ondes planes quelle que soit la cible. Les fonctions d'ondes associées aux états  $\psi_i$  et  $\psi_f^-$  s'écrivent en première approximation, sous forme de produits

$$\psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (4.5)$$

$$\psi_f^-(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0) \chi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (4.6)$$

$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  et  $\chi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  décrivent la cible avant et après la collision. Ces fonctions d'ondes ont été étudiées en détail dans le chapitre 2. La fonction d'onde  $\chi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

La description des deux électrons éjectés par le produit de deux fonctions décrivant chacune un électron dans un champ coulombien (Byron et Joachain 1967) possède également le défaut de négliger les interactions entre les deux électrons dans le continuum.

Les résultats de ces modèles peuvent être en contradiction totale avec l'expérience lorsqu'on ne considère pas de corrélation dans la voie de sortie entre les électrons éjectés. D'autres techniques permettant de tenir compte des corrélations dans les deux états initial et final ont ainsi été ultérieurement envisagées.

Joulakian *et al* (1992) et Joulakian et Dal Cappello (1993) ont également utilisé des fonctions corrélées dans les voies d'entrée et de sortie. Ils ont utilisé pour la corrélation à l'entrée les fonctions de Bonham et Kohl (1966) et 3C de Redmond-Merkuriev pour décrire les deux électrons éjectés.

Dans une première partie du présent chapitre, l'étude de la double ionisation ( $e,3e$ ) (Joulakian et Dal Cappello 1993) sur la cible d'hélium sera reprise et prolongée aux systèmes  $H^-$  et  $Li^+$  tout en utilisant les fonctions d'ondes corrélées dans les deux voies d'entrée (Tavard et Najjari 1996) et de sortie.

Les difficultés expérimentales liées aux faibles valeurs des sections efficaces ne permettent pas de produire de nombreuses expériences dans ce domaine. Nagy *et al* (1980) puis Shah *et al* (1988) ont apporté des améliorations à l'étude de la DI en mesurant des sections efficaces différentielles multiples au lieu de sections efficaces totales. Lahmam-Bennani *et al* (1989) furent les premiers à mesurer les sections efficaces différentielles quintuples (SEDQ) de double ionisation ( $e,3e$ ). Afin de tendre vers les expériences nous allons également nous intéresser aux sections efficaces quadruples (SED4) dans lesquelles seuls deux électrons seront détectés en coïncidence.

Dans la dernière partie nous établirons quelques résultats théoriques relatifs au processus de photo double ionisation (PDI) en calculant les sections efficaces associées (SED $T(\gamma,2e)$ ). Nos résultats théoriques seront confrontés aux mesures expérimentales existantes.

$$\chi_{f^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3} \exp[i(\mathbf{k}_C \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_C \cdot \mathbf{r}_2)] C(\eta_B, \mathbf{k}_B | \mathbf{r}_1) C(\eta_C, \mathbf{k}_C | \mathbf{r}_2) C(\eta, \mathbf{k}_{BC} | \mathbf{r}_{12}), \quad (4.7)$$

n'est autre que la fonction 3C de Redmond-Merkuriev décrivant les deux électrons éjectés dans un double continuum, utilisant le coefficient de normalisation de Gamow, la fonction  $C$  s'écrit

$$C(\eta, \mathbf{k} | \mathbf{r}) = \Gamma(1+i\eta) e^{\pi\eta/2} {}_1F_1[-i\eta; 1; -i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + kr)] \text{ et } \eta = Zk^{-1}$$

où  $Z$  est la charge de l'ion résiduel après la collision.

Alors que les deux électrons sont supposés provenir de l'état singulet  $1s^2 \ ^1S$ , la symétrisation de la fonction d'onde spatiale  $\chi_{f^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  permet d'écrire l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$  sous la forme

$$T_{fi} = T_{fi}(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_C) + T_{fi}(\mathbf{k}_C, \mathbf{k}_B). \quad (4.8)$$

A l'aide de la transformation de Bethe

$$\int d\mathbf{r} \frac{e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} = (4\pi)K^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_0), \quad (4.9)$$

on peut établir que

$$T_{fi}(\mathbf{k}_B, \mathbf{k}_C) = T_{fi}(\mathbf{k}_C, \mathbf{k}_B) = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \langle \chi_{f^-} | -Z + \sum_{\mu=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_\mu) | \varphi_i \rangle. \quad (4.10)$$

Cette égalité est due au fait de l'échange dans la voie de sortie, les deux électrons éjectés (initialement liés) peuvent contribuer de façon similaire à l'amplitude de diffusion, ainsi l'élément de matrice total est multiplié par 2.

$$T_{fi} = \frac{2}{2\pi^2 K^2} \langle \chi_{f^-} | -2 + \sum_{\mu=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_\mu) | \varphi_i \rangle. \quad (4.11)$$

Dans l'expression (4.11) on a substitué la valeur de  $Z$  (du potentiel) par 2 (pour toutes les cibles) afin d'assurer asymptotiquement la décroissance rapide du potentiel  $V_i$  de l'équation (4.4). Ce problème peut être vu sous un autre angle en orthogonalisant l'état  $\chi_{f^-}$  du double continuum avec l'état initial  $\varphi_i$  de la cible soit à l'aide de la procédure de Schmidt (par exemple Dal Cappello et Le Rouzo 1991 et Joulakian et Dal Cappello 1993) qui est également utilisée dans notre étude



$$\langle {}^\perp \chi_f | = \langle \chi_f^- | - \langle \chi_f^- | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i |. \quad (4.12)$$

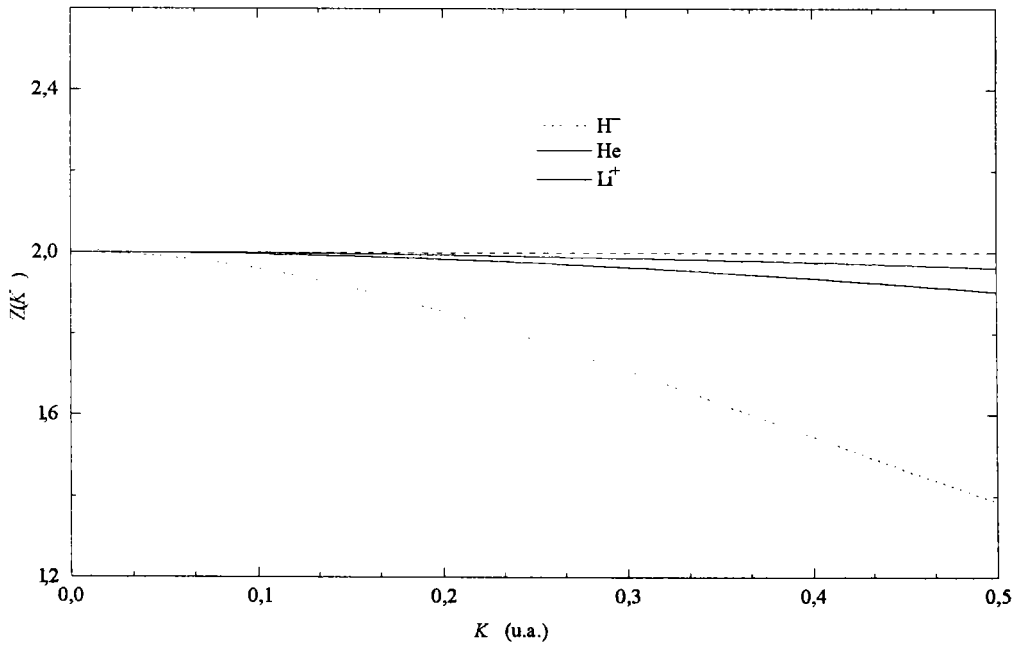
L'élément de matrice de transition dans ce cas peut s'écrire

$$\begin{aligned} {}^\perp T_{fi} &= \frac{1}{\pi^2 K^2} \langle {}^\perp \chi_f | \sum_{\mu=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_\mu) | \varphi_i \rangle \\ &= \frac{1}{\pi^2 K^2} \langle \chi_f^- | - Z(\mathbf{K}) + \sum_{\mu=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_\mu) | \varphi_i \rangle, \end{aligned} \quad (4.13)$$

avec

$$Z(\mathbf{K}) = \langle \psi_i | \sum_{\mu=1}^2 \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_\mu) | \psi_i \rangle. \quad (4.14)$$

Un calcul numérique de  $Z(\mathbf{K})$  dans le cas d'une cible à deux électrons tels que  $\text{H}^-$ ,  $\text{He}$  et  $\text{Li}^+$  pour différentes valeurs de  $K$  montre que la quantité  $Z(\mathbf{K})$  décroît en partant de la valeur  $Z(\mathbf{0}) = 2$ . Cette décroissance est d'autant rapide lorsque la charge du noyau cible est faible. Dans la suite nous pouvons poser  ${}^\perp T_{fi} \approx T_{fi}$  pour les petits transferts d'impulsion (figure 4.1), ce qui est vérifié dans le cadre de notre étude.



**Figure 4.1** Représentation de  $Z(k)$  (équation 4.14) pour les atomes  $\text{He}$ ,  $\text{H}^-$  et  $\text{Li}^+$

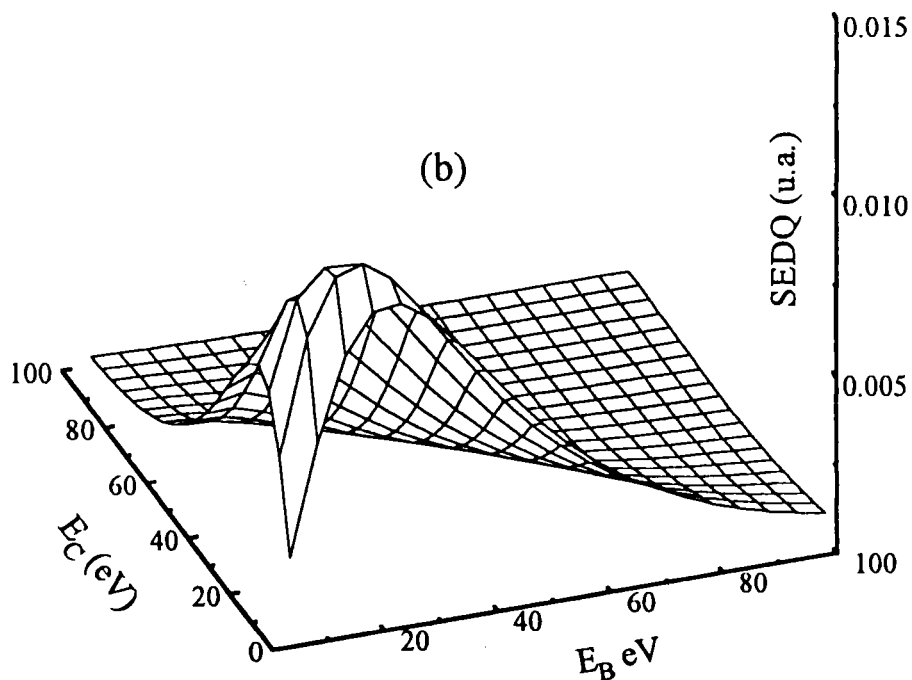
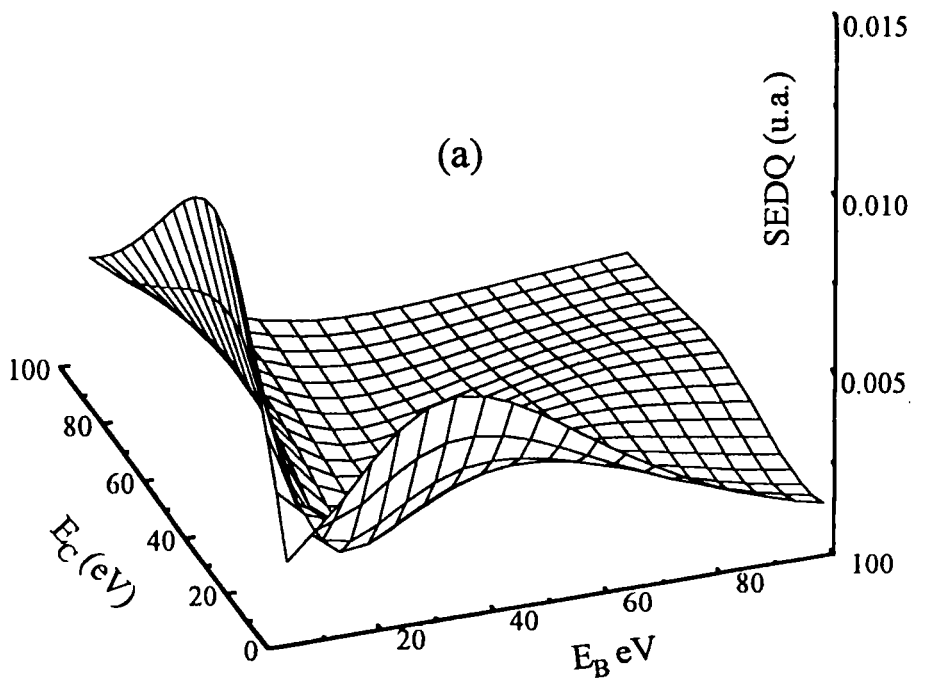
### 4.2.2 Résultats (e,3e)

Nous représentons dans cette partie quelques résultats concernant la double ionisation des systèmes He, H<sup>-</sup> et Li<sup>+</sup> dans l'état fondamental (1s<sup>2</sup> <sup>1</sup>S) par impact d'électrons à une énergie incidente  $E_0 = 5$  keV et sous un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ .

Les figures 4.2 représentent en trois dimensions (3D), des SEDQ de double ionisation d'hélium en fonction des énergies d'éjection  $E_B$  et  $E_C$ . Les directions (coplanaires  $\varphi_A = \varphi_C = \varphi_B = 0$ ) de détection des deux électrons éjectés sont respectivement : (a),  $\theta_C = \theta_K$  et  $\theta_B = \theta_C + 180^\circ$  ; (b),  $\theta_C = \theta_K + 90^\circ$  et  $\theta_B = \theta_C + 110^\circ$  ; (c),  $\theta_C = \theta_K$  et  $\theta_B = \theta_C + 90^\circ$  et (d),  $\theta_C = \theta_K + 90^\circ$  et  $\theta_B = \theta_C + 90^\circ$ . On remarque que les deux électrons initialement liés ont tendance à être éjectés avec des énergies différentes lorsque l'un est éjecté dans la direction de transfert  $\theta_K$  et l'autre dans la direction opposée (cas a). Cette situation disparaît lorsque les directions des éjections ne sont pas opposées ( $\theta_{BC} = \theta_B - \theta_C \neq 180^\circ$  : figures 4.2b et c) ou lorsque aucun électron n'est éjecté dans la direction de transfert (cas d). Ces cas de figures restent valable pour les ions H<sup>-</sup> et Li<sup>+</sup> mais avec un déplacement des pics vers les petites énergies dans le premier cas (figures 4.3) et vers les grandes énergies dans le second (figures 4.4). Autrement dit, ces figures montrent que les maxima des SEDQ sont obtenus pour une somme des énergies d'éjection  $E_B + E_C$  de l'ordre de 20 eV pour H<sup>-</sup>, 30 eV pour l'hélium et 60 eV dans le cas du Li<sup>+</sup>.

Dans les figures 4.5 nous représentons en 3D les SEDQ de double ionisation de He (1s<sup>2</sup> <sup>1</sup>S) en fonction des angles  $\theta_B$  et  $\theta_C$  des deux électrons éjectés et pour des énergies d'éjection égales,  $E_B = E_C = 15$  eV. La courbe (a) où  $\theta_B$  et  $\theta_C$  parcourent tout l'intervalle  $[0, 2\pi]$  montre que les éjections des deux électrons sont impossibles dès que l'on s'approche des situations  $\theta_B \approx \theta_C$  (zone interdite). Dans (b) les deux angles décrivent respectivement les intervalles  $[0, \pi]$  et  $[-\pi, 0]$  on montre le comportement des SEDQ quand les électrons sont éjectés dans les demi-plans de part et d'autre de l'axe (z) d'incidence.

Une même étude réalisée pour les ions H<sup>-</sup> (figures 4.6) et Li<sup>+</sup> (figures 4.7) montre les mêmes structures des SEDQ avec une légère réduction des zones *interdites*, mentionnées auparavant, lorsque la charge Z du noyau augmente.



**Figure 4. 2** SEDQ de double ionisation de He en fonction des énergies d'éjection pour une énergie incidente  $E_0 = 5\text{keV}$  et un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les angles des électrons éjectés sont fixés à : (a)  $\theta_C = \theta_K$  et  $\theta_B = \theta_C + 180^\circ$ ; (b)  $\theta_C = \theta_K + 90^\circ$  et  $\theta_B = \theta_C + 110^\circ$ ; (c)  $\theta_C = \theta_K$  et  $\theta_B = \theta_C + 90^\circ$  et (d)  $\theta_C = \theta_K + 90^\circ$  et  $\theta_B = \theta_C + 90^\circ$ .

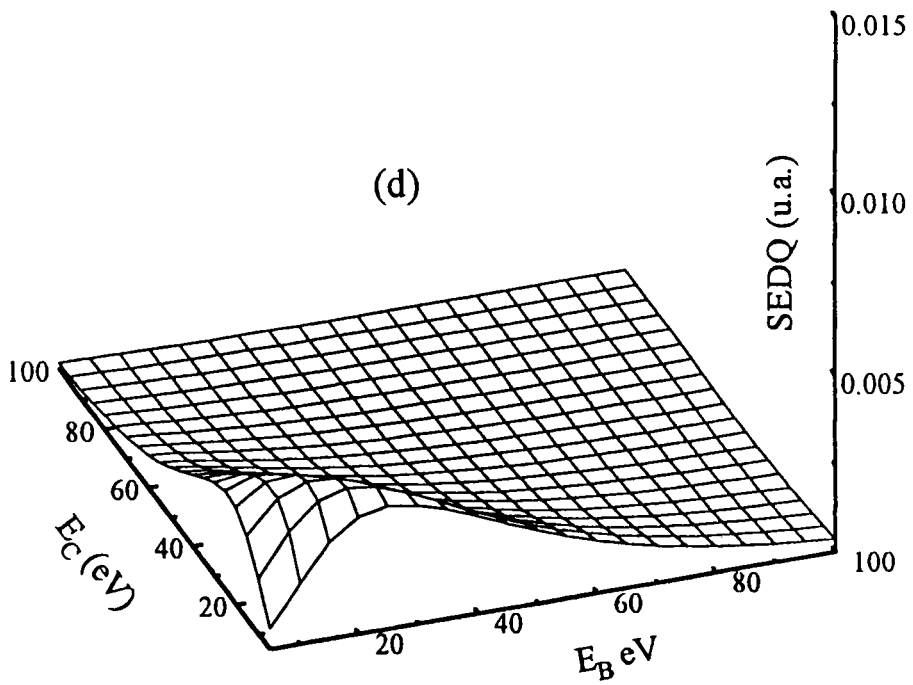
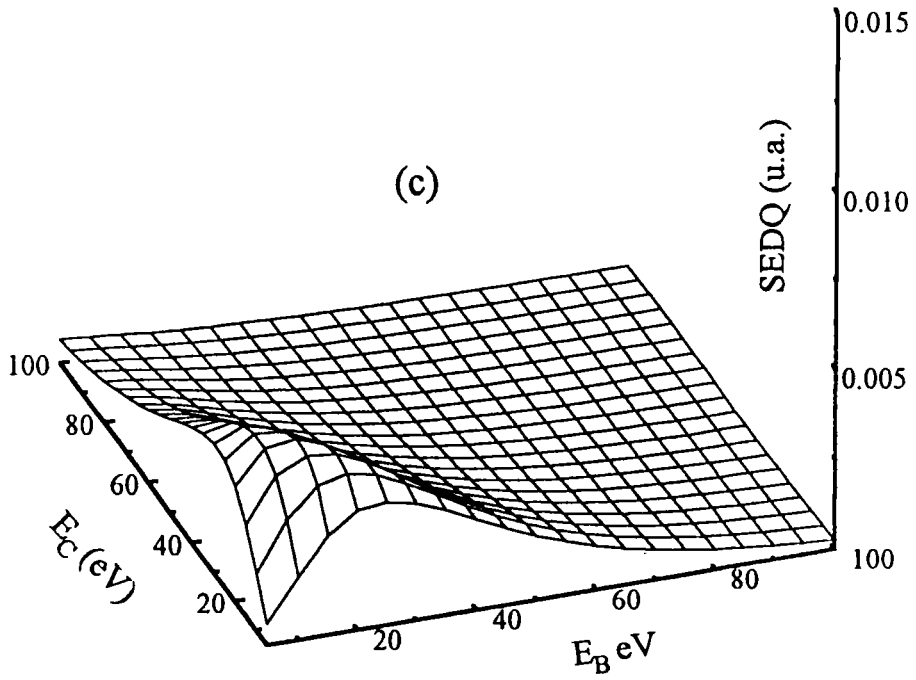
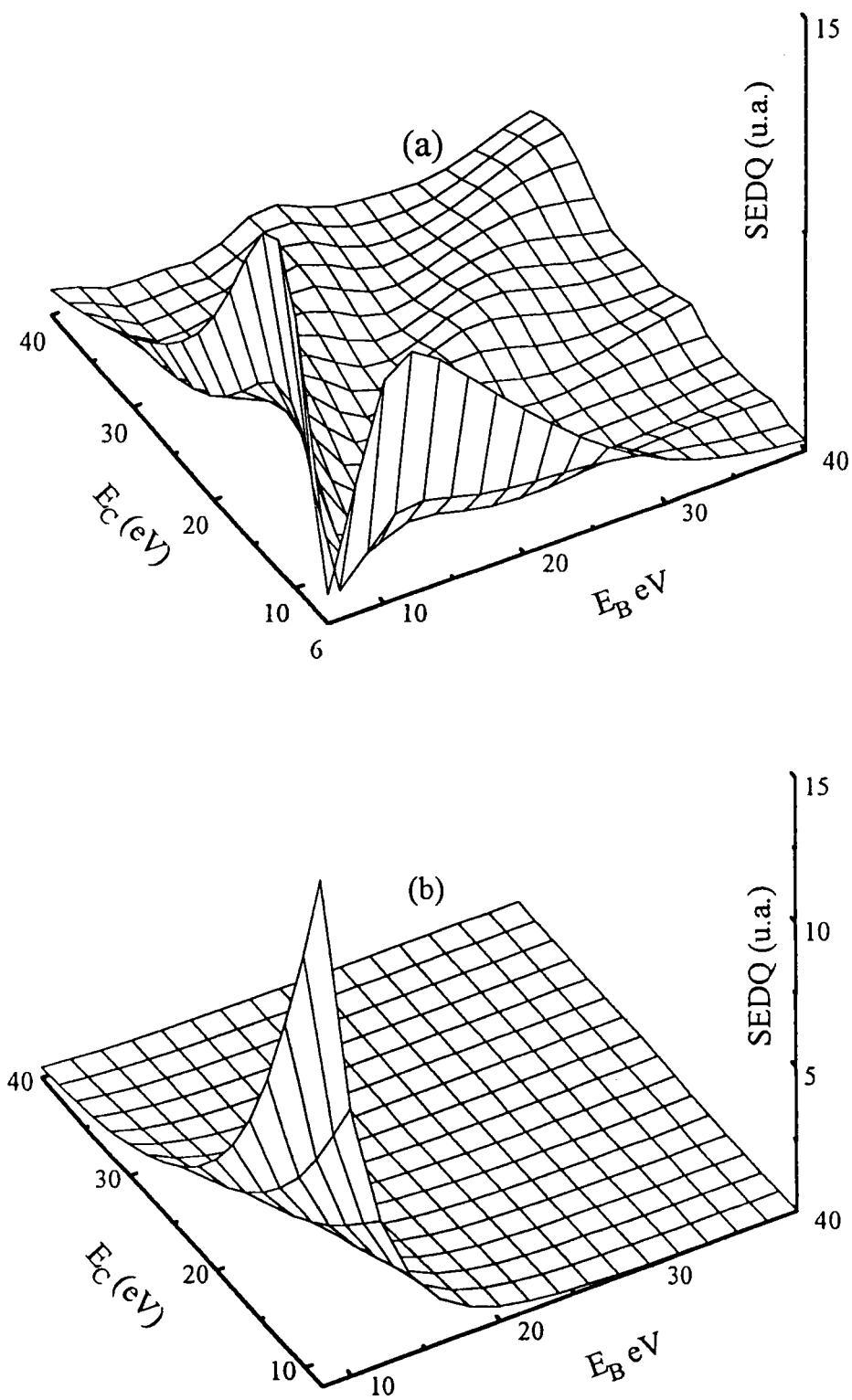
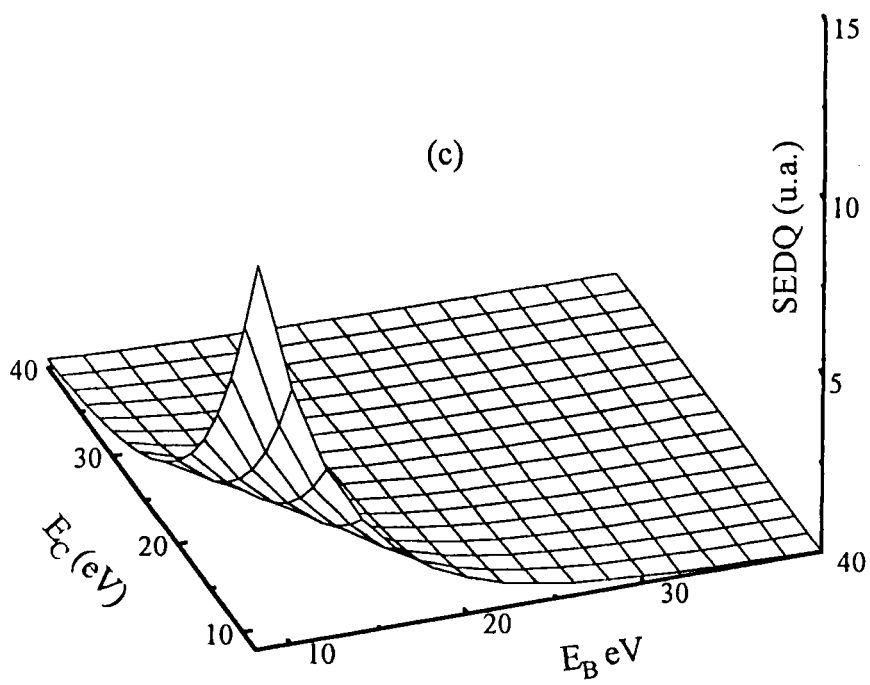


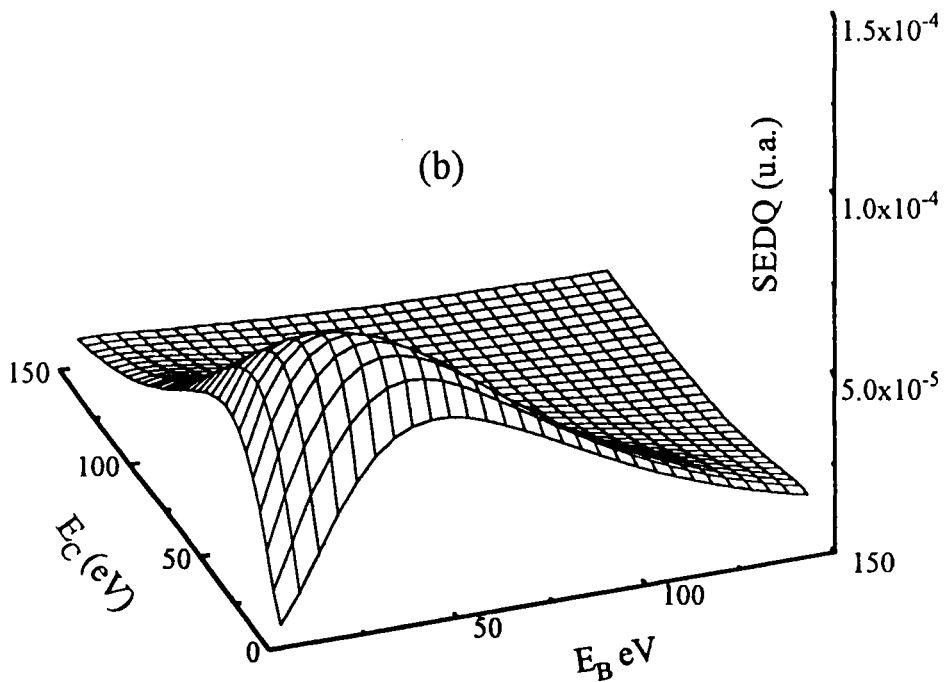
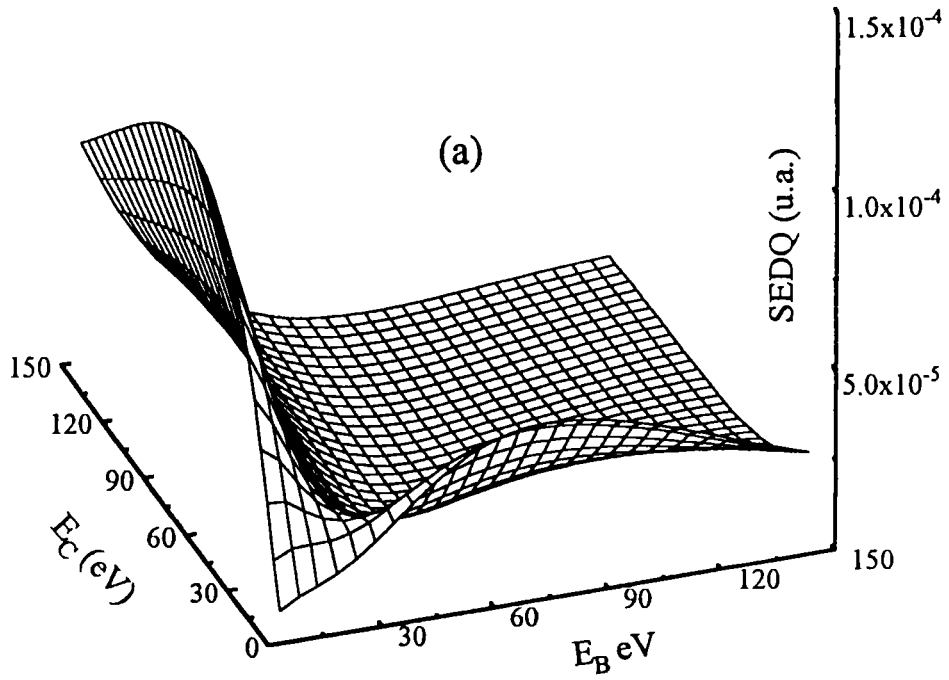
Figure 4. 2 (suite)



**Figure 4.3** SEDQ de double ionisation de  $H^+$  en fonction des énergies d'éjection pour une énergie incidente  $E_0 = 5\text{keV}$  et un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les angles des électrons éjectés sont fixés à : (a)  $\theta_C = \theta_K$  et  $\theta_B = \theta_C + 180^\circ$ ; (b)  $\theta_C = \theta_K + 90^\circ$  et  $\theta_B = \theta_C + 110^\circ$ ; (c)  $\theta_C = \theta_K$  et  $\theta_B = \theta_C + 90^\circ$ .



**Figure 4. 3** (*suite*)



**Figure 4. 4** SEDQ de double ionisation de  $\text{Li}^+$  en fonction des énergies d'éjection pour une énergie incidente  $E_0 = 5\text{keV}$  et un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les angles des électrons éjectés sont fixés à : (a)  $\theta_C = \theta_k$  et  $\theta_B = \theta_C + 180^\circ$  ; (b)  $\theta_C = \theta_k + 90^\circ$  et  $\theta_B = \theta_C + 100^\circ$ .

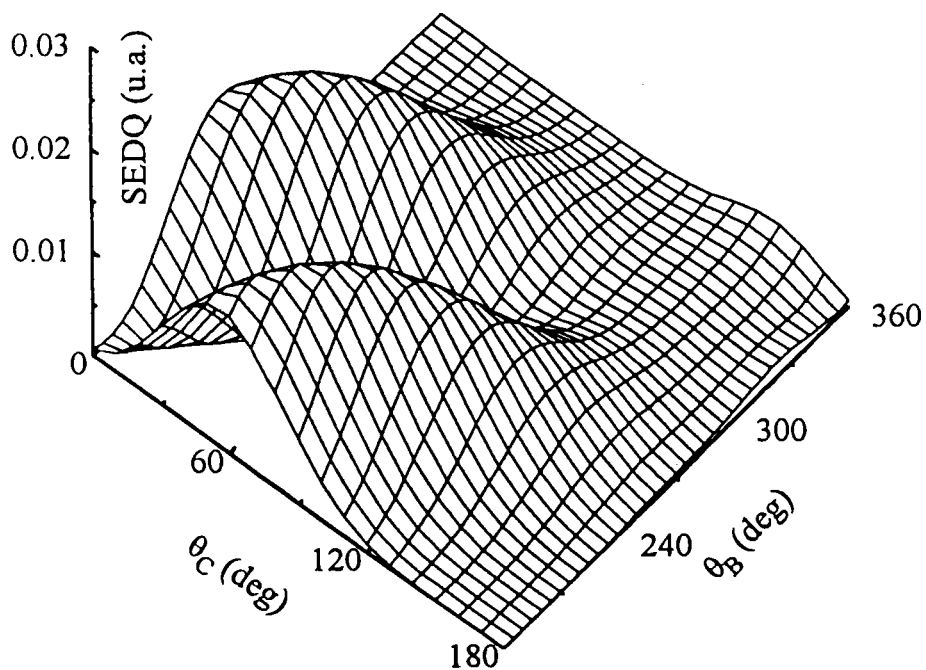
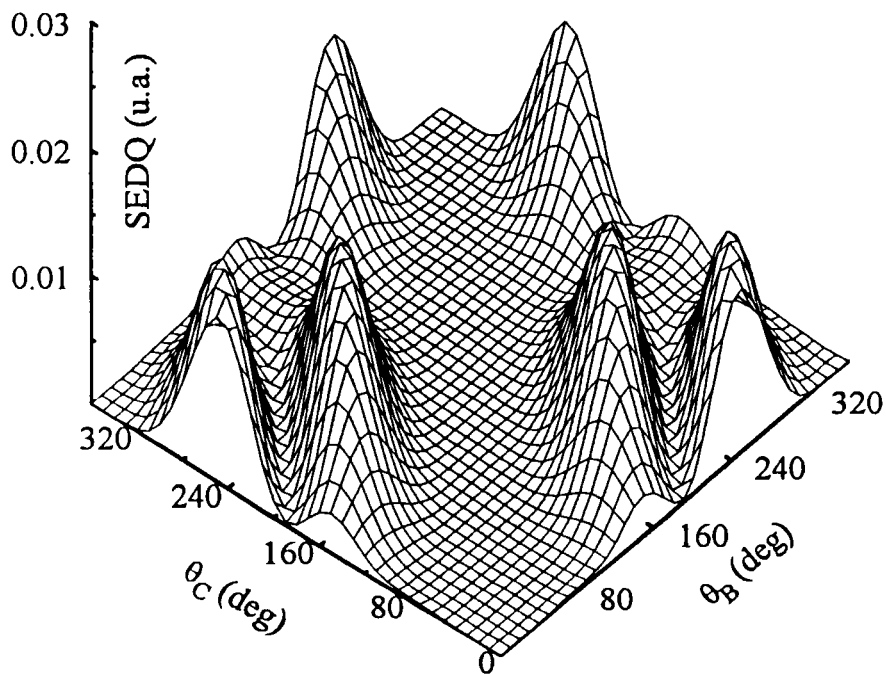
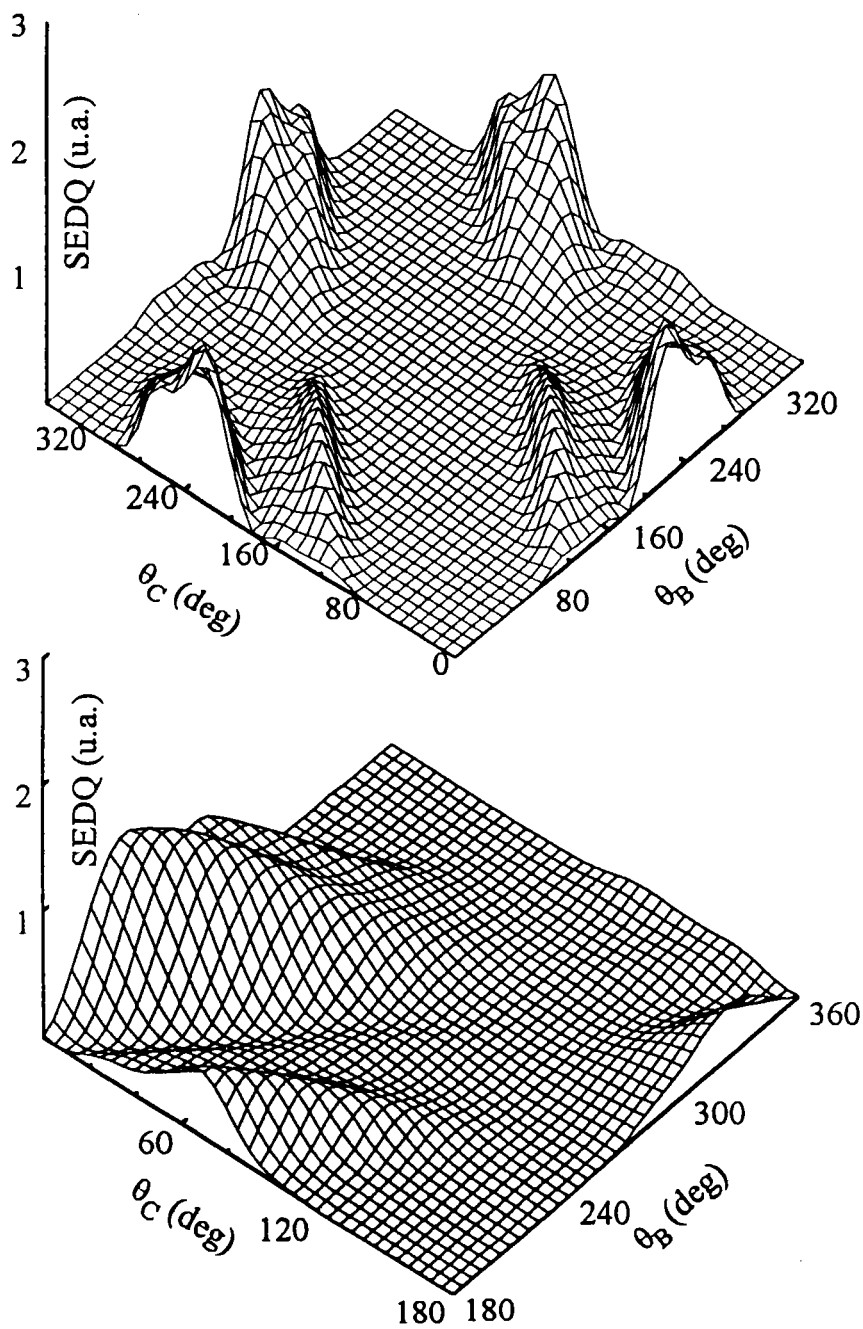
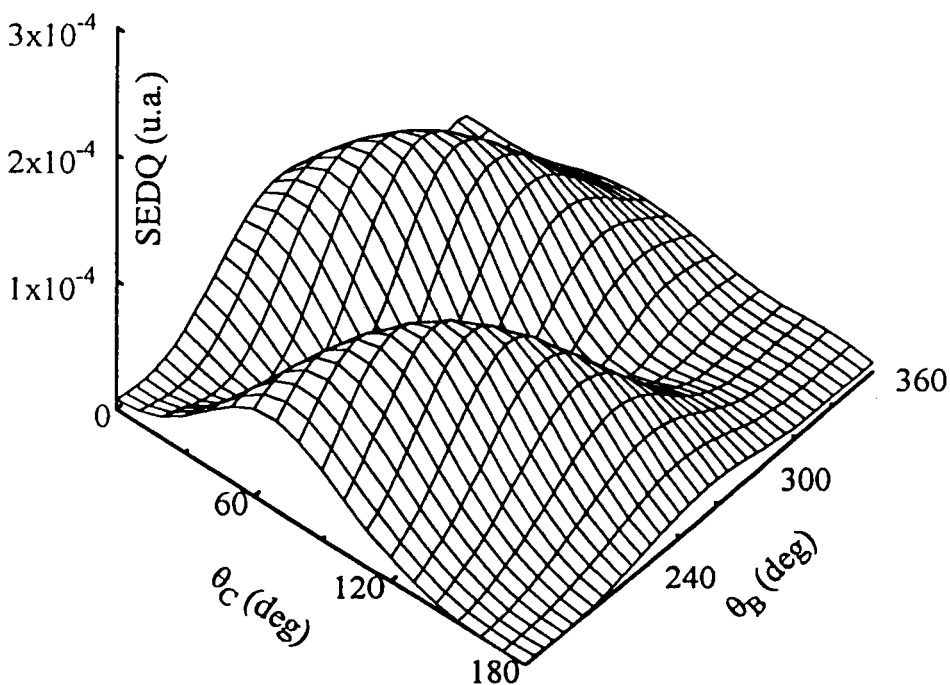
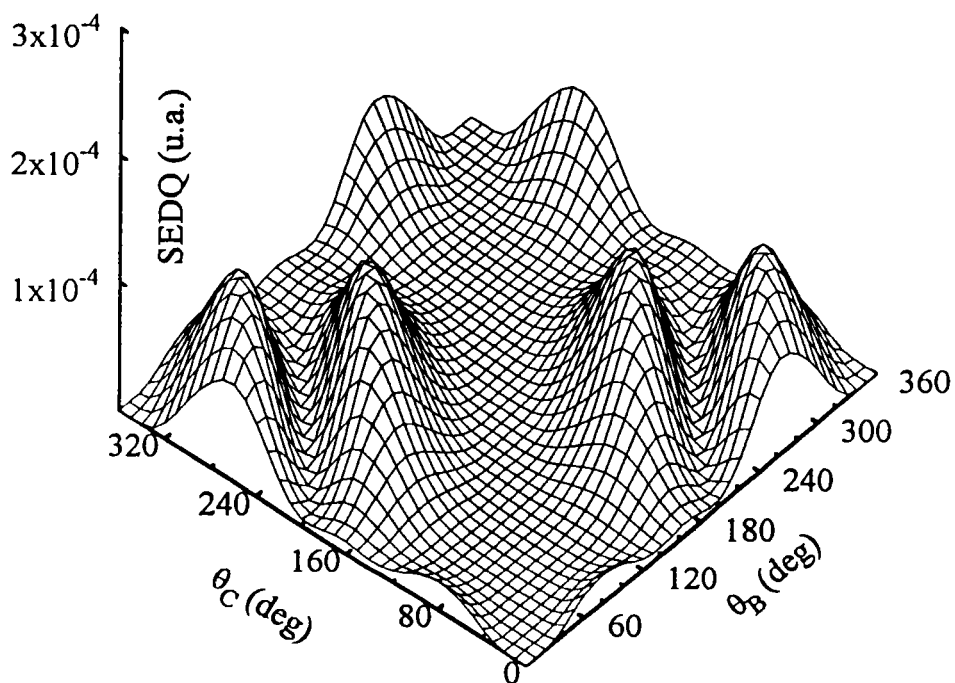


Figure 4.5 SEDQ en unité atomique d'une ionisation double ( $e, 3e$ ) de He en fonction des angles  $\theta_B$  et  $\theta_C$  des électrons éjectés dans une géométrie coplanaire et avec une même énergie  $E_B = E_C = 15$  eV. L'énergie incidente  $E_0 = 5$  keV et l'angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ .





**Figure 4.6** SEDQ (unités atomiques) d'ionisation double ( $e,3e$ ) de  $H^+$  en fonction des angles  $\theta_B$  et  $\theta_C$  des deux électrons éjectés dans une géométrie coplanaire et avec une même énergie  $E_B = E_C = 15$  eV. L'énergie incidente  $E_0 = 5$  keV et l'angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ .



**Figure 4.7** SEDQ en unité atomique d'une ionisation double ( $e, 3e$ ) de  $\text{Li}^+$ . L'énergie incidente  $E_0 = 5 \text{ keV}$  et l'angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Elle est représentée en fonction des angles  $\theta_B$  et  $\theta_C$  des électrons éjectés dans une géométrie coplanaire et avec une même énergie  $E_B = E_C = 40 \text{ eV}$ .

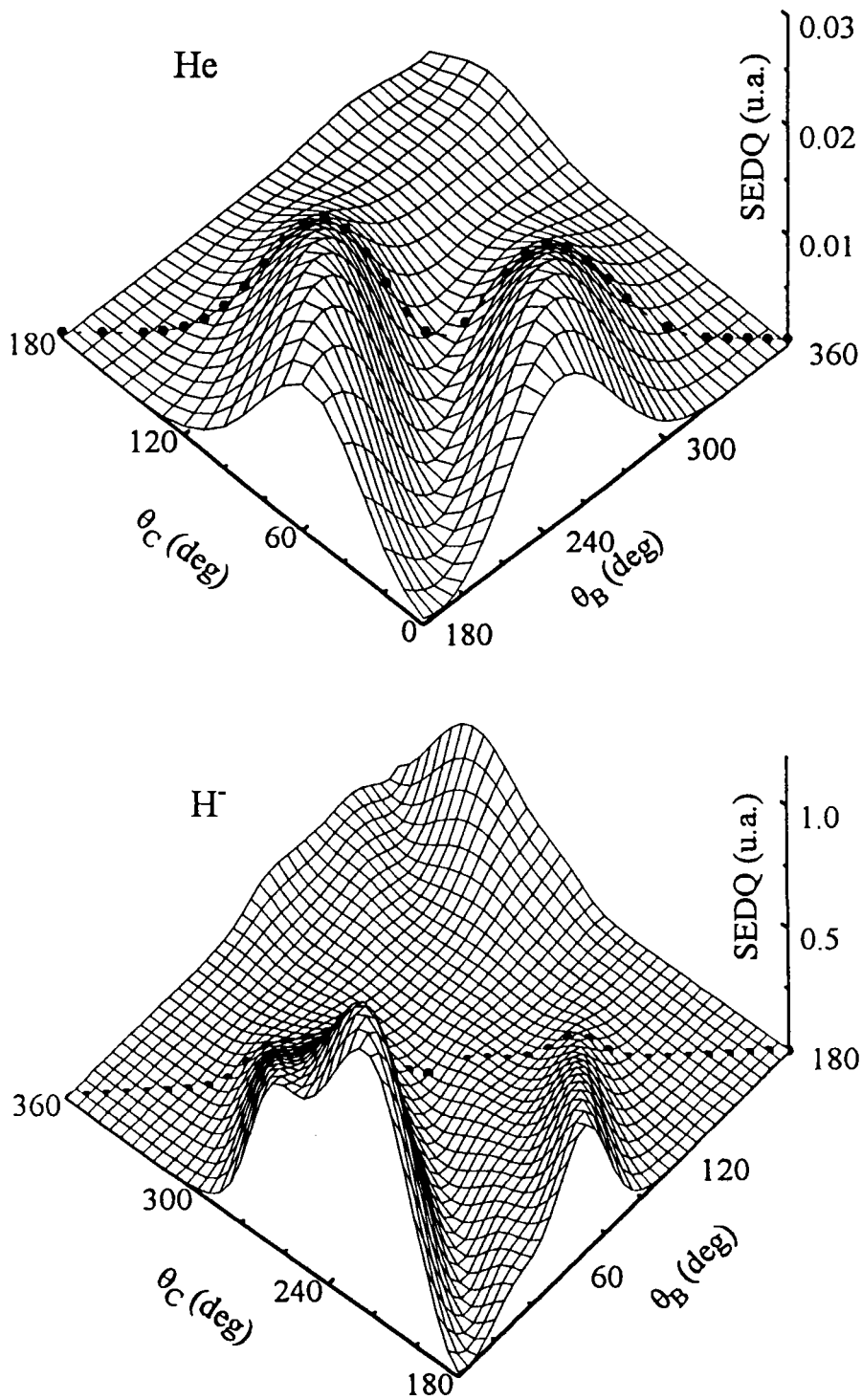
Les SEDQ en 3D (figures 4.8) de double ionisation de H<sup>-</sup> dans son état fondamental, présentent, comme dans le cas de l'hélium et de Li<sup>+</sup>, deux lobes avec un dédoublement accompagné également d'un déplacement vers l'extérieur.

Nous avons également montré dans les mêmes graphiques (figures 4.8) en cercles pleins les SEDQ relatives aux systèmes H<sup>-</sup> et He dans des situations coplanaires symétriques ( $E_B = E_C$ ,  $\theta_B = \theta_C$  et  $\varphi_B - \varphi_C = \pi$ ). Celles-ci montrent que dans une double ionisation de l'hélium les deux électrons éjectés avec une même énergie et dans des directions égales vis-à-vis de la direction d'incidence, ont tendance à sortir vers l'avant à 60° et vers l'arrière à 120°. Ces structures rappellent celles observées pour les processus (e,2e) symétriques à basses énergies (chapitre 3).

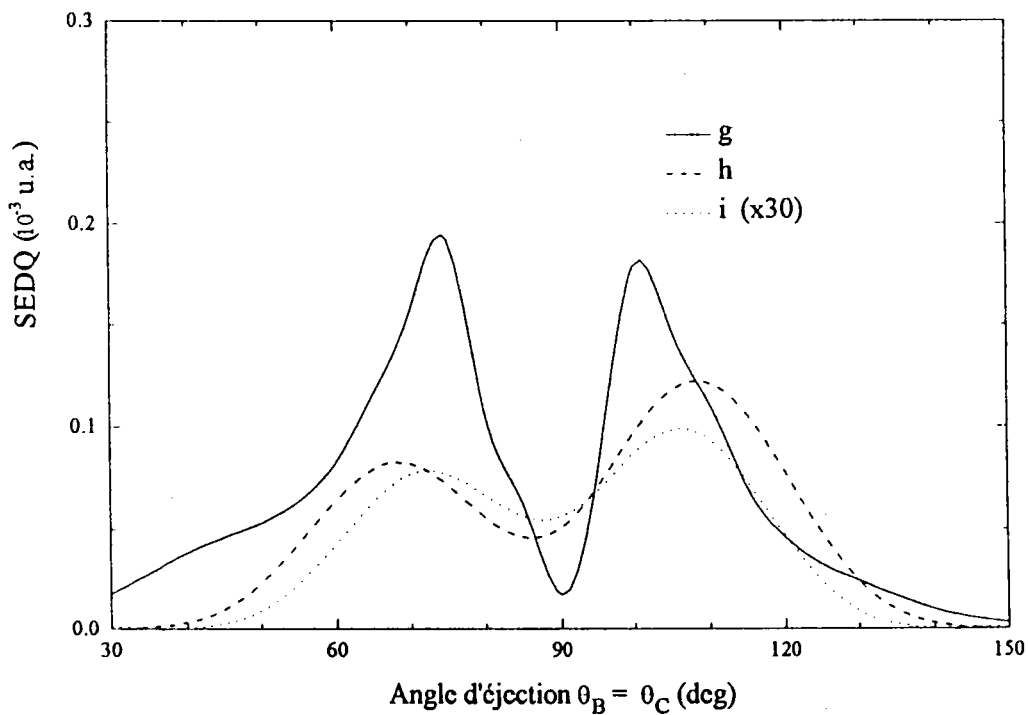
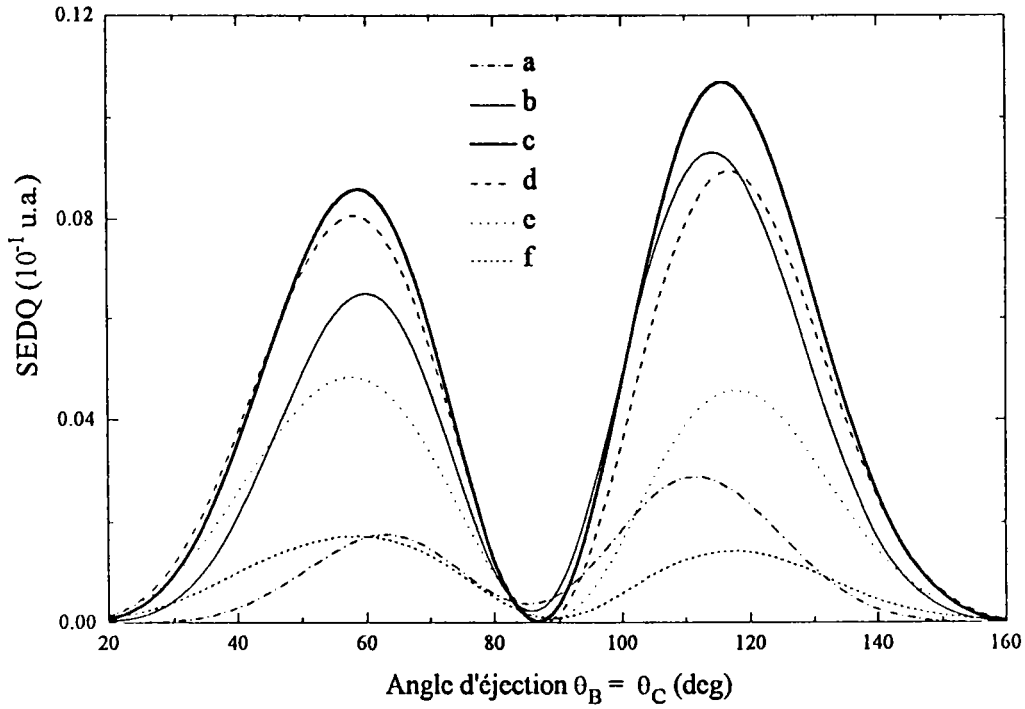
Dans la figure 4.9 nous avons représenté toujours dans le cadre d'une géométrie coplanaire symétrique ( $E = E_B = E_C$  et  $\theta_B = \theta_C$ ) coplanaire ( $\varphi_B - \varphi_C = \pi$ ) les SEDQ de DI de l'atome d'hélium en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$ . L'énergie incidente  $E_0 = 5$  keV et l'angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$  pour différentes valeurs des énergies d'éjection. On remarque l'importance du lobe de situé aux grands angles (*recul*) d'une part, et d'autre part, une quasi-stabilité des deux pics respectivement autour de 60° et de 120°.

Les diagrammes polaires des SEDQ d'ionisation double, dans des situations coplanaires, en fonction de l'angle  $\theta_B$  du premier électron éjecté, sont représentés pour les trois systèmes (He, H<sup>-</sup> et Li<sup>+</sup>). Les figures 4.10-11 reproduisent les SEDQ pour He pour des énergies d'éjection  $E_B = 25$  eV et  $E_C = 5$  eV et à différents angles  $\theta_C$  (voir figure ). Dans la figure 4.12 nous représentons la situation inverse  $E_B = 5$  eV et  $E_C = 25$  eV. Elle montre que les éjections des électrons lents ont tendance à sortir à l'opposé de l'électron rapide. Les SEDQ dans ce dernier cas représentent des formes plus ou moins étalées que dans le premier cas. Des situations similaires ont été également étudiées pour H<sup>-</sup> (figures 4.13 et 4.14) et pour Li<sup>+</sup> (figures 4.15 et 4.16).

L'évolution des SEDQ(e,3e) pour H<sup>-</sup>, He et Li<sup>+</sup> (en fonction de  $Z = 1, 2$  et  $3$ ) montre, avec un affaiblissement des sections efficaces, que l'éjection du second électron a tendance à s'effectuer perpendiculairement au premier électron éjecté quand  $Z$  augmente. Ceci est peut-être dû au fait que lorsque  $Z$  augmente les effets coulombiens du noyau l'emportent sur la répulsion des électrons.



**Figure 4.8** Représentation 3D des SEDQ coplanaires ( $\varphi_A = \varphi_C = 0$  et  $\varphi_B = \pi$ ) de double ionisation d'hélium et de  $H^+$  en fonction des angles d'éjection  $\theta_B$  et  $\theta_C$  pour des conditions cinématiques  $E_0 = 5$  keV,  $E_B = E_C = 15$  eV et  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les points représentent le cas symétrique  $\theta_B = \theta_C$  de l'hélium.



**Figure 4.9** SEDQ, en unités atomiques, pour l'ionisation double ( $c, 3c$ ) de He pour une énergie incidente  $E_0 = 5$  keV et un angle de diffusion  $\theta_\Lambda = 0.5^\circ$ . Les électrons éjectés sont détectés dans une géométrie symétrique coplanaire,  $\theta_B = \theta_C$ ,  $\varphi_B = 0$  et  $\varphi_C = \pi$  avec les mêmes énergies  $E_B = E_C$  : (a) 5 eV ; (b) 10 eV ; (c) 15 eV ; (d) 20 eV ; (e) 30 eV ; (f) 45 eV ; (g) 100 eV (h) 2 eV et (i) 1eV.

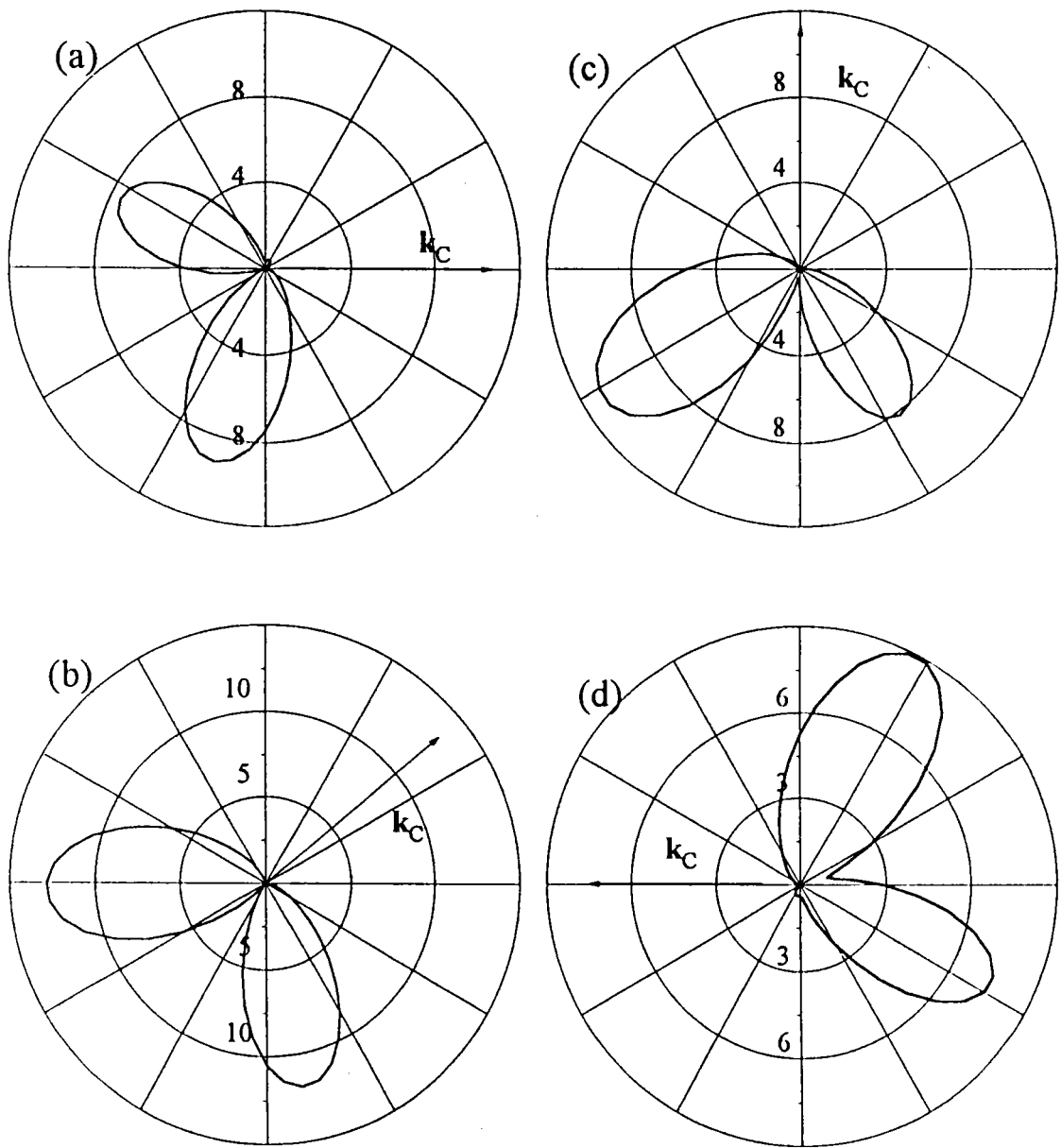
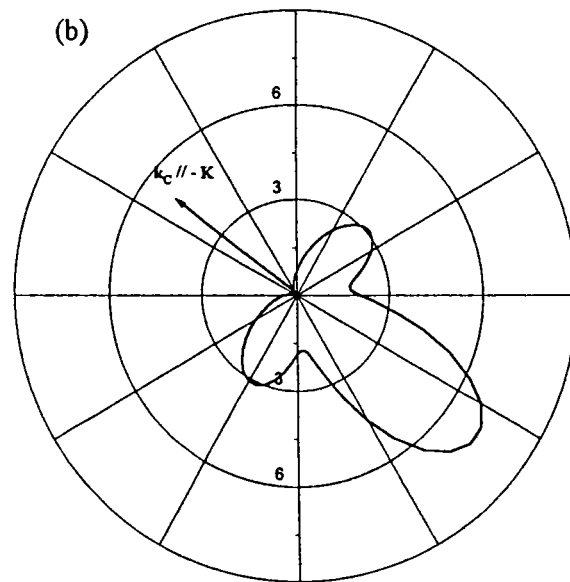
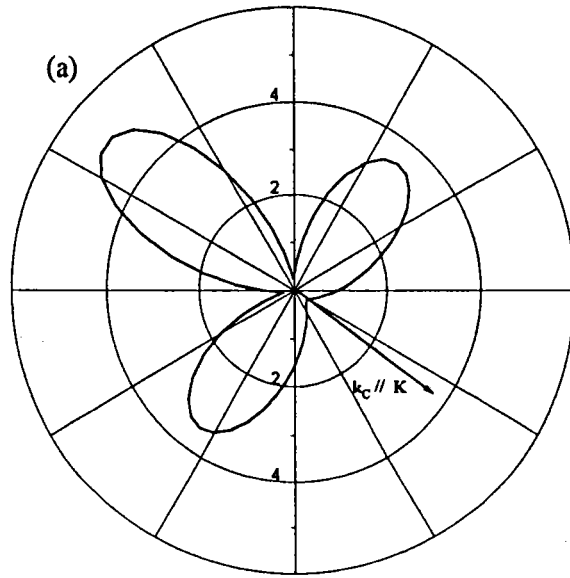


Figure 4.10 SEDQ en échelle de  $10^3 a_0^2 (\text{sr}^{-1} 4 \text{ Ryd}^2)^{-1}$  de double ionisation (e,3e) d'hélium en fonction du premier angle d'éjection  $\theta_B$  à une énergie incidente  $E_0 = 5 \text{ keV}$  et un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les énergies des deux électrons éjectés  $E_B = 25 \text{ eV}$  et  $E_C = 5 \text{ eV}$ . L'électron C est émis respectivement dans : (a)  $\theta_C = 0^\circ$  ; (b)  $\theta_C = 45^\circ$  ; (c)  $\theta_C = 90^\circ$  et (d)  $\theta_C = 180^\circ$ .



**Figure 4.11** même situation que la figure 4.10 mais avec : (a),  $\theta_C = \theta_k$   
 et (b),  $\theta_C = 180^\circ + \theta_k$ .

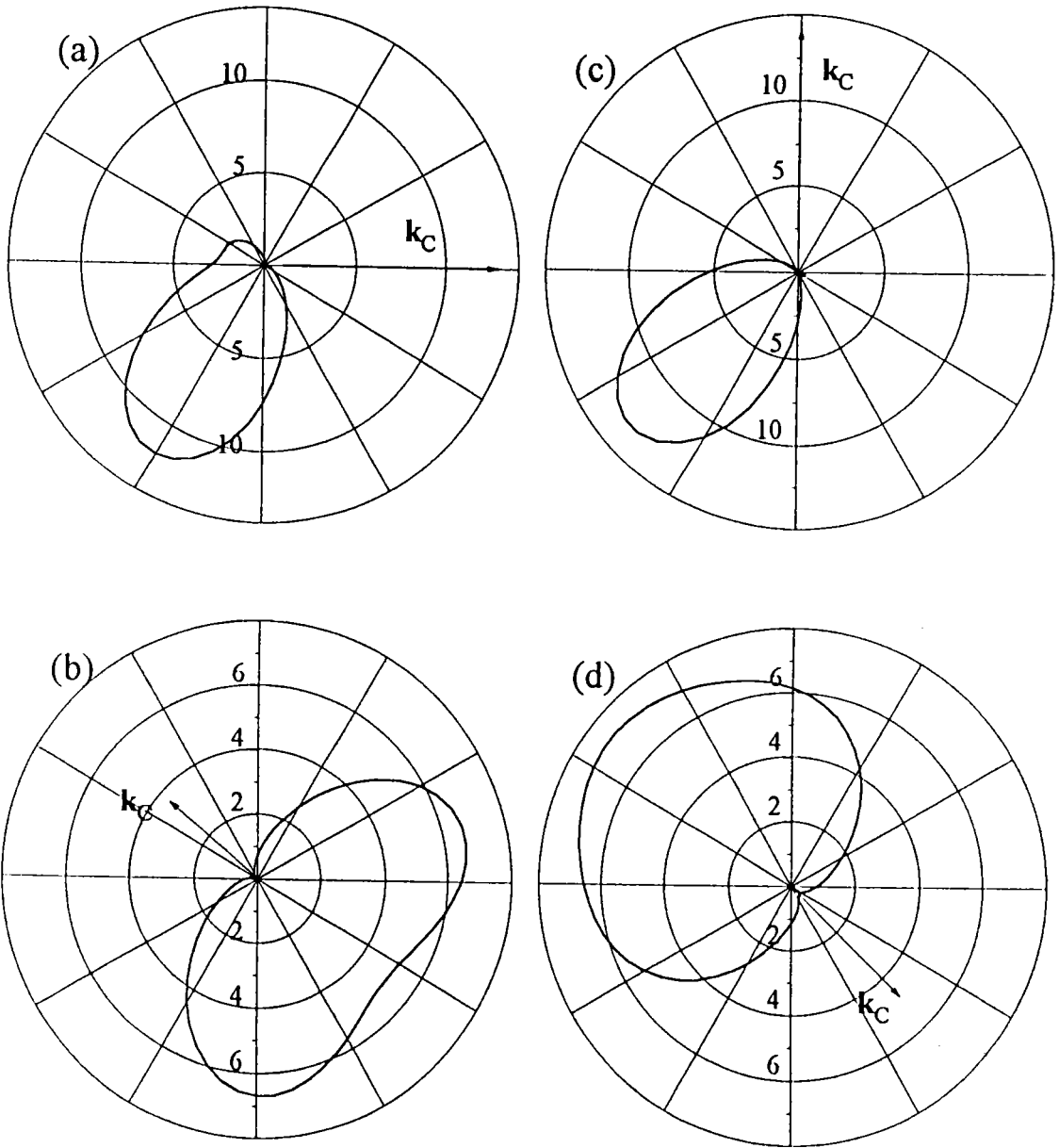


Figure 4.12 mêmes situations que la figure 4.10 mais avec une énergie du premier éjecté  $E_B = 5$  eV et  $E_C = 25$  eV pour l'électron C qui est émis respectivement dans : (a)  $\theta_C = 0^\circ$  ; (b)  $\theta_C = \theta_K + 180^\circ$  ; (c)  $k_C = 90^\circ$  et (d)  $\theta_C = \theta_K$ .



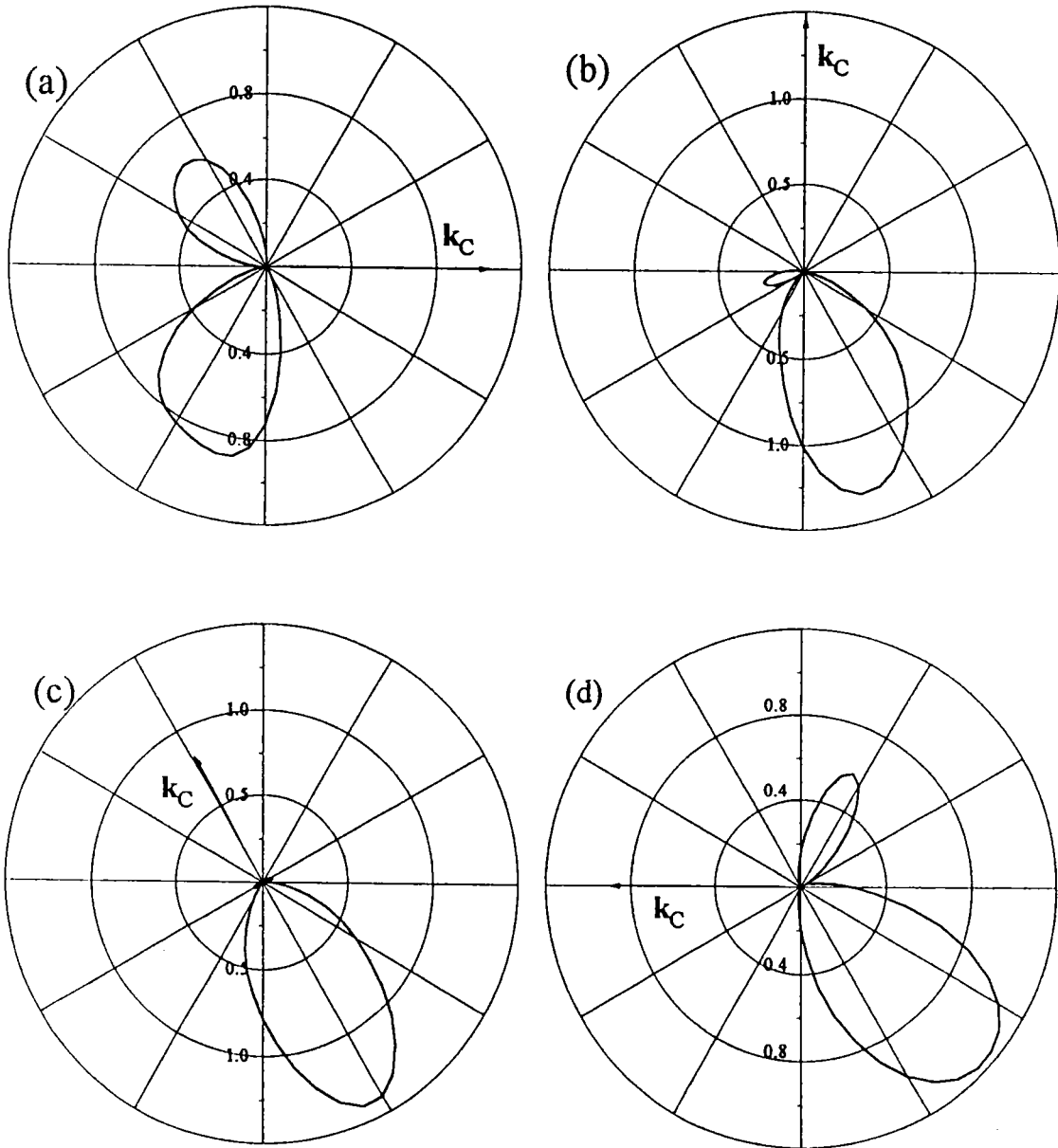


Figure 4.13 SEDQ en échelle  $a_0^2 (\text{sr}^2 4 \text{ Ryd}^2)^{-1}$  de la double ionisation de  $\text{H}^-$  par impact électronique d'énergie incidente de 5 keV, l'angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les énergies des deux éjectés  $E_B = 25 \text{ eV}$  et  $E_C = 5 \text{ eV}$ . L'électron C est émis : (a),  $\theta_C = 0^\circ$  ; (b),  $\theta_C = 90^\circ$  ; (c),  $k_C // -K$  et (d),  $\theta_C = 180^\circ$ .

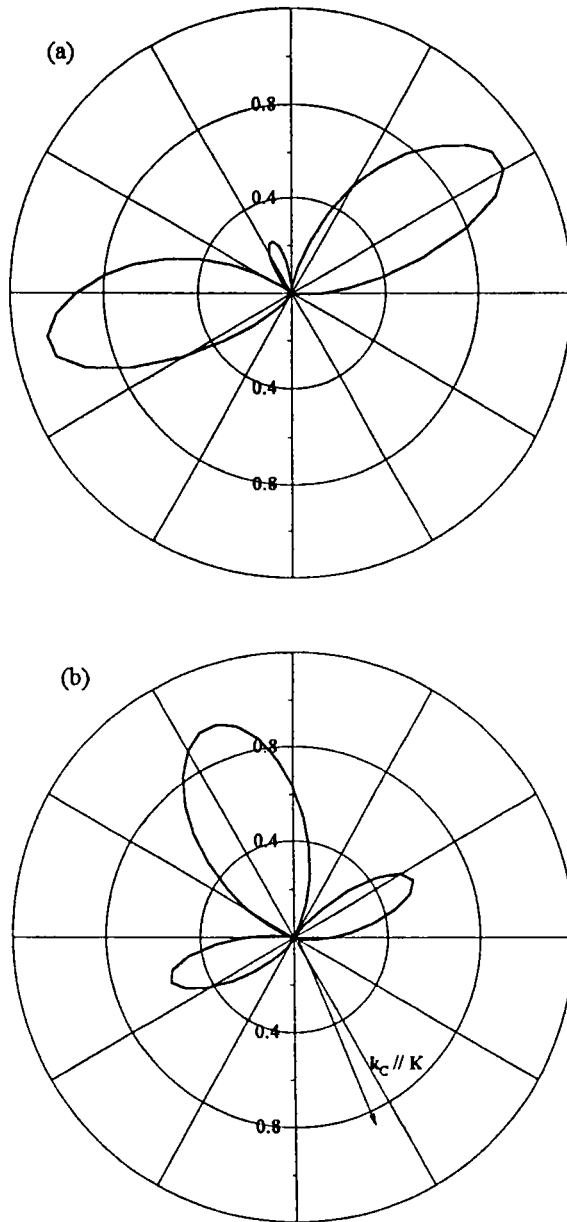


Figure 4.14 SEDQ en échelle de  $a_0^2 (\text{sr}^3 4 \text{ Ryd}^2)^{-1}$  de double ionisation de  $\text{H}^-$  par impact électronique d'énergie incidente  $E_0 = 5 \text{ keV}$  et d'angle de diffusion  $\theta_\Lambda = 0.5^\circ$ . L'électron C est détecté dans la direction de transfert  $\mathbf{K}$ . Les énergies des éjectés : (a),  $E_B = E_C = 10 \text{ eV}$  et (b),  $E_B = 15 \text{ eV}$  et  $E_C = 5 \text{ eV}$ .

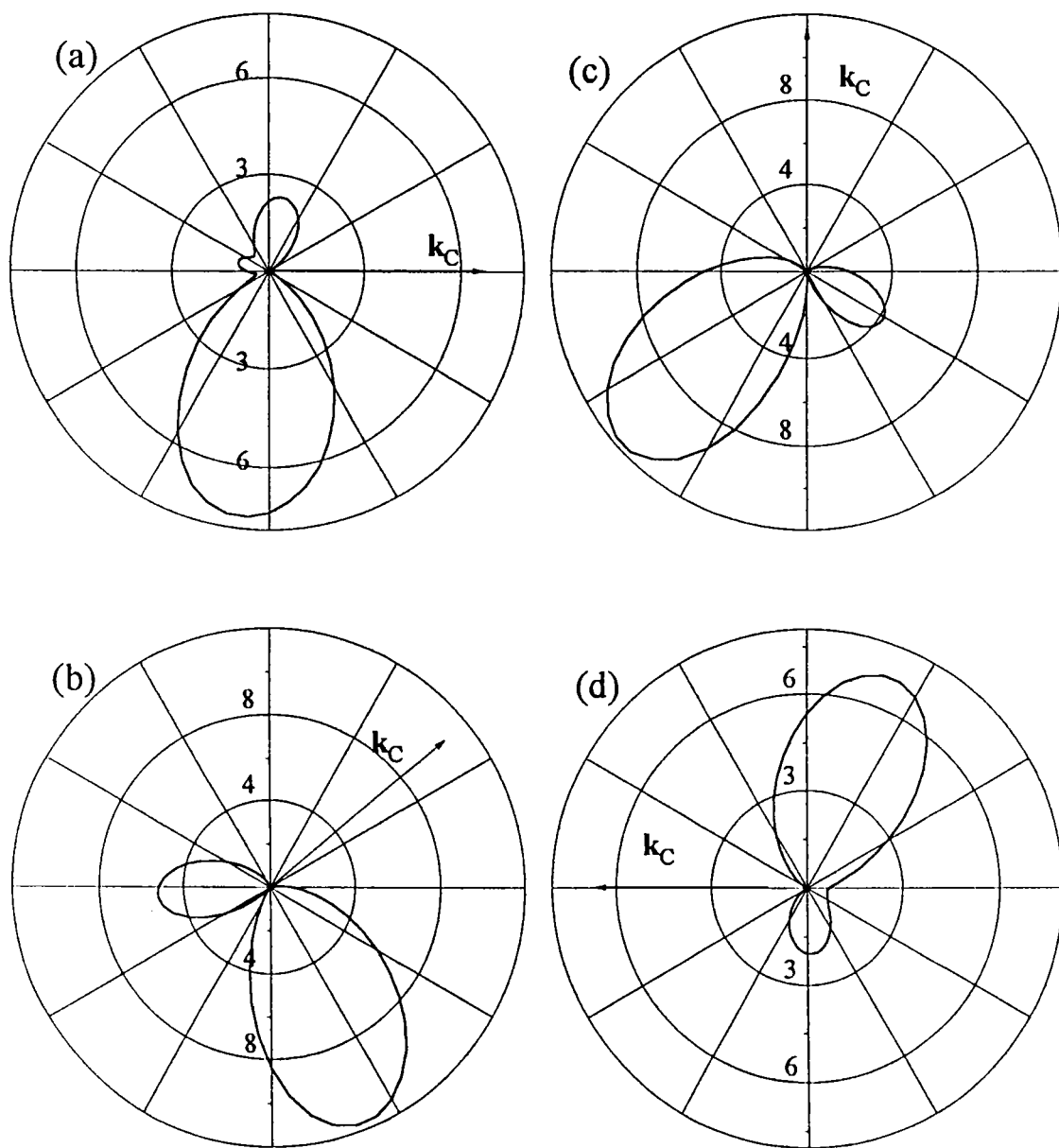


Figure 4.15 SEDQ en échelle de  $10^{-5} a_0^2 (\text{sr}^3 4 \text{ Ryd}^2)^{-1}$  de la double ionisation de  $\text{Li}^+$  par impact électronique d'énergie incidente  $E_0 = 5 \text{ keV}$  et d'angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les énergies des deux éjectés  $E_B = E_C = 40 \text{ eV}$ . L'électron C est émis : (a),  $\theta_C = 0^\circ$  ; (b),  $\theta_C = 45^\circ$  ; (c),  $\theta_C = 90^\circ$  et (d),  $\theta_C = 180^\circ$ .

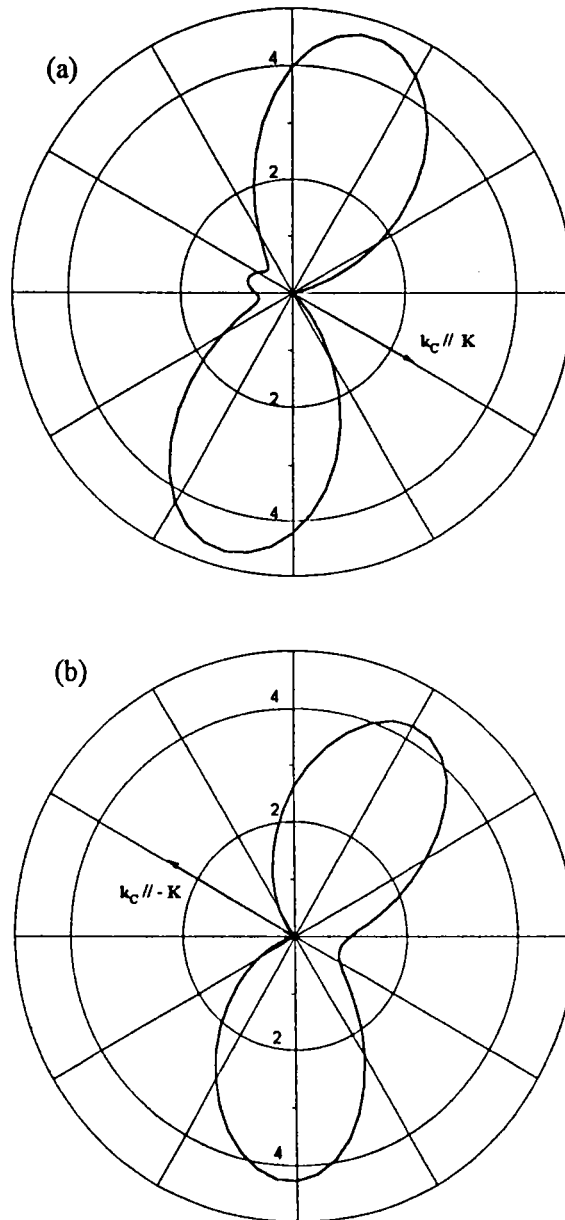


Figure 4.16 même situation que la figure 4. mais avec : (a),  $\theta_C = \theta_k$   
 et (b),  $\theta_C = 180^\circ + \theta_k$ .

### 4.2.3 Sections efficaces différentielles quadruples (e,3-1e)

La détection de trois électrons par coïncidence apparaît difficile en raison du faible taux de comptage pour ce type d'événements. Des comparaisons définitives entre théories et expériences sont donc difficiles dans ce domaine. Pour cela nous avons envisagé d'étudier des sections efficaces différentielles quadruples (SED4) dans lesquelles seuls deux électrons sont détectés en coïncidence. L'électron diffusé A, ou l'un des deux éjectés B ou C, sera non détecté dans l'expérience. Ceci conduit aux deux possibilités :

*a-* (e,3-1e) de première espèce

Ce processus consiste à détecter les deux électrons éjectés B et C en coïncidence.

L'électron A est diffusé dans toutes les directions possibles, en respectant la conservation des énergies. La section efficace associée

$$\text{SED4(B,C)} = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_B d\Omega_C dE_B dE_C} = (2\pi)^4 \frac{k_A k_B k_C}{k_i} \int d\Omega_A |T_{fi}|^2, \quad (4.15)$$

est obtenue en intégrant sur l'angle solide  $d\Omega_A$  total de l'électron diffusé. Les contributions des grands angles de diffusion peuvent être négligées afin de réduire le temps d'intégration dans les calculs.

*b-* (e,3-1e) de deuxième espèce

Parmi les processus auxquels nous nous intéressons dans ce mémoire, la section efficace différentielle quadruple (SED4) relative au processus (e,3-1e) de deuxième espèce. Ce dernier processus consiste à détecter en coïncidence l'électron diffusé A et l'un des deux électrons éjectés B ou C. L'autre électron éjecté C ou B est alors émis dans une direction qui reste indéterminée. La section efficace associée

$$\text{SED4(A,B)} = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE_A dE_B} = (2\pi)^4 \frac{k_A k_B k_C}{k_i k^2} \int d\Omega_C |T_{fi}|^2, \quad (4.16)$$

est obtenue en intégrant sur toutes les directions d'éjection possibles de l'un ou l'autre des deux électrons B ou C. Du fait que  $\text{SED4(A,B)} = \text{SED4(A,C)}$ , nous avons choisi ici d'intégrer sur toutes les directions de l'électron C. En premier lieu, il semblerait de point de vue expérimental que les techniques de détection en (e,2e) des SEDT de simple ioni-

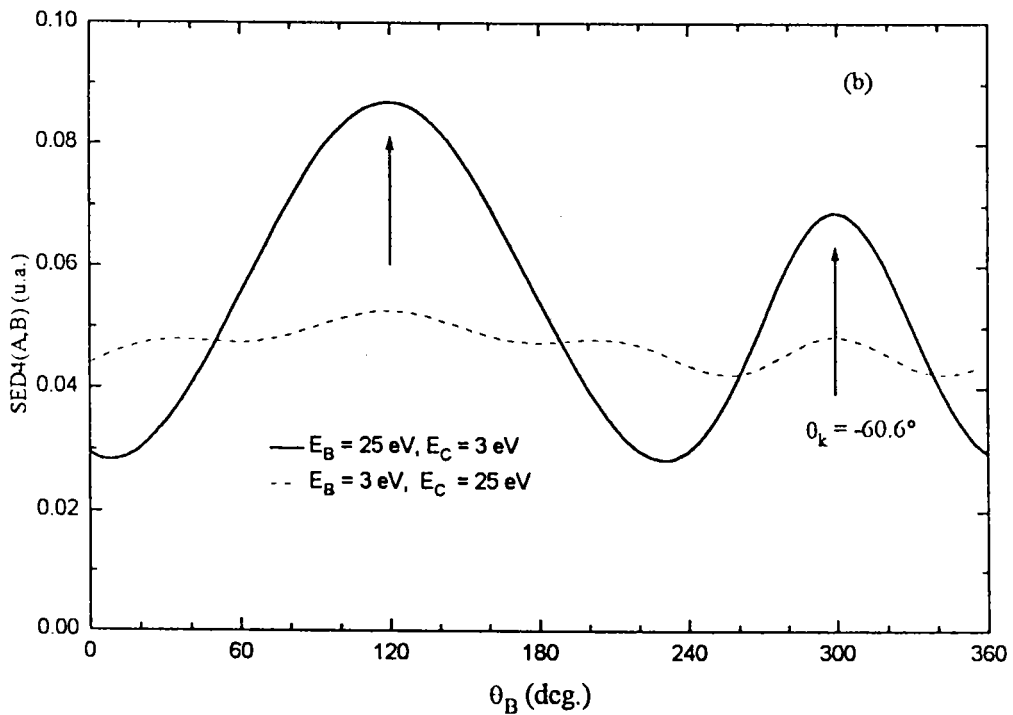
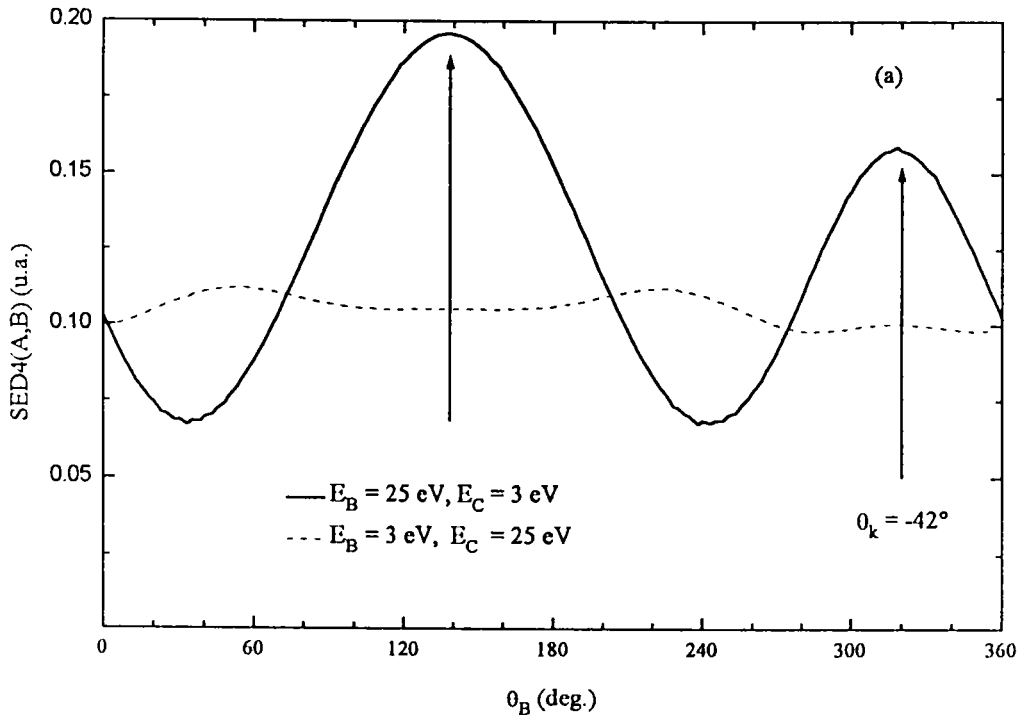
sation soient transposables aux mesures des SED4. La comparaison de ces deux situations devrait permettre une meilleure compréhension des mécanismes de double ionisation.

#### 4.2.4 Résultats (e,3-1e) 2ème espèce

Une comparaison entre les résultats du calcul des sections efficaces (SED4), en utilisant la fonction d'onde ( $e$ ) du chapitre 2 pour l'état initial de la cible et l'approximation (3C) pour décrire les deux électrons éjectés, est proposée pour l'ion  $H^+$  et l'atome d'hélium. Ces résultats nous apporteront des informations relatives aux mécanismes de double ionisation ainsi que l'importance de certains mécanismes pour chaque système.

La figure 4.17 représente les SED4(A,B) en unités atomiques, de double ionisation de He ( $1s^2$ ) par impact d'électrons. Ces sections efficaces sont représentées en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  pour des énergies, incidente  $E_C = 5607$  eV et des éjections en tirets  $E_B = 25$  et  $E_C = 3$  eV et en traits pleins  $E_B = 3$  et  $E_C = 25$  eV pour des angles de diffusion fixés à : (a)  $\theta_A = 0.5^\circ$  ; (b)  $\theta_A = 1^\circ$  et (c)  $\theta_A = 5^\circ$ . On remarque que les SED4 de l'équation (4.18) en fonction de l'angle du premier électron éjecté (supposé rapide  $E_B = 25$  eV  $E_C = 3$  eV) présentent deux maxima répartis d'une manière symétrique par rapport à la direction de transfert, l'un dans la direction de transfert et l'autre dans la direction opposés. Cette situation rappelle *quantitativement* la forme des SEDT(e,2e) et apparaît clairement pour de grands angles de diffusion. Dans le cas où l'électron éjecté qui est détecté est lent ( $E_B = 3$  eV) les SED4 correspondantes montrent une isotropie, ce qui est clair dans les figures 4.17a et b. Tout se passe comme si le processus d'ionisation double s'effectue par une simple ionisation en éjectant un électron rapide, suivie immédiatement par une seconde éjection d'un second électron moins rapide par rapport au premier sous un réarrangement du potentiel. Ce phénomène est connu sous le nom du mécanisme shake-off (Lahmam-Bennani *et al* 1991).

Des situations identiques à celles citées ci-dessus pour un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$  mais en variant la différence des énergies d'éjection tout en conservant la somme  $E_B + E_C = 28$  eV (figure 4.18) montrent que, lorsque  $E_B$  tend vers  $E_C$ , les SED4 présentent un maximum (plus ou moins étalé) dans la direction opposée au transfert d'impulsion  $\mathbf{k}$ .



**Figure 4.17** SED<sub>4</sub>(A,B) d'ionisation double de He en fonction de l'angle  $\theta_B$  du premier électron éjecté pour des énergies incidente  $E_0 = 5607 \text{ eV}$  et d'éjection  $E_B + E_C = 28 \text{ eV}$  à un angle de diffusion : (a)  $\theta_A = 0.5^\circ$  ; (b)  $\theta_A = 1^\circ$  et (c)  $\theta_A = 5^\circ$ .

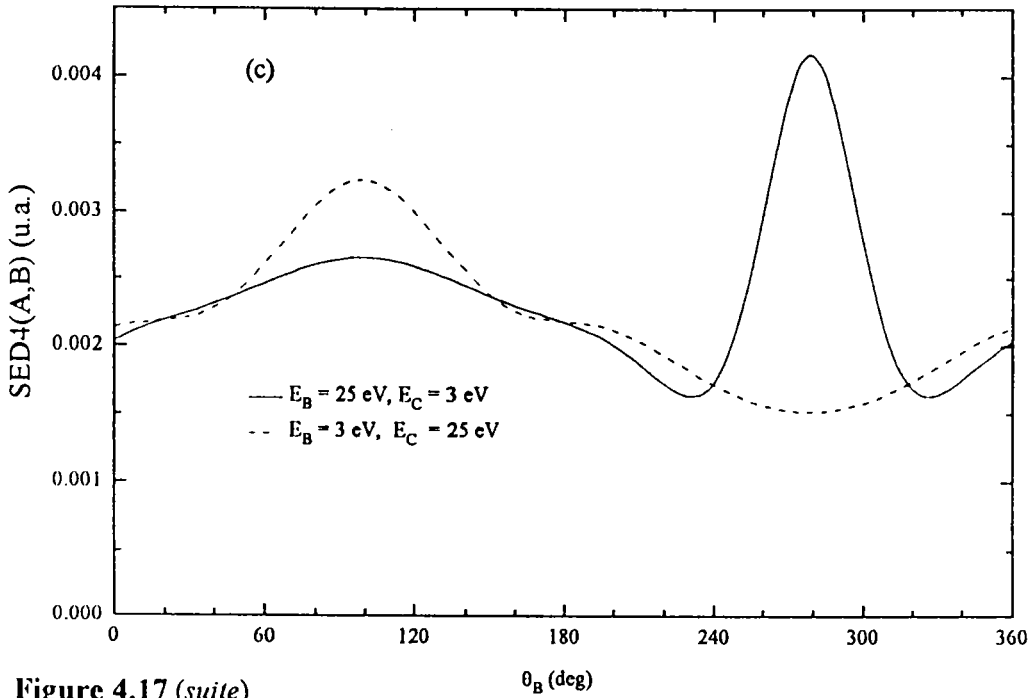


Figure 4.17 (suite)

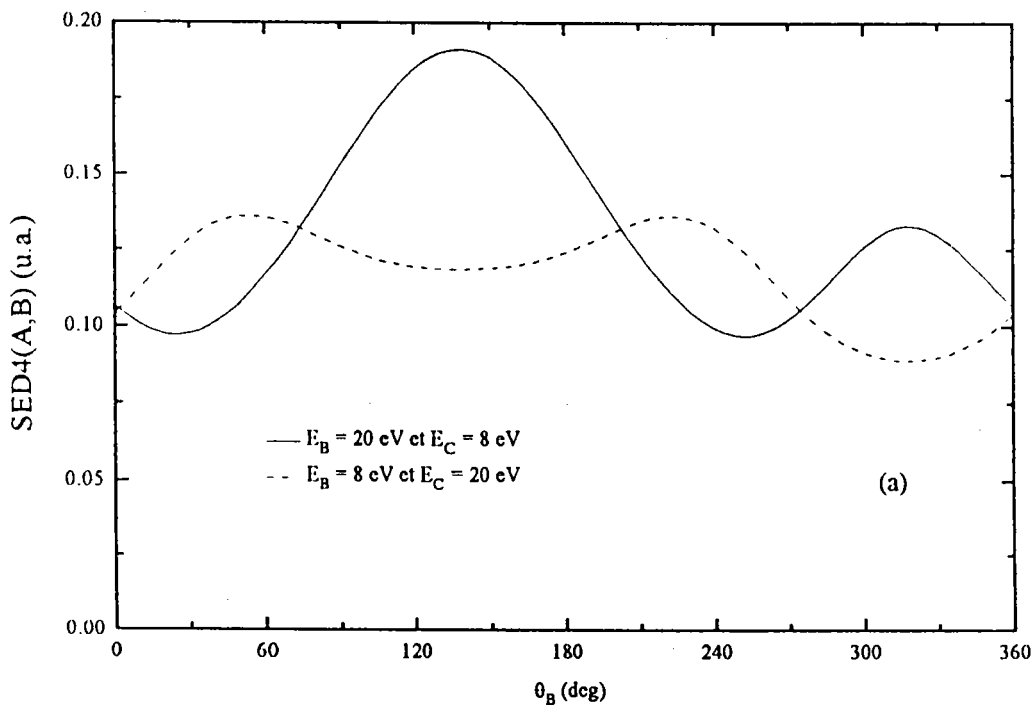


Figure 4.18 SED4(A,B) d'ionisation double de He en fonction de l'angle  $\theta_B$  du premier électron éjecté pour une énergie incidente  $E_0 = 5607 \text{ eV}$  et un angle de diffusion  $\theta_A = 0.5^\circ$ . Les énergies des éjections vérifient  $E_B + E_C = 28 \text{ eV}$  : (a) 20 et 8 eV ; (b) 18 et 10 eV et (c) 14 eV.



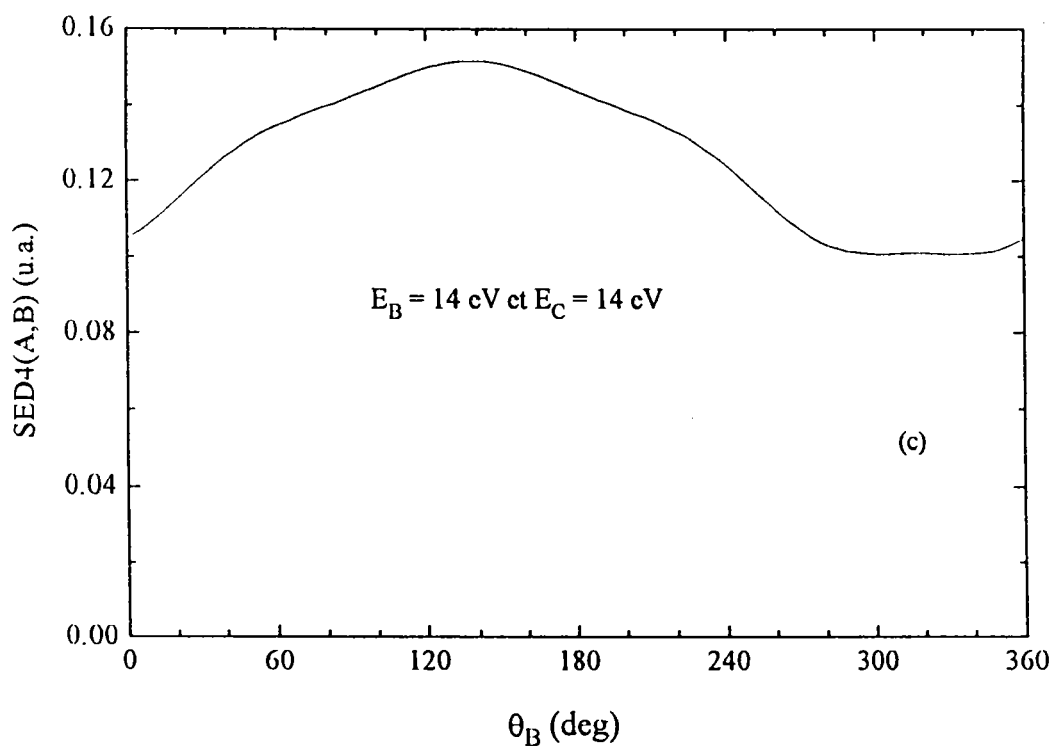
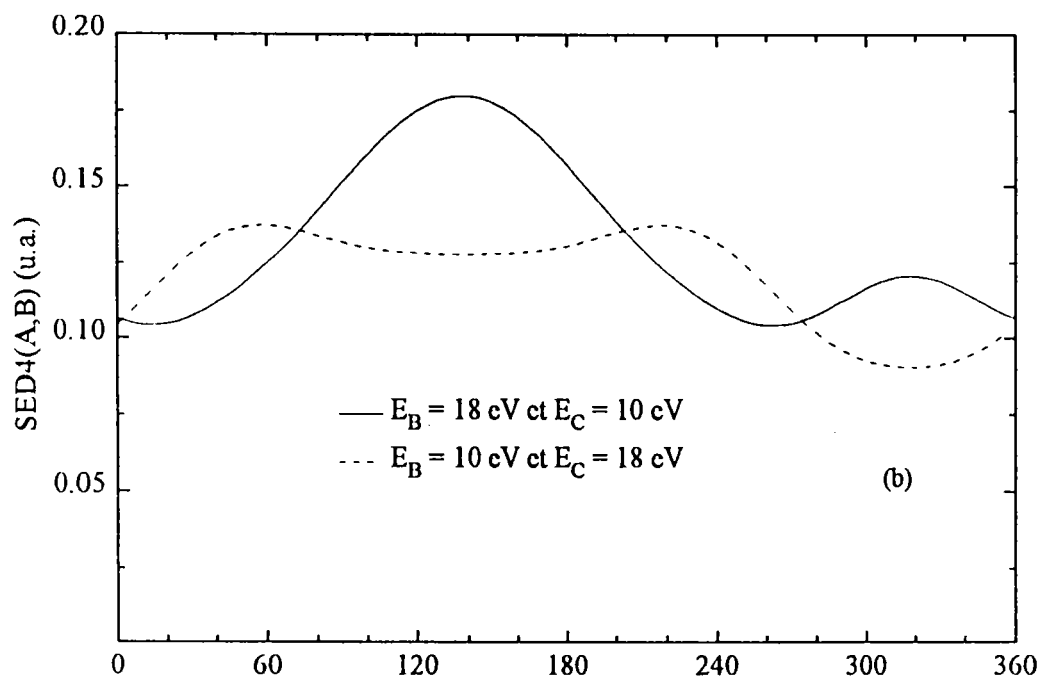
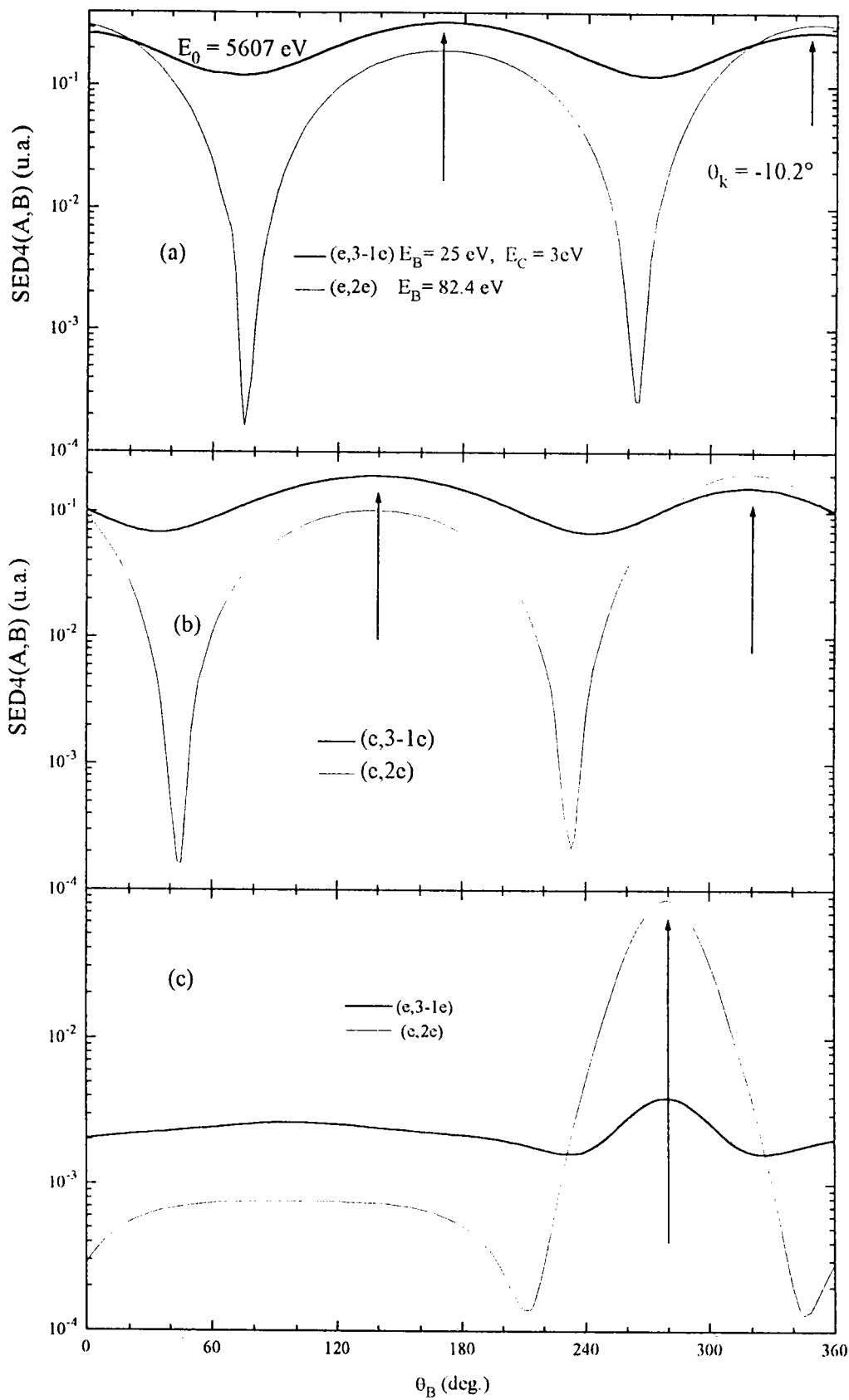


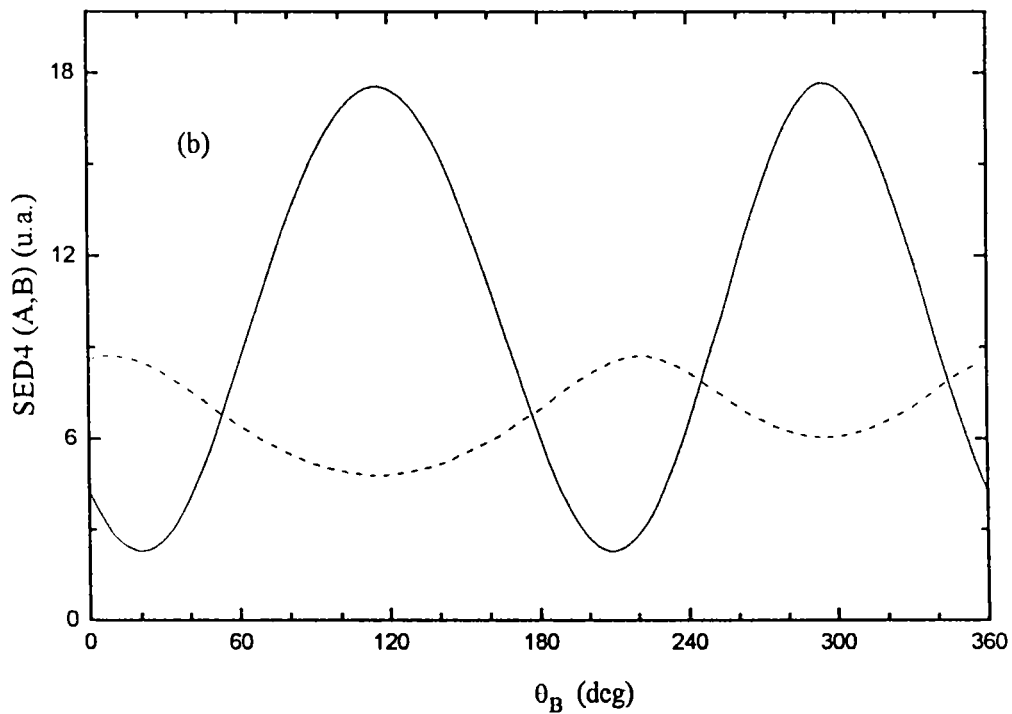
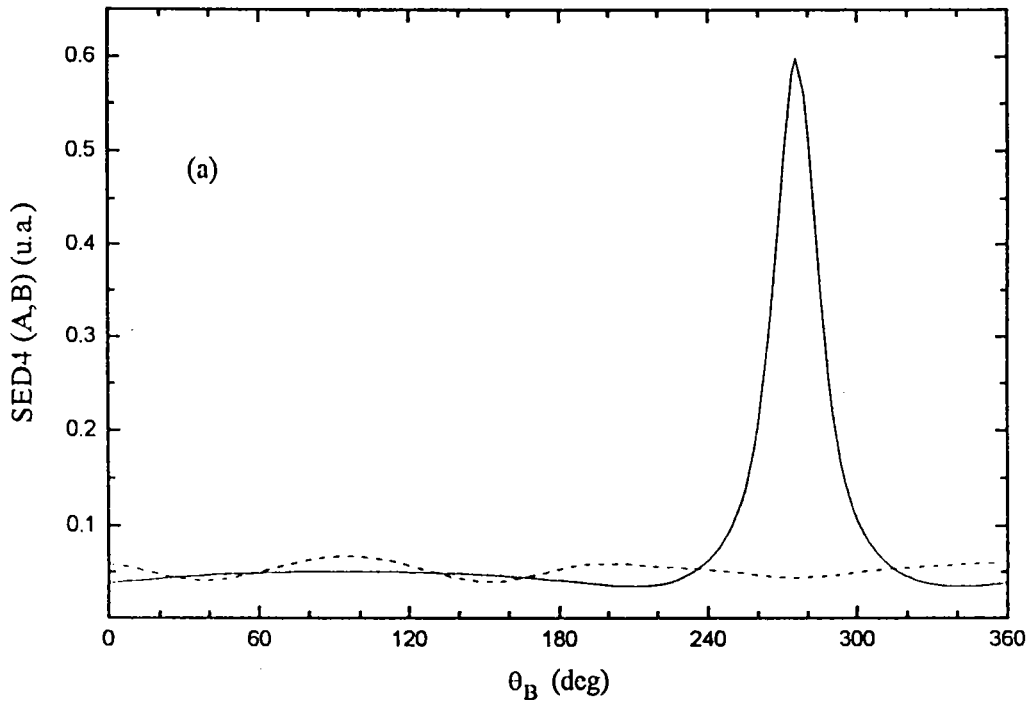
Figure 4.18 (suite)

Nous représentons également sur les mêmes graphes (et à la même échelle logarithmique) les SED4 de double ionisation et les SEDT(e,2e) pour les mêmes transferts d'impulsion et d'énergie (figure 4.19). Ces figures montrent que le pic dans la direction du transfert des SED4 est moins important que le pic du *recul* (direction opposée au transfert). La situation est inverse dans le cas des SEDT(e,2e). En effet pour une même perte d'énergie, la quantité transférée à l'électron éjecté dans un processus (e,2e) est plus importante que celle transférée à l'un des éjectés dans le processus (e,3-1e). D'un autre côté le noyau résiduel dans une ionisation double exerce plus de force sur les électrons éjectés que l'ion résiduel des simples ionisations. Ceci est en accord avec l'idée que le recul est dû à l'attraction coulombienne de l'ion résiduel.

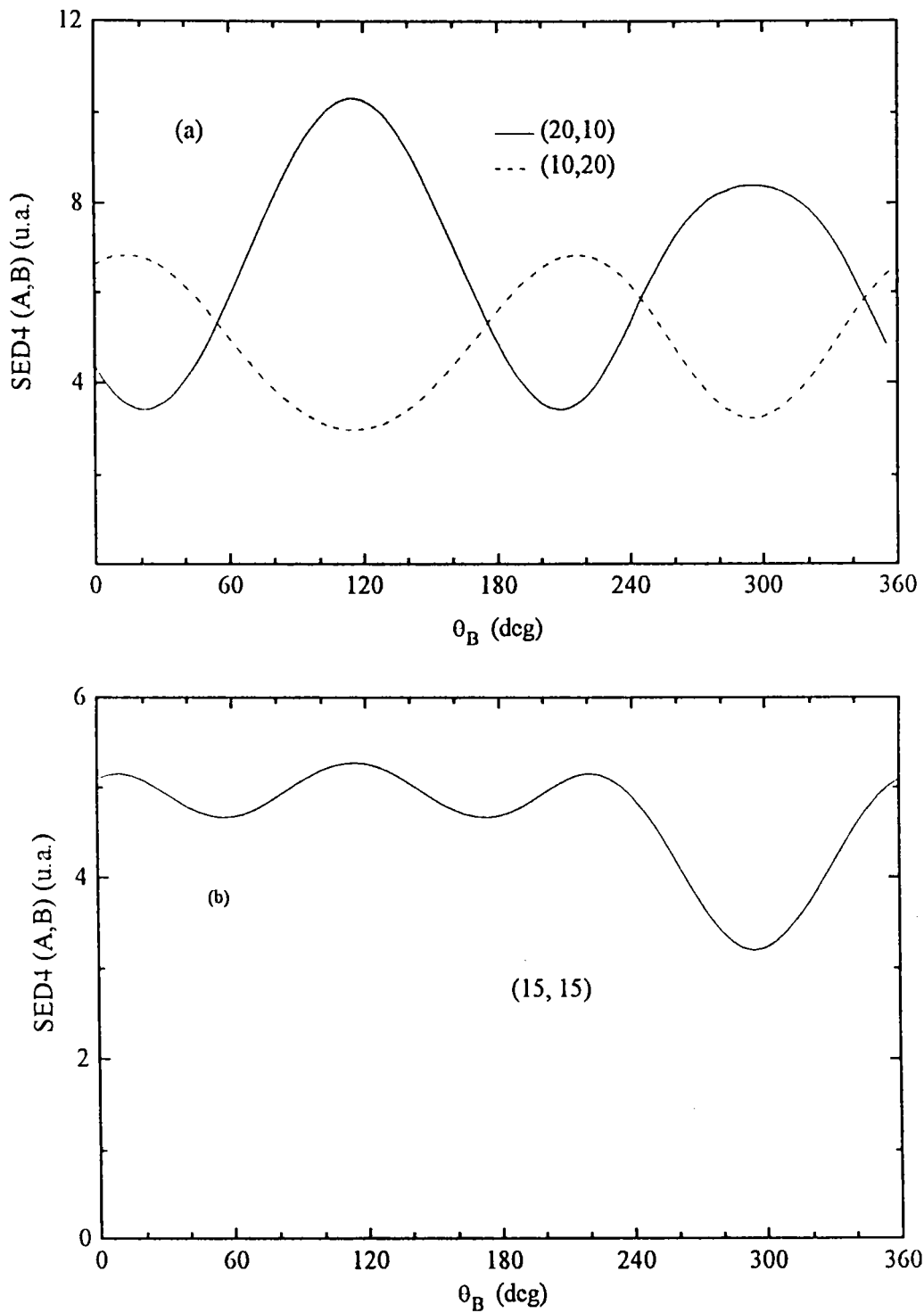
Ces phénomènes ont été prévus également dans l'étude de DI de H<sup>-</sup> à une énergie incidente  $E_0 = 5543.6$  eV et pour des énergies d'éjection vérifiant la conservation  $E_B + E_C = 30$  eV (figures 4.20 et 21). Dans la figure 4.20a nous représentons les SED4 de H<sup>-</sup> pour des énergies d'éjection respectives 25 et 5 eV avec un grand transfert ( $\theta_A = 4.2^\circ$ ). Elle montre que la distribution angulaire d'éjection de l'électron lent (5eV) est isotrope alors que celle de l'électron rapide (25eV) est semblable à celle des SEDT(e,2e) avec un grand transfert d'impulsion. Tout se passe comme si, à grand transfert (grands angles de diffusion) l'électron incident n'interagit qu'avec l'électron éjecté le plus rapide. Le second électron est éjecté de manière isotrope. La figure 4.20b représente une situation identique à celle dans la figure 4.20a mais pour un faible transfert ( $\theta_A = 0.5^\circ$ ). En ce qui concerne les faibles angles de diffusion la distribution angulaire de l'électron lent qui a tendance à être éjecté de façon isotrope, subit de légères ondulations dues à la répulsion du premier éjecté et ces effets que l'on peut qualifier d'effets post-collisionnels entre les électrons éjectés deviennent importants. Ces effets deviennent d'autant importants en réduisant l'écart entre les énergies des deux électrons éjectés. Dans la figure 4.21 nous montrons l'importance des effets post-collisionnels qui se traduit par des ondulations plus ou moins importantes dans les SED4. Il faut noter que ces effets ont été prévus dans l'ionisation double de l'atome d'hélium. Ce dernier présente des distributions angulaires d'éjection de l'électron lent moins ondulées (figure 4.18) que celles données dans le cas de H<sup>-</sup> (figure 4.21). Ceci s'explique par le fait que les effets post-collisionnels se compensent par l'interaction du noyau résiduel de la collision : les effets post-collisionnels sont moins importants lorsque l'interaction du noyau est forte. Celle-ci, est deux fois plus importante dans le cas de DI de l'hélium que dans le cas de DI de H<sup>-</sup>.



**Figure 4.19** Comparaison de SEDT(e,2c) et de SED4(A,B) d'ionisation d'hélium en fonction de l'angle  $\theta_B$  pour une énergie incidente  $E_0 = 5607$  eV et une même perte d'énergie  $\Delta E = 107$  eV. L'angle de diffusion est fixé à : (a)  $\theta_\Lambda = 0.1^\circ$  ; (b)  $\theta_\Lambda = 0.5^\circ$  et (c)  $\theta_\Lambda = 5^\circ$  .



**Figure 4.20** SED4(A,B) d'ionisation double de  $H^-$  en fonction de l'angle  $\theta_B$  du premier électron éjecté pour une énergie incidente  $E_0 = 5543.6$  eV à un angle de diffusion : (a)  $\theta_\Lambda = 4.2^\circ$  et (b)  $\theta_\Lambda = 0.5^\circ$ . Les énergies des éjectés : —  $E_B = 25$  eV,  $E_C = 5$  eV et - - -  $E_B = 5$  eV,  $E_C = 25$  eV.



**Figure 4.21** SED4(A,B) d'ionisation double de  $H^-$  en fonction de l'angle  $\theta_B$  du premier électron éjecté pour une énergie incidente  $E_0 = 5543.6$  eV à un angle de diffusion  $\theta_\Lambda = 0.5^\circ$ . Les énergies des éjectés vérifient  $E_B + E_C = 30$  eV : (a) —  $E_B = 20$  eV,  $E_C = 10$  eV  
 ---  $E_B = 10$  eV,  $E_C = 20$  eV et (b)  $E_B = E_C = 15$  eV.

Enfin, dans le but de justifier nos calculs, voire notre modèle, nous nous sommes intéressés au processus de double ionisation dans la limite optique (très faible transfert  $K \rightarrow 0$ ). Une comparaison des résultats des SEDQ(e,3e) pour  $K \rightarrow 0$  et ceux de photo double ionisation ( $\gamma, 2e$ ) nous permettra de tester le modèle 3C utilisé durant cette étude.

### 4.3 Photo double ionisation (PDI)

La photo double ionisation (PDI) consiste à envoyer sur une cible, un faisceau de photons de longueur d'onde  $\lambda$  (suffisamment faible pour pouvoir détacher deux électrons de la cible). Le photon est totalement absorbé par la cible en permettant à celle-ci d'éjecter deux de ses électrons. L'étude d'un tel processus est connu sous le nom de spectroscopie ( $\gamma, 2e$ )., la PDI représente l'un des sujets les plus importants en physique des collisions. Elle préoccupe ces dernières années, de nombreux théoriciens et expérimentateurs : récemment, certains auteurs ( voir par exemple Le Rouzo et Dal Cappello 1991, Schwarzkopf *et al* 1993, Schwarzkopf et Schmidt 1995, Dawber *et al* 1995, Forrey *et al* 1995, Maulbetsch *et al* 1995, Pont et Shakeshaft 1995, Pont *et al* 1996 ) se sont intéressés à l'étude de la PDI de l'atome d'hélium dans son état fondamental.

La section efficace différentielle associée au processus de PDI est donnée par la relation (Le Rouzo et Dal Cappello 1991)

$$SED(\gamma, 2e) = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_B d\Omega_C dE_B dE_C} = 4\pi^2 \alpha k_B k_C E_\gamma |\mathcal{M}_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f) \quad (4.17)$$

$\alpha$  est la constante de structure fine,  $E_\gamma$  et  $\mathcal{M}_{fi}$  représentent respectivement l'énergie du photon et l'élément de matrice du moment dipolaire de transition d'un état initialement lié vers un état final constitué d'un double continuum. Dans la représentation des longueurs cet élément de matrice s'écrit

$$\mathcal{M}_{fi}(\gamma, 2e) = 2 \varepsilon \langle \chi_f | \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 | \varphi_i \rangle. \quad (4.19)$$

$\varepsilon$  représentant la direction de polarisation (supposée parallèle à l'axe z) du photon. Cet élément est lié à l'élément de transition de double ionisation par impact électronique par la relation

$$\mathcal{M}_{fi}(\gamma, 2e) = A \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} T_{fi}(e, 3e) \quad \text{avec } K \rightarrow 0^+ \quad (4.20)$$

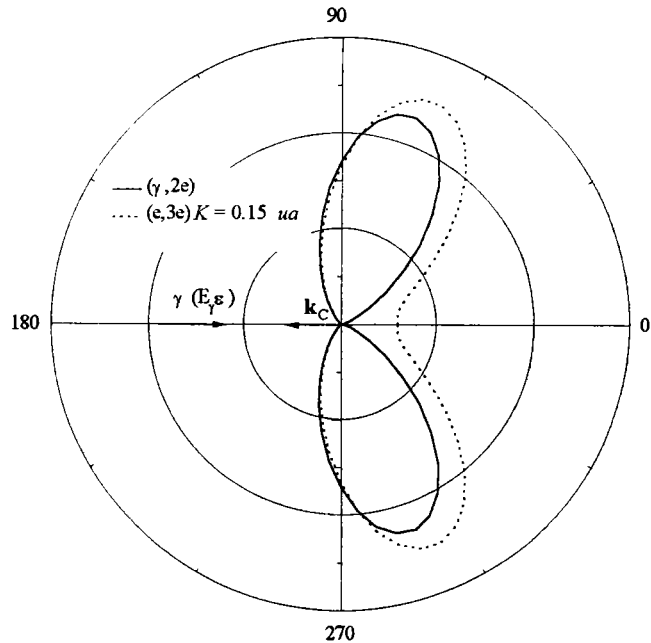
avec

$$A = 2i\pi^2 K^4 \alpha.$$

La relation (4.20) permettra de comparer les résultats obtenus pour un processus  $(\gamma, 2e)$  à ceux de  $(e, 3e)$  dans la limite dipolaire ( $K \rightarrow 0$ ). Ce qui revient à développer le terme  $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_\mu)$  de l'équation (4.13) en ne gardant que les deux premiers termes du développement. Une comparaison de ces deux quantités (figure 4.22). La différence entre les deux diagrammes est due aux puissances élevées de  $K$

**Figure 4.22**

SED $T(\gamma, 2e)$  calculée par la méthode du moment dipolaire (équation 4.21) et celle obtenue à partir de la limite optique  $K \rightarrow 0$  de la SED $Q(e, 3e)$ .

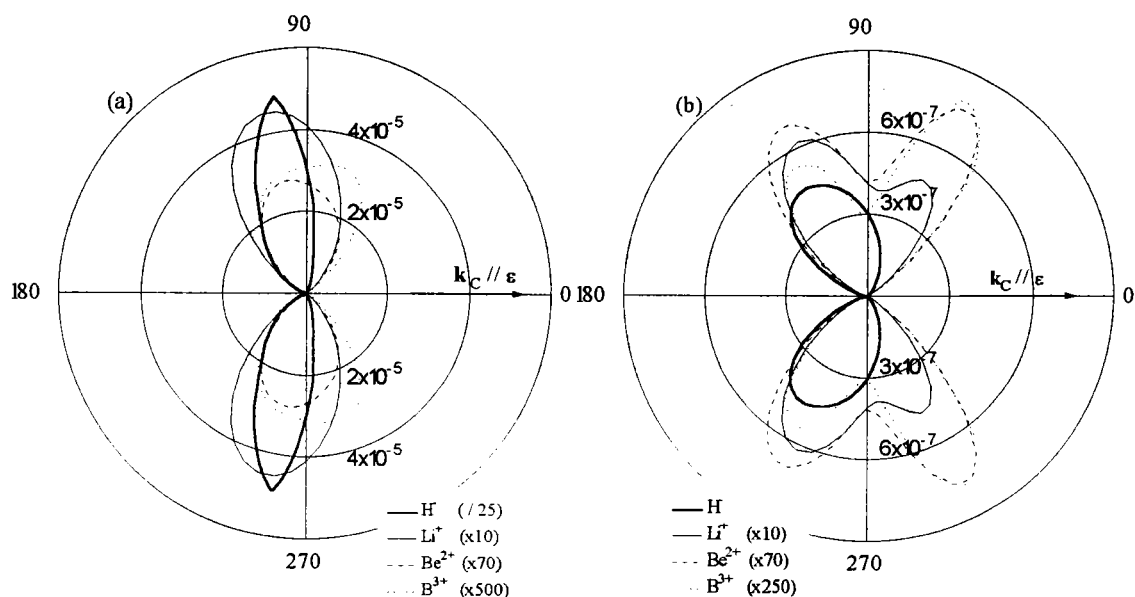


### 4.3.1 Résultats de $(\gamma, 2e)$

Nous représentons dans cette partie quelques résultats des sections efficaces différentielles triples concernant la photo double ionisation (SED $T \gamma, 2e$ ) de l'atome d'hélium dans son état fondamental ( $1s^2$ ). On a pu également confronter notre étude à des mesures existantes dans ce domaine.

La figure 4.23 représente, en unités atomiques, les SED $T$  de PDI  $(\gamma, 2e)$  des systèmes  $H$ ,  $Li^+$ ,  $Be^{2+}$  et  $B^{3+}$  ( $1S$ ) avec des photons d'énergie  $E_\gamma = 30 \text{ eV} + I^{2+}$ . Ces sections efficaces sont représentées en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  pour des énergies d'éjection égales,  $E_B = E_C = 15 \text{ eV}$ . L'angle  $\theta_C$  du deuxième électron éjecté (l'électron C) est fixé à  $0^\circ$ .

Nous représentons dans le cas (a) nos calculs avec 3C et dans (b) les sections efficaces sont calculées avec deux ondes coulombiennes (2C) normalisées avec le facteur de Gamow d'où la notation 2CG.

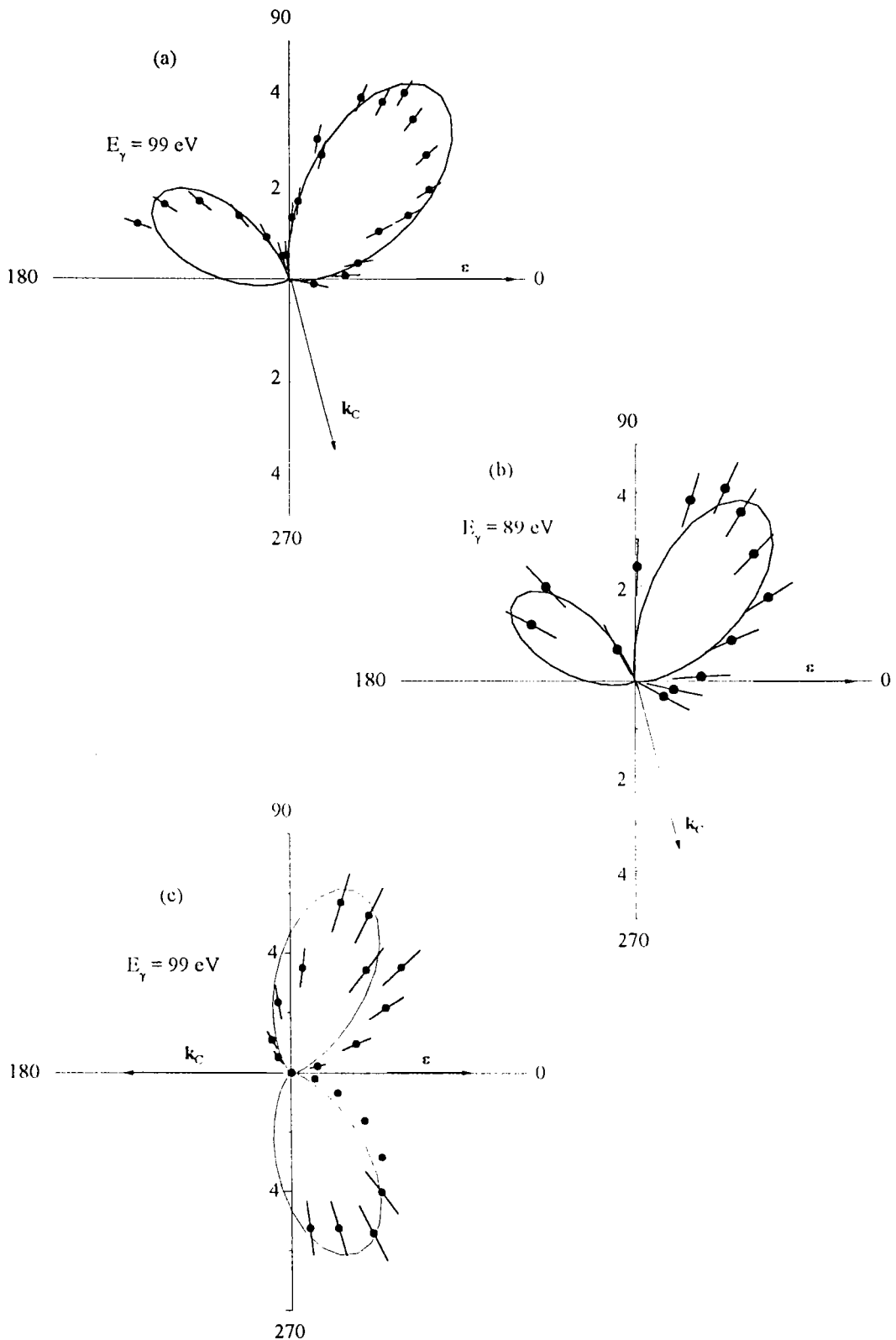


**Figure 4.23** SEDT en (u. a.) d'une réaction  $A(\gamma, 2e)A^{++}$ , pour différentes cibles ioniques  $A$  à deux électrons. Les électrons éjectés sont détectés avec la même énergie  $E = 15\text{eV}$ . Les modèles utilisés correspondent respectivement à : (a), 3C et (b), approximation 2CG (deux coulombiennes normalisées avec le facteur de Gamow).

Les figures 4.24 représentent, en échelle arbitraire, les diagrammes polaires des SEDT( $\gamma, 2e$ ) de He ( $1s^2$ ) en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$ . Les énergies  $E_\gamma$  des photons sont 89 et 99 eV. Le vecteur  $\epsilon // (z)$  indique la direction de polarisation du maximum du faisceau de photons. Les deux électrons éjectés sont détectés avec des énergies égales  $E_B = E_C = E_\gamma - 79$  eV. L'angle  $\theta_C$  de détection du deuxième électron éjecté est : (a) et (b),  $\theta_C = -76^\circ$  et (c),  $\theta_C = 180$ . Les points expérimentaux ont été mesurés par Schwarzkopf *et al* (1993 et 1995).

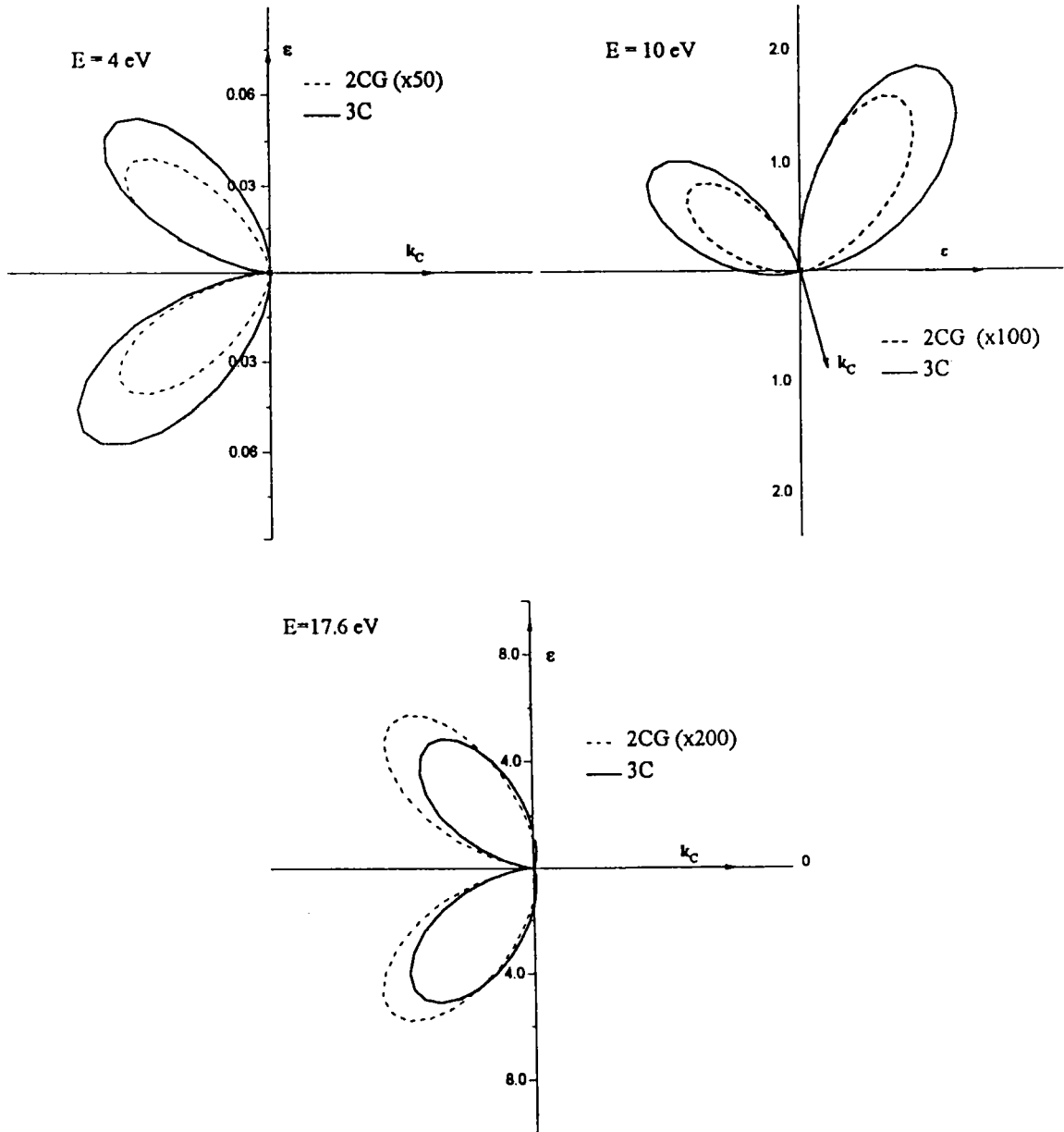
Nos résultats (3C + e), en comparaison avec l'expérience, montrent qu'à haute énergie d'incidence les processus de photo double ionisation en particulier et double ionisation en général, peuvent être décrits par des processus directs et en une seule étape (shake-off) et seuls sont importants les effets post-collisionnels entre les électrons éjectés. La prise en compte de ces effets est assurée par la description 3C.





**Figure 4.24** SEDT( $\gamma,2e$ ) de double ionisation d'hélium par des photons d'énergie  $E_\gamma = 99$  et  $89 \text{ eV}$ . Les électrons éjectés B et C sont détectés dans des cinématiques symétriques  $E_B = E_C = 10$  et  $5 \text{ eV}$ . L'électron C est éjecté dans des directions  $\theta_C$  : (a) et (b)  $\theta_C = -78^\circ$  et (c)  $\theta_C = 180^\circ$ . • mesures, en échelle arbitraire, de Schwarzkopf *et al* (1993 et 1995) et — notre calcul 3C.

Enfin, dans la figure 4.25 nous comparons les SEDT coplanaires de PDI de l'atome d'hélium, calculées à l'aide du modèle 3C et de l'approximation 2CG, en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$ . L'électron C est éjecté dans la direction  $\mathbf{k}_C$  et avec la même énergie que l'électron B ( $E_B = E_C = E$ ) : (a)  $E = 4$  eV,  $\theta_C = 0$  et  $\boldsymbol{\varepsilon} \perp \mathbf{k}_C$ ; (b)  $E = 10$  eV,  $\theta_C = -76^\circ$  et  $\boldsymbol{\varepsilon} \parallel \mathbf{z}$  et (c)  $E = 17.6$  eV et  $\mathbf{k}_C \parallel \boldsymbol{\varepsilon} \parallel \mathbf{z}$ . A première vue, les figures 4.23 et 4.25 montrent que les sections efficaces calculées à l'aide de l'approximation 2CG sont d'une part très faibles et d'autre part leurs formes diffèrent de celles obtenues avec 3C (figure 4.23).



**Figure 4.25** SEDT( $\gamma, 2e$ ) de PDI de l'atome He ( $1s^2 \ ^1S$ ) en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_B$  de l'un des deux électrons éjectés pour des énergies symétriques d'éjection  $E_B = E_C = E$  : (a),  $E=4$  eV ; (b)  $E=10$  eV et (c),  $E=17.6$  eV. Le vecteur  $\boldsymbol{\varepsilon}$  indique la direction de polarisation du photon et  $\mathbf{k}_C$  le vecteur d'ondes de l'électron C.

## 4.4 Conclusion

Avec le double objectif de présenter les contributions simultanées des corrélations relatives aux états du fondamental dans la voie d'entrée et du double continuum après la collision, nous avons fourni des résultats théoriques pour les processus  $(e,3e)$ ,  $(e,3-1e)$  et  $(\gamma,2e)$  des systèmes héliumoides en utilisant des états corrélés aussi bien dans la voie d'entrée que dans la voie de sortie : nous avons montré qu'il était possible d'en déduire une étude des effets structurels et des effets post-collisionnels en même temps. Il faut noter que cette étude est très difficile dans le cadre de la simple ionisation, notamment lorsque l'on cherche à prendre en compte toutes les corrélations *angulaires* dans la cible.

Nous avons également dans ce chapitre des représentations tridimensionnelle (3D), en fonction des énergies d'éjection qui font apparaître les domaines énergétiques pour lesquels les processus de double ionisation sont probables. Les positions des pics de détection en coïncidence pour la DI ont été également proposées en représentation 3D des SEDQ, en fonction des angles des électrons éjectés. On remarque que :

- la corrélation post-collisionnelle du double continuum des deux électrons éjectés joue un rôle important dans les processus d'ionisation. Elle a pour effet le plus spectaculaire d'empêcher les éjections des deux électrons, quand leurs énergies sont proches, dans le même quadrant.
- Pour une même cible donnée, les fonctions d'onde utilisées conduisent pratiquement au même résultat ( les formes des SED sont les mêmes pour différentes fonctions d'ondes d'une même cible : par exemple en utilisant des fonctions d'onde décrivant la cible d'hélium différentes de celles utilisées par Joulakian et Dal Cappello 1993, on obtient exactement les mêmes résultats que ces auteurs). Par contre des modifications importantes apparaissent lorsqu'on passe de H à  $\text{Li}^+$ .

Nos calculs conduisent à prédire une double symétrie des SEDQ de  $(e,3e)$  par rapport à la direction de transfert (non observée par les expérimentateurs). Cette situation est d'une part, la conséquence de la symétrie sphérique ( $ns^2$ ) de la cible, d'autre part, de nos hypothèses de travail pour la description de l'électron diffusé, hypothèses qui seraient à revoir pour des électrons diffusés plus lents.

# Conclusion générale

Les principaux éléments de la théorie des collisions sont appliqués à l'étude des structures électroniques des systèmes atomiques et ioniques à deux électrons. L'étude de l'hélium dans son état fondamental est particulièrement détaillée dans le chapitre 2, ainsi que ses ions isoélectroniques (avec un numéro atomique  $Z$  variant entre 1 et 15 pour limiter l'étude à des situations non-relativistes).

Ce travail implique une description correcte du mouvement de deux électrons au delà du seuil d'ionisation (double continuum), en présence d'un champ coulombien. Les techniques récemment développées - et plus particulièrement les méthodes proposées par Brauner *et al.* (1989) basées sur les résultats de Merkuriev-Redmond, ainsi que les corrections apportées par Mukhamadzanov *et al.* (1994) puis celles de Berakdar (1996a et b) ont ainsi été détaillées dans le second chapitre. Les calculs des sections efficaces triplement différentielles caractérisant une ionisation simple ou double de l'hélium par impact électronique sont respectivement développés dans les chapitres 3 et 4. Les études en double ionisation (chapitre 4) se réfèrent aux techniques expérimentales d'impact d'électrons rapides ou de photons suffisamment énergétiques, avec comparaison aux mesures existantes. Par ailleurs une étude générale mais moins exhaustive des systèmes ioniques à deux électrons est également proposée.

Notre étude théorique, basée sur les approches de Brauner *et al.* (1989) et de Berakdar *et al.* (1994 a et b), rend ainsi compte des principales propriétés des distributions angulaires expérimentales à des énergies élevées et intermédiaires. Elle conduit à une confrontation entre ces deux méthodes et nous a permis de dégager les caractéristiques essentielles de la dynamique de ces processus.

Dans le cas d'une simple ionisation, notre étude a plus particulièrement porté sur des cinématiques particulières de choc, dites asymétrique et symétrique :

- situation asymétrique caractérisée par un faible transfert d'impulsion et des trajectoires de particules incidente, diffusée et éjectée toutes coplanaires. Les effets de corrélation entre électrons dans la cible jouent un rôle dominant à haute énergie incidente (de 600 eV jusqu'à

10 keV, pour une cible d'hélium) . L'utilisation de fonctions suffisamment élaborées pour la description de l'état initial de la cible est nécessaire pour reproduire de façon satisfaisante ( Tavad & Najjari, 1996 ) les mesures expérimentales. Pour des énergies intermédiaires ( de 100 eV jusqu'à 600 eV ) on remarque surtout l'importance des effets des corrélations dues aux interactions post-collisionnelles entre les deux électrons émergents diffusé et éjecté.

- situation symétrique coplanaire dans laquelle l'électron diffusé et l'électron arraché à la cible ont la même énergie. Ce type de cinématique, caractérisée par de grands transferts d'impulsion, permet d'étudier les effets dynamiques liés au processus d'ionisation et de mieux comprendre les mécanismes associés.

Par rapport aux méthodes précédentes et notamment le traitement DS3C de Berakdar et Briggs (1994 a, b), nous avons pu montrer la très grande importance des contributions d'échange et de capture pour la description de la section efficace différentielle triple, en développant la méthodologie correspondante au calcul d'un terme initialement proposé par Schulz (1973). Ce résultat constitue l'une des contributions importantes et originales de mon travail.

Dans le cadre de cette cinématique et en prenant en compte toutes les contributions possibles au processus d'ionisation, nous avons pu calculer les contributions d'échange et de capture correspondantes et expliquer quantitativement les différences existantes entre les modèles antérieurs et les expériences de Gélébart *et al.* (1990) et Frost *et al.* (1990). Ces effets n'ont été prévus ni par les expériences de Pochat *et al.* (1983) ni par les calculs de Mota-Furtado et O'Mahony (1989) en seconde approximation de Born.

La comparaison entre la présente théorie et les mesures de Rösel *et al.* (1991) semble indiquer que l'introduction du terme de capture (assortie d'un mécanisme où les deux électrons de la cible sont finalement éjectés) engendre des effets qui sont également très importants à de très faibles énergies incidentes (de 25 eV jusqu'à 100 eV pour l'hélium). Ce terme a permis de décrire pour la première fois de façon satisfaisante la présence de l'ensemble des pics observés dans les mesures de sections efficaces différentielles triples et de reproduire leurs formes près du seuil d'ionisation telles qu'elles ont été prévues par la théorie de Wannier (1953). Le désaccord néanmoins présent dans les amplitudes respectives

des pics calculés serait une conséquence des effets de polarisation de la cible par le projectile, de distorsion du projectile par la cible et de distorsion des électrons diffusés et éjectés par l'ion résiduel (effet non présent dans l'atome d'hydrogène).

Les effets cités ci-dessus n'ont pas été pris en compte dans la modélisation. Il faut noter qu'à ces énergies très basses (en dessous de 100 eV) aucun des modèles antérieurs proposés n'avait pu reproduire le comportement des sections efficaces et en particulier le premier pic localisé au voisinage de  $45^\circ$ .

L'ensemble des spécifications requises pour une modélisation d'un processus  $(e,2e)$  peut être résumé dans le tableau C.

Enfin, dans le cadre de la double ionisation par impact d'électrons rapides  $(e,3e)$  ou de photons  $(\gamma,2e)$  nous avons pu souligner l'importance des effets de corrélations entre les deux électrons de plus basse énergie, généralement supposés émerger de la cible. L'accord entre la théorie (développée dans une situation limite  $K \rightarrow 0$  de transfert d'impulsion nul) et les expériences de double photoionisation nous a permis de conserver et d'étendre à cette situation la méthodologie développée pour les chocs  $(e,3e)$ .

Malgré la relative simplicité du problème, due au nombre très réduit des électrons dans l'atome d'hélium, à la description quasiment parfaite de sa structure électronique (dans son état initial) ainsi qu'au contrôle de toutes les interactions mises en jeu au cours du choc, la modélisation des différents mécanismes reste un problème complexe. Le nombre important de travaux déjà réalisés dans ce domaine n'a pas fourni de réponse entièrement satisfaisante à la confrontation théorie-expérience. Nous pensons cependant avoir apporté une contribution originale partielle aux problèmes de basse énergie. Il serait souhaitable, notamment dans le cas des collisions  $(e,2e)$ , de développer des calculs ultérieurs (à l'aide d'une décomposition en ondes partielles par exemple) prenant en compte l'ensemble des effets précédemment envisagés.

## Références

- Abramowitz M and Stegun I A, *Handbook of Mathematical Functions*, (New York : Dover, 1972).
- Altick P L, *Phys. Rev. A* **21**, 1381-6, (1983a).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, 3543-55, (1983b).
- Alt E O and Mukhamedzhanov A M, *Phys. Rev. A* **47**, 2004-22, (1993)
- Amaldi U, Egidi A, Marconero R and Pizella G, *Rev. Sci. Instrum.* **40**, 1001-4, (1969).
- Beaty E C, Hesselbacher K H, Jong S P and Moore J H, *Phys. Rev. A* **17**, 1592-9, (1978).
- Berakdar J, *Phys. Rev. A* **53**, 2314-27 et **54**, 1480-86, (1996).
- Berakdar J and Briggs J S, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 4271-80 et *Phys. Rev. Lett.* **24**, 3799-802, (1994).
- Bethe H A, *Ann. Phys. Lpz.* **5**, 325-400, (1930).
- Bethe H A and Salpeter E E, *Quantum Mechanics of One and Two Electron Systems*, (Springerverlag, 1957).
- Biswas R and Sinha C, *Phys. Rev. A* **50**, 354-9, (1994).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 1311-20, (1995).
- Bohr N, *Phil. Mag.* **25**, 10, (1913) et **30**, 581, (1915).
- Bonham R A and Kohl D A, *J. Chem. Phys.* **45**, 2471-3, (1966).
- Born M, *Z. Phys.* **37**, 863, (1926).
- Botero J and Macek J H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L405-11, (1991).
- , *Phys. Rev. Lett.* **68**, 576, (1992).
- Bransden B H, Smith J J and Winters K H, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **11**, 3095-114, (1978).
- Bransden B H, " *Atomic Collision Theory* ", 304, ( The Benjamin Cummings Publ. Comp. 1983).
- Bransden B H, Noble C J and Hewitt R N, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 2487-99, (1993).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12**, 1267, (1979).
- Brauner M, Briggs J S and Klar H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265-87 (1989).
- Bray I and Fursa D V, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L435-41, (1995).
- Bray I, (communication privée : 1997), voir Röder *et al* (1996).
- Byron F W Jr and Joachain C J, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 1139-42, (1966).
- , *Phys. Rev.* **164**, 1-9, (1967).
- , *Phys. Rev. A* **8**, 1267, (1973).
- , *Phys. Rep.* **34**, 233-324, (1977).
- Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *J. Phys. B: At Mol. Phys.* **15**, L293-6, (1982).
- , *J. Phys. B: At Mol. Phys.* **16**, L769-74, (1983).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18**, 3203-18, (1985).

- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **19**, 1201-10, (1986).
- Clementi E and Roetti C, *At. Data Tables* **14**, 177, (1974).
- Dal Cappello C and Le Rouzo H, *Phys. Rev. A* **43**, 1395-404, (1991).
- Dal Cappello C, Langlois J, Dal Cappello M C, Joulakian B, Lahmam-Bennani A, Duguet A and Tweed R, *Z. Phys. D* **23**, 389-96, (1992).
- Dal Cappello C, Popov Yu V, Stefani G, Kuzmina N M and Hda H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 1549-60, (1994).
- Das A K and Sil N C, *Phys. Rev. A* **23**, 1662, (1981).
- Daoud, *Thèse de troisième cycle*, Paris, (1985).
- Dawber G, Avaldi L, McConkey A G, Rojas H, McDonald M A, King G C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L271-7, (1995).
- Duguet A, *Thèse d'Université*, (Paris, 1981).
- Duguet A, Cherid M, Lahmam-Bennani A, Franz A and Klar H, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 6145-56, (1987).
- Dupré C, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Mota-Furtado F, O'Mahony P F and Dal Cappello C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 259-76, (1992).
- Ehrhardt H *Comments At. Mol. Phys.* **13**, 115-25, (1983).
- Ehrhardt H, Fischer M, Jung K, Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1807-10, (1982).
- Ehrhardt H, Fischer M and Jung K, *Z. Phys. A : Atoms and Nuclei* **304**, 119-24, (1982).
- Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, Schulz M, Tekaas T and Willmann K, *Z. Phys.* **244**, 254-67, (1971).
- Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, Schulz M and Willmann K, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5**, 2107-16, (1972a).
- Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, Schubert E and Willmann K, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7**, 69-78, (1974).
- Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K and Willmann K, *Case Studies in Atomic Collision Physics*, **2**, 159-208, (Amsterdam : North-Holland, 1972b).
- Ehrhardt H, Jung K and Schubert E, " *Low-Energy Electron Impact Ionization With Completely Determined Kinematics*", *Coherence and Correlation in Atomic Collisions*, Ed. H Kleinpoppen & J F Williams, pp : 159-208, (Amsterdam : North-Holland, 1980).
- Ehrhardt H, Schulz M, Tekaas T, Willmann K, *Phys. Rev. Lett.* **22**, 89-92, (1969).
- Fabre De La Ripelle M, *Introduction des Corrélations à Deux Corps dans les Systèmes Atomiques et Nucléaires*, G R n° 783 du CNRS, 8ème Réunion, Recueil des exposés pp : 98-103, (1992).
- Forrey R C, Sadeghpour H R, Baker J D, Morgan J D, Dalgarno A, *Phys. Rev. A* **51**, 2112-6, (1995).
- Fink M and Bonham R A, *Phys. Rev.* **187**, 114, (1969).
- Franz A and Altick P L, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 1577-90, (1992).



- Friedrich H, " *Theoretical Atomic Physics* " (Berlin : Springer, 1991).
- Frost L, Freienstein P and Wagner W, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, L715-20, (1990).
- Garibotti G and Miraglia J E, *Phys. Rev. A* **21**, 572-80, (1980).
- Gélébart F and Tweed R J, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **23**, L641-7, (1990).
- Geltman S, *Phys. Rev.* **102**, 171-9, (1956).
- Geltman S and Hidalgo M B, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7**, 831-9, (1974).
- Geltman S, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **7**, 1994-2002, (1974).
- Glauber R J, " *Lectures in Theoretical Physics* ", Vol.1, 314-414, (New York : Interscience, 1959).
- Godunov A L, Kunikeev Sh D, Mileev V N and Senashenko V S, *Proc. 13th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions* (Berlin) ed Eichler J, Abstracts p : 380, (Amsterdam : North-Holland, 1983 ).
- Goldberger M L and Watson K M, " *Collision Theory* " ( J Wiley & Sons, New York, 1967).
- Gradshteyn I S and Ryzhik I M, *Table of Integrals, Series and Products* , Academic Press, (New York,1980).
- Gupta S and Srivastava M K, *Phys. Rev. A* **52**, 2083-7, (1995).
- Hafid H, *Thèse d'Université de Metz* , (1994).
- Hart J F and Herzberg G, *Phys. Rev.* **106**, 79-82, (1957)
- Hda H, Dal Cappello C and Langlois J, *Z. Phys. D* **29**, 25, (1994)
- Hood S T, McCarthy I E, Teubner P J O, Weigold E, *Phys. Rev. A* **8**, 2494-500, (1973).
- Hughes A L and McMillan J H, *Phys. Rev.* **39**, 585, (1932).
- Hylleraas E A, *Z. Phys.* **54**, 347-366, (1929).
- , *Z. Phys.* **83**, 739-63, (1933).
- Inokuti M, Itikawa Y and Turner J E, *Rev. Mod. Phys.* **50**, 23-35, (1978).
- Inokuti M, *Rev. Mod. Phys.* **43**, 297, (1971).
- Jia X, Shi Q, Chen Z, Chen J and Xu K, *Phys. Rev. A* **55**, 1971-5, (1997)
- Joachain C J, " *Quantum Collision Theory* " , (Amsterdam : North-Holland, 1975).
- Jones S, Madison D H and Konovalov D A, *Phys. Rev. A* **55**, 444-9, (1997).
- Joulakian B and Dal Cappello C, *Phys. Rev. A* **47**, 3788-95 (1993).
- Joulakian B, Dal Cappello C and Brauner M, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 2863-71, (1992).
- Jung K, Müller-Fiedler R, Schlemmer P, Ehrhardt H and Klar H, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18**, 2955, (1985). (cité dans McDanniel " *Atomic Collision*" pp : 411 et 444 : 375-448, 1990)
- Kazansky A K and Ostrovsky V N, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L333-9 et 1453-62, (1995).
- Kim Y K, *Phys. Rev. A* **6**, 666-70, (1972).
- Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Duguet A and Rouault M, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **16**, 2219-30, (1983).

- Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Dal Cappello C and Duguet A, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **17**, 3159-72, (1984).
- Lahmam-Bennani A, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 2401-42, (1991).
- Lahmam-Bennani A, Duguet A, Dupré C and Dal Cappello C, *J. Elec. Spec. Rel. Phen.* **58**, 17-22, (1992).
- Lahmam-Bennani A, Dupré C and Duguet A, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1582-5, (1989).
- Lahmam-Bennani A, Ehrhardt H, Dupré C and Duguet A, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 3645-53, (1991).
- Langer R E, *Phys. Rev.* **51**, 669, (1937).
- Langlois J and Tweed R J, 23/24 Nov. (e,2e) *Collisions and Related Problems*, 228-32, (Kaiserslautern, 1989).
- Langmuir J J and Jones T, *Phys. Rev.* **31**, 357, (1928).
- Le Rouzo H and Dal Cappello C, *Phys. Rev. A* **43**, 318-29, (1991).
- Lewis R R Jr, *Phys. Rev.* **102**, 537-43, (1956).
- Lippmann B A and Schwinger J, *Phys. Rev.* **79**, 469, (1950).
- Lohmann B, McCarthy I E, Stelbovic A T and Weigold E, *Phys. Rev. A* **30**, 758, (1984).
- Madison D H, Calhoun R Vand Shelton W N, *Phys. Rev. A* **16**, 552-62, (1977).
- Madison D H, Jones S, Franz A and Altick P L, (e,2e) & related processes, Whelan C T et al (eds.), 171-84, (Netherlands, Kluwer Academic Publishers, 1993).
- Maulbetsch F, Pont M, Briggs J S and Shakeshaft R, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L341-7, (1995).
- Massey H S W and Mohr C B O, *Proc. Roy. Soc. A* **140**, 613, (1933).
- McCarthy I E and Weigold E, *Phys. Rep.* **27C**, 275-371, (1976).
- McGuire J H, Hidalgo M B, Doolen G D and Nuttall J, *Phys. Rev. A* **7**, 973, (1973).
- Messiah A, *Mécanique Quantique*, tome **2**, ed. Dunod, (Paris, 1964).
- Merkuriev S P, *Theor. Math. Phys.* **32**, 680, (1977).
- Mota-Furtado F and O'Mahony P F, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **22**, 3925, (1989).
- Mott N F and Massey H S W, " *The Theory of Atomic Collisions* " ( London : Oxford University Press, 1965).
- Murray A J and Read F H, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2912-4, (1992).
- , *Phys. Rev. A* **47**, 3724 et *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, L359, (1993).
- Mukhamedzhanov A M and Lieber M, *Phys. Rev. A* **54**, 3078-85, (1996).
- Nagy P, Skutlitz A and Schmidt V, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **13**, 1249, (1980).
- Nesbet R K and Watson R E, *Phys. Rev.* **110**, 1073-6, (1958).
- Nordsieck A, *Phys. Rev.* **93**, 785-7, (1954).
- Nicolas M, Tweed R J and Robaux O, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 791-811, (1996).
- Peterkop R K, *Izv Akad Nauk Latv SSR* N°9, **79**, (1960).
- , *Proc. Phys. Soc.* **77**, 1220-2, (1961).
- , *Opt. Spectr.* **13**, 87-9, (1962).

- , " *Theory of Ionization of Atoms by the Electron impact* ", (Colorado Associated University Press, Boulder, 1977).
- Phillips D H and McDowell M R C, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6**, L165-8, (1973).
- Pluvinage P, *Ann. Phys., Paris* **5**, 145, (1950) et *J. Phys. Radium* **12**, 789, (1951).
- Pochat A, Doritch M and Presse J, *Phys. Lett.* **90A**, 354-7, (1982).
- Pochat A, Tweed R J, Peresse J, Joachain C J, Piraux B and Byron F W Jr, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, L775-9, (1983).
- Pont M and Shakeshaft R, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, L571-7, (1995).
- Pont M, Shakeshaft R, Maulbetsch F and Briggs J S, *Phys. Rev. A* **53**, 3671-4, (1996).
- Popov Yu V, Dal Cappello C, Joulakian B and Kurmina N M, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 1599-612, (1994).
- Hafid H, *Thèse d'Université*, (Metz, 1994).
- Ray H and Roy A C, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21**, 3243-51, (1988).
- Röder J, Rasch J, Jung K, Whelan C T, Ehrhardt H, Allan R J and Walters H R J, *Phys. Rev. A* **53**, 225-33, (1996).
- Röder J, Ehrhardt H, Bray I, Fursa D V and McCarthy I E, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29**, L67-73, (1996).
- Rösel T, Dupré C, Röder J, Jung K, Lahmam-Bennani A and Ehrhardt H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 3059-68, (1991).
- Rösel T, Schlemmer P, Röder J, Frost L, Jung K and Ehrhardt H, *Z. Phys. D* **23**, 359-63, (1992).
- Rosenberg L, *Phys. Rev. A* **8**, 1833-43 (1973).
- Roy A, Roy K J and Sil N C, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13**, 3443-50, (1980).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15**, 1289-92, (1982).
- Rudberg E, *Proc. Roy. Soc. A* **129**, 628, (1930).
- Rudge M R H, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 564-90, (1968).
- Rudge M R H and Seaton M J, *Proc. Phys. Soc.* **83**, 680, (1964).
- , *Proc. Roy. Soc. A* **283**, 262-90, (1965).
- Rudge M R H and Schwartz S B, *Proc. Phys. Soc.* **88**, 563, (1966).
- Salin A, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5**, 979-86, (1972).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6**, L34-6, (1973).
- Schlemmer P, Srivastava M K, Rösel T and Ehrhardt H, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24**, 2719-36, (1991).
- Schubert E, Schuck A, Jung K and Geltman S, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12**, 967-78, (1979).
- Schulz M, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6**, 2580-99, (1973).
- Schwarzkopf O, Krässig B, Elmiger J and Schmidt V, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3008-11, (1993).
- Schwarzkopf O and Schmidt V, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **28**, 2847-62, (1995).
- Schweitzer P and Klapisch M, *24<sup>th</sup> ICPEAC, Gelds et al (ed.)*, Abstracts p : 380, (1987)
- Sharma S and Srivastava M K, *Phys. Rev. A* **35**, 1939-31, (1987).

- Shah M B, Elliot D S, McCallion P and Gilbody H B, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **21**, 2751, (1988).
- Sinha C, Roy K and Sil N C, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 2545-52, (1987).
- Smith J J, Winters K H and Bransden B H, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12**, 1723-31, (1979).
- Srivastava M K and Bhaduri R H, *Am. J. Phys.* **45**, 462-4, (1977).
- Srivastava M K, Bhaduri R H and Dutta A K, *Phys. Rev. A* **14**, 1961-4, (1976).
- Srivastava M K and Sharma S, *Phys. Rev. A* **37**, 628-31, (1988).
- Tiwary S N, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **15**, L323-6, (1982).
- Tavard C, *Thèse de Doctorat*, (Orsay : 1966) et *Cahiers Phys.* **20**, 397, (1965)
- Tavard C and Najjari B, *Int. J. Quantum Chem.* **60**, 657-65, (1996).
- Tong M and Altick P L, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 741-505, (1992).
- Tweed R J, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5**, 810-19 ; 820-4, (1972).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6**, 398-405, (1973a).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **13**, 4467-79, (1980).
- , *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **6**, 259-69 ; 270-85 ; L378-80 (1973b).
- Veldre V Ya, Damburg R Ya, Peterkop R K, *Atomic Collisions* (London : Butterworths, 1966).
- Vucic S, Potvliege R M, Joachain C J, 23/24 Nov. (e,2e) *Collisions and Related Problems*, 26-37, (Kaiserslautern , 1989).
- Wannier G H, *Phys. Rev.* **90**, 817-25, (1953).
- Weigold E, Hood S T and Teubner P J O, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 475-8, (1973).
- Weigold E and McCarthy I E, *Adv. At. Mol. Phys.* **14**, 127-79, (1973).
- , " (e,2e) Collision " dans " *Advances in Atomic and Molecular Physics* " vol. **14**, 127-79, (Academic Press, New York, 1978).
- Wetzel W W, *Phys. Rev.* **44**, 25-30, (1933).
- Whelan C T, Allan R J, Walters H R J and Zhang X, "(e,2e) & related processes" *Whelan et al (ed.)*, 1-32, (Academic Publ. Netherlands, 1993) et Whelan C T, Allan R J and Walters H R J, *J. de Physique IV*, 39-49, (1993).
- Yu D J, Rachafi S, Jureta J and Defrance P, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 4593-600, (1992).
- Zhang X, Whelan C T and Walters H R J, *Z. Phys. D* **23**, 301-308, (1992).

## Annexe A

### A1 Opérateur d'évolution

Considérons un état  $\psi(t)$  dépendant du temps, à un faible accroissement  $\tau$  de l'instant  $t$  correspond l'état  $\psi(t+\tau)$ . Ce dernier, développé en série de Taylor, permet d'écrire

$$\psi(t+\tau) = \sum_n \frac{1}{n!} (\tau)^n \psi^{(n)}(t) = U\tau \psi(t). \quad (1)$$

L'opérateur  $U\tau$  s'écrit alors

$$U\tau = \sum_n \frac{1}{n!} (\tau)^n \left( \frac{d}{dt} \right)^n = \exp\left(\tau \frac{d}{dt}\right). \quad (2)$$

Par identification dans l'équation de Schrödinger

$$\frac{d}{dt} \psi(t) = -iH \psi(t) \quad (3)$$

et si  $H$  est indépendant du temps, l'opérateur d'évolution se réduit à

$$U\tau = \exp(-i \tau H). \quad (4)$$

### A2 Relation entre les matrices S et T

Dans le chapitre 1 nous avons utilisé la relation

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{e^{i(E_b - E_a)t}}{E_b - (E_a + i\eta)} = 2i\pi \delta(E_a - E_b), \quad (5)$$

pour obtenir l'équation (1.87) liant les matrices S et T

$$\langle \chi_b | S | \chi_a \rangle = \langle b | S | a \rangle = \delta_{ba} - 2i\pi \delta(E_a - E_b) \langle b | \mathcal{T} | a \rangle. \quad (6)$$

L'expression (5) découle du théorème de Cauchy et que pour toute fonction  $f$  ne présentant pas de singularité à l'origine, nous pouvons montrer que la relation suivante

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{ixt}}{x - i\eta} f(x) = 2\pi i f(0) \quad (6)$$

est vérifiée, d'où le résultat (5).

### A3 Calcul de l'intégrale $I$ (chapitre 1 équation 1.98)

Un développement de  $E_q$  au voisinage de  $\mathbf{p}$  permet d'écrire

$$E_q \approx E_p + (\mathbf{q} - \mathbf{p}) \nabla_p E_p \quad (7)$$

$\nabla_{\mathbf{p}} E_{\mathbf{p}} = \mathbf{v}$  définit la vitesse de groupe. A l'aide des égalités

$$E_a = E_{a,\mathbf{q}^1} + E_{a,\mathbf{q}^2} \quad (8)$$

$$E_{a'} = E_{a,\mathbf{q}'^1} + E_{a,\mathbf{q}'^2}$$

et à l'aide de la relation (7)

$$E_{a'} - E_a = (\mathbf{q}'^1 - \mathbf{p}_1 - \mathbf{q}_1 + \mathbf{p}_1) \mathbf{v}_1 + (\mathbf{q}'^2 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}_2 + \mathbf{p}_2) \mathbf{v}_2 \quad (9)$$

si on pose  $\rho_i = \mathbf{q}_i - \mathbf{p}_i$  et  $\rho'_i = \mathbf{q}'^i - \mathbf{p}_i$  ( $i = 1, 2$ ), l'expression (9) se réduit à :

$$E_{a'} - E_a = (\rho'_1 - \rho_1) (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) + (\rho'_1 + \rho'_2 - \rho_1 - \rho_2) \mathbf{v}_2. \quad (10)$$

$$\begin{aligned} I &= \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' A(\mathbf{q}) A(\mathbf{q}') \delta(\mathbf{P}_{a'} - \mathbf{P}_a) \delta(E_{a'} - E_a) \\ &= (2\pi)^{-1} \int d\mathbf{q} d\mathbf{q}' A(\mathbf{q}) A(\mathbf{q}') \delta(\mathbf{P}_{a'} - \mathbf{P}_a) \int dt \exp\{i(E_{a'} - E_a)t\} \end{aligned} \quad (11)$$

A l'aide de la relation (9) et de la condition  $\delta(\mathbf{P}_{a'} - \mathbf{P}_a)$  soit  $\delta(\rho'_1 + \rho'_2 - \rho_1 - \rho_2)$ , l'intégrale  $I$  se réduit à

$$\begin{aligned} I &= (2\pi)^{-1} \int dt \int d\rho_1 a_P(\rho_1) \exp\{-it\rho_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\} \\ &\quad \times \int d\rho'_1 a^*_P(\rho'_1) \exp\{it\rho'_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\} \\ &\quad \times \int d\rho_2 a_C(\rho_1) a^*_C(\rho_2 + \rho_1 - \rho'_1) \\ &\approx (2\pi)^{-1} \int dt \int d\rho_1 a_P(\rho_1) \exp\{it\rho_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\} \\ &\quad \times \int d\rho'_1 a^*_P(\rho'_1) \exp\{it\rho'_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)\} \\ &\quad \times \int d\rho_2 a_C(\rho_1) a^*_C(\rho_2) \end{aligned} \quad (12)$$

A l'aide des relations (1.30) et (1.33) et si l'on définit par  $F$  le flux du faisceau projectile, supposé parallèle à l'axe  $z$ ,

$$F = \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\| (2\pi)^{-3} \int dt |G_P(t(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2))|^2, \quad (13)$$

l'intégrale (12) se réduit à la relation :

$$I = (2\pi)^2 \|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2\|^{-1} F. \quad (14)$$

## Annexe B

### 1 Calcul de l'élément de matrice du hamiltonien pour des systèmes à deux électrons

Dans cette partie nous allons voir l'action de l'opérateur  $\Delta = \sum_{xyz} (\partial/\partial x)^2$  sur les fonctions de type :

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) \exp(\gamma r_{12}).$$

Analysant à priori l'action de  $(\frac{\partial}{\partial x_1})^2$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} [\exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) \exp(\gamma r_{12})] &= [\frac{\partial}{\partial x_1} (-\alpha r_1 + \gamma r_{12})] \exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) \exp(\gamma r_{12}) \\ &= (-\alpha x_1 r_1^{-1} + \gamma x_{12} r_{12}^{-1}) \exp(-\alpha r_1 - \beta r_2) \exp(\gamma r_{12}). \end{aligned} \quad (1)$$

L'action une seconde fois de l'opérateur  $\frac{\partial}{\partial x_1}$  sur l'expression ci-dessus, on trouve

$$\begin{aligned} (\frac{\partial}{\partial x_1})^2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= [\frac{\partial}{\partial x_1} (-\alpha x_1 r_1^{-1} + \gamma x_{12} r_{12}^{-1}) + (-\alpha x_1 r_1^{-1} + \gamma x_{12} r_{12}^{-1})^2] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= [(-\alpha x_1 r_1^{-1} + \gamma x_{12} r_{12}^{-1})^2 - \alpha r_1^{-1} + \gamma r_{12}^{-1} + \alpha x_1^2 r_1^{-3} - \gamma x_{12}^2 r_{12}^{-3}] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (2)$$

On peut procéder de la même façon pour calculer l'action de  $(\frac{\partial}{\partial y_1})^2$  et de  $(\frac{\partial}{\partial z_1})^2$  sur  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , et par sommation des termes on obtient

$$\Delta_1 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [\alpha^2 + \gamma^2 - 2\alpha r_1^{-1} + 2\gamma r_{12}^{-1} - 2\alpha \gamma (r_1^2 - \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) r_1^{-1} r_{12}^{-1}] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (3)$$

De même pour  $\Delta_2$  on a :

$$\Delta_2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [\beta^2 + \gamma^2 - 2\beta r_2^{-1} + 2\gamma r_{12}^{-1} - 2\beta \gamma (r_2^2 - \mathbf{r}_2 \mathbf{r}_2) r_2^{-1} r_{12}^{-1}] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (3')$$

Enfin, l'expression explicite de l'opérateur énergie cinétique  $T = -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2)$ , en fonction des paramètres  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  et des coordonnées  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  et  $\mathbf{r}_{12}$  peut se mettre sous la forme

$$T = [-\frac{1}{2} (\alpha^2 + \beta^2) - \gamma^2 + \alpha r_1^{-1} + \beta r_2^{-1} - 2\gamma r_{12}^{-1} + \alpha \gamma (r_1^2 - \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) r_1^{-1} r_{12}^{-1} + \beta \gamma (r_2^2 - \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) r_2^{-1} r_{12}^{-1}]. \quad (4)$$

A l'aide de la relation  $\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 = \frac{1}{2} (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2)$ , l'expression ci-dessus se réduit à

$$\begin{aligned} T &= \{-\frac{1}{2} (\alpha^2 + \beta^2) - \gamma^2 + \alpha r_1^{-1} + \beta r_2^{-1} - 2\gamma r_{12}^{-1} + \frac{1}{2} \gamma [\alpha (r_1^2 - r_2^2 + r_{12}^2) r_1^{-1} r_{12}^{-1} + \\ &\quad + \gamma \beta (r_2^2 - r_1^2 + r_{12}^2) r_2^{-1} r_{12}^{-1}]\}. \end{aligned} \quad (4')$$

Par conséquent le hamiltonien  $H = T + V$  peut s'écrire dans ce cas (action sur  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ) sous une forme compacte

$$H = \sum_{lm} a_{lm} r_1^l r_2^m r_{12}^n, \quad (l, m \text{ et } n = -1, 0, 1 \text{ ou } 2) \quad (5)$$

Les constantes  $a_{lm}$  sont définies par identification terme à terme. Cette expression (équation 5) permet de calculer les différents termes de l'élément de matrice

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{lmn} a_{lmn} I_{lmn}(a,b,c), \quad (5')$$

où l'intégrale  $I$  est donnée par :

$$\begin{aligned} I_{lmn}(a,b,c) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 r_1^l r_2^m r_{12}^n \exp(-a r_1 - b r_2) \exp(c r_{12}) \\ &= (4\pi)^2 (-)^{l+m} \left(\frac{\partial}{\partial a}\right)^{l+1} \left(\frac{\partial}{\partial b}\right)^{m+1} \left(\frac{\partial}{\partial c}\right)^{n+1} [(a+b)(a-c)(b-c)]^{-1}. \end{aligned} \quad (6)$$

En ce qui concerne l'élément de matrice relatif à  $\cos \theta_{12} = (r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2)/(2r_1 r_2)$ ,

$$\begin{aligned} \langle \psi | \cos \theta_{12} | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 (r_1 r_2^{-1} + r_2 r_1^{-1} - r_1^{-1} r_2^{-1} r_{12}^2) \exp(-a r_1 - b r_2) \exp(c r_{12}) \\ &= \frac{1}{2} (I_{1,-1,0} + I_{1,1,0} - I_{-1,-1,2}). \end{aligned} \quad (7)$$

## 2 Potentiel d'interaction entre l'électron incident et la cible

Pour des raisons de simplification, nous supposons ici que la cible est décrite par une fonction Hartree-Fock (Clementi et Roetti 1974)

$$\varphi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_0(r_1) \phi_0(r_2), \quad (8)$$

le potentiel statique d'interaction peut s'écrire

$$\langle \varphi_i | -Z r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1} | \varphi_i \rangle = -Z r_0^{-1} + 2 \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | r_{01}^{-1} | \phi_0 \rangle. \quad (9)$$

$$\langle \phi_0 | r_{01}^{-1} | \phi_0 \rangle = N \sum_l A_l \int d\mathbf{r}_1 r_{01}^{-1} \exp(-a_l r_1). \quad (10)$$

Les quantités  $N$ ,  $A_l$  et  $a_l$  sont données (par exemple dans Clementi et Roetti 1974), et vérifient la condition de normalisation  $N^{-1} = 8\pi \sum_l A_l a_l^{-3}$ . A l'aide des transformées de Bethe :

$$\exp(-a_l r_1) = (2\pi^2)^{-1} (-\partial/\partial a_l) \int d\mathbf{p} \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1) [p^2 + a_l^2]^{-1}; \quad (10')$$

et

$$r_{01}^{-1} = (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{q} q^{-2} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_{01}),$$

respectivement dans l'intégrale  $I_l = \int d\mathbf{r}_1 r_{01}^{-1} \exp(-a_l r_1)$  et celle-ci peut être réduite à

$$(2\pi)^{-3} I_l = (2\pi^2)^{-2} (-\partial/\partial a_l) \int d\mathbf{q} q^{-2} [q^2 + a_l^2]^{-1} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0), \quad (11)$$

la relation

$$q^{-2} [q^2 + a_l^2]^{-1} = a_l^{-2} \{q^{-2} - [q^2 + a_l^2]^{-1}\}$$

permet d'écrire (11) sous la forme :

$$\langle \phi_0 | r_{01}^{-1} | \phi_0 \rangle = N (2\pi^2)^{-2} \sum_l A_l (2a_l^{-3} - a_l^{-2} \partial/\partial a_l) \int d\mathbf{q} \{q^{-2} - [q^2 + a_l^2]^{-1}\} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0),$$

$$= r_0^{-1} - 8\pi N \sum_l A_l a_l^{-3} [r_0^{-1} \exp(-a_l r_0) + 0.5 a_l \exp(-a_l r_0)] \quad (12)$$

donc le potentiel moyen s'écrit

$$\langle \varphi_i | -Z r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1} | \varphi_i \rangle = (2-Z) r_0^{-1} - 8\pi N \sum_l A_l a_l^{-3} [2r_0^{-1} + a_l] \exp(-a_l r_0). \quad (13)$$

L'expression ci-dessus montre que  $V_i$  (équation 3.7b) s'annule à l'infini plus rapidement que  $r_0^{-2}$  lorsqu'on substitue, pour toutes les cibles à deux électrons (atome ou ions),  $Z$  par 2.



## Annexe C

### C1 Calcul de l'intégrale $I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q})$

Dans le calcul des différents éléments de matrice de transition, on a souvent rencontré des intégrales de la forme :

$$I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-a r_1 - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2) \exp(c r_{12}). \quad (1)$$

A l'aide de la transformée de Bethe

$$r^n \exp(-a r) = \frac{1}{2\pi^2} \left( -\frac{\partial}{\partial a} \right)^{n+1} \int d\mathbf{s} \exp(i\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}) [s^2 + a^2]^{-1}, \quad (2)$$

et l'égalité

$$d\mathbf{r}_{12} \wedge d\mathbf{r}_2 = d\mathbf{r}_1 \wedge d\mathbf{r}_2, \quad \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

dans l'expression (1), celle-ci devient

$$I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) = \frac{1}{2\pi^2} \left( -\frac{\partial}{\partial a} \right) \int d\mathbf{r}_{12} d\mathbf{r}_2 ds [s^2 + a^2]^{-1} \exp\{-i(\mathbf{p} - \mathbf{s})\mathbf{r}_{12}\} \times \exp\{-b r_2 - i(\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{s})\mathbf{r}_2\} \exp(c r_{12}). \quad (3)$$

Il est également très facile, à l'aide de (2), de remarquer que

$$\int d\mathbf{r}_2 \exp\{-b r_2 - i(\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{s})\mathbf{r}_2\} = 4\pi \left( -\frac{\partial}{\partial b} \right) [|\mathbf{q} + \mathbf{p} - \mathbf{s}|^2 + b^2]^{-1},$$

ce résultat porté dans l'expression (3), permet d'écrire cette dernière sous la forme :

$$I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) = 2\pi^{-1} \left( \frac{\partial^2}{\partial a \partial b} \right) \int d\mathbf{r}_{12} ds \exp(c r_{12}) \exp\{-i(\mathbf{p} - \mathbf{s})\mathbf{r}_{12}\} [(|\mathbf{s} - \Lambda|^2 + b^2)(s^2 + a^2)]^{-1}, \quad (4)$$

à l'aide de la transformée de Feynman

$$[(|\mathbf{s} - \Lambda|^2 + b^2)(s^2 + a^2)]^{-1} = \int_0^1 dx [|\mathbf{s} - x\Lambda|^2 + \mu^2]^{-2} \quad (5)$$

où

$$\mu^2 = x(1-x) \Lambda^2 + (1-x) a^2 + x b^2, \quad (6)$$

puis à l'aide de la transformée (2)

$$\int d\mathbf{s} \exp(i\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_{12}) [|\mathbf{s} - x\Lambda|^2 + \mu^2]^{-2} = \pi^2 \mu^{-1} \exp\{-\mu r_{12} + ix\Lambda \cdot \mathbf{r}_{12}\}, \quad (7)$$

finalemt l'expression (4) devient

$$I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) = (4\pi)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial a \partial b} \right) \int_0^1 dx (\mu - c) [|\mathbf{p} - x\Lambda|^2 + (\mu - c)^2]^{-2}. \quad (8a)$$

Il faut noter que si  $c = 0$ , l'expression (8a) se réduit à

$$\begin{aligned}
I(a,b,0,\mathbf{p},\mathbf{q}) &= (4\pi)^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial a \partial b} \right) \int_0^1 dx \mu [|\mathbf{p} - x\Lambda|^2 + \mu^2]^{-2} \\
&= 8\pi^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial a \partial b} \right) [(q^2 + b^2)(p^2 + a^2)]^{-1}.
\end{aligned} \tag{8b}$$

Si  $c \neq 0$  et avec la condition  $Re(\mu - c) > 0$  (vérifiée pour toute valeur de  $c < \inf(a,b)$ ), l'expression (8a) peut être aussi mise sous la forme d'une troisième dérivée supplémentaire par rapport à  $c$ , c'est-à-dire :

$$I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) = 8\pi^2 \left( \frac{\partial^3}{\partial a \partial b \partial c} \right) \int_0^1 dx \mu^{-1} [|\mathbf{p} - x\Lambda|^2 + (\mu - c)^2]^{-1}. \tag{8c}$$

En utilisant dans la suite le résultat de Lewis (1957) pour pouvoir l'écrire (8c) sous une forme plus adaptée aux problèmes de diffusions. On trouve ainsi

$$I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) = (4\pi)^2 \left( \frac{\partial^3}{\partial a \partial b \partial c} \right) \int_0^\infty dx [A_0 x^2 + B_0 x + C_0]^{-1}, \tag{8d}$$

où les quantités  $A_0$ ,  $B_0$  et  $C_0$  sont liées par

$$A_0 C_0 = [p^2 + (a - c)^2] [q^2 + (b - c)^2] [|\mathbf{p} + \mathbf{q}|^2 + (a + b)^2] \tag{9a}$$

et

$$B_0 = b(p^2 + a^2 + c^2) + a(q^2 + b^2 + c^2) - c(|\mathbf{p} + \mathbf{q}|^2 + (a + b)^2). \tag{9b}$$

L'expression (8d) présente l'avantage de choisir arbitrairement les quantités  $A_0$ ,  $B_0$  et  $C_0$  vérifiant les relations (9a et b). Elle est utilisée dans le calcul des amplitudes de diffusion lorsque au moins un électron du continuum est décrit par une onde coulombienne, sinon les expressions (8a et b) sont plus simples en pratique.

D'une manière plus générale on peut remarquer que

$$\begin{aligned}
I_{\lambda\mu}(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 r_1^\lambda r_2^\mu r_{12}^\nu \exp(-a r_1 - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2) \exp(c r_{12}) \\
&= (-)^{\lambda+\mu} (4\pi)^2 \left( \frac{\partial}{\partial a} \right)^{\lambda+1} \left( \frac{\partial}{\partial b} \right)^{\mu+1} \left( \frac{\partial}{\partial c} \right)^{\nu+1} I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q}).
\end{aligned} \tag{10}$$

**C2 Calcul de l'intégrale  $K(a, b, c; \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k})$  de la forme :**

$$\begin{aligned}
K(a, b, c; \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(c r_{12}) \exp\{-b r_1 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1\} \times \\
&\quad \times \exp\{-a r_2 - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_2\} {}_1F_1[i\eta; 1; i(kr_1 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1)].
\end{aligned} \tag{11}$$

${}_1F_1$  représente la fonction hypergéométrique confluente, dont la représentation intégrale (Abramowitz et Stegun 1972) s'écrit

$${}_1F_1(a; c; z) = (-2\pi i)^{-1} \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} \oint_C dt (-t)^{a-1} (1-t)^{c-a-1} e^{tz},$$

$C$  est un contour quelconque issu de  $t=1$  et contournant le point  $t=0$  dans le sens positif. Il devient un contour arbitraire contournant les deux points 0 et 1, de l'axe réel, lorsque  $c$  décrit l'ensemble des entiers positifs, en particulier pour  $c=1$

$${}_1F_1(a; 1; z) = (2\pi i)^{-1} \oint_{(0^+, 1^+)} dt t^{a-1} (t-1)^{-a} e^{tz}$$

et l'expression (11) devient :

$$K = (2\pi i)^{-1} \int dt t^{i\eta-1} (t-1)^{-i\eta} N(t), \quad (12)$$

avec

$$N(t) = \int dr_1 dr_2 \exp\{-ar_1 - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1 + i(kr_1 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1)t\} \exp\{-br_1 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1\} \exp(c r_{12}), \quad (13a)$$

si on pose

$$\mathbf{K} = \mathbf{p} - t \mathbf{k} \quad \text{et} \quad \lambda = a - i t k$$

et à l'aide des expressions (1) et (8d), l'intégrale  $N(t)$  peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned} N(t) &= \int dr_1 dr_2 \exp(-\lambda r_1 - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_1) \exp\{-br_1 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1\} \exp(c r_{12}) \\ &= I(\lambda, b, c; \mathbf{K}, \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (13b)$$

Il reste alors de calculer dans la suite l'intégrale de la forme

$$\int dt t^{i\eta-1} (t-1)^{-i\eta} I(a - its, b, c; \mathbf{p} - t\mathbf{s}, \mathbf{q}),$$

avec

$$I(a - its, b, c; \mathbf{p} - t\mathbf{s}, \mathbf{q}) = (4\pi)^2 (\partial_{abc}^3) \int_0^\infty dx [A(t)x^2 + B(t)x + C(t)]^{-1}. \quad (14)$$

Comme il a été mentionné ci-dessus l'intégrale (14) ne dépend pas des quantités  $A(t)$ ,  $C(t)$  et  $B(t)$  séparément et tout choix arbitraire de ces quantités remplissant les relations (9a et b) n'affecte pas la valeur de l'intégrale (14). Nous prendrons dans la suite les valeurs

$$\begin{aligned} A(t) &= [|\mathbf{p} - t\mathbf{s}|^2 + (a - its - c)^2] [q^2 + (b - c)^2] \\ &= -2t(\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + is(a - c))(q^2 + (b - c)^2) + (p^2 + (a - c)^2)(q^2 + (b - c)^2) \end{aligned} \quad (15a)$$

$$C(t) = -2t[\mathbf{s}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + is(a + b)] + [|\mathbf{p} + \mathbf{q}|^2 + (a + b)^2] \quad (15b)$$

et

$$\begin{aligned} B(t) &= b(|\mathbf{p} - t\mathbf{s}|^2 + (a - its)^2 + c^2) + (a - its)(q^2 + b^2 + c^2) - c C(t). \\ &= -t\{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + is a)b + is(q^2 + b^2 + c^2) + 2c[\mathbf{s}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + is(a + b)]\} + \\ &\quad + b(p^2 + a^2 + c^2) + a(q^2 + b^2 + c^2) - c(|\mathbf{p} + \mathbf{q}|^2 + (a + b)^2). \end{aligned} \quad (15c)$$

Les expressions (15a, b et c) permettent également d'écrire

$$A(t)x^2 + B(t)x + C(t) = \sigma_0(x) - t \sigma_1(x), \quad (16)$$

avec

$$\sigma_0(x) = A_0 x^2 + B_0 x + C_0 \quad (17a)$$

et

$$\begin{aligned} \sigma_1(x) &= 2x^2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + is(a - c))(q^2 + (b - c)^2) + x\{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{s} + is a)b + \\ &\quad is(q^2 + b^2 + c^2) + 2c[\mathbf{s}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + is(a + b)]\} + 2[\mathbf{s}(\mathbf{p} + \mathbf{q}) + is(a + b)]. \end{aligned} \quad (17b)$$

l'égalité (16) permet de réécrire l'intégrale (14) sous la forme :

$$I(a - its, b, c; \mathbf{p} - ts, \mathbf{q}) = (4\pi)^2 (\partial^3_{abc}) \int_0^\infty dx [\sigma_0(x) - t \sigma_1(x)]^{-1} . \quad (18)$$

En portant l'expression (18) dans (13a ou b) et à l'aide de la représentation de Laplace de la fonction hypergéométrique (avec la condition  $Re(c-a) > 0$ )

$${}_2F_1(a, b; c; z) = (2\pi i)^{-1} \frac{\Gamma(1-a)\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} \oint_C dt (-t)^{a-1} (1-t)^{c-a-1} (1-tz)^{-b} \quad (19a)$$

et de la relation

$${}_2F_1(a, c; c; z) = (1-z)^{-a} , \quad (19b)$$

l'intégrale (12) se réduit finalement à une intégrale simple (que l'on peut évaluer numériquement)

$$\begin{aligned} K &= (4\pi)^2 (\partial^3_{abc}) \int_0^\infty dx \int dt t^{i\eta-1} (t-1)^{-i\eta} \sigma_0(x)^{-1} [1 - t \sigma_1(x) / \sigma_0(x)]^{-1} \\ &= (4\pi)^2 (\partial^3_{abc}) \int_0^\infty dx \sigma_0(x)^{-1} [1 - \sigma_1(x) / \sigma_0(x)]^{-i\eta} . \end{aligned} \quad (20)$$

### C3 Application aux calculs de l'amplitude de diffusion

- ondes planes (OP)

Dans le chapitre 3 on a souvent utilisé les trois intégrales suivantes

$$f_0(a, b) = -2 \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 r_0^{-1} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-a r_1 - i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}), \quad (21a)$$

$$f_1(a, b) = \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 r_{01}^{-1} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-a r_1 - i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}), \quad (21b)$$

$$f_2(a, b) = \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 r_{02}^{-1} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-a r_1 - i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}). \quad (21c)$$

En utilisant les transformations

$$r_{0i}^{-1} = (2\pi^2)^{-1} \int d\mathbf{p} p^{-2} \exp[-i\mathbf{p}(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i)] \quad (\text{avec } \mathbf{r}_i = \mathbf{0}, \mathbf{r}_1 \text{ ou } \mathbf{r}_2)$$

de Bethe, et

$$\int d\mathbf{r}_0 \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_0) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p}),$$

on peut trouver facilement

$$\int d\mathbf{r}_0 r_{0i}^{-1} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) = (4\pi) k^{-2} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i), \quad (22)$$

dans chacune des intégrales (21a, b et c), on obtient

$$\begin{aligned} f_0(a, b) &= -8\pi k^{-2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-a r_1 - i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}) \\ &= -8\pi k^{-2} I(a, b, c; \mathbf{k}_B, \mathbf{0}), \end{aligned} \quad (23a)$$

$$\begin{aligned} f_1(a, b) &= 4\pi k^{-2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-a r_1 - i(\mathbf{k}_B - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}) \\ &= 4\pi k^{-2} I(a, b, c; \mathbf{k}_B - \mathbf{k}, \mathbf{0}), \end{aligned} \quad (23b)$$

$$\begin{aligned}
f_2(a,b) &= 4\pi k^{-2} \int dr_1 dr_2 \exp(-a r_1 - i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) \exp(-b r_2 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2) \exp(c r_{12}) \\
&= 4\pi k^{-2} I(a,b,c; \mathbf{k}_B, -\mathbf{k}).
\end{aligned} \tag{23c}$$

on se ramène finalement au calcul de l'intégrale  $I(a,b,c,\mathbf{p},\mathbf{q})$  donnée par l'équation (8d)

- **une onde plane et une onde coulombienne (1C)** : cette approximation correspond au calcul des sections efficaces d'ionisation par impact d'électrons rapides à faible transfert d'impulsion. L'électron éjecté (lent) est décrit par une onde coulombienne alors que le diffusé (plus rapide) est décrit par une plane. L'intégrale associée dans le cas d'une cible à deux électrons a la forme

$$\begin{aligned}
L &= \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-a r_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}) \times \\
&\quad \times (-2r_0^{-1} + r_01^{-1} + r_02^{-1}) \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)]
\end{aligned} \tag{24}$$

en utilisant l'expressions (22) l'intégrale (24) s'écrit

$$\begin{aligned}
L &= 4\pi k^{-2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-a r_1) \exp(-b r_2) \exp(c r_{12}) \times \\
&\quad \times [-2 + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2)] \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \\
&= (L_0 + L_1 + L_2)
\end{aligned} \tag{25}$$

où les quantités  $L_i$  ( $i = 0, 1$  et  $2$ ) se réduisent à des intégrales de type (11), c'est-à-dire

$$\begin{aligned}
L_0 &= -8\pi k^{-2} K(a, b, c; \mathbf{k}_B, \mathbf{0}, \mathbf{k}_B), \\
L_1 &= 4\pi k^{-2} K(a, b, c; \mathbf{k}_B - \mathbf{k}, \mathbf{0}, \mathbf{k}_B) \\
L_2 &= 4\pi k^{-2} K(a, b, c; \mathbf{k}_B, -\mathbf{k}, \mathbf{k}_B)
\end{aligned}$$

où  $K$  n'est autre que l'intégrale (11)

$$\begin{aligned}
K(a, b, c; \mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k}) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(c r_{12}) \exp\{-b r_1 - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2\} \times \\
&\quad \times \exp\{-a r_1 - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1\} {}_1F_1[i\eta; 1; i(k r_1 + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1)],
\end{aligned} \tag{26}$$

elle est donnée par l'expression (20).

- **trois ondes coulombiennes (3C)** : dans le cas des cinématiques symétriques, il n'y a aucune raison de distinguer les deux électrons détectés. Ces derniers sont décrits par le produit de deux ondes coulombiennes modifié par une hypergéométrique décrivant l'interaction post-collisionnelle, ce qui revient à calculer d'intégrale suivante

$$\begin{aligned}
T &= \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp(-a r_1 - b r_2) [-2r_0^{-1} + r_01^{-1} + r_02^{-1}] \times \\
&\quad \times \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \times \\
&\quad \times \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0) {}_1F_1[i\eta_A; 1; i(k_A r_0 + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0)] \\
&\quad \times \exp(-\delta r_{01}) {}_1F_1[i\eta; 1; i(k_{AB} r_{01} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{01})] \quad \delta \rightarrow 0^+.
\end{aligned} \tag{27}$$

En introduisant les intégrales  $T_0$ ,  $T_1$  et  $T_2$ , définies par

$$T_0 + T_1 = \int d\mathbf{r}_2 \exp(-br_2) [-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1}] = 8\pi b^{-3} (-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1}) \quad (28a)$$

et

$$T_2 = \int d\mathbf{r}_2 \exp(-br_2) r_{02}^{-1} = 2\pi^{-1} \left( -\frac{\partial}{\partial b} \right) \int d\mathbf{p} \frac{\exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_0)}{p^2 (p^2 + b^2)} \quad (28b)$$

et à l'aide de la relation

$$\frac{1}{p^2 (p^2 + b^2)} = b^{-2} [p^{-2} - (p^2 + b^2)^{-1}],$$

dans l'expression (28b) de  $T_2$ , celle-ci devient

$$\begin{aligned} T_2 &= 2\pi^{-1} \left( -\frac{\partial}{\partial b} \right) \{ b^{-2} \int d\mathbf{p} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}_0) [p^{-2} - (p^2 + b^2)^{-1}] \} \\ &= 8\pi b^{-3} \{ r_0^{-1} [1 - \exp(-br_0)] - \frac{1}{2} b \exp(-br_0) \}. \end{aligned} \quad (28c)$$

donc

$$T_0 + T_1 + T_2 = 8\pi b^{-3} \{ r_0^{-1} [-1 - \exp(-br_0)] - \frac{1}{2} b \exp(-br_0) + r_{01}^{-1} \}, \quad (29)$$

et en substituant l'expression (29) dans l'équation (28),  $T$  devient

$$\begin{aligned} T &= 8\pi b^{-3} \int d\mathbf{r}_0 d\mathbf{r}_1 \exp(-ar_1) \times \\ &\quad \times \{ r_0^{-1} [-1 - \exp(-br_0)] - \frac{1}{2} b \exp(-br_0) + r_{01}^{-1} \} \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \times \\ &\quad \times \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0) {}_1F_1[i\eta_A; 1; i(k_A r_0 + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_0)] \\ &\quad \times \exp(-\delta r_{01}) {}_1F_1[i\eta; 1; i(k_{AB} r_{01} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{01})] \quad \delta \rightarrow 0^+, \end{aligned} \quad (30)$$

ce qui se ramène finalement à une intégrale de la forme

$$\begin{aligned} F_{lmn} &= \int d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j r_i^l r_j^m r_{ij}^n \exp(-br_i - ar_j - \delta r_{ij}) \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_j) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_j + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_j)] \times \\ &\quad \times \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_i) \exp(-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_i) {}_1F_1[i\eta_A; 1; i(k_A r_i + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_i)] \\ &\quad \times {}_1F_1[i\eta; 1; i(k_{AB} r_{ij} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{ij})] \quad \delta \rightarrow 0^+, \end{aligned} \quad (31a)$$

on peut remarquer que celle-ci se réduit facilement à

$$F_{lmn} = (2\pi^2)^{-3} (-)^{l+m+n} \left( \frac{\partial}{\partial a} \right)^l \left( \frac{\partial}{\partial b} \right)^m \left( \frac{\partial}{\partial \delta} \right)^n F, \quad (31b)$$

et

$$\begin{aligned} F &= \int d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j \exp(-br_i - ar_j - \delta r_{ij}) \times \\ &\quad \times \exp(-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_j) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_j + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_j)] \times \\ &\quad \times \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_i) \exp(-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_i) {}_1F_1[i\eta_A; 1; i(k_A r_i + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_i)] \\ &\quad \times {}_1F_1[i\eta; 1; i(k_{AB} r_{ij} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{ij})] \quad \delta \rightarrow 0^+. \end{aligned} \quad (32)$$

Cette dernière intégrale est calculée dans l'annexe H.

## Annexe D

### Détermination des matrices $D_i$

Les transformations  $D_i$  permettant le passage entre les différentes coordonnées de Jacobi peuvent être définies à l'aide de la figure 2.2 du chapitre 2, soit

$$\mathbf{r}_1 = \alpha \mathbf{r}_{12} - \mathbf{R} \quad ; \quad \mathbf{R}_1 = \gamma \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{12} = (\gamma\alpha - 1) \mathbf{r}_{12} - \gamma \mathbf{R} ; \quad (1)$$

$$\mathbf{r}_2 = -\alpha \mathbf{r}_{12} - \mathbf{R} \quad \text{et} \quad \mathbf{R}_2 = (1 - \gamma\alpha) \mathbf{r}_{12} - \gamma \mathbf{R}$$

où les quantités  $\alpha$  et  $\gamma$  sont des constantes en fonction des masses  $m$  et  $M$ . Elles sont données par les relations

$$\alpha = m(2m)^{-1} = 1/2 \quad \text{et} \quad \gamma = m(M + m)^{-1}. \quad (2)$$

Les coordonnées de Jacobi peuvent être liées à l'aide des équations (1), c'est-à-dire la relation

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_i \\ \mathbf{R}_i \end{pmatrix} = D_i \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \mathbf{R} \end{pmatrix} \quad (i=1 \text{ ou } 2), \quad (3)$$

avec

$$D_1 = \begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ \gamma\alpha - 1 & -\gamma \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad D_2 = \begin{pmatrix} -\alpha & -1 \\ 1 - \gamma\alpha & -\gamma \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Si on note par  $(\mathbf{k}_{AB}, \mathbf{K})$ ,  $(\mathbf{k}_A, \mathbf{K}_A)$  et  $(\mathbf{k}_B, \mathbf{K}_B)$  les vecteurs d'ondes conjugués à chaque paire de coordonnées de Jacobi, respectivement  $(\mathbf{r}_{12}, \mathbf{R})$ ,  $(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1)$  et  $(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2)$ . C'est-à-dire les égalités des produits scalaires

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 \\ \mathbf{R}_1 \end{pmatrix} (\mathbf{k}_A, \mathbf{K}_A) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_2 \\ \mathbf{R}_2 \end{pmatrix} (\mathbf{k}_B, \mathbf{K}_B) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \mathbf{R} \end{pmatrix} (\mathbf{k}_{AB}, \mathbf{K}) \quad (5)$$

sont vérifiées. Cette condition (équation 5) permet alors d'écrire

$$\begin{pmatrix} \mathbf{k}_m \\ \mathbf{K}_m \end{pmatrix} = D_m \begin{pmatrix} \mathbf{k}_{AB} \\ \mathbf{K} \end{pmatrix} \quad (m=A \text{ ou } B), \quad (6)$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r}_i \\ \mathbf{R}_i \end{pmatrix} (\mathbf{k}_m, \mathbf{K}_m) = D_i \begin{pmatrix} \mathbf{r}_{12} \\ \mathbf{R} \end{pmatrix} (\mathbf{k}_{AB}, \mathbf{K}) {}^t D_m \quad (m=A \text{ et } i=1 \text{ ou } m=B \text{ et } i=2). \quad (7)$$

Il vient facilement à l'aide des équations (5) et (7) que les matrices  $D_i$  et  $D_m$  vérifient les identités

$$D_A = {}^t D_1 \quad \text{et} \quad D_B = {}^t D_2. \quad (8)$$

## Annexe E

### Effets d'échange dans l'hydrogène

Dans le cadre où l'on néglige l'interaction spin-orbite ainsi que les effets relativistes dans les atomes lourds. Ici l'énergie du système ne dépend pas de l'orientation du spin vis-à-vis du moment orbital angulaire, il suffit tout simplement de connaître les composantes du spin suivant la direction  $z$  afin de décrire le système complètement. La fonction propre complète est un produit d'une fonction propre spatiale solution de l'équation de Schrödinger et une fonction dépendant des coordonnées de spin.

Nous introduisons les variables de spin définies par un opérateur de spin  $s$ , sa projection  $s_z$  sur l'axe  $z$ , nombre quantique de spin  $m_s = \pm 1/2$  pour un électron, une coordonnée de spin  $\sigma$  et une fonction de spin  $\alpha$  si  $m_s = +1/2$  ou  $\beta$  si  $m_s = -1/2$ . Les deux coordonnées d'espace et de spin seront notées dans la suite par  $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \sigma)$ . La conséquence du principe d'exclusion de Pauli pour le système  $e$ -H implique

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1). \quad (1)$$

L'état de spin total des deux électrons dépend du module  $S$  de l'opérateur de spin total  $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$  et de sa projection  $S_z = s_{1z} + s_{2z}$  sur l'axe  $z$  soit le nombre quantique  $M_S$  de spin total. On note quatre états orthonormaux possibles, trois symétriques pour  $S = 0$

$$\begin{aligned} S_{T+1}(1,2) &= \alpha(1)\alpha(2), \quad S_{T-1}(1,2) = \beta(1)\beta(2), \\ S_{T0}(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \end{aligned} \quad (2)$$

et un antisymétrique

$$S_S(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]. \quad (3)$$

où  $S$  est le spin total des deux électrons dont la projection est  $M_S$ .

De l'équation (1) il s'en suit que la composante de spin

$$\chi(S, M_S | \sigma_1, \sigma_2) = (-1)^{S+1} \chi(S, M_S | \sigma_2, \sigma_1). \quad (4)$$

Les états singulets  $S = 0$  du système  $e$ -H avant et après la collision s'écrivent respectivement pour les deux voies d'entrée et de sortie sous la forme :

$$|\Phi_{i,S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\phi_{i,12} + \phi_{i,21}\rangle |S_S(1,2)\rangle; \quad (5)$$

$$|\Psi_{f,S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\psi_{f,12} + \psi_{f,21}\rangle |S_S(1,2)\rangle. \quad (6)$$

L'élément de matrice de diffusion correspondant à l'état singulier est

$$T_S = \langle \Psi_{f,S} | V | \Phi_{i,S} \rangle. \quad (7)$$



Le fait qu'on a exclu toute sorte d'interaction dépendant du spin l'amplitude Ts se réduit à

$$T_S = (1/4)^{1/2} (\langle \psi_{f,12} | V_i | \phi_i \rangle + \langle \psi_{f,21} | V_i | \phi_i \rangle) \quad (8)$$

Dans le cas du triplet S = 1, les fonctions d'ondes associées s'écrivent respectivement

$$|\Phi_{i,1}\rangle = 1/2 | \phi_{i,12} - \phi_{i,21} \rangle 2^{1/2} S_{T1}(1,2) - S_{T0}(1,2) \rangle \quad (9)$$

dans le canal d'entrée,

$$|\Psi_{f,T}\rangle = 1/2 | \psi_{f,12} - \psi_{f,21} \rangle 2^{1/2} S_{T1}(1,2) - S_{T0}(1,2) \rangle \quad (10)$$

dans le canal de sortie. L'élément de matrice de transition correspondant à l'état triplet, s'écrit

$$T_T = (3/4)^{1/2} (\langle \psi_{f,12} | V_i | \phi_i \rangle - \langle \psi_{f,21} | V_i | \phi_i \rangle). \quad (11)$$

### Effets d'échange pour des systèmes à deux électrons (He)

Dans le cas de simple ionisation des systèmes à plus d'un électron à côté de l'échange habituel décrit précédemment s'ajoute une nouvelle possibilité d'échange dont laquelle l'électron incident est capturé dans un état lié alors que deux électrons initialement liés sont éjectés. Pour cela, considérons ici l'ionisation simple de l'atome d'hélium. Les fonctions propres de l'hélium sont notées par  $\psi(n, S_A | \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ , où  $n$  décrit la configuration et  $S_A$  le spin total de l'atome. La fonction d'onde spatiale du système  $e$ -He, satisfait l'égalité

$$\psi(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = (-1)^{S_A} \psi(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2). \quad (12)$$

La fonction d'onde totale antisymétrique s'écrit

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) = \sum_{perm\ cyclique} \delta(\mu_j | \sigma_j) \chi(S_A, M_{S_A} | \sigma_2, \sigma_3) \psi(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$$

L'état doublet S = 1/2 du système  $e$ -He avant et après la collision s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned} |\Phi_{i,S}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{per\ cycl} v_0 | \phi_{i,\rho\mu\nu} + \phi_{i,\rho\nu\mu} \rangle | \alpha(\rho) S_s(\mu, \nu) \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3!}} v_0 ( | \phi_{i,123} + \phi_{i,132} \rangle | \alpha(1) S_s(2,3) \rangle + | \phi_{i,213} + \phi_{i,231} \rangle | \alpha(2) S_s(1,3) \rangle + | \phi_{i,312} + \phi_{i,321} \rangle | \alpha(3) S_s(1,2) \rangle ), \end{aligned} \quad (13)$$

avec

$$v_0 = \begin{cases} 1 & \neq \\ & \phi_{i,123} \quad \phi_{i,132} \\ 1/\sqrt{2} & = \end{cases}$$

L'état final correspondant aux mêmes quantités de spin total est doublement dégénéré, en effet

$$\begin{aligned} |\Psi_{f,s}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\text{per cyl}} |\psi_{f,\rho\mu\nu} + \psi_{f,\rho\nu\mu}\rangle |\alpha(\rho)S_s(\mu,\nu)\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{3!}} (|\psi_{f,123} + \psi_{f,132}\rangle |\alpha(1)S_s(2,3)\rangle + |\psi_{f,213} + \psi_{f,231}\rangle |\alpha(2)S_s(3,1)\rangle + |\psi_{f,312} + \psi_{f,321}\rangle |\alpha(3)S_s(1,2)\rangle), \end{aligned} \quad (14)$$

Dans le cas de l'état singulet l'amplitude de diffusion correspondante

$$T_s = \langle \Psi_{f,s} | V_i | \Phi_i \rangle, \quad (15)$$

en portant les expressions (13) et (14) respectivement pour les états initial et final, dans (15)

$$\begin{aligned} T_s &= \frac{v_0}{3} [\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | \alpha(1)S_s(2,3) \rangle + \langle \psi_{f,213} + \psi_{f,231} | \alpha(2)S_s(3,1) \rangle + \langle \psi_{f,312} + \psi_{f,321} | \alpha(3)S_s(1,2) \rangle] \\ &\quad V_i [|\phi_{i,123}\rangle |\alpha(1)S_s(2,3)\rangle + |\phi_{i,213}\rangle |\alpha(2)S_s(3,1)\rangle + |\phi_{i,312}\rangle |\alpha(3)S_s(1,2)\rangle]. \end{aligned} \quad (16)$$

Le fait qu'on a exclu toute sorte d'interaction dépendante du spin l'amplitude  $T_s$  peut s'écrire

$$\begin{aligned} T_s &= \frac{v_0}{3!} [\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,213} + \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,213} \rangle + \langle \psi_{f,312} + \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,312} \rangle] + \\ &+ \frac{v_0}{3!} [\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i (|\phi_{i,213}\rangle \langle \alpha(1)S_s(2,3) | \alpha(2)S_s(3,1) \rangle + |\phi_{i,312}\rangle \langle \alpha(1)S_s(2,3) | \alpha(3)S_s(1,2) \rangle) \rangle \\ &+ \langle \psi_{f,213} + \psi_{f,231} | V_i (|\phi_{i,123}\rangle \langle \alpha(2)S_s(3,1) | \alpha(1)S_s(2,3) \rangle + |\phi_{i,312}\rangle \langle \alpha(2)S_s(3,1) | \alpha(3)S_s(1,2) \rangle) \rangle \\ &+ \langle \psi_{f,312} + \psi_{f,321} | V_i (|\phi_{i,123}\rangle \langle \alpha(3)S_s(1,2) | \alpha(1)S_s(2,3) \rangle + |\phi_{i,213}\rangle \langle \alpha(3)S_s(1,2) | \alpha(2)S_s(3,1) \rangle) \rangle] \\ &= \frac{v_0}{3!} [3\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,123} \rangle - 1/2(\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,213} \rangle + \langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,312} \rangle + \langle \psi_{f,213} \\ &+ \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,213} + \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,312} \rangle + \langle \psi_{f,312} + \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,312} + \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,213} \rangle) \rangle] \\ &= \frac{v_0}{3!} [3\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,123} \rangle - 1/2(\langle \psi_{f,213} + \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,321} + \psi_{f,312} | V_i | \phi_{i,132} \rangle + \langle \psi_{f,213} \\ &+ \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,231} + \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,132} \rangle + \langle \psi_{f,312} + \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,321} + \psi_{f,312} | V_i | \phi_{i,123} \rangle) \rangle] \\ &= \frac{v_0}{2} [\langle \psi_{f,123} + \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,123} \rangle - 1/2(\langle \psi_{f,213} + \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,321} + \psi_{f,312} | V_i | \phi_{i,123} \rangle)]. \end{aligned} \quad (17)$$

où l'on a utilisé les égalités suivantes et l'équation (3)

$$\langle \alpha(\rho)S_s(\mu,\nu) | \alpha(\rho)S_s(\mu,\nu) \rangle = 1;$$

$$\begin{aligned}
\langle \alpha(\rho)S_s(\mu, \nu) | \alpha(\rho)S_s(\nu, \mu) \rangle &= -1; \\
\langle \alpha(\rho)S_s(\mu, \nu) | \alpha(\mu)S_s(\rho, \nu) \rangle &= 1/2; \\
\langle \alpha(\rho)S_s(\mu, \nu) | \alpha(\nu)S_s(\mu, \rho) \rangle &= 1/2; \\
\langle \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) - \alpha(\rho)\beta(\mu)\alpha(\nu) | \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) - \beta(\rho)\alpha(\mu)\alpha(\nu) \rangle &= 1 \text{ et} \\
\langle \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) - \alpha(\rho)\beta(\mu)\alpha(\nu) | \beta(\rho)\alpha(\mu)\alpha(\nu) - \alpha(\rho)\beta(\mu)\alpha(\nu) \rangle &= 1.
\end{aligned}$$

Dans le cas du triplet  $S = 1$  (  $S$  spin total des deux électrons du continuum) l'état final correspondant s'écrit

$$\begin{aligned}
| \Psi_{f,T} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\text{per cyl}} (|\psi_{f,\rho\mu\nu} - \psi_{f,\rho\nu\mu}\rangle [(2/3)^{1/2} |\beta(\rho)S_{T1}(\mu, \nu)\rangle - (1/3)^{1/2} \alpha(\rho)S_{T0}(\mu, \nu)\rangle]) \\
&= \frac{1}{\sqrt{3!}} \{ |\psi_{f,123} - \psi_{f,132}\rangle \times [(2/3)^{1/2} |\beta(1)S_{T1}(2,3)\rangle - (1/3)^{1/2} |\alpha(1)S_{T0}(2,3)\rangle] + \\
&\quad + |\psi_{f,231} - \psi_{f,213}\rangle \times [(2/3)^{1/2} |\beta(2)S_{T1}(3,1)\rangle - (1/3)^{1/2} |\alpha(2)S_{T0}(3,1)\rangle] + \\
&\quad + |\psi_{f,312} - \psi_{f,321}\rangle [(2/3)^{1/2} |\beta(3)S_{T1}(1,2)\rangle - (1/3)^{1/2} |\alpha(3)S_{T0}(1,2)\rangle] \}, \quad (18)
\end{aligned}$$

et l'élément de matrice de transition  $T_T$  du triplet ,

$$T_T = \langle \Psi_{f,T} | V_i | \Phi_i \rangle \quad (19)$$

s'écrit, en tenant compte des équations (13) et (18) sous la forme

$$\begin{aligned}
T_T &= (2/6)v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | (2^{1/2} \langle \beta(1)S_{T1}(2,3) | - \langle \alpha(1)S_{T0}(2,3) |) V_i (|\phi_{i,213}\rangle |\alpha(2)S_s(3,1)\rangle + |\phi_{i,312}\rangle \\
&\quad (2^{1/2} \langle \beta(2)S_{T1}(3,1) | - \langle \alpha(2)S_{T0}(3,1) |) V_i (|\phi_{i,123}\rangle |\alpha(1)S_s(2,3)\rangle + |\phi_{i,312}\rangle \\
&\quad |\alpha(3)S_s(1,2)\rangle) + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | (2^{1/2} \langle \beta(3)S_{T1}(1,2) | - \langle \alpha(3)S_{T0}(1,2) |) V_i (|\phi_{i,123}\rangle |\alpha(1)S_s(2,3)\rangle + |\phi_{i,213}\rangle \\
&\quad |\alpha(2)S_s(3,1)\rangle + |\phi_{i,312}\rangle |\alpha(3)S_s(1,2)\rangle) ], \quad (20)
\end{aligned}$$

et à l'aide des relations d'orthogonalisation

$$\begin{aligned}
\langle S_{T1}(\mu, \nu) | S_s(\mu, \nu) \rangle &= 0 \text{ et} \\
\langle S_{T0}(\mu, \nu) | S_s(\mu, \nu) \rangle &= 0
\end{aligned}$$

l'expression de  $T_T$  devient

$$\begin{aligned}
T_T &= 2/6v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | (2^{1/2} \langle \beta(1)S_{T1}(2,3) | - \langle \alpha(1)S_{T0}(2,3) |) V_i (|\phi_{i,213}\rangle |\alpha(2)S_s(3,1)\rangle + |\phi_{i,312}\rangle \\
&\quad |\alpha(3)S_s(1,2)\rangle) + \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | (2^{1/2} \langle \beta(2)S_{T1}(3,1) | - \langle \alpha(2)S_{T0}(3,1) |) V_i (|\phi_{i,123}\rangle |\alpha(1)S_s(2,3)\rangle + |\phi_{i,312}\rangle \\
&\quad |\alpha(3)S_s(1,2)\rangle) + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | (2^{1/2} \langle \beta(3)S_{T1}(1,2) | - \langle \alpha(3)S_{T0}(1,2) |) V_i (|\phi_{i,123}\rangle |\alpha(1)S_s(2,3)\rangle + |\phi_{i,213}\rangle \\
&\quad |\alpha(2)S_s(3,1)\rangle) ]. \\
&= 2/6v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,213} \rangle \times (2^{1/2} \beta(1)S_{T1}(2,3) - \alpha(1)S_{T0}(2,3) | \alpha(2)S_s(3,1) \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,312} \rangle \langle 2^{1/2} \beta(1)S_{T1}(2,3) - \alpha(1)S_{T0}(2,3) | \alpha(3)S_s(1,2) \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,123} \rangle \langle 2^{1/2} \beta(2)S_{T1}(3,1) - \alpha(2)S_{T0}(3,1) | \alpha(1)S_s(2,3) \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,312} \rangle \langle 2^{1/2} \beta(2)S_{T1}(3,1) - \alpha(2)S_{T0}(3,1) | \alpha(3)S_s(1,2) \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle \langle 2^{1/2} \beta(3)S_{T1}(1,2) - \alpha(3)S_{T0}(1,2) | \alpha(1)S_s(2,3) \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,213} \rangle \langle 2^{1/2} \beta(3)S_{T1}(1,2) - \alpha(3)S_{T0}(1,2) | \alpha(2)S_s(3,1) \rangle]
\end{aligned}$$

A l'aide des équations (2 et 3) et des relations d'orthonormalisation, on peut réduire l'expression ci-dessus, en introduisant

$$\langle \beta(\rho)S_{T+1}(\mu, \nu) | \alpha(\mu)S_s(\rho, \nu) \rangle = 2^{-1/2} \langle \beta(\rho)\alpha(\mu)\alpha(\nu) | \alpha(\mu)S_s(\rho, \nu) \rangle = -2^{-1/2}$$

$$\begin{aligned}
\langle \beta(\rho)S_{T-1}(\mu, \nu) | \alpha(\mu)S_s(\rho, \nu) \rangle &= 2^{-1/2} \langle \beta(\rho)\beta(\mu)\beta(\nu) | \alpha(\mu)S_s(\rho, \nu) \rangle = 0 \\
\langle \alpha(\rho)S_{T0}(\mu, \nu) | \alpha(\mu)S_s(\rho, \nu) \rangle &= 2^{-1} \langle \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) + \alpha(\rho)\beta(\mu)\alpha(\nu) | \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) - \beta(\rho)\alpha(\mu)\alpha(\nu) \rangle \\
&= 2^{-1} \langle \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) | \alpha(\rho)\alpha(\mu)\beta(\nu) \rangle \\
&= 2^{-1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_T &= 2/6v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,213} \rangle \langle 1+1/2 \rangle + \langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,312} \rangle \langle -1-1/2 \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,123} \rangle \langle -1-1/2 \rangle + \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,312} \rangle \langle 1+1/2 \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle \langle 1+1/2 \rangle + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,213} \rangle \langle -1-1/2 \rangle ]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_T &= 1/2v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,213} \rangle - \langle \psi_{f,123} - \psi_{f,132} | V_i | \phi_{i,312} \rangle - \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,312} \rangle + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle - \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,213} \rangle] \\
&= 1/2v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,213} - \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,123} \rangle - \langle \psi_{f,321} - \psi_{f,312} | V_i | \phi_{i,132} \rangle - \langle \psi_{f,231} - \psi_{f,213} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \\
&\quad + \langle \psi_{f,213} - \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,132} \rangle + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle - \langle \psi_{f,321} - \psi_{f,312} | V_i | \phi_{i,123} \rangle] \\
&= 3/2v_0(1/3)^{1/2} [\langle \psi_{f,213} - \psi_{f,231} | V_i | \phi_{i,123} \rangle + \langle \psi_{f,312} - \psi_{f,321} | V_i | \phi_{i,123} \rangle] \quad (21)
\end{aligned}$$

Ici l'expression  $V_i | \phi_{i,\rho\mu\nu} \rangle$  sous-entend  $V_i(\rho; \mu, \nu) | \phi_{i,\rho\mu\nu} \rangle$  où  $V_i(\rho; \mu, \nu) = r_{\rho\mu}^{-1} + r_{\rho\nu}^{-1} - 2r_{\rho}^{-1}$   
Les expressions (17) et (21) peuvent être simplifiées en écrivant

$$T_s = (1/4)^{-1/2}(2f-g-h) \quad \text{et} \quad T_T = (3/4)^{-1/2}(g-h). \quad (22)$$

où les amplitudes  $f$ ,  $g$  et  $h$  sont données respectivement par les éléments de matrices

$$f = \langle \psi_{f,123} | V_i | \phi_i \rangle = \langle \psi_{f,132} | V_i | \phi_i \rangle,$$

$$g = \langle \psi_{f,213} | V_i | \phi_i \rangle = \langle \psi_{f,312} | V_i | \phi_i \rangle$$

et

$$h = \langle \psi_{f,321} | V_i | \phi_i \rangle = \langle \psi_{f,231} | V_i | \phi_i \rangle.$$

## Annexe F

### Normalisation de la fonction 3C

#### 1 Préliminaire

L'équation de Schrödinger d'une particule *libre* à énergie totale positive, ne possède aucune solution  $\psi$  appartenant à l'espace d'Hilbert. La normalisation de celle-ci consiste par convention à exiger que leurs produits scalaires soient proportionnels à la fonction  $\delta$  Dirac.

Considérons l'équation de Schrödinger indépendante du temps, d'une particule libre

$$(\Delta + k^2) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0, \quad (1)$$

dont la solution est représentée par une onde plane que l'on peut écrire sous la forme

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (2)$$

et satisfait l'orthogonalisation suivante

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{r} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (3)$$

quand  $A = (2\pi)^{-3/2}$ . Cette propriété demeure valable pour les systèmes à énergies positives dans un potentiel coulombien. L'équation du mouvement associée

$$(\Delta + 2\lambda r^{-1} + k^2) \chi(\eta, \mathbf{r} | \mathbf{k}) = 0, \quad (4)$$

dont la solution est de la forme

$$\chi(\eta, \mathbf{r} | \mathbf{k}) = C \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})), \quad (5)$$

ici  $\eta = \lambda/k$  et  $C = \exp(\frac{1}{2} \pi \eta) \Gamma(1 + i\eta)$  étant le coefficient de Gamow permettant de normaliser l'expression (5). L'orthonormalisation au sens de (3) doit s'écrire dans ce cas sous forme

$$\int d\mathbf{r} \chi(\eta, \mathbf{r} | \mathbf{k}) \chi^*(\eta', \mathbf{r} | \mathbf{k}') = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'). \quad (6)$$

Il est très important a priori d'étendre la propriété d'orthonormalisation ci-dessus à la fonction 3C et d'étudier la condition de sa validité. Pour cela, nous allons tout d'abord calculer l'intégrale de la forme suivante

$$\begin{aligned} \mathfrak{S}(\mathbf{q} | \mathbf{k}, \mathbf{k}') &= \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) {}_1F_1(i\eta'; 1; i(k'r + \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})) \\ &= -\frac{\partial}{\partial a} I(a; \mathbf{q} | \mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad \text{avec } a \rightarrow 0^+. \end{aligned} \quad (7)$$

Il suffit alors de calculer l'intégrale de type Nordsieck (1954)

$$I(a; \mathbf{q} | \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int d\mathbf{r} r^{-1} \exp(-a\mathbf{r} + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(k\mathbf{r} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) {}_1F_1(i\eta'; 1; i(k'\mathbf{r} + \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}))$$

$$= 2\pi J(a), \quad (8)$$

$$J(a) = \alpha^{-1} (\alpha/\gamma)^{-i\eta} (\alpha/(\alpha+\beta))^{i\eta'} {}_2F_1(-i\eta, i\eta'; 1; f/g). \quad (9)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} (a^2 + q^2); \quad \beta = \mathbf{k}' \cdot \mathbf{q} - iak'; \quad \gamma = \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} + iak + \alpha;$$

$$\delta = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' + kk' + \beta; \quad f = \beta\gamma - \alpha\delta \quad \text{et} \quad g = \gamma(\alpha + \beta).$$

$$-\frac{\partial}{\partial a} J = [(i\eta - i\eta' + 1) \alpha' \alpha^{-2} - i\eta \gamma' (\gamma \alpha)^{-1} + i\eta' (\alpha' + \beta') (\alpha^2 + \alpha\beta)^{-1}] J_0 - \eta\eta' (f' - f g^{-1} g') \alpha^{-3} J_1 \quad (10)$$

$$J_0 = (\alpha/\gamma)^{-i\eta} (\alpha/(\alpha+\beta))^{i\eta'} {}_2F_1(-i\eta, i\eta'; 1; f/g), \quad (11)$$

et

$$J_1 = (\alpha/\gamma)^{-i\eta'+1} (\alpha/(\alpha+\beta))^{i\eta'+1} {}_2F_1(-i\eta+1, i\eta'+1; 2; f/g). \quad (12)$$

$$\alpha' = a; \quad \beta' = -ik'; \quad \gamma = ik + a \quad \text{et} \quad \delta' = -ik'.$$

La factorisation par  $\alpha' \alpha^{-2}$  de l'expression (10) permet d'écrire celle-ci sous la forme

$$-\frac{\partial}{\partial a} J = \alpha' \alpha^{-2} K(a), \quad (13)$$

avec

$$K(a) = [(i\eta - i\eta' + 1) - i\eta \alpha \gamma' (\alpha' \gamma)^{-1} + i\eta' \alpha (\alpha' + \beta') (\alpha' \alpha + \alpha' \beta)^{-1}] J_0 - \eta\eta' (f' - f g^{-1} g') (\alpha' \alpha)^{-1} J_1. \quad (14)$$

A l'aide des identités

$$2\pi^2 \exp(-\lambda r) = -\frac{\partial}{\partial \lambda} \int d\mathbf{q} [q^2 + \lambda^2]^{-1} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}), \quad (15)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \lambda} [q^2 + \lambda^2]^{-1} = 2\pi^2 \delta(\mathbf{q}) \quad \text{quand} \quad \lambda \rightarrow 0^+, \quad (16)$$

et de l'équation (3) il vient que

$$\alpha' \alpha^{-2} = 4\pi^2 \delta(\mathbf{q}) \quad \text{avec} \quad a \rightarrow 0^+ \quad (17)$$

et par suite, les équations (8), (13) et (17) permettent de réduire l'intégrale (7) en écrivant

$$\mathfrak{G}(\mathbf{q} | \mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial a} I(a; \mathbf{q} | \mathbf{k}, \mathbf{k}') = -2\pi \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial a} J(a) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{q}) K(0). \quad (18)$$

## 2 Normalisation de la fonction d'onde (3C)

Reprenons maintenant la fonction d'onde (3C) de l'équation (2.45), soit

$$\psi_{3C}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) = C \chi(\eta_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_A) \chi(\eta_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_B) {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(k_{AB}r_{12} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12})), \quad (19)$$

C représente le facteur de Gamow associé à la dernière hypergéométrique de l'équation (19). La normalisation de la fonction (3C) implique le calcul de l'intégrale

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B) \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) \\ \mathfrak{G}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) &= M \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \chi(\eta_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_A) \chi^*(\eta'_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}'_A) \chi(\eta_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_B) \chi^*(\eta'_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}'_B) \times \\ &\quad \times {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(k_{AB}r_{12} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12})) {}_1F_1(i\eta; 1; i(k'_{AB}r_{12} + \mathbf{k}'_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12})), \quad (20) \end{aligned}$$

avec

$$M = \exp\left[\frac{1}{2} \pi(\eta + \eta')\right] \Gamma(1 + i\eta) \Gamma(1 - i\eta'), \quad \eta = -.5/k_{AB} \text{ et } \eta' = -.5/k'_{AB}.$$

A l'aide de la transformation

$$\chi(\mathbf{r}_0) = (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{q} d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r}) \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)],$$

dans l'égalité (20)

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) &= (2\pi)^{-3} M \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3 \chi(\eta_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}_A) \times \\ &\quad \times \chi^*(\eta'_A, \mathbf{r}_1 | \mathbf{k}'_A) \chi(\eta_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}_B) \chi^*(\eta'_B, \mathbf{r}_2 | \mathbf{k}'_B) \times \\ &\quad \times \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_{12})] {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(k_{AB}r_3 + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_3)) {}_1F_1(i\eta; 1; i(k'_{AB}r_3 + \mathbf{k}'_{AB} \cdot \mathbf{r}_3)). \quad (21) \end{aligned}$$

En posant

$$\Lambda(\mathbf{q} | \mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \chi(\eta, \mathbf{r} | \mathbf{k}) \chi^*(\eta', \mathbf{r} | \mathbf{k}'), \quad (22)$$

comme une généralisation de l'équation (6) et l'intégration sur  $\mathbf{r}_3$ , donnée par les relations (7) et (18), l'expression (21) devient

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) &= M \int d\mathbf{q} \Lambda(-\mathbf{q} | \mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) \Lambda(\mathbf{q} | \mathbf{k}_B, \mathbf{k}'_B) \delta(\mathbf{q}) K(0) \\ &= M K(0) \Lambda(\mathbf{0} | \mathbf{k}_A, \mathbf{k}'_A) \Lambda(\mathbf{0} | \mathbf{k}_B, \mathbf{k}'_B). \quad (24) \end{aligned}$$

L'identité (6) permet de réduire l'intégrale (22) quand  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$  à une fonction de Dirac et par suite (24) se réduit également à

$$\mathfrak{G}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) = M K(0) \delta(\mathbf{k}_A - \mathbf{k}'_A) \delta(\mathbf{k}_B - \mathbf{k}'_B). \quad (25)$$

La quantité  $M K(0)$  sous-entend sa propre limite quand  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$  et se réduit à l'unité, en effet, à l'aide des équations (7) et (18) on peut écrire l'intégrale

$$\begin{aligned} (2\pi)^{-3} M \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}] \times \\ \times {}_1F_1(-i\eta; 1; -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) {}_1F_1(i\eta'; 1; i(k'r + \mathbf{k}' \cdot \mathbf{r})) = \delta(\mathbf{q} + \mathbf{k} - \mathbf{k}') M K(0), \quad (26) \end{aligned}$$

qui n'est autre que  $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$  quand  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ , par conséquent on trouve finalement

$$\mathfrak{G}(\mathbf{k}_A, \mathbf{k}_B | \mathbf{k}'_A, \mathbf{k}'_B) = \delta(\mathbf{k}_A - \mathbf{k}'_A) \delta(\mathbf{k}_B - \mathbf{k}'_B). \quad (27)$$

## Annexe G

### Extension du modèle (3C) de Merkuriev-Redmond

La recherche des solutions de l'équation de Schrödinger, relative à un processus de diffusion, ayant la forme  $\Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)[1-f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)]$  permet d'écrire

$$(\Delta_1 + \Delta_2 + 2E - 2V) \Psi_f^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [\Delta_1 + \Delta_2 + 2E - 2V] (1-f) \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (1)$$

soit

$$[(1-f) (\Delta_1 + \Delta_2 + 2E - 2V)] \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = [(\Delta_1 + \Delta_2)f + 2(\nabla_1 f \nabla_1 + \nabla_2 f \nabla_2)] \Psi_{3C}^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2)$$

En portant l'expression de la fonction  $\Psi_{3C} = \psi_{2C} \chi_{12}$  (équation 2.94) avec

$$\psi_{2C} = A \exp\{i(\mathbf{k}_A \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_B \mathbf{r}_2)\} {}_1F_1[-i\eta_A, 1, -i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + k_A r_1)] \times \\ {}_1F_1[-i\eta_B, 1, -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)]$$

et

$$\chi_{12} = B {}_1F_1[-i\eta', 1, -i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + k_{AB} r_{12})],$$

dans l'équation ci-dessus (équation 2), on trouve

$$(1-f) \{ \Delta_1 \psi_{2C} \chi_{12} + \Delta_2 \psi_{2C} \chi_{12} + (k_A^2 + k_B^2 - 2V) \psi_{2C} \chi_{12} \} \\ = [(\Delta_1 + \Delta_2)f] \psi_{2C} \chi_{12} + 2(\nabla_1 f \nabla_1 \psi_{2C} \chi_{12} + \nabla_2 f \nabla_2 \psi_{2C} \chi_{12}), \quad (3)$$

en introduisant l'égalité

$$\Delta_i (\psi_{2C} \chi_{12}) = \chi_{12} \Delta_i \psi_{2C} + \psi_{2C} \Delta_i \chi_{12} + 2 \nabla_i \psi_{2C} \nabla_i \chi_{12} \quad (i = 1, 2)$$

dans l'équation (3) on peut écrire

$$(1-f) \{ \chi_{12} (\Delta_1 + \Delta_2 + k_A^2 + k_B^2 - 2V) \psi_{2C} + \psi_{2C} (\Delta_1 + \Delta_2) \chi_{12} + 2 \nabla_1 \chi_{12} (\nabla_1 \psi_{2C} - \nabla_2 \psi_{2C}) \} \\ = [(\Delta_1 + \Delta_2)f] \psi_{2C} \chi_{12} + 2 \nabla_1 f (\chi_{12} \nabla_1 \psi_{2C} + \psi_{2C} \nabla_1 \chi_{12}) + \nabla_2 f (\chi_{12} \nabla_2 \psi_{2C} + \psi_{2C} \nabla_2 \chi_{12}), \quad (4)$$

et à l'aide de l'équation

$$(\Delta_1 + \Delta_2 + k_A^2 + k_B^2 - 2V) \psi_{2C} = -2r_{12}^{-1} \psi_{2C},$$

l'équation (4) devient

$$(1-f) \{ (-2r_{12}^{-1} + \Delta_1 + \Delta_2) \chi_{12} + 2 \nabla_1 \chi_{12} (\nabla_1 \ln \psi_{2C} - \nabla_2 \ln \psi_{2C}) \} \\ = [(\Delta_1 + \Delta_2)f] \chi_{12} + 2 \nabla_1 f (\chi_{12} \nabla_1 \ln \psi_{2C} + \nabla_1 \chi_{12}) + 2 \nabla_2 f (\chi_{12} \nabla_2 \ln \psi_{2C} - \nabla_1 \chi_{12}). \quad (5)$$



$$\ln \psi_{2C} = C + i(\mathbf{k}_A \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_B \mathbf{r}_2) + \ln\{{}_1F_1[-i\eta_A, 1, -i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + k_A r_1)]\} + \ln\{{}_1F_1[-i\eta_B, 1, -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)]\}, \quad (6)$$

donc

$$\nabla_i \ln \psi_{2C} = \delta_{i1}(i\mathbf{k}_A + \nabla_1 \ln\{{}_1F_1[-i\eta_A, 1, -i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + k_A r_1)]\}) + \delta_{i2}(i\mathbf{k}_B + \nabla_1 \ln\{{}_1F_1[-i\eta_B, 1, -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)]\}). \quad (7)$$

Nous définissons des vecteurs  $\mathbf{F}$  et  $\mathbf{G}$  par

$$\mathbf{F} = \nabla_1 \ln\{{}_1F_1[-i\eta_A, 1, -i(\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_1 + k_A r_1)]\} \text{ et}$$

$$\mathbf{G} = \nabla_2 \ln\{{}_1F_1[-i\eta_B, 1, -i(\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2 + k_B r_2)]\},$$

et à l'aide de l'équation suivante

$$(\Delta_1 + \Delta_2 + k_A^2 + k_B^2 - 2r_{12}^{-1})\{\chi_{12} \exp[i(\mathbf{k}_A \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_B \mathbf{r}_2)]\} = 0,$$

nous pouvons écrire

$$(\Delta_1 + \Delta_2 - 2r_{12}^{-1})\chi_{12} = -2i\mathbf{H} \cdot (\mathbf{k}_A - \mathbf{k}_B)\chi_{12}, \quad (8)$$

où le vecteur  $\mathbf{H} = \nabla_1 \ln \chi_{12} = -\nabla_2 \ln \chi_{12}$ , c'est-à-dire :

$$\mathbf{H} = \nabla_1 \ln\{{}_1F_1[-i\eta', 1, -i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + k_{AB} r_{12})]\}$$

$$= -\nabla_2 \ln\{{}_1F_1[-i\eta', 1, -i(\mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{12} + k_{AB} r_{12})]\}$$

dans l'équation (5), et en divisant chaque membre de l'égalité (équation 5) par  $\chi_{12}$  on trouve

$$[\Delta_1 + 2(i\mathbf{k}_A + \mathbf{F} + \mathbf{H}) \cdot \nabla_1 + \Delta_2 + 2(i\mathbf{k}_B + \mathbf{G} - \mathbf{H}) \cdot \nabla_2]f - 2\mathbf{H} \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{G})(1-f) = 0. \quad (9)$$

Les solutions  $\Psi_{3C}^{(-)}$  ne peuvent être exactes que si on a pour l'équation (9) une solution triviale ( $f = 0$ ), ce qui est vérifié lorsque  $\mathcal{R} = \mathbf{H} \cdot (\mathbf{F} - \mathbf{G})$  est nul. Cette condition est satisfaite dans la région asymptotique ( $r_{12} \rightarrow \infty$ ) puisque le vecteur  $\mathbf{H}$  à de grandes valeurs de  $r_{12}$  se comporte comme  $0(r_{12}^{-1})$ .

## Annexe H

Calcul du terme de l'amplitude de diffusion  $h$ , associée au terme de capture

$$h = \langle \psi_{f_{1,2,0}}^- | V_i | \psi_i \rangle \quad (1)$$

où

$$\langle \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi_{f_{1,2,0}}^- \rangle = \varphi_{\text{He}^+}(\mathbf{r}_0) \psi_{3C}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

et

$$\langle \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | \psi_i \rangle = \phi_0(\mathbf{r}_0) \chi_{\text{He}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Posons

$$\begin{aligned} W &= (2\pi)^{-3/2} (\varepsilon^3 \pi^{-1})^{1/2} \int d\mathbf{r}_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-\varepsilon r_0) [-2r_0^{-1} + r_{01}^{-1} + r_{02}^{-1}] \\ &= \pi^{-2} (\varepsilon^3/8)^{1/2} [-2w_0 + w(\mathbf{r}_1) + w(\mathbf{r}_2)] \end{aligned}$$

$$w_0 = 8\pi [k_0^2 + \varepsilon^2]^{-1} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} w(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}_0 \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_0) \exp(-\varepsilon r_0) \|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}\|^{-1} \\ &= 2\pi^{-1} (-\partial/\partial\varepsilon) \int d\mathbf{q} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \{q^{-2} [|\mathbf{q} + \mathbf{k}_0|^2 + \varepsilon^2]^{-1}\} \end{aligned} \quad (3)$$

à l'aide de la transformation (annexe C : relation 5) de Feynman suivante

$$q^{-2} [|\mathbf{q} + \mathbf{k}_0|^2 + \varepsilon^2]^{-1} = \int_0^1 dx [|\mathbf{q} + x\mathbf{k}_0|^2 + \mu^2]^{-2},$$

où

$$\mu^2 = x(1-x) k_0^2 + x\varepsilon^2,$$

puis à l'aide de la relation

$$\int d\mathbf{q} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) [|\mathbf{q} + x\mathbf{k}_0|^2 + \mu^2]^{-2} = \pi^2 \mu^{-1} \exp\{-\mu r - ix\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\},$$

$$w(\mathbf{r}) = 2\pi(-\partial/\partial\varepsilon) \int_0^1 dx \mu^{-1} \exp\{-\mu r - ix\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}\}. \quad (4)$$

Nous remarquerons que  $w_0 = w(\mathbf{0})$ , et l'intégrale (1) peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned} h &= A_0 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [-2w_0 + w(\mathbf{r}_1) + w(\mathbf{r}_2)] \chi_{\text{He}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{3C}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= -2h_0 + h_1 + h_2 \end{aligned}$$

où

$$A_0 = (2\pi)^{-3/2} (\varepsilon^3 \pi^{-1})^{1/2} \text{ et}$$

$$h_0 = A_0 w_0 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \chi_{\text{He}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{3C}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

$$h_1 = A_0 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 w(\mathbf{r}_1) \chi_{\text{He}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{3C}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \text{ et}$$

$$h_2 = A_0 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 w(\mathbf{r}_2) \chi_{\text{He}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_{3c}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) .$$

Les trois intégrales s'obtient l'une à partir de l'autre. Il suffit alors de calculer par exemple  $h_1$ , soit

$$\begin{aligned} h_1 = A_1 \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 w(\mathbf{r}_1) \exp(-a r_1 - b r_2) \times \\ \times \exp(-i \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i \eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \times \\ \times \exp(-i \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2) {}_1F_1[i \eta_A; 1; i(k_A r_2 + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2)] \times \\ \times {}_1F_1[i \eta; 1; i(k_{AB} r_{21} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{21})] \end{aligned} \quad (5a)$$

où

$$\begin{aligned} A_1 = N(2\pi)^{-3} A_0 \exp[\pi(\eta + \eta_A + \eta_B)/2] \Gamma(1-i\eta) \Gamma(1-i\eta_A) \Gamma(1-i\eta_B) \\ h_1 = 2\pi A_1 (-\partial/\partial \varepsilon) \int_0^1 dx \mu^{-1} \Phi(x) \quad \delta \rightarrow 0^+ \end{aligned} \quad (5b)$$

avec

$$\begin{aligned} \Phi(x) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp[-(a+\mu)r_1 - b r_2] \times \\ \times \exp[-i(\mathbf{k}_B + x \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}_1] {}_1F_1[i \eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \times \\ \times \exp(-i \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2) {}_1F_1[i \eta_A; 1; i(k_A r_2 + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2)] \times \\ \times \exp(-\delta r_{12}) {}_1F_1[i \eta; 1; i(k_{AB} r_{21} + \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{21})] \end{aligned} \quad (6a)$$

En remplaçant la troisième hypergéométrique par sa forme intégrale (annexe C ),

$$\Phi(x) = (-2\pi i)^{-1} \int_{(0^+, 1^+)} dt (-t)^{i\eta-1} (1-t)^{-i\eta} F(t). \quad (6b)$$

$(0^+, 1^+)$  sous entend un contour fermé entourant l'intervalle  $[0, 1]$ , et en substituant  $(-t)^{i\eta} (1-t)^{-i\eta}$  par  $t^{i\eta} (1-t)^{-i\eta} \exp(\pi\eta)$  pour la partie du contour au dessus de  $[0, 1]$  et par  $t^{i\eta} (1-t)^{-i\eta} \exp(-\pi\eta)$  pour la partie en dessous. L'intégration dans le plan complexe se réduit ainsi à une intégrale simple

$$\int_{(0^+, 1^+)} dt (-t)^{i\eta} (1-t)^{-i\eta} = \int_{[1, 0]} dt t^{i\eta} (1-t)^{-i\eta} \exp(\pi\eta) + \int_{[0, 1]} dt t^{i\eta} (1-t)^{-i\eta} \exp(-\pi\eta)$$

et l'expression (6b) devient

$$\Phi(x) = (2\pi i)^{-1} [\exp(-\pi\eta) - \exp(\pi\eta)] \int_{[0, 1]} dt t^{i\eta-1} (1-t)^{-i\eta} F(t). \quad (6c)$$

$$\begin{aligned} F(t) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \exp[-(a+\mu)r_1 - b r_2] \times \\ \times \exp[-i(\mathbf{k}_B + x \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{r}_1] {}_1F_1[i \eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \times \\ \times \exp(-i \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2) {}_1F_1[i \eta_A; 1; i(k_A r_2 + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2)] \times \\ \times \exp[(-\delta + i t k_{AB}) r_{21}] \exp(it \mathbf{k}_{AB} \cdot \mathbf{r}_{21}). \end{aligned} \quad (7)$$

En posant

$$\nu = a + \mu; \lambda = (-\delta + i t k_{AB}); \Lambda_B = \mathbf{k}_B + x \mathbf{k}_0 + \mathbf{p} + i \mathbf{k}_{AB} \text{ et } \Lambda_A = \mathbf{k}_A - \mathbf{p} - i \mathbf{k}_{AB}$$

l'expression (7) de  $F(t)$  peut se réduire à

$$F(t) = (2\pi^2)^{-1} (-\partial/\partial\delta) \int d\mathbf{p} (p^2 + \lambda^2)^{-1} J(\nu, b; \Lambda_B, \mathbf{k}_B, \Lambda_A, \mathbf{k}_A) \quad (8)$$

avec

$$\begin{aligned} J(\nu, b; \Lambda_B, \mathbf{k}_B, \Lambda_A, \mathbf{k}_A) &= \int d\mathbf{r}_1 \exp(-\nu r_1) \exp(-i\Lambda_B \cdot \mathbf{r}_1) {}_1F_1[i\eta_B; 1; i(k_B r_1 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_1)] \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}_2 \exp(-b r_2) \exp(-i\Lambda_A \cdot \mathbf{r}_2) {}_1F_1[i\eta_A; 1; i(k_A r_2 + \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r}_2)] \\ &= B_0 \int_{[0,1]} dt_1 t_1^{i\eta_B-1} (1-t_1)^{-i\eta_B} \times \int_{[0,1]} dt_2 t_2^{i\eta_A-1} (1-t_2)^{-i\eta_A} J_1(t_1, t_2) \end{aligned}$$

où

$$B_0 = [\Gamma(i\eta_A) \Gamma(1-i\eta_A) \Gamma(i\eta_B) \Gamma(1-i\eta_B)]^{-1}.$$

et

$$\begin{aligned} J_1(t_1, t_2) &= \int d\mathbf{r}_1 \exp[(-\nu + i t_1 k_B) r_1] \exp[-i(\Lambda_B - t_1 \mathbf{k}_B) \cdot \mathbf{r}_1] \\ &\quad \times \int d\mathbf{r}_2 \exp[(-b + i t_2 k_A) r_2] \exp[-i(\Lambda_A - t_2 \mathbf{k}_A) \cdot \mathbf{r}_2]. \end{aligned}$$

Donc l'intégrale

$$\begin{aligned} F(t) &= (2\pi^2)^{-1} (-\partial/\partial\delta) \int d\mathbf{p} (p^2 + \lambda^2)^{-1} J_1(t_1, t_2) \\ &= (4\pi)^2 (-\partial^3/\partial\delta\partial\nu\partial b) \int_{[0+\infty]} ds F_1(s) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} F_1(s) &= B_0 \int_{[1,0]} dt_1 \int_{[1,0]} dt_2 t_1^{i\eta_B-1} (1-t_1)^{-i\eta_B} t_2^{i\eta_A-1} (1-t_2)^{-i\eta_A} [\sigma_0 + t_1 \sigma_1 + t_2 \sigma_2 + t_1 t_2 \sigma_{12}]^{-1} \\ &= [\Gamma(i\eta_B) \Gamma(1-i\eta_B)]^{-1} \int_{[0,1]} dt_1 t_1^{i\eta_B-1} (1-t_1)^{-i\eta_B} (\sigma_0 + t_1 \sigma_1)^{-1} \\ &\quad \times [\Gamma(i\eta_A) \Gamma(1-i\eta_A)]^{-1} \int_{[0,1]} dt_2 t_2^{i\eta_A-1} (1-t_2)^{-i\eta_A} [1 + t_2 (\sigma_2 + t_1 \sigma_{12}) / (\sigma_0 + t_1 \sigma_1)]^{-1} \end{aligned} \quad (10)$$

les fonctions  $\sigma_i$  sont des polynômes de degré 2 en fonction de  $s$  et sont données par

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= [\mathbf{Q}_1^2 + (a-g)^2] [\mathbf{Q}_2^2 + (b-g)^2] s^2 \\ &\quad + \{2a[\mathbf{Q}_2^2 + b^2 + g^2] + 2b[\mathbf{Q}_1^2 + a^2 + g^2] - 2g[|\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2|^2 + (a+b)^2]\} s \\ &\quad + [|\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2|^2 + (a+b)^2]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_1 &= -2[ip_1(a-g) + \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{Q}_1] [\mathbf{Q}_2^2 + (b-g)^2] s^2 \\ &\quad - 2\{ip_1[\mathbf{Q}_2^2 + b^2 + g^2] + 2b[ip_1 a + \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{Q}_1] - 2g[\mathbf{p}_1 \cdot (\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2) + ip_1(a+b)]\} s \\ &\quad - 2[\mathbf{p}_1 \cdot (\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2) + ip_1(a+b)]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_2 &= -2[ip_2(b-g) + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{Q}_2] [\mathbf{Q}_1^2 + (a-g)^2] s^2 \\ &\quad - 2\{ip_2[\mathbf{Q}_1^2 + a^2 + g^2] + 2a[ip_2 b + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{Q}_2] - 2g[\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2) + ip_2(a+b)]\} s \\ &\quad - 2[\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{Q}_1 + \mathbf{Q}_2) + ip_2(a+b)] \end{aligned}$$

et

$$\sigma_{12} = 4 [ip_1(a-g) + \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{Q}_1] [ip_2(b-g) + \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{Q}_2] s^2 - 4 \{ p_1 p_2 (a+b-g) + g \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{p}_1 - i [p_1 p_2 \cdot \mathbf{Q}_2 + p_2 p_1 \cdot \mathbf{Q}_1] \} s - 2 [p_2 p_1 - \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{p}_1],$$

avec les quantités

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1 &= \mathbf{k}_B + x \mathbf{k}_0 - t \mathbf{k}_{AB} ; & \mathbf{p}_2 &= \mathbf{k}_A + t \mathbf{k}_{AB} ; \\ \mathbf{Q}_1 &= \mathbf{p}_1 - \mathbf{q}_1 ; & \mathbf{Q}_2 &= \mathbf{p}_2 - \mathbf{q}_2 ; \\ a &= a + \mu(x) ; & b &= b \quad \text{et} \quad g = -\delta + i t k_{AB} . \end{aligned}$$

La dixième intégrale de la relation (10) n'est autre que  $\{1 + (\sigma_2 + t_1 \sigma_{12}) / (\sigma_0 + t_1 \sigma_1)\}^{-i\eta_A}$ , donc

$$F_1(s) = [\Gamma(i\eta_B) \Gamma(1-i\eta_B)]^{-1} \int_{[0,1]} dt_1 t_1^{i\eta_B-1} (1-t_1)^{-i\eta_B} (\sigma_0 + t_1 \sigma_1)^{-1} \{1 + (\sigma_2 + t_1 \sigma_{12}) / (\sigma_0 + t_1 \sigma_1)\}^{-i\eta_A} . \quad (11)$$

A l'aide des substitutions

$$A = \sigma_0 / \sigma_1 ; \quad B = (\sigma_0 + \sigma_2) / (\sigma_1 + \sigma_{12}) \quad \text{et} \quad x = B / (B+1) (t_1^{-1} - 1)$$

l'intégrale (10)

$$F_1(s) = [\Gamma(i\eta_B) \Gamma(1-i\eta_B)]^{-1} \int_C dx x^{-i\eta_B} (1+x)^{-i\eta_B} \{1 + xAB^{-1}(1+B)(1+A)^{-1}\}^{-1+i\eta_A} . \quad (12)$$

Le contour C désigne l'espace complexe décrit par  $x = (t_1^{-1} - 1) B / (B+1)$  quand  $t_1$  parcourt l'intervalle  $[0,1]$ , c'est-à-dire  $C = [0, +\infty[ x B / (B+1)$ . A l'aide du théorème de Cauchy, cet espace sera réduit au demi-axe réel positif  $[0, +\infty[$  lorsque  $x_0$ , solution de l'équation du premier degré  $1 + x_0 AB^{-1}(1+B)(1+A)^{-1} = 0$ , est à l'extérieur de C. En utilisant la représentation intégrale de la fonction hypergéométrique

$${}_2F_1(\alpha, \beta; 1; 1-z) = [\Gamma(\beta) \Gamma(1-\beta)]^{-1} \int_{[0,+\infty[} dt t^{\beta-1} (1+t)^{\alpha-1} (1+zt)^{-\alpha}$$

avec la condition  $1 > \text{Re}(\beta) > 0$ , et à l'aide de la relation

$${}_2F_1(\alpha, \beta; 1; 1-z) = (1-z)^{1-\beta-\alpha} {}_2F_1(1-\alpha, 1-\beta; 1; z) ,$$

L'équation (12) peut se réduire à

$$F_1(s) = \sigma_0^{-1} (\sigma_0 / \sigma_3)^{i\eta_B} (\sigma_0 / \sigma_4)^{i\eta_A} {}_2F_1\{i\eta_B, i\eta_A; 1; \sigma_5 / \sigma_6\} . \quad (13)$$

Donc l'équation (9) devient

$$F(t) = (4\pi)^2 (-\partial^3 / \partial \delta \partial v \partial b) \int_{[0,+\infty[} ds \sigma_0^{-1} (\sigma_0 / \sigma_3)^{i\eta_B} (\sigma_0 / \sigma_4)^{i\eta_A} {}_2F_1\{i\eta_B, i\eta_A; 1; \sigma_5 / \sigma_6\} , \quad (14)$$

où

$$\sigma_3 = \sigma_0 + \sigma_1 ; \quad \sigma_4 = \sigma_0 + \sigma_2 ; \quad \sigma_5 = (\sigma_1 \sigma_2 - \sigma_0 \sigma_{12}) \quad \text{et} \quad \sigma_6 = \sigma_3 \sigma_4 .$$

A l'aide des équations (5b, 6a, 6b et 9), l'expression de  $h_1$  devient

$$h_1 = 2\pi A_0 (4\pi)^2 (\pi i)^{-1} \sinh(-\pi\eta) (\partial^4 / \partial \varepsilon \partial \delta \partial v \partial b) \int_{[0,1]} dx \mu^{-1} \{ \int_{[0,1]} dt t^{i\eta-1} (1-t)^{-i\eta} \int_{[0,+\infty[} ds F_1(s) \} . \quad (15)$$