

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE FERHAT ABBAS – SETIF1

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT 3^{eme} cycle

En: Physique

Spécialité: Physique théorique

Par: Kawther BECHANE

thème

“Etude complète des effets de distorsions et de l'interaction post-collisionnelle dans les processus d'ionisation par impact d'électrons : Application aux cibles atomiques”

Soutenue publiquement le // devant la commission d'examen:

M.	Kamel BENCHEIKH	Prof. à l'UFA Sétif-1	Président
M.	Hocine AOUCHEE	Prof. à l'UMM Tizi Ouzou	Examineur
M.	Abdelaziz MANSOURI	Prof. à l'UFA Sétif-1	Examineur
M.	Yacine BOUGUERRA	MCA à l'UFA Sétif-1	Examineur
M.	Salim HOUAMER	Prof. à l'UFA Sétif-1	Directeur de thèse
M.	Adnan NAJA	Prof. à l' U. Libanaise Liban	Membre Invité

Remerciement

Ce travail de thèse a été réalisé au Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques (*LPQSD*) de l'université Ferhat Abbas Sétif 1. Les travaux et les résultats que j'ai l'honneur de vous présenter dans cette thèse ont été effectués sous la direction de Mr. Salim HOUAMER, Professeur à l'université Ferhat Abbas Sétif 1.

Je tiens en premier lieu à remercier Mr Salim HOUAMER, mon Directeur de thèse. Je le remercie de m'avoir proposé ce sujet de thèse, j'ai beaucoup appris à votre contact, tout en prenant un très grand plaisir à être votre étudiante de doctorat.

Je tiens ensuite à exprimer ma profonde reconnaissance à Mr A. MANSOURI, Professeur à l'université Ferhat Abbas de Sétif 1, pour tous les encouragements et pour ses conseils. Je le remercie pour avoir accepté de participer au jury comme examinateur.

Je remercie Mr Claude Dal Cappello, Professeur à l'université de Metz, pour avoir beaucoup contribué à la concrétisation de ce travail.

Je remercie Mr. K. BENCHEIKH, Professeur à l'université Ferhat Abbas Sétif 1, président du jury de soutenance de mon master, pour avoir accepté de présider le jury de ma thèse.

Je remercie également Mme I. KADA, Maître de Conférences à l'université Sétif 1, pour ses remarques qui m'ont été très utiles, son aide, son attention et ses nombreux encouragements.

Je remercie aussi membres du jury : Mr H. AOUCHICHEE, Professeur à l'université de Tizi Ouzou. Y. BOUGUERRA, Maître de Conférences à l'université Sétif 1, je les remercie pour avoir accepté d'être rapporteurs du jury de ce mémoire et d'avoir consacré une partie de leur temps et de leurs efforts pour 'rapporter' sur mon travail.

Mes remerciements vont également à Mr A. NAJA, Professeur à l'université de Libanaise, pour avoir accepté notre invitation.

Je remercie aussi Mr S. ADDOUNE, Maître de Conférences à l'université de BBA pour ses conseils.

Mes sincères remerciements sont adressés à mes parents et à mon mari, sans eux cette thèse n'aurait pas vu le jour.

Table des matières

Introduction générale	v
1 Étude générale de la simple ionisation	1
1.1 Introduction	1
1.2 Description de l'interaction	2
1.3 Section efficace	4
1.3.1 Amplitude de diffusion	5
1.3.2 Approximation de Born	6
1.4 Cinématique de la simple ionisation	7
1.5 Géométrie asymétrique coplanaire	8
1.6 Notion de corrélation électronique	9
1.7 Fonction d'onde	9
1.7.1 Fonction d'onde de l'électron incident	11
1.7.2 Fonction d'onde de l'électron atomique	12
1.8 Types d'études (e,2e)	14
1.8.1 Étude dynamique	14
1.8.2 Étude de structure	14
1.9 Conclusion	15
2 Quelques approximations et modèles théoriques	16
2.1 Introduction	16
2.2 Etude des états liés et du continuum des systèmes atomiques	17
2.3 Description de l'état initial	17
2.4 Description de l'état final	22
2.4.1 L'approximation de Born aux ondes plane (<i>PWBA</i>)	22
2.4.2 L'approximation de Born aux ondes coulombienne (<i>CWBA</i>)	22
2.4.3 L'approximation de Born aux ondes distordue (<i>DWBA</i>)	23

2.4.4	Modèle des ondes distordues (3DW)	24
2.4.5	Modèle de l'onde distordue (1DW)	24
2.4.6	Modèle de Brauner, Briggs et Klar (BBK)	25
2.4.7	Méthode de la matrice R (RM)	26
2.5	Conclusion	27
3	Étude des effets de distorsion	28
3.1	Introduction	28
3.2	Approximation de la charge variable	29
3.3	Calcul de la charge variable de quelques atomes	30
3.3.1	Hélium	30
3.3.2	Néon	31
3.3.3	Argon	31
3.4	Calcul de la charge variable de quelques molécules	32
3.5	Modèles approximés de distorsion	35
3.6	Validité du modèle (BBK2CWZ)	39
3.7	Résultats et discussion	39
3.7.1	Application à l'atome de Néon	40
3.7.2	Application à l'atome de l'Argon	41
3.8	Conclusion	46
4	Le modèle (3CWZ) résultats et discussions	47
4.1	introduction	47
4.2	Description de l'interaction	48
4.3	Résultats et discussion	51
4.4	Conclusion	58
	Conclusion générale	59
	A Orbitales atomiques	61
	B Amplitude de diffusion dans le modèle (BBK)	63
	C Effets d'échange	66
	D Calcul de la charge variable	70

Introduction générale

L'ionisation d'un atome et de molécules par impact de particules chargées est l'un des processus les plus étudiés dans les expériences de diffusion. C'est le phénomène par lequel un atome ou une molécule est bombardé par une particule (dans le présent travail des électrons) et par conséquent la cible perd un ou plusieurs électrons et devient porteur de charges électriques positives. Dans les expériences de coïncidence, toutes les informations concernant les électrons dans la voie de sortie sont connues (énergies et directions). Dans le cas de la simple ionisation le processus est noté $(e, 2e)$, pour la double ionisation le processus est noté $(e, 3e)$. Ce processus présente un intérêt considérable non seulement au niveau théorique mais aussi en sciences de la vie où les données numériques des sections efficaces différentielles et totales se sont avérées indispensables pour modéliser l'interaction particule chargée-matière vivante, en particulier pour la thérapie du cancer.

Pour profiter des prédictions de la théorie il est souvent nécessaire de modéliser un formalisme mathématique rigoureux selon la nature du processus à étudier. Cependant, suivre la rigueur d'un formalisme mathématique souvent mène à des complications au niveau des calculs numériques qui rendent parfois impossible l'extraction des résultats, le temps nécessaire pour obtenir un résultat est aussi un facteur très important. Donc nous sommes souvent obligés de faire des approximations pour simplifier le formalisme mathématique d'un côté pour rendre les calculs maniables et d'un autre côté pour pouvoir tirer des informations sur la nature du processus étudié. Cependant, les résultats donnés par la modélisation doivent être en accord avec ceux donnés par d'autres modèles théoriques précédents de précision déjà confirmée, et le plus important c'est qu'ils doivent être en bon accord avec les données de l'expérience.

Du point de vue historique le développement expérimental et théorique du processus d'ionisation par impact électronique a débuté très tôt au début du vingtième siècle.

En 1928, Langmuir et Jones [1], commencent les premiers travaux sur l'ionisation, et suivis par ceux de Rudberg en 1930 [2]. La même année Bethe [3], puis Massey et Mohr en 1933 [5] ont décrit de manière théorique l'ionisation en se servant de l'approximation de Born (l'un des traitements les plus utilisés tant que l'énergie incidente est grande devant l'énergie d'ionisation d'un électron de la cible).

En 1932, Hugues et McMillen [4] mesurent les premières sections totales, simplement et doublement différentielles. Il faudra ensuite attendre 1969 pour qu'Amaldi et al. [9], ainsi qu'Ehrhardt et al. [10], effectuent les premières expériences de détection en coïncidence pour déterminer les sections efficaces triplement différentielles (l'avantage de cette méthode est d'obtenir des sections efficaces différentielles qui sont les plus riches en informations).

En 1960 Peterkop, puis en 1964 et 1968 Rudge et Seaton, décrivent l'état final lors de l'ionisation en essayant de tenir compte de la présence des trois particules en interaction dans la voie de sortie. Par la suite, Ehrhardt et al, en 1982 et Lahmam-Bennani et al [13], en 1983 conti-

nuent les expériences sur la simple ionisation alors que les théories se développent en modélisant de mieux en mieux les interactions dans la voie finale (Brauner et al [14], en 1989). Néanmoins, en ne considérant que le problème de l'ionisation de l'atome de l'hydrogène (l'atome le plus simple) par impact d'électrons, les méthodes utilisées à ce propos restent inadaptées pour les autres cibles qu'elles soient atomiques ou moléculaires.

En 1983, Byron et al, ont été les premiers à réaliser le calcul de la 2^{ème} approximation de Born, mais seuls l'état fondamental $n = 1$ et les états excités $n = 2$ ont été pris en compte. Ces auteurs ont ensuite considéré l'approximation de fermeture pour évaluer les autres contributions.

En 1992, Franz et Altick ont remplacé la fonction hypergéométrique tenant compte de la répulsion des deux électrons par son comportement asymptotique. Popov et al (1994) puis Nicolas et al (1996) ainsi que plusieurs auteurs ont remplacé la fonction hypergéométrique décrivant l'interaction électron-électron par l'unité tout en gardant sa normalisation (modèle dit de Gamow), pour rendre les calculs théoriques plus simples.

En 2001, Fang et Bartschat utilisent la seconde approximation de Born avec des traitements sophistiqués tel que le modèle de (*DWBA*) mais en ne calculant qu'une partie des termes.

En 2003, Houamer et al [17], ont appliqué la seconde approximation pour l'étude de l'ionisation de H_2 .

En 2004, Mansouri et al, ont aussi utilisé la seconde approximation de Born pour l'ionisation double de H_2 (chaque électron éjecté est décrit par une seule onde coulombienne). La même année, Kheifets a appliqué la seconde approximation de Born en utilisant le modèle (*CCC*) (Convergent Close Coupling) pour la double ionisation de l'hélium mais uniquement pour les moments de transfert très faibles.

En 2005, Ancarani et Dal Cappello ont étudié ce même processus mais avec un meilleur modèle, appelé (*BBK*).

Le présent travail se compose de quatre chapitres.

Dans le chapitre 1 sont développés quelques éléments théoriques de la théorie des collisions, les définitions et méthodes de calcul relatives au concept de section efficace de diffusion y sont notamment introduites.

Le deuxième chapitre est consacré à la description des états, initiaux et finaux, dans une collision ($e, 2e$) des cibles atomiques, pour décrire les ondes représentant les électrons incident, diffusé et éjecté. La modélisation peut aller de l'onde plane simple pour les électrons rapides jusqu'aux différents modèles du double continuum, en passant par une description sous forme de produits d'ondes coulombiennes ou par des ondes distordues. Il faut ajouter à ces méthodes, les approches plus complexes comme la méthode R-Matrix ou la méthode de (*CCC*) "convergent close-coupling", qui sont des approches numériques et qui demandent des moyens de calcul énormes pour la construction des bases nécessaires dans la détermination de la section efficace des processus collisionnels.

Dans le troisième chapitre, nous présentons des calculs de sections efficaces triplement différentielles de quelque cibles atomiques en utilisant les modèles de distorsions, Une description du double continuum est donnée en suivant la méthode utilisée par Brauner et al (1989). En effet, l'étude des sections efficaces triplement différentielles nous informe sur l'importance de la corrélation, en particulier sur la description du double continuum représente un intérêt certain dans le calcul de la section efficace.

Dans le dernier chapitre Nous nous proposons, de développer une étude systématique pour inclure les effets de corrélation dans l'état final ainsi que les effets de distorsion, dans le but d'améliorer la description du processus de simple ionisation par impact d'électrons. L'étude sera réalisée pour les cibles atomiques (Argon) en un premier lieu avant de la généraliser aux systèmes plus complexes. Le choix de l'atome d'Argon est justifié par la disponibilité de données expérimentales récentes d'une part, et par le fait que beaucoup de ces données restent difficiles à prédire théoriquement par la théorie d'autre part.

Abréviations utilisées

<i>(e,2e)</i>	Symbolisant le processus d'ionisation simple par impact d'électrons.
<i>(SETD)</i>	La section efficace triplement différentielle.
<i>(u.a)</i>	Unité atomique.
<i>(FBA)</i>	La première approximation de Born (First Born Approximation).
<i>(PCI)</i>	L'interaction post-collisionnelles (Post-Collision Interaction).
<i>(PWBA)</i>	L'approximation de Born aux ondes planes.
<i>(CWBA)</i>	L'approximation de Born aux ondes coulombienne .
<i>(DWBA)</i>	L'approximation de Born aux ondes distordues.
<i>(BBK)</i>	Modèle proposé par Brauner, Briggs et Klar.
<i>(1CW)</i>	Une seule onde coulombienne.
<i>(2CW)</i>	Deux ondes coulombiennes.
<i>(1DW)</i>	Une seule onde distordue.
<i>(3DW)</i>	Trois ondes distordues.
<i>(BBK2CWZ)</i>	Deux ondes coulombiennes avec charge variable pour les électrons sortantes.
<i>(3CWZ)</i>	Trois ondes coulombiennes avec charge variable .

Chapitre 1

Étude générale de la simple ionisation

1.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les outils théoriques de base concernant l'étude et l'interprétation des résultats d'expériences de coïncidence ionisantes par impact électronique, appelées $(e, 2e)$. Envisageons dans ce but deux systèmes initialement isolés et préparés dans des états individuels, 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. 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 nous avons émission de nouvelles particules appelées électron éjecté et diffusé en plus de l'ion résiduel. Les électrons collectés dans la voie de sortie sont détectés en coïncidence¹.

Les mesures effectuées sur les systèmes ainsi formés, et notamment leurs caractéristiques énergétiques, leurs directions d'émergences. Permettent d'obtenir des informations sur le potentiel d'interaction et la structure initiale interne des particules.

La description des phénomènes de diffusion implique l'introduction du concept de sections efficaces de diffusion impliquant automatiquement la comparaison des mesures expérimentales aux résultats fournis par les modèles théoriques. Le calcul théorique des sections efficaces nécessite le calcul d'amplitudes de diffusion, le problème revient alors à trouver les solutions de l'équation de Schrödinger² dans les voies d'entrée et de sortie permettant de déterminer les différentes quantités physiques décrivant la collision telle que l'amplitude de diffusion.

Dans ce chapitre, nous présentons un aperçu des notions élémentaires de la théorie des collisions soulignant les idées principales du contexte.

1. Le principe de mesure en coïncidence consiste à déterminer, parmi tous les électrons détectés, ceux qui proviennent du même événement.

2. ses solutions dites fonctions d'onde du système "notion introduite par Schrödinger en 1926".

1.2 Description de l'interaction

Le processus $(e, 2e)$ symbolise l'ionisation simple d'une cible atomique (ou moléculaire) A, par impact³ d'électron e_i , il peut être représenté comme suit :



où A^+ représente l'ion résiduel, e_i , e_s et e_e sont respectivement les électrons incident, diffusé et éjecté, ayant chacun une énergie E_j et un vecteur d'onde \vec{k}_j ($j = i, s, e$).

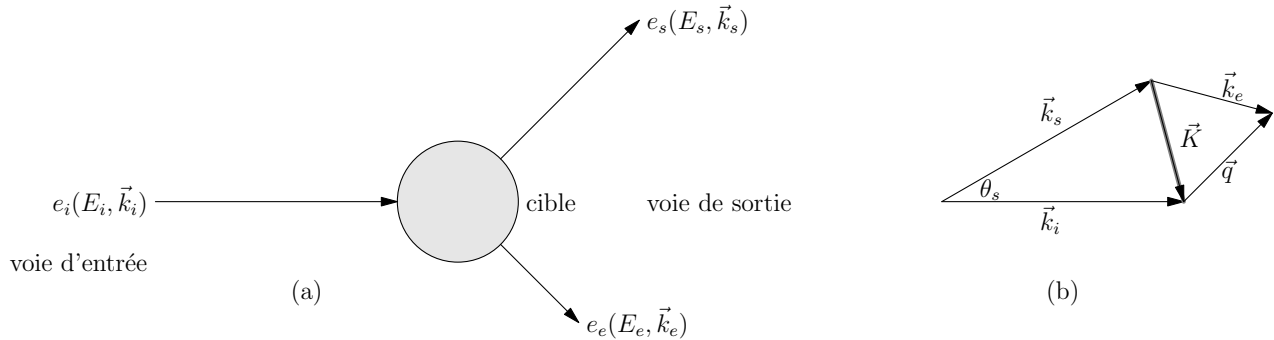


FIGURE 1.1: (a) Processus de simple ionisation $(e, 2e)$. (b) Diagramme illustrant les vecteurs moments pertinents durant le processus d'ionisation $(e, 2e)$.

Les deux électrons émergeant après la collision sont indiscernables [43], les termes de diffusé et éjecté sont donc équivalents. Quant l'un des électrons est rapide et l'autre lent, le premier est dit diffusé et le second éjecté.

Les équations de conservation des énergies et les quantités de mouvement totales sont données par :

$$E_i = E_s + E_e + E_{ion} + E_{rec}^{A^+}$$

$$\vec{k}_i = \vec{k}_s + \vec{k}_e + \vec{q}$$

E_{ion} représente l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale de la cible, et $E_{rec}^{A^+}$ est l'énergie de recul⁴ de la cible. avec \vec{q} représente la quantité de mouvement de l'ion résiduel. Lors de la collision, le projectile perd une impulsion $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ qu'on appelle le moment de transfert.

Le plan de collision est défini par (\vec{k}_i, \vec{k}_s)

Il faut noter que le type d'informations acquises de l'expérience de diffusion dépend de la valeur du moment de transfert :

1. Pour $|\vec{K}| \sim 1 - 2(u.a)$ (valeurs faibles de K), l'expérience donne des informations sur la dynamique de la collision.
2. Pour $|\vec{K}| \sim 4 - 7(u.a)$, l'expérience donne des informations sur la structure de la cible.

Plusieurs processus peuvent se produire lors de la collision [35] :

3. Le faisceau incident ne doit pas être très intense pour que l'interaction entre les particules incidentes soit négligée, ni très faible pour qu'on puisse observer un nombre d'évènements considérables durant l'expérience.

4. négligeable à cause de la différence de masse de l'électron et de l'ion résiduel.

1. Collision élastique : l'état interne des particules reste inchangé $A + B \rightarrow A + B$
2. Collision inélastique : la cible est déformée en changeant de composition après l'interaction $A + B \rightarrow A' + B'$
3. Réaction : le système composite ($A+B$) donne naissance à plusieurs particules différentes de A et B .
 $A + B \rightarrow C_1 + C_2 + \dots + C_n$ avec $n \geq 2$

Exemple 1.1.

$e + H(1s) \rightarrow e + H(1s)$ (collision élastique)

$e + H(1s) \rightarrow e + H^*$ (collision inélastique)

$e + H(1s) \rightarrow 2e + H^+$ (réaction)

Notre problème consiste à étudier l'interaction d'une particule de masse m_1 et d'énergie E avec un potentiel $V(\vec{r})$ représentant la cible de masse m_2 . Cette particule incidente peut être un électron ou positron alors que la cible est soit un atome, un ion ou une molécule. Cela revient donc à résoudre l'équation de Schrödinger qui s'écrit :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \vec{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \vec{\nabla}_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (1.2)$$

En utilisant les coordonnées du centre de masse et les coordonnées relatives

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad \text{et} \quad M = m_1 + m_2$$

Dans le système du centre de masse, la forme (1.2) devient alors :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + V(r) \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.3)$$

où μ est la masse réduite. L'équation (1.3) représente la diffusion d'une particule de masse μ par⁵ un potentiel $V(r)$. On suppose que le potentiel est de courte portée, l'interaction a lieu seulement dans cette région, appelée la région de diffusion ou la portée du potentiel. Il est alors commode d'effectuer le changement suivant :

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}, \quad U(r) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}$$

. L'équation (1.3) s'écrit

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2 - U(r))\psi(\vec{r}) = 0. \quad (1.4)$$

Hors de la région de diffusion la solution est tout simplement une onde plane de vecteur d'onde \vec{k}_i qu'on note ψ_{inc} telle que $\psi_{inc}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$

Après la collision, la présence du potentiel de la cible qui est supposé de courte portée engendre la diffusion d'une partie de l'onde incidente, par conséquent la fonction d'onde associée à la particule diffusée ψ_{sc} s'écrit $\psi_{sc}(\vec{r}) = f(\theta, \varphi) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{r}$.

La quantité $f(\theta, \varphi)$ est appelée amplitude de diffusion, elle dépend au potentiel V , θ est l'angle entre \vec{k}_i et \vec{k} .

5. Dans le cas d'un potentiel central $V(\vec{r}) = V(r)$.

La fonction d'onde totale est la superposition d'une onde incidente et d'une onde diffusée [36] et s'écrit donc

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(\theta, \varphi) \frac{e^{ik \cdot r}}{r}. \quad (1.5)$$

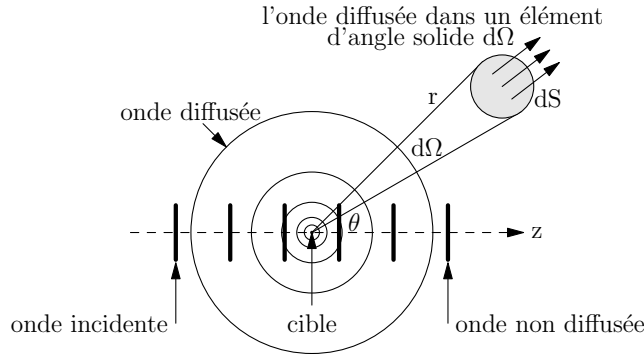


FIGURE 1.2: Les vecteurs d'ondes incidents et diffusés.

1.3 Section efficace

Dans une expérience de diffusion [40], on considère un flux F_{inc} de particules incidentes, homogène et de même énergie, dirigées vers la cible (particules identiques à l'état gazeux). Loin de la zone d'interaction, on dispose d'un détecteur mesurant le nombre dN de particules diffusées par unité de temps dans un élément d'angle solide $d\Omega$ ($d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$). Le coefficient de proportionnalité entre dN et la densité de flux de particules incidentes j_{inc} est par définition la section efficace différentielle⁶ de collision, diffusion, réaction, d'interaction dans la direction $d\Omega$

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{j_{inc}} \frac{dN(\theta, \varphi)}{d\Omega}. \quad (1.6)$$

La section efficace totale de diffusion est obtenue par l'intégration de la section efficace différentielle sur toutes les directions (θ, φ)

$$\sigma = \iint \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\varphi. \quad (1.7)$$

Pour calculer la section efficace différentielle, introduisons d'abord les densités de courant incident et diffusé [38] suivantes

$$\begin{aligned} j_{inc} &= \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi_{inc} \vec{\nabla} \psi_{inc}^* - \psi_{inc}^* \vec{\nabla} \psi_{inc}) = \frac{\hbar k_i}{\mu}, \\ j_{sc} &= \frac{i\hbar}{2\mu} (\psi_{sc} \vec{\nabla} \psi_{sc}^* - \psi_{sc}^* \vec{\nabla} \psi_{sc}) = \frac{\hbar k}{\mu r^2} |f(\theta, \varphi)|^2. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Le nombre $dN(\theta, \varphi)$ de particules diffusées dans un élément d'angle solide $d\Omega$ dans la direction (θ, φ) et traversant un élément de la surface du détecteur $dS = r^2 d\Omega$ par unité de temps, est donné par $dN = j_{sc} dS$

6. a la dimension d'une surface.

En remplaçant dN dans l'équation (1.6) et à l'aide des densités de courant obtenues dans l'équation (1.8) on trouve finalement :

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{k}{k_i} |f(\theta, \varphi)|^2. \quad (1.9)$$

Pour une collision élastique, on prend $k = k_i$.

Remarque 1.1.

- Si, une des deux particules dans la voie de sortie est détectée dans une certaine direction, on parle dans ce cas de section efficace simplement différentielle, que l'on note $\frac{d\sigma}{d\Omega_i}$.
- Si on peut encore connaître l'énergie d'émission de cet électron, on mesure la section efficace doublement différentielle $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_i dE_i}$ qui est plus significative que celle simplement différentielle.
- La section efficace sera dite triplement différentielle (SETD), si on peut analyser les deux particules suivant leurs directions et leurs énergies, cette quantité fournit plus de détails sur la dynamique de l'interaction (puisque'elle fait intervenir tous les paramètres cinématiques entrant en jeu), on la note $\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s}$.

1.3.1 Amplitude de diffusion

L'ionisation par impact électronique est un processus très complexe [45], son étude nécessite la détermination de la probabilité de transition d'un état initial à un état final qui peut être exprimée en terme de l'élément de la matrice de transition, associé à l'amplitude de diffusion. Des méthodes approximatives sont alors nécessaires pour calculer l'amplitude de diffusion. Pour effectuer ce calcul, nous utiliserons la fonction de Green. On commence par réécrire l'équation de Schrödinger sous la forme suivante

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}). \quad (1.10)$$

Par définition, la fonction de Green est la solution de l'équation

$$(\vec{\nabla}^2 + k^2)G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (1.11)$$

L'équation (1.10) peut s'écrire sous la forme

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r}) + \int G(\vec{r} - \vec{r}')U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d\vec{r}'. \quad (1.12)$$

Cette équation est appelée équation de Lippmann-Schwinger. La fonction ψ_{inc} est la solution homogène de l'équation (1.10) et $G(\vec{r} - \vec{r}')$ est la fonction de Green de l'onde entrante (+) et celle sortante (-) définie comme suit [46]

$$G_{\pm}(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (1.13)$$

Comme le détecteur est très loin de la cible, on peut connaître la forme asymptotique de ψ (lorsque r très loin par rapport à r'). On écrit alors $|\vec{r} - \vec{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\vec{r}'} \simeq r - \frac{\vec{r}}{r}\vec{r}' \simeq r - \vec{u}_r \cdot \vec{r}'$.

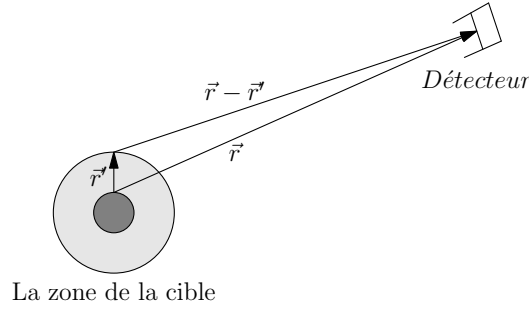


FIGURE 1.3: Une comparaison entre la distance r séparant la cible du détecteur et r' la taille de la cible.

En utilisant ces approximations⁷, on obtient

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r}) - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (1.14)$$

En identifiant cette équation avec l'équation (1.5), on trouve

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \quad (1.15)$$

avec $\psi_f(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ où ψ_f et ψ_i représentent respectivement les fonctions d'ondes finale et initiale.

L'équation (1.15) peut être encore écrite en terme de la matrice⁸ de transition T comme suit $f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{2\pi} T_{if}$. (Dans le système d'unités atomiques)

Dans ce cas, la section efficace triplement différentielles est donnée par la relation suivante

$$\sigma^{(3)} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2. \quad (1.16)$$

L'amplitude de diffusion est la quantité fondamentale pour la description du phénomène de collision, mais le calcul de cette quantité d'une manière exacte présente un certain nombre de difficultés, il est alors utile de faire appel à des approximations, parmi les approches les plus utilisées l'approximation de Born.

1.3.2 Approximation de Born

Cette formulation due à Born, permet d'exprimer l'opérateur de transition T sous la forme d'un développement en terme de potentiel d'interaction V , ce développement en série est obtenu en utilisant la méthode des approximations successives [47], par conséquent, la solution de l'équation intégrale de diffusion (1.14) se met sous la forme

$$\psi_n(\vec{r}) = \psi_{n-1}(\vec{r}) + \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}_n|}}{|\vec{r}-\vec{r}_n|} V(\vec{r}_n) \psi_{n-1}(\vec{r}_n) d\vec{r}_n. \quad (1.17)$$

7. Comme l'onde diffusée est une onde sortante, nous utiliserons la fonction de Green G_+ .

8. La matrice de diffusion relie la fonction d'onde qui décrit le système avant la collision à la fonction d'onde qui décrit le système après la collision.

A l'ordre zéro, la solution est $\psi_0 = \psi_{inc}$

La première approximation de Born (FBA) donne

$$d\sigma = \frac{k}{k_i} \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2 d\Omega. \quad (1.18)$$

Remarque 1.2. (FBA) est valide lorsque l'énergie cinétique des particules incidentes est très grande par rapport au potentiel de diffusion pour une diffusion élastique.

1.4 Cinématique de la simple ionisation

Plusieurs configurations cinématiques et géométriques peuvent être utilisées pour l'ionisation simple [15] voir (*figure 1.4*). Si l'éjection et la diffusion sont dans le même plan d'incidence, la géométrie est dite coplanaire, sinon elle est non coplanaire. Aussi, la sortie des deux électrons émergeant suivant des angles $\theta_s = \theta_e$ et avec des énergies égales détermine une géométrie symétrique, ou une géométrie asymétrique si l'émergence se fait avec des angles de diffusion et d'éjection différents (voir *tableau 1.1*).

TABLE 1.1: Géométries possibles des collisions

Géométries	Coplanaire	Non-coplanaire
Symétrique	\vec{k}_i, \vec{k}_s et \vec{k}_e dans le plan de collision $E_s = E_e$	\vec{k}_i, \vec{k}_s et \vec{k}_e chacun dans un plan $E_s = E_e$
Asymétrique	\vec{k}_i, \vec{k}_s et \vec{k}_e dans le plan de collision $E_s \neq E_e$	\vec{k}_i, \vec{k}_s et \vec{k}_e chacun dans un plan $E_s \neq E_e$

En général, les trois vecteurs d'impulsions \vec{k}_i, \vec{k}_s et \vec{k}_e ne se trouvent pas dans le même plan d'une géométrie coplanaire, sauf dans le cas où l'angle azimutal relatif aux deux électrons émergeant défini par $\varphi = \varphi_s - \varphi_e$, prend les valeurs 0 ou π

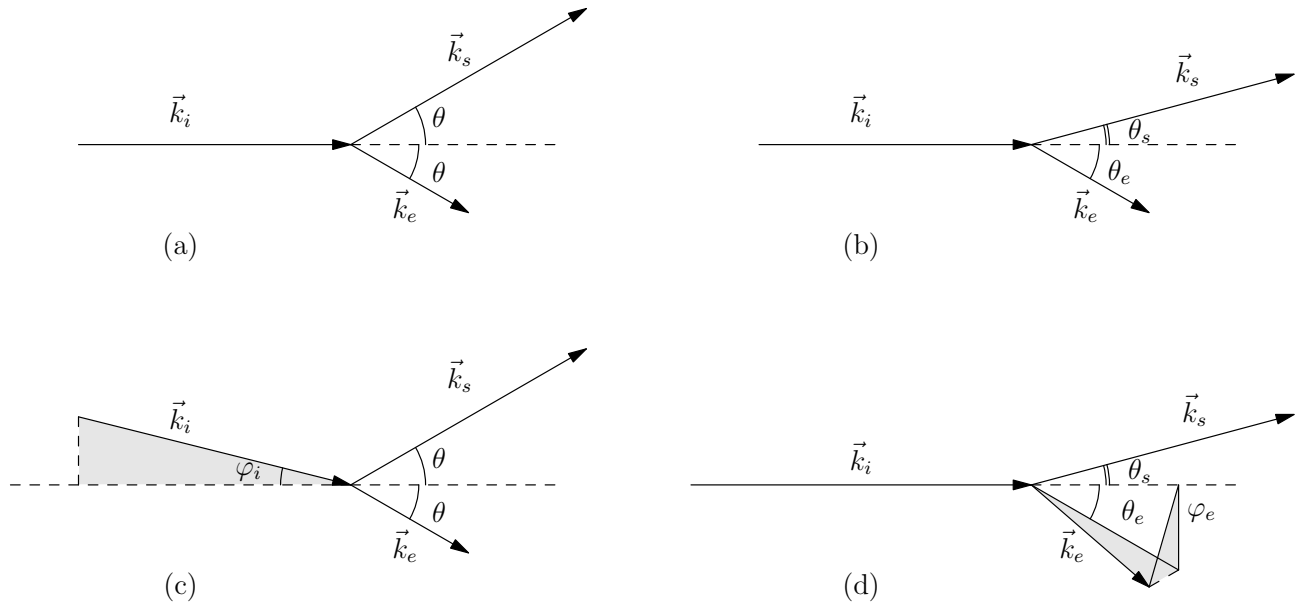


FIGURE 1.4: Schéma représentant les cinématiques de la réaction $(e, 2e)$. (a) la géométrie symétrique coplanaire où $\theta_s = \theta_e = \theta$. (b) la géométrie asymétrique coplanaire où $E_s \gg E_e$, θ_s est fixé et θ_e varie dans le plan de diffusion. (c) la géométrie symétrique non coplanaire où φ_i est fixé, θ_s et θ_e varient. (d) la géométrie asymétrique non coplanaire où φ_e varie.

1.5 Géométrie asymétrique coplanaire

Dans cette géométrie l'angle de diffusion θ_s est fixé inférieur à 20 degrés pour avoir la meilleure résolution expérimentale tandis que l'angle d'éjection θ_e est variable. Les électrons ont des énergies très différentes, l'électron rapide représente l'électron diffusé. Dans cette géométrie, les expériences sont réalisées à différentes gammes d'énergie de l'électron incident [41] : hautes énergies, énergies intermédiaires et basses énergies.

Hautes énergies ($E_i \geq 600$ eV)

- **Régime impulsif** (à grand transfert d'impulsion) : Dans ce régime la (*SETD*) montre un seul pic dans la direction du moment de transfert nommé pic binaire. La (*FBA*) suffit généralement pour décrire ce genre de collision qui fournit un test important pour l'étude de la structure de la cible.
- **Régime dipolaire** (à faible transfert d'impulsion) : La (*SETD*) montre deux lobes⁹, un lobe binaire dans la direction de \vec{K} et un lobe de recul dans la direction opposée au transfert. En effet, l'électron éjecté quitte la cible après la collision avec une faible vitesse et subit une réflexion due à l'attraction de l'ion résiduel. La dynamique des collision dans ce régime est bien décrite par (*FBA*).

9. qui sont répartis de manière symétrique vis-à-vis de la direction de transfert \vec{K} .

Énergies intermédiaires ($100eV \leq E_i \leq 600eV$)

La (*SETD*) montre deux lobes : un lobe binaire et un lobe de recul, cependant, la répartition n'est plus symétrique par rapport aux directions de transfert, ce phénomène est dû aux corrélations post-collisionnelles (*PCI*) des deux électrons sortants, ces deux électrons émergent avec des vitesses proches après la collision, ils ont tendance à se repousser mutuellement. Divers modèles théoriques qui tiennent compte de ces interactions par exemple, le modèle (*BBK*), peuvent expliquer ce décalage.

Basses énergies ($20eV \leq E_i \leq 100eV$)

Dans cette région d'énergie, il apparaît également deux pics un pic, binaire et un de recul décalés par rapport aux directions de transfert, le processus de collision est beaucoup plus complexe. En effet, plusieurs effets contribuent à cette complexité, les effets de distorsion des électrons éjectés, les effets de (*PCI*), les effets de collision multiple etc. . .

1.6 Notion de corrélation électronique

Le mot corrélation signifie que toute perturbation appliquée à une partie du système se répercute sur toutes les autres parties. Pour une bonne description du système, il faut tenir compte des corrélations électroniques par le choix d'une bonne fonction d'onde décrivant la cible.

Le type de corrélations qui existe entre les états liés de la cible ainsi que celles entre les électrons du continuum est appelé corrélation structurelle. En effet, il s'agit des interactions coulombiennes entre les électrons de la cible, exprimées par des potentiels en $\frac{1}{r_{ij}}$, qui rendent impossible la détermination exacte des solutions de l'équation de Schrödinger pour tout atome possédant au moins deux électrons. La structure de ces atomes ne peut donc être décrite que par approximation.

Un autre type de corrélation est celui induit par la collision elle-même, appelé corrélation dynamique. En effet, le projectile (ayant une faible énergie) interagit avec la cible, ce qui a pour effet réciproque de modifier la fonction d'onde de l'électron incident. Ces effets de corrélation dynamique en voie d'entrée, sont pris en compte par des modèles à ondes distordues, et les interactions coulombiennes des électrons issus de l'ionisation, doivent être présentes dans la description de la fonction d'onde de l'état final, par une corrélation dynamique en voie de sortie.

1.7 Fonction d'onde

Dans le cas le plus simple de diffusion de deux particules interagissant à travers le potentiel V , l'équation de Schrödinger [41] s'écrit $H\psi = E\psi$.

Dans l'état initial du système le hamiltonien H peut s'écrire comme $H = K + V$ où K est le hamiltonien du système en l'absence de toute interaction V entre l'électron incident et la cible.

Dans l'état final, l'ion A^+ et les électrons émergents se trouvent à nouveau séparés (voir [figure1.5](#)), le hamiltonien H du système peut s'écrire alors $H = K' + V'$ où K' représente le

hamiltonien du système (ion + deux électrons) en absence de toute interaction et V' le potentiel d'interaction entre l'ion, l'électron diffusé et l'électron éjecté.

L'ionisation simple ($e, 2e$) d'une cible atomique par impact électronique est un problème à trois corps, il conduit à un état final composé de deux électrons et un ion résiduel. La détection en coïncidence de ces deux électrons permet de mesurer la (*SETD*), la matrice de transition dans ce cas est donnée par

$$T_{if} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle, \quad (1.19)$$

ψ_i, ψ_f sont respectivement les fonctions d'onde décrivant le système avant et après la collision.

La fonction d'onde [42] du système peut être écrite comme le produit de la fonction d'onde de l'électron incident, par celle de l'atome cible¹⁰, les fonctions d'onde du système sont données par

$$\begin{aligned} \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e}) &= \phi_i(\vec{r}_0) \phi_{cible}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e}) \\ \psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e-1}) &= \phi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \phi_{ion}(\vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e-1}) \end{aligned} \quad (1.20)$$

où, \vec{r}_0 et $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e}$ sont les vecteurs position du projectile et de N_e électron atomique dont le noyau est pris comme origine des coordonnées.

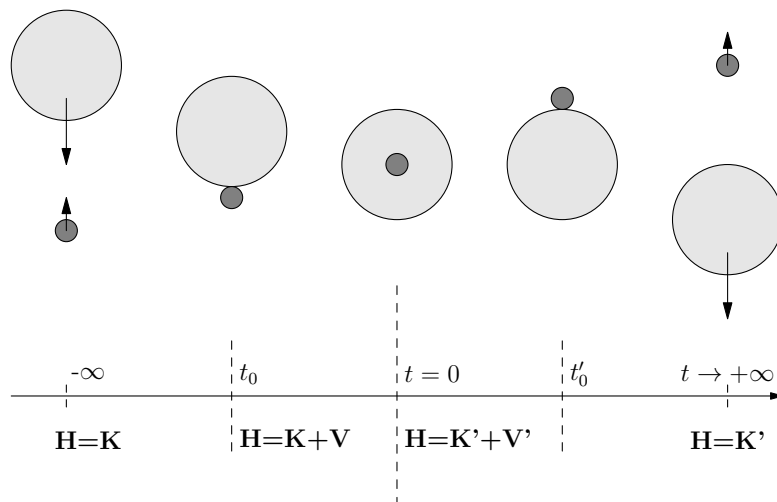


FIGURE 1.5: Schéma simplifié d'un processus collisionnel au cours du temps entre deux systèmes

Remarque 1.3. On a deux conventions de la (*SETD*)

$$\sigma^{(3)} = \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2, \quad T_{if} = -\frac{1}{2\pi} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle, \quad \phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (1.21)$$

$$\sigma^{(3)} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2, \quad T_{if} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle, \quad \phi(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (1.22)$$

où ϕ représente l'expression de la fonction d'onde de l'électron dans le continuum.

10. Dans la première voie de la réaction (voie d'entrée), on considère un électron incident qui entre en collision avec un atome. Après la collision (dans la voie de sortie de la réaction (1.1)), 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. Quand les énergies des deux électrons sortants sont égales il faudra prendre en compte les effets d'échange.

1.7.1 Fonction d'onde de l'électron incident

Les fonctions d'onde décrivant le mouvement de l'électron incident dans le champ créé par une cible atomique à N_e électrons, sont déterminées en résolvant l'équation de Schrödinger pour l'électron incident avec le hamiltonien

$$H = -\frac{\nabla_{inc}^2}{2} - \sum_{j=1}^{N_e} \left(\frac{\nabla_j}{2} + \frac{Z_N}{r_j} \right) + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{r_{0j}} \quad (1.23)$$

où Z_N représente la charge du noyau, r_{0j} est la distance entre l'électron incident et l'électron j de la cible.

Cas d'un électron incident rapide

Dans le cas d'une ionisation par impact d'électron rapide¹¹, la matrice de transition ne tenant compte que du premier ordre de la série de Born. Par conséquent, la fonction d'onde qui correspond à l'électron incident sera celle d'une particule libre représentée par une onde plane

$$\phi_i(\vec{r}_0) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0}. \quad (1.24)$$

Dans ce cas

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \phi_{cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}). \quad (1.25)$$

Dans l'état final, on construit la fonction d'onde ψ_f sous forme d'un produit entre la fonction de l'ion résiduel et les deux ondes qui représentent respectivement l'électron diffusé χ_s et l'électron éjecté χ_e :

$$\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e-1}) = \chi_s(\vec{r}_0) \chi_e(\vec{r}_1) \phi_{ion}(\vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e-1}). \quad (1.26)$$

Cas d'un électron incident lent

Il s'agit d'une ionisation par impact d'électron à faible énergie. Dans ce cas, le potentiel d'interaction n'est plus négligeable devant l'énergie du projectile, ce dernier subit l'effet d'un potentiel de distorsion U_{cible} qu'on doit prendre en considération dans la description de sa fonction d'onde.

Comme nous l'avons précisé plus haut, le hamiltonien H du système s'écrit comme la somme de deux opérateurs

$$\begin{aligned} H &= K + V \\ &= K + V + U_{cible} - U_{cible} \\ &= (K + U_{cible}) + (V - U_{cible}) \\ &= K^{DWBA} + V'. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Dans ce cas, la matrice de transition est donnée par l'approximation de Born aux ondes distordues (*DWBA*), sous la forme

$$T_{if} = \langle \psi_f | V' | \psi_i \rangle \quad (1.28)$$

11. A ce stade intervient l'hypothèse $k_i \gg 1$.

U_{cible} représente le potentiel de distorsion de l'état initial, il est défini par

$$U_{cible}(r_0) = -\frac{Z_N}{r_0} + \left\langle \phi_{cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) \left| \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{r_{0j}} \right| \phi_{cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) \right\rangle. \quad (1.29)$$

La fonction ψ_i devient

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_e}) = \chi_i(\vec{r}_0) \phi_{cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) \quad (1.30)$$

où ϕ_{cible} est la fonction d'onde de la cible, qu'on relie par une nouvelle fonction d'onde (distordue) χ_i de l'électron incident.

Remarque 1.4. On remarque que la définition habituelle de l'élément de transition défini dans l'équation (1.19), peut être obtenue en remplaçant dans (1.28) le potentiel U_{cible} par zéro, la fonction d'onde χ_i dans ce cas, est une onde plane.

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

$$\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_{e-1}}) = \chi_s(\vec{r}_0) \chi_e(\vec{r}_1) \phi_{ion}(\vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_{e-1}}) \quad (1.31)$$

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

$$H = -\frac{\nabla_{inc}^2}{2} - \sum_{j=1}^{N_{e-1}} \left(\frac{\nabla_j^2}{2} + \frac{Z_N}{r_j} \right) + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{r_{0j}} + U_{ion}(r_0) \quad (1.32)$$

avec

$$U_{ion}(r_0) = -\frac{Z_N}{r_0} + \left\langle \phi_{ion}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_{e-1}}) \left| \sum_{j=1}^{N_{e-1}} \frac{1}{r_{0j}} \right| \phi_{ion}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_{e-1}}) \right\rangle. \quad (1.33)$$

U_{ion} est le potentiel de distorsion dans l'état final. Il est défini comme une moyenne sur toute les interactions de chaque électron sortant avec l'ion résiduel à N_{e-1} électrons.

1.7.2 Fonction d'onde de l'électron atomique

L'opérateur hamiltonien décrivant la cible sans la perturbation W provoquée par l'électron incident s'écrit, dans le système d'unités atomiques, sous la forme suivante

$$H = -\sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{\nabla_i^2}{2} + \frac{N_e}{r_i} \right) + \sum_{i<j}^{N_e} \frac{1}{r_{ij}}. \quad (1.34)$$

Ainsi la perturbation W provoquée par l'électron incident peut être écrite sous la forme

$$W = \left(-\frac{N_e}{r_0} + \sum_{i=1}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_i|} \right) \quad (1.35)$$

avec \vec{r}_0 le vecteur position de l'électron incident par rapport à l'origine qui est supposé confondu avec le noyau atomique, les \vec{r}_i sont les vecteurs positions des électrons de la cible atomique. La quantité $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ est la distance entre la particule i et la particule j .

Pour l'état initial de l'électron atomique¹², on utilise les fonctions d'onde de Clementi dont les orbitales atomiques sont des fonctions d'onde de type Slater [39]

Dans un système de coordonnées sphériques, l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut s'écrire dans le système d'unité atomique sous la forme suivante

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

L'expression finale de la fonction d'onde ψ , solution de l'équation (1.36), peut s'écrire en terme de F_l dite fonction réduite¹³ sous la formé

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l e^{i\delta_l} i^l \frac{F_l(k, r)}{kr} Y_{l,m}^*(\hat{k}) Y_{l,m}(\hat{r}) \quad (1.37)$$

$$F_l(k, r) = \frac{2}{n^{l+2} 2(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+1)!}{(n-l-1)!}} (2r)^l e^{-\frac{r}{n}} {}_1F_1\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right) \quad (1.38)$$

où ${}_1F_1$ désignent la fonction hypergéométrique confluent [37],

et δ_l représente le déphasage dû au potentiel radial $U(r)$, $Y_{l,m}$ est une harmonique sphérique, par définition cette fonction est une fonction propre de l'opérateur moment cinétique L^2 , (l et m sont respectivement le nombre quantique azimutal et le nombre quantique magnétique).

Cas d'une particule libre

Dans le cas où le potentiel d'interaction $U = 0$, l'équation (1.36) se réduit à celle d'une particule libre qu'on décrit par une onde plane ψ_p

$$\psi_p(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \quad (1.39)$$

Dans le modèle des ondes planes, l'état final est décrit par le produit de deux ondes planes. Cette description n'est valable que pour des collisions à très haute énergie.

Cas d'un potentiel Coulombien

Soit un projectile de charge Z_1 , de masse m_1 et de moment k , dans le champ d'une cible ionique de charge Z_2 et de masse m_2 . Le paramètre de Sommerfeld s'écrit $\eta = \frac{Z_1 Z_2}{k} \mu$ où μ est la masse réduite.

Dans ce cas le problème se ramène à la résolution de l'équation de Schrödinger (dans le système de coordonnées paraboliques) d'une particule dans un potentiel central U donné par $U = \frac{-Z_2}{r}$, la fonction d'onde sortante s'écrit sous la forme suivante [33]

$$\psi_c(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\frac{\eta r}{2}} \Gamma(1-i\eta) {}_1F_1(i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})) \quad (1.40)$$

12. Les électrons "actifs" de la cible A sont les électrons susceptibles, durant la collision, soit de changer d'orbitale par excitation, soit de passer dans le continuum par ionisation. Dans ce travail, nous étudierons uniquement le cas de l'ionisation de l'électron de valence. Les autres électrons de la cible sont dits électrons "spectateurs".

13. La fonction réduite F_l est solution de l'équation (1.36) qui se réduit à celle d'une équation différentielle concernant la partie radiale seulement : $\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right) F_l(k, r) = 0$

où Γ désigne la fonction gamma d'Euler complexe.

Remarque 1.5. *On peut remarquer que cette onde coulombienne tend vers l'onde plane quand $Z \rightarrow 0$.*

Exemple 1.2. *Un électron éjecté d'un ion (charge Z positive) : $Z_1 = -1$, $Z_2 = Z - 1$ et $\mu = 1$. Dans ce cas, on obtient*

$$\psi_c(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{\frac{(Z-1)\pi}{2k}} \Gamma\left(1 + i\frac{(Z-1)\pi}{k}\right) {}_1F_1\left(-i\frac{(Z-1)\pi}{k}, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})\right).$$

Cas d'un potentiel de distorsion

Reprenons l'équation (1.36) pour un potentiel radial de type : $U = U_c + U_{cp}$ où la perturbation U_{cp} qui s'ajoute au potentiel coulombien U_c , est le résultat d'une interaction de courte portée entre chaque électron sortant et l'ion restant à $(N_e - 1)$ électrons. Au-delà d'une certaine distance du noyau¹⁴, l'effet du potentiel U_{cp} devient quasiment nul, c'est le potentiel coulombien U_c qui prédomine.

La fonction d'onde d'un électron dans le potentiel de distorsion, n'est plus représentée par l'onde coulombienne pure, mais par une onde distordue.

1.8 Types d'études (e,2e)

La direction du moment de transfert joue le rôle principal dans la distinction entre les études structurales et les études de la dynamique de collision.

1.8.1 Étude dynamique

Pour ce type d'études les expériences sont réalisées dans une géométrie asymétrique coplanaire, l'énergie du projectile peut changer d'une expérience à une autre, la modélisation théorique est d'autant plus complexe que l'énergie d'impact est petite. Ce type d'études sert à connaître les mécanismes collisionnels du processus (e,2e)

1.8.2 Étude de structure

Lorsque toute l'énergie et le moment de l'électron incident sont transférés ou absorbés par l'électron éjecté. Dans ce cas, l'ion résiduel ne joue aucun rôle et la section efficace issue du processus contient les informations de l'électron éjecté des orbitales correspondantes. Dans ces conditions, l'électron incident est utilisé comme un moyen d'exploration de la structure de la cible. Dans ce cas les géométries symétriques coplanaires et non coplanaires¹⁵ sont les plus appropriées et sont réalisées à haute énergie et à des énergies intermédiaires, le mécanisme est assez simple pour être décrit par les théories du premier ordre.

14. Aux grandes distances, le potentiel coulombien domine tandis que l'interaction totale intervient à des petites distance r .

15. Les géométries non coplanaires sont les plus couramment utilisées pour ce genre d'études.

1.9 Conclusion

Nous avons passé en revue les différentes situations expérimentales dans lesquelles sont réalisées les expériences relatives au processus $(e,2e)$. Chacune d'elles offre un outil certain pour les études structurales et dynamiques du processus.

L'amplitude de diffusion est la quantité fondamentale pour la description du phénomène de collision, et la connaissance de l'amplitude de diffusion est nécessaire pour la détermination de la section efficace. Cette amplitude nécessite le calcul de l'élément de transition entre les états initial et final de la cible. Pour effectuer son calcul, on doit recourir à des approximations et à des modèles, la plupart de ces modèles ont été développés dans un premier temps pour l'ionisation de l'hydrogène qui présente le système quantique le plus simple. Parmi les modèles utilisés on peut citer par exemple l'approximation (*FBA*), l'approximation (*DWBA*) et le modèle (*BBK*)...

Dans le chapitre suivant, nous essayons de traiter les détails du processus $(e,2e)$ des cibles atomiques à l'aide de différents modèles dans différentes conditions cinématiques.

Chapitre 2

Quelques approximations et modèles théoriques appliqués à l'étude de l'ionisation simple

2.1 Introduction

L'étude expérimentale et théorique de l'ionisation ($e, 2e$) d'atomes et des molécules a fait l'objet de nombreuses investigations. En effet, la ($SETD$) est une grandeur essentielle pour la compréhension des processus d'ionisation car elle fournit l'information la plus détaillée sur ces processus. Depuis les premières mesures de cette grandeur [10], diverses méthodes théoriques ont été élaborées pour comprendre les mécanismes de la réaction. Dans ce qui suit, nous présentons succinctement certains modèles qui nous serviront le long du présent travail.

Le choix d'une bonne fonction d'onde décrivant les électrons du continuum (l'électron incident, l'électron diffusé et l'électron éjecté), joue un rôle important dans la description du processus d'ionisation des atomes et des molécules. Divers modèles ont été proposés dans le cadre des séries de Born pour décrire les électrons de la voie d'entrée et de sortie, on les représente par une onde plane, une onde coulombienne ou une onde distordue, tout dépend de l'énergie de ces électrons.

Dans la première approximation de Born, l'amplitude de diffusion s'écrit sous sa forme la plus simple comme suit :

$$T_{if} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle \quad (2.1)$$

Dans la deuxième approximation de Born [17], l'amplitude de diffusion est donnée par

$$T_{if} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle + \langle \psi_f | V G_0^{(+)} V | \psi_i \rangle \quad (2.2)$$

$G_0^{(+)}$ est la fonction de Green ¹ définie par l'équation (1.13)

1. Nous avons peut être présenté les fonctions de Green comme quelque chose qui peut paraître compliqué, mais le lecteur peut remarquer qu'il utilise les fonctions de Green dans le potentiel électrostatique créé par une charge ponctuelle est : $G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$

2.2 Etude des états liés et du continuum des systèmes atomiques

La (*SETD*), comme nous l'avons souligné plus haut, est une quantité importante pour la compréhension du processus de simple ionisation. Cependant, ce processus s'est heurté à la difficulté qui réside dans la complexité de calcul de cette quantité, qui contient des états initial et final à plusieurs corps, et dans la description des corrélations entre les électrons dans les états initial et final et leurs interactions avec la cible ionisée. Tout d'abord, nous allons mentionner brièvement une simple description de l'état initial et final.

2.3 Description de l'état initial

L'état initial du système (électron incident-électron "actif") est décrit par une fonction d'onde ψ_i solution de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1) = E_i\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1)$$

avec H l'hamiltonien initial total du système et s'écrit en (*u.a.*), comme suit :

$$H = -\frac{1}{2}(\nabla^2(\vec{r}_0) + \nabla^2(\vec{r}_1)) + V(r_0) + V(r_1) + \frac{1}{r_{01}} \quad (2.3)$$

Où $V(r_0)$ et $V(r_1)$ représentent le potentiel d'interaction de l'électron incident et de l'électron cible avec le noyau de charge $Z = 1$, et $\frac{1}{r_{01}}$ représente le potentiel d'interaction répulsif entre ces deux électrons, avec $r_{01} = |\vec{r}_0 - \vec{r}_1|$

A $t \rightarrow -\infty$, l'interaction de l'électron incident avec la cible étant considérée comme nulle, on peut écrire l'hamiltonien H comme une somme de deux hamiltoniens indépendants

$H \simeq H_0 + H_1$ tels que

$$\begin{cases} H_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2(\vec{r}_0) \\ H_1 = -\frac{1}{2}\nabla^2(\vec{r}_1) + V(r_1) \text{ avec } V(r_1) = -\frac{Z}{r_1} \end{cases} \quad (2.4)$$

avec H_0 représente l'hamiltonien de l'électron incident et H_1 celui de l'électron cible "actif".

On décrit l'état initial par le produit des fonctions d'onde de l'électron incident et la fonction d'onde de la cible, l'équation (1.20) se réduit à :

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1) = \phi_i(\vec{r}_0)\phi_{cible}(\vec{r}_1)$$

Dans l'approximation de Born l'électron incident est représenté par une onde plane solution de l'équation $H\phi_i(\vec{r}_0) = E_i\phi_i(\vec{r}_0)$ telle que :

$$\phi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \quad (2.5)$$

avec $k_i^2 = 2E_i$

pour la fonction d'onde de la cible $\psi_{cible} = \psi_j$ (en utilisant l'approximation du cœur gelé²). La difficulté augmente rapidement avec le nombre des électrons de la cible, en réalité c'est un problème à $3N_e$ dimensions, voir (*Annexe A*). Dans le modèle d'un seul électron actif, on s'intéresse seulement à la fonction d'onde de l'électron étudié (la fonction d'onde atomique de l'état lié j "orbitale j "; voir les (*figure 2.1 – 2.8*)).

Dans ce travail, on utilise les fonctions d'onde de Clementi de type Hartree Fock où les orbitales atomiques sont des fonctions d'onde de type Slater, avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_j(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{N_j} a_{jk} R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) Y_{l_{jk}, m_{jk}}(\theta, \varphi) \\ \text{Où, } R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}(r) = N_{jk} r^{n_{jk}-1} e^{-\xi_{jk} r} \\ \text{et } N_{jk} = \frac{(2\xi_{jk})^{n_{jk} + \frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n_{jk})!}} \end{array} \right. \quad (2.6)$$

où N_j est le nombre de fonctions de type Slater utilisées dans le développement de la j^{ieme} orbitale atomique et a_{jk} le poids³ de chaque composante atomique réelle.

N_{jk} est un facteur de normalisation, les paramètres ($n_{jk}, l_{jk}, m_{jk}, \xi_{jk}, a_{jk}$) de quelques atomes (Néon "Ne", Argon "Ar") sont donnés dans le (*tableau 2.1*), avec une configuration électronique $1s^2 2s^2 2p^6$ pour Ne et $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ pour Ar

$R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}$ sont les fonctions radiales données sous la forme des fonctions de type Slater

Remarque 2.1. La fonction radiale $R_{n_{jk}}^{\xi_{jk}}$ peut être généralement modélisée à travers trois formes mathématiques couramment employées :

- Les orbitales atomiques hydrogénoïdes sont dérivées de solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour un électron atomique. La partie de la fonction qui dépend de la distance radiale c'est un polynôme multiplier par une fonction $e^{-\alpha r}$, α étant une constante.
- L'orbitale de type Slater est une forme décroît selon r comme une orbitale hydrogénoïde elle s'écrit $r^{(n-1)} e^{-\alpha r}$.
- L'orbitale gaussienne qui décroît comme $e^{-\alpha r^2}$.

Pour l'hydrogène les énergies de ces orbitales sont $E_n = \frac{-E}{n^2}$

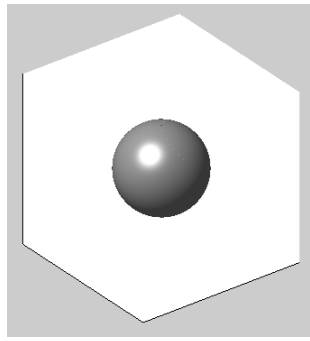
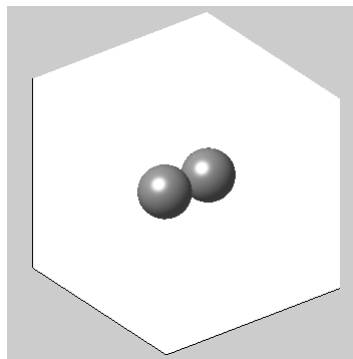
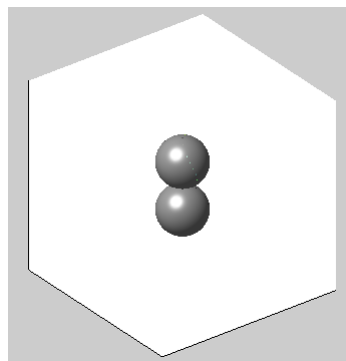
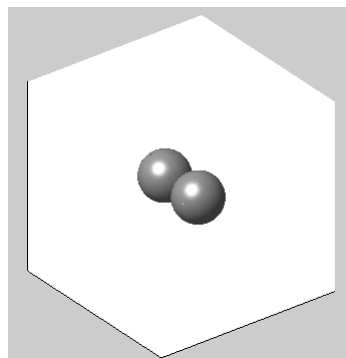
$E = -13,6eV$ est l'énergie d'ionisation de la première orbitale de l'hydrogène ($n = 1$). Dans le cas d'atomes hydrogénoïdes constitués d'un noyau de charge Z et d'un électron, [34] elles possèdent des fonctions d'ondes identiques à celles de l'atome d'hydrogène, mais la charge du noyau apparaît explicitement dans l'expression $E_n = \frac{-Z^2 E}{n^2}$.

Pour les atomes multiélectroniques, des solutions approchées sont trouvées en utilisant les orbitales atomiques de l'hydrogène, comme la méthode self consistante de Hartree-Fock⁴.

2. Cette approximation repose sur l'hypothèse que seuls les électrons les plus externes (les électrons de valence) contribuent de façon significative aux propriétés physiques et chimiques d'un système donné alors que les électrons de cœur ne sont pas fortement sensibles à l'environnement.

3. a_{jk} déterminent la contribution de chaque orbitale atomique.

4. qui est très utilisée en physique atomique où chaque électron se meut dans le champ moyen engendré par les autres $N_e - 1$ électrons.

FIGURE 2.1: L'orbitale atomique $1s$ FIGURE 2.2: L'orbitale atomique $2p_1$ FIGURE 2.3: L'orbitale atomique $2p_0$ FIGURE 2.4: L'orbitale atomique $2p_{-1}$

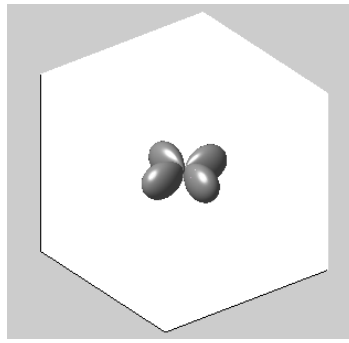
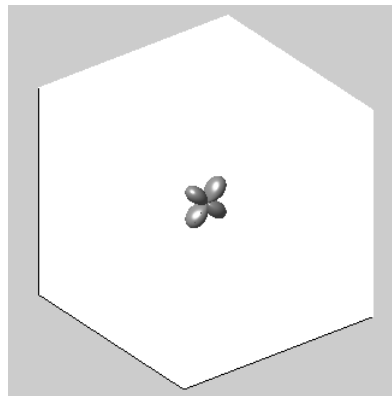
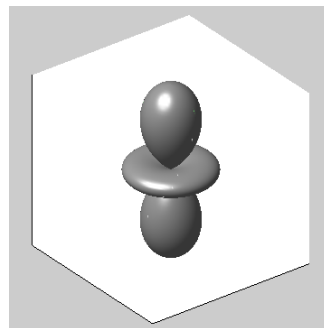
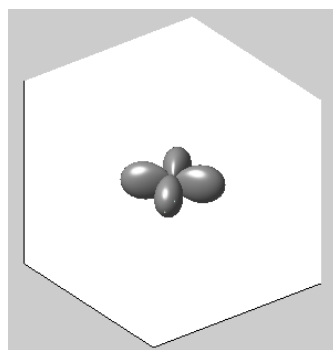
FIGURE 2.5: L'orbitale atomique $3d_2$ FIGURE 2.6: L'orbitale atomique $3d_1$ FIGURE 2.7: L'orbitale atomique $3d_0$ FIGURE 2.8: L'orbitale atomique $3d_{-1}$

TABLE 2.1: Liste des différents coefficients (a_j, ξ_j) et les sous couches (n_j, l_j, m_j). Les trois orbitales atomiques nécessaires pour d'écrire Ne , sont respectivement $1s, 2s$ et $3p$. Les énergies correspondants d'ionisation sont exprimés en ($u.a$) [39].

nlm	ξ	1s	2s	2p
1s	9.5735	0.93093	-0.23171	
1s	15.4496	0.04610	-0.00442	
2s	1.9550	-0.00085	0.18201	
2s	2.8462	0.00321	0.66106	
2s	4.7746	-0.00180	0.32372	
2s	7.7131	0.03537	-0.14244	
2p	1.4700			0.22430
2p	2.3717			0.51826
2p	4.4545			0.33902
2p	9.4550			0.01765
$E(a.u)$		-32.77276	-1.93048	-0.85048

TABLE 2.2: Liste des différents coefficients (a_j, ξ_j) et les sous couches (n_j, l_j, m_j). Les cinq orbitales atomiques nécessaires pour d'écrire l'Ar, sont respectivement $1s, 2s, 3s, 2p$ et $3p$. Les énergies correspondants d'ionisation sont exprimés en ($u.a$) [39].

nlm	ξ	1s	2s	3s	2p	3p
1s	18.0000	0.97453	-0.27666	0.08642		
3s	21.2848	0.01878	-0.00224	0.00232		
3s	15.5021	0.02233	0.04716	-0.02369		
3s	11.2367	-0.00310	0.36409	-0.10542		
3s	7.5066	0.00215	0.63126	-0.28841		
3s	4.7029	-0.00094	0.04500	-0.05813		
3s	3.2138	0.00038	-0.00186	0.68983		
3s	1.9931	-0.00010	0.00088	0.47773		
2p	9.0000				0.64951	-0.18072
4p	15.0000				0.01298	-0.01234
4p	11.9644				0.02669	0.02183
4p	8.7924				0.28421	-0.12559
4p	6.3011				0.12881	0.10518
4p	3.4327				0.00219	0.58041
4p	1.9409				0.00008	0.46149
4p	1.0309				-0.00002	0.02249
$E(a.u)$		-118.61064	-12.32244	-1.27752	-9.57176	-0.59116

2.4 Description de l'état final

La fonction d'onde finale doit décrire les deux électrons dans le champ coulombien de l'ion résiduel. Ce problème est connu sous le nom de double continuum, la description de l'état final a engendré plusieurs descriptions du double continuum. A cet effet, plusieurs modèles théoriques ont été proposés par les chercheurs dans le cadre de l'approximation de Born. Les critères permettant de choisir un modèle bien meilleur qu'un autre sont la simplicité, la rapidité des calculs et la qualité des résultats obtenus. Nous présentons, brièvement, les modèles les plus utilisés.

L'état final $\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1)$ est décrit par le produit des fonctions d'onde des électrons diffusé et éjecté

$$\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1) = \phi_s(\vec{r}_0)\phi_e(\vec{r}_1)$$

2.4.1 L'approximation de Born aux ondes plane (PWBA)

Cette approximation consiste à négliger toutes les interactions dans la voie final (soit les interaction entre les électrons, soit les interactions électron-ion résiduel). Donc, tous les électrons participant à l'interaction (l'incident, le diffusé et l'éjecté) sont représentés par des ondes planes. Cette description n'est valable que pour des collisions à très hautes énergie, dans ce cas les électrons éjecté et diffuse sont décrits par une onde plane. Dans ce modèle l'amplitude de diffusion s'écrit comme suit [25] :

$$T_{if} = \left\langle \phi_p(\vec{r}_1) \left| \int e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_s) \cdot \vec{r}_0} \left(\frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \right) d\vec{r}_0 \right| \phi_j(\vec{r}_1) \right\rangle \quad (2.7)$$

en utilisant la relation de Bethe

$$\int \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \quad (2.8)$$

l'équation (2.7) devient

$$T_{if} = \frac{4\pi}{K^2} \left\langle \phi_p(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} - 1 \right| \phi_j(\vec{r}_1) \right\rangle \quad (2.9)$$

Où $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$ est le moment de transfert.

Ce modèle a toutefois montré ses limites pour des énergies d'éjection faibles et moyennes lorsque les corrélations entre les électrons éjectés deviennent fortes.

2.4.2 L'approximation de Born aux ondes coulombienne (CWBA)

Dans ce modèle, l'interaction coulombienne dans la voie de sortie (entre l'électron éjecté et l'ion résiduel représenté par un noyau de charge Z) est prise en compte tandis que, les interactions entre les électrons diffusé et éjecté est négligée [16].

L'équation de Schrödinger pour l'électron éjecté

$$\left(-\frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 - \frac{Z}{r} \right) \psi(\vec{r}) = E_e \psi(\vec{r}) \quad (2.10)$$

où $Z = 1$ correspond à la charge asymptotique vue par l'électron éjecté.

La solution de cette équation (2.10) qui représente la fonction d'onde de l'électron éjecté s'écrit :

$$\phi_c(\vec{k}_e, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} e^{-\frac{\eta r}{2}} \Gamma(1 - i\eta) {}_1F_1(i\eta, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \cdot \vec{r})) \quad (2.11)$$

en décrivant l'électrons diffusé par une onde plane, l'amplitude de diffusion est calculée comme dans le cas du (PWBA). Par analogie avec l'équation (2.9) on obtient

$$T_{if} = \frac{4\pi}{K^2} \left\langle \phi_c(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} - 1 \right| \phi_j(\vec{r}_1) \right\rangle \quad (2.12)$$

Remarque 2.2. Le modèle (CWBA) est également connu sous le nom (1CW).

On peut aussi représenter l'électron diffusé par une onde coulombienne, et le modèle obtenu est dit (2CW).

2.4.3 L'approximation de Born aux ondes distordue (DWBA)

Pour des énergies d'incidence assez faible, les électrons du continuum subissent un potentiel de distorsion⁵, dû à l'interaction de courte portée entre ces électrons et la cible dans les voies d'entrée et de sortie⁶. Ce potentiel s'écrit :

$$U_{cible}(r_0) = -\frac{Z_N}{r_0} + \left\langle \phi_{cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) \left| \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{r_{0j}} \right| \phi_{cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}) \right\rangle \quad (2.13)$$

$$U_{ion}(r_0) = -\frac{Z_N}{r_0} + \left\langle \phi_{ion}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e-1}) \left| \sum_{j=1}^{N_e-1} \frac{1}{r_{0j}} \right| \phi_{ion}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_{N_e-1}) \right\rangle \quad (2.14)$$

Ce potentiel de distorsion représente une interaction de courte portée entre chaque électron entrant (ou sortant) et la cible dans son état initial et final. Au delà d'une certaine distance r l'effet de ce potentiel devient pratiquement nul. Les électrons incident, diffusé et éjecté sont donc représentés par des ondes distordues dont les fonctions s'écrivent :

$$\phi_{DW}(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{l,m} e^{i\delta_l} i^l \frac{F_l(k, r)}{kr} Y_{l,m}^*(\hat{k}) Y_{l,m}(\hat{r}) \quad (2.15)$$

Remarque 2.3. A une énergie incidente et diffusée très grandes, les ondes distordues des électrons du continuum sont remplacées par des ondes planes, d'où le modèle (PWBA).

Pour calculer la section efficace, il est nécessaire de déterminer les solutions de l'équation de Schrödinger (1.4) pour un potentiel de courte portée et un autre de longue portée (potentiel coulombien).

5. Comme l'interaction entre les électrons a une longue portée, alors la trace de l'effet des électrons de la cible sur les électrons incident (diffusé) et actif (éjecté) doit se trouver dans les fonctions d'ondes.

6. Dans ce cas l'électron incident est représenté par une onde distordue calculée par la résolution de l'équation de Schrödinger qui contient le potentiel de la cible, tandis que les électrons émergents (diffusé et éjecté) sont représentés par des ondes distordues calculées par la résolution de l'équation de Schrödinger qui contient le potentiel de l'ion.

Plusieurs modifications ont été apportées à ce modèles par plusieurs auteurs, ce qui a conduit à plusieurs versions, par exemple, le modèle hybride ($DWBA - RM$) décrit l'interaction électron éjecté-ion résiduel par un formalisme de matrice-R. Dans sa version « premier ordre d'interaction projectile-cible » ce modèle est dénoté ($DWB1 - RM$). Il est noté ($DWB2 - RM$) lorsqu'on tient compte de cette interaction au deuxième ordre. Une autre version du modèle ($DWBA$) est le modèle ($DWBA - G$) qui a été décrit par Kheifets et al [20].

L'approche ($DWBA$) s'est avérée l'une des méthodes les plus efficaces pour calculer la section efficace triplement différentielle dans les processus d'ionisation par impact électronique ($e, 2e$) dans certaines conditions cinématiques. Cette approximation tient 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.

2.4.4 Modèle des ondes distordues (3DW)

Cette approximation est une extension de la méthode ($DWBA$), Dans laquelle les trois électrons sont décrit par des ondes distordues, en multipliant l'état final par une fonction qui représente les effets post-collisionnels entre les deux électrons dans la voie de sortie. Pour calculer les fonctions d'onde distordues on doit résoudre trois équations de Schrödinger des électrons.

L'hamiltonien du système avant la collision s'écrit

$$H = K_i + V_i \quad (2.16)$$

L'hamiltonien du système après la collision s'écrit comme :

$$H = (K_e + V_e) + (K_s + V_s) + V_{se} \quad (2.17)$$

K_i , K_s et K_e sont les opérateurs des énergies cinétiques des électrons incident, diffusé et éjecté respectivement. V_i le potentiel d'interaction de l'électron incident avec la cible. V_s et V_e sont les potentiel d'interaction de chaque électron avec l'ion résiduel et V_{se} est le potentiel d'interaction entre l'électron diffusé et l'électron éjecté. Les potentiels d'interactions V_i , V_s et V_e peuvent contenir plusieurs types d'interaction

$$V = V_{stat} + V_{ex} + V_p \quad (2.18)$$

Avec V_{stat} est la somme du potentiel d'interaction coulombienne et le potentiel d'interaction de courte portée ($U_c + U_{cp}$), V_{ex} est le potentiel d'échange et V_p est le potentiel de polarisation.

L'avantage de cette approximation est la prise en compte des effets à courte portée entre l'atome et les deux électrons sortants. Le modèle (3DW) a fourni un bon accord avec des données expérimentales mais nécessite des moyens de calculs énormes.

2.4.5 Modèle de l'onde distordue (1DW)

dans ce modèle l'interaction entre l'électron éjecté et la cible résiduelle est décrite par une onde distordue, l'électron diffusés est décrit par une onde plane. Dans le cadre de l'approximation à un électron actif, l'amplitude de diffusion T_{if} s'écrit (après l'intégration par rapport à \vec{r}_0) :

$$T_{if} = \frac{4\pi}{K^2} \left\langle \phi_{DW}(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} - 1 \right| \phi_j(\vec{r}_1) \right\rangle \quad (2.19)$$

Habituellement l'onde distordue est décrite par la formule suivante :

$$\phi_{DW}(\vec{k}_e, \vec{r}) = \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} e^{i\delta_l} i^l \frac{F_l(k_e, r)}{k_e r} Y_{l,m}^*(\hat{k}_e) Y_{l,m}(\hat{r}) \quad (2.20)$$

F_l est la fonction radiale distordue et se calcule comme cela a été décrit au premier chapitre.

Une méthode alternative a été proposée par Chinoune et al [27] qui permet de tenir compte des effets de distorsions de l'électron éjecté sans utiliser la forme (2.20). Cette méthode est en fait basée sur le modèle de l'onde coulombienne avec une charge variable $Z(r)$ [48] (cette méthode est détaillée dans le chapitre 3).

Remarque 2.4. Le modèle (1DW) est une simplification du modèle (DWBA), où l'on décrit l'électron éjecté par une onde distordue et le projectile par une onde plane.

2.4.6 Modèle de Brauner, Briggs et Klar (BBK)

Ce modèle connu sous le nom (BBK) prend en considération l'interaction mutuelle⁷ entre les électrons éjecté et diffusé dans la voie de sortie⁸, l'état final est défini comme un produit de trois ondes coulombiennes représentant l'interaction coulombienne mutuelle entre les électrons diffusé, éjecté et l'ion résiduel ainsi que les effets post-collisionnels (PCI). Deux fonctions décrivant les électrons diffusé et éjecté, et la troisième pour décrire l'interaction coulombienne entre ces deux électrons [14] :

$$\psi_f(\vec{k}_s, \vec{k}_e, \vec{r}_0, \vec{r}_1) = \phi_c(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c(\vec{k}_e, \vec{r}_1) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) \quad (2.21)$$

Où la fonction d'onde coulombienne ϕ_c s'écrit comme suit :

$$\phi_c(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-\frac{Z\pi}{2k}} \Gamma\left(1 - i\frac{Z}{k}\right) {}_1F_1\left(-i\frac{Z}{k}, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})\right) \quad (2.22)$$

La charge effective est généralement choisie comme étant $Z = 1$ dans un processus ($e, 2e$), tandis que le terme décrivant l'interaction mutuelle (ou effet post-collisionnel) est décrite par la fonction :

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) = e^{-\frac{\pi}{4k_{se}}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{se}}\right) {}_1F_1\left(-i\alpha_{01}, 1, -i(k_{se}r_{01} + \vec{k}_{se}\cdot\vec{r}_{01})\right) \quad (2.23)$$

Avec $\vec{k}_{se} = \frac{1}{2}(\vec{k}_s - \vec{k}_e)$ et $\alpha_{01} = \frac{Z_{01}}{k_{se}}$ où $Z_{01} = -\frac{1}{2}$

La (SETD) est donnée par :

$$(\sigma)^3 = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2 \quad (2.24)$$

Pour évaluer l'amplitude de diffusion $T_{if} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$, nous écrivons

$$T_{if} = \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) V \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \quad (2.25)$$

7. Lorsque les deux électrons sont détectés avec des énergies voisines, l'interaction mutuelle entre ces deux électrons doit être prise en considération. Ces effets post-collisionnels ont été introduits pour la première par Brauner et al (Connu comme BBK) dans l'état final.

8. ce modèle (BBK) prend en compte l'interaction électron éjecte-cible ionisée, l'interaction particule diffusée-cible ionisée et enfin l'interaction électron éjecté-particule diffusée.

L'état initial ψ_i est décrit par le produit des fonctions d'onde de l'électron incident et de la cible. alors que l'interaction V entre le projectile et la cible est purement coulombienne. En utilisant l'approximation d'un électron actif, V est exprimé comme

$$V(r_0, r_1) = \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \quad (2.26)$$

Où $r_{01} = |\vec{r}_0 - \vec{r}_1|$ est la distance entre le projectile et l'électron lié.

L'équation (2.25) représente une intégrale à six dimensions, l'évaluation de l'élément de matrice dans ce cas nécessite un temps de calcul important. Pour éviter cet inconvénient, nous appliquons la méthode de Kornberg et Miraglia qui utilise la transformation de Fourier permettant de réduire l'intégrale à six dimensions à une intégrale à trois dimensions, voir (*Annexe B*).

L'avantage de (*BBK*) est dû au fait que l'interaction (*PCI*) est contenue à tous les ordres de la théorie de perturbations.

Facteur de Gamow

Le calcul de la section efficace du processus de simple ionisation par la méthode (*BBK*) nécessite un temps très grand. En remplaçant la troisième fonction Coulombienne qui décrit la répulsion entre les deux électrons éjecté et diffuse par une fonction appelée facteur de Gamow, le temps de calcul de la (*SETD*) est largement réduit [44]. Le facteur de Gamow ne dépend que des énergies d'électron éjecté et est défini par l'expression

$$\phi_G(\alpha_{01}) = \Gamma(1 - i\alpha_{01})e^{-\frac{\pi}{2}\alpha_{01}} \quad (2.27)$$

La fonction représentant l'état final (2.21) dans le modèle (*BBK*) s'écrit maintenant comme

$$\psi_f(\vec{k}_s, \vec{k}_e, \vec{r}_0, \vec{r}_1) = \phi_c(\vec{k}_s, \vec{r}_0)\phi_c(\vec{k}_e, \vec{r}_1)\phi_G(\alpha_{01}) \quad (2.28)$$

Cette nouvelle version du (*BBK*) rend les calculs beaucoup plus simples et le temps de calcul plus court sans pour autant perdre l'aspect physique de la répulsion coulombienne entre les deux électrons du continuum. Mais cette approximation conduit à une sous-estimation de l'amplitude de diffusion.

Remarque 2.5. *Ce facteur prend en compte la forte répulsion des électrons dans la voie finale, ayant des énergies voisines tout en la surestimant. Lorsque les énergies d'éjection et du diffuse des deux électrons ne sont pas proches, leur répulsion est presque nulle et le facteur de Gamow tend ici vers un.*

2.4.7 Méthode de la matrice \mathbf{R} (*RM*)

L'idée fondamentale de la méthode est que la configuration spatiale décrivant le projectile et la cible est divisée en deux régions. Dans la région interne $r < a$ (région interne de rayon a), l'interaction est forte et le processus de collision est difficile à calculer [23]. par contre dans la région externe, l'interaction est faible et le problème est solvable de façon exacte.

On considère en général la diffusion d'une particule par un potentiel de courte portée telle que l'équation de Schrödinger radiale réduite s'écrive :

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) + k^2 \right] F_l(r) = 0 \quad (2.29)$$

Avec $V(r) = 0$ pour $r \geq a$

La méthode de la matrice R consiste à développer la solution F_l pour n'importe quelle énergie dans le domaine $0 \leq r \leq a$ sur une base complète d'états propres définis par :

$$F(r) = \sum_{\lambda=1}^{\infty} C_{\lambda} F_{\lambda}(r)$$

Avec la condition d'orthonormalisation :

$$\int_0^a F_{\lambda}(r) F_{\lambda'}(r) dr = \delta_{\lambda\lambda'}$$

La méthode R-matrix a été utilisée pour calculer les (*SETD*), en utilisant les approximations suivantes [49] :

- L'électron incident est décrit par une onde distordue.
- L'électron éjecté est représenté par un développement de matrice R .
- L'interaction coulombienne entre l'électron incident et les électrons de la cible est prise en compte.
- L'interaction (*PCI*) ainsi que les effets d'échange entre les deux électrons du continuum de l'état final sont négligés.

2.5 Conclusion

Nous avons brièvement exposé une description globale de la réaction ($e, 2e$), en utilisant le modèle du cœur gelé qui a simplifié considérablement les calculs en prenant en compte un seul électron de l'orbitale ionisée. On a vu que la connaissance de la fonction d'onde qui décrit la cible atomique est nécessaire. Les orbitales atomiques de l'hydrogène sont utilisées pour décrire les orbitales atomiques des cibles atomiques à plusieurs électrons. Enfin on a présenté les différents modèles pour la description des électrons du continuum, et pour le calcul de la (*SETD*) dans l'approximation de Born qui reste le moyen le plus rapide et le plus simple pour reproduire les résultats expérimentaux.

Dans les chapitres 3 et 4, nous reviendrons sur la définition et l'application des modèles (*BBK2CWZ*) et (*3CWZ*). Ces modèles ont pu 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, et nous verrons les domaines d'application de chaque modèle.

Chapitre 3

Étude des effets de distorsion et de l'interaction post-collisionnelle

3.1 Introduction

La section efficace triplement différentielle (*SETD*) obtenue dans les techniques de coïncidence ($e, 2e$) représente la description la plus complète du processus d'ionisation, grâce à la détection en coïncidence des deux électrons sortants (le diffusé et l'éjecté). Cette dernière est évaluée à travers l'amplitude de diffusion définie comme les éléments de transition entre les états initial et final de la collision.

L'ionisation par impact électronique a été utilisée, d'une part, pour explorer la structure de la cible étudiée, et d'autre part pour comprendre la dynamique de collision des réactions correspondantes.

Pour les hautes énergies ($E_i \geq 600 \text{ eV}$) et les énergies intermédiaires ($100 \text{ eV} \leq E_i \leq 600 \text{ eV}$), les approximations du premier ordre qui ne tiennent pas compte de l'interaction entre l'électron diffusé et l'électron éjecté sont suffisantes pour calculer la (*SETD*) dans le cas des couches externes. Pour les basses énergies ($20 \text{ eV} \leq E_i \leq 100 \text{ eV}$) et les couches internes, ces approximations sont incapables de reproduire les résultats expérimentaux, ce qui exige l'introduction d'autres contributions comme l'interaction post collisionnelle (*PCI*) représentée à travers le modèle (*BBK*) bien connu. Cependant, le modèle (*BBK*) n'est pas toujours en mesure d'interpréter les expériences ($e, 2e$), d'autres phénomènes doivent alors être pris en considération pour interpréter l'expérience tel que la distorsion de l'électron éjecté ainsi que celle de l'électron diffusé avec l'effet (*PCI*) entre ces deux électrons¹.

La distorsion est un modèle connu qui est utilisé par les modèles théoriques les plus puissants, il est par conséquent très largement décrit dans la littérature. La modélisation est purement numérique et revient dans un premier temps à résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas de ce qu'on appelle un potentiel de distorsion. Dans notre travail, la distorsion est représentée par une onde Coulombienne avec une charge variable. Dans ce chapitre, le traitement précédent est amélioré en prenant simultanément en compte le (*PCI*) ainsi que les effets de

1. La distorsion est due au potentiel de courte portée autour de la cible qui cause une déformation des ondes représentant l'électron éjecté et l'électron diffusé, les effets (*PCI*) sont les interactions entre l'électron éjecté avec le diffusé de nature purement coulombienne.

distorsion des deux électrons sortants. Dans le modèle utilisé dans le présent travail, les effets de distorsion sont introduits de façon plutôt différentes. On représente alors les électrons du continuum par une onde coulombienne avec une charge variable $Z(r)$ au lieu d'une charge effective constante Z .

3.2 Approximation de la charge variable

La charge variable $Z(r)$ est calculée en utilisant le potentiel statique moyenné V_{stat} de la cible vue par l'électron éjecté (appelé également potentiel de Hartree qui représente un potentiel purement coulombien plus un potentiel de courte portée). Pour des cibles atomiques, ce potentiel est donné (dans le cas d'une orbitale j) par :

$$V_j(\vec{r}_1) = -\frac{Z}{r_1} + \sum_{i=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \quad (3.1)$$

où N_0 est le nombre d'orbitales atomiques de la cible, N_{ij} le nombre d'électrons dans la $i^{\text{ème}}$ orbitale, \vec{r}_1 position de l'électron éjecté, Z est la charge du noyau et ϕ_j la fonction d'onde représentant l'électron lié, elle est représentée par une combinaison linéaire de fonctions de type Slater définie comme suit :

$$\phi_j(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{N_j} a_{jk} \phi_{n_{ik} l_{ik} m_{ik}}^{\xi_{ik}}(\vec{r}), \quad (3.2)$$

avec

$$\phi_{nlm}^{\xi}(\vec{r}) = N_n r^{n-1} e^{-\xi r} Y_{l,m}(\theta, \varphi). \quad (3.3)$$

Notons qu'au lieu d'utiliser le vrai potentiel, on utilise pour des raisons pratique un potentiel radial moyenné U_j en effectuant une moyenne angulaire sur V_j comme suit :

$$U_j(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int V_j(\vec{r}_1) d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1}. \quad (3.4)$$

Remarque 3.1. La charge variable $Z(r_1)$ est telle que $Z(r_1)$ tend vers la charge du noyau à $r = 0$ et $Z(r_1) = 1$ asymptotiquement, c'est à dire :

$$Z(0) = Z \text{ et } \lim_{r_1 \rightarrow \infty} Z(r_1) = 1, \quad (3.5)$$

où Z est la charge au centre de l'ion résiduel.

Si on prend une charge constante vue par l'électron éjecté $Z = 1$, le modèle 1DW est réduit au modèle 1CW [30].

3.3 Calcul de la charge variable de quelques atomes

3.3.1 Hélium

L'atome d'hélium dans son état fondamental représente le cas le plus simple² pour calculer le potentiel statique U , et sa configuration est, $He : 1s^2$

$$U(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{2}{r_1} + \int \frac{|\phi_{1s}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e, \quad (3.6)$$

La charge variable est calculée analytiquement en utilisant le développement multipolaire

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{l,m}^*(\Omega_i) Y_{l,m}(\Omega_j), \quad (3.7)$$

Si on choisit la fonction d'onde de Hylleraas pour représenter l'électron actif de l'atome d'hélium

$$\phi_{1s}(\vec{r}) = 2\alpha^{3/2} e^{-\alpha r} Y_{0,0}(\Omega), \quad (3.8)$$

avec $\alpha = \frac{27}{16}$.

On obtient ([Annexe D](#))

$$Z(r) = 1 + (1 + \alpha r) e^{-2\alpha r}. \quad (3.9)$$

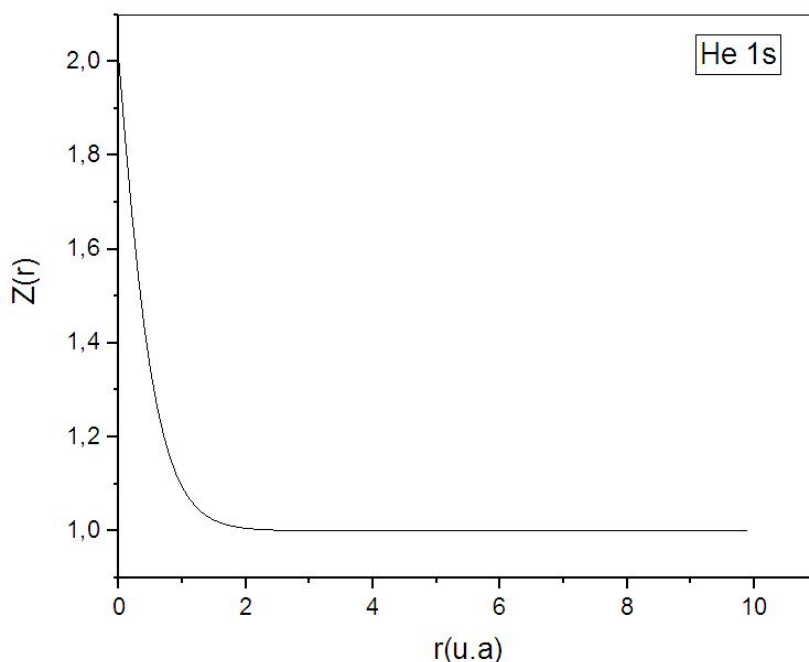


FIGURE 3.1: Variation de la charge effective Z en fonction de r dans le cas d'ionisation de l'orbitale atomique $1s$ de l'Hélium.

2. L'étude de l'ionisation pour l'atome d'hélium représente le premier test pour tous les modèles théoriques car c'est l'élément le plus simple à étudier après l'atome d'hydrogène. L'autre avantage d'étudier l'hélium est la disponibilité de nombreuses mesures expérimentales.

3.3.2 Néon

L'état fondamental du Néon est décrit par la fonction d'onde de type Hartree-Fock de Clementi [39] pour décrire l'électron actif. Sa configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^6$.

Dans le cas de l'ionisation de l'orbitale atomique $2p$ du Néon, le potentiel statique donné par l'équation (3.4) devient

$$U(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{10}{r_1} + 2 \int \frac{|\phi_{1s}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{2s}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 5 \int \frac{|\phi_{2p}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1} \quad (3.10)$$

La charge variable finalement sous la forme :

$$Z(r_1) = 10 - 2Z_{1s}(r_1) - 2Z_{2s}(r_1) - 5Z_{2p}(r_1), \quad (3.11)$$

avec

$$Z_{1s}(r_1) = \int \frac{|\phi_{1s}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r}, \quad Z_{2s}(r_1) = \int \frac{|\phi_{2s}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r}, \quad Z_{2p}(r_1) = \int \frac{|\phi_{2p}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r}$$

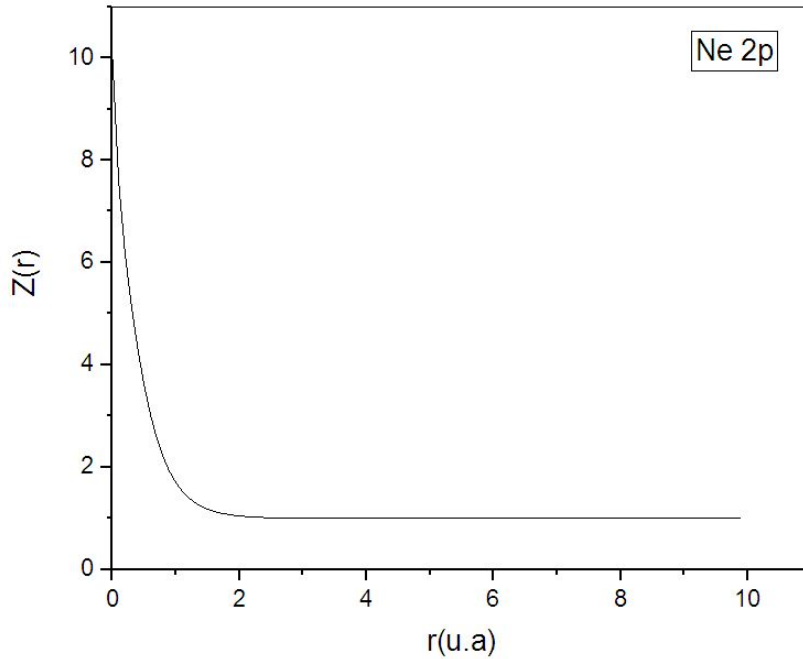


FIGURE 3.2: Variation de la charge effective Z en fonction de r dans le cas d'ionisation de l'orbitale atomique $2p$ de Néon

3.3.3 Argon

L'argon est une cible largement étudiée en théorie et en expérience. Sa configuration électronique est $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. L'électron actif est représenté par les fonctions d'onde de type Hartree-Fock de Clementi [39], dans le cas de l'ionisation de l'orbitale atomique $3p$ d'Argon, le

potentiel statique donné par l'équation (3.4) devient

$$U(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{18}{r_1} + 2 \int \frac{|\phi_{1s}|^2}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{2s}|^2}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} d\vec{r} + 6 \int \frac{|\phi_{2p}|^2}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{3s}|^2}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} d\vec{r} + 5 \int \frac{|\phi_{3p}|^2}{|\vec{r}-\vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1}. \quad (3.12)$$

De même la charge variable peut être écrite sous la forme

$$Z(r_1) = 18 - 2Z_{1s}(r_1) - 2Z_{2s}(r_1) - 6Z_{2p}(r_1) - 2Z_{3s}(r_1) - 5Z_{3p}(r_1), \quad (3.13)$$

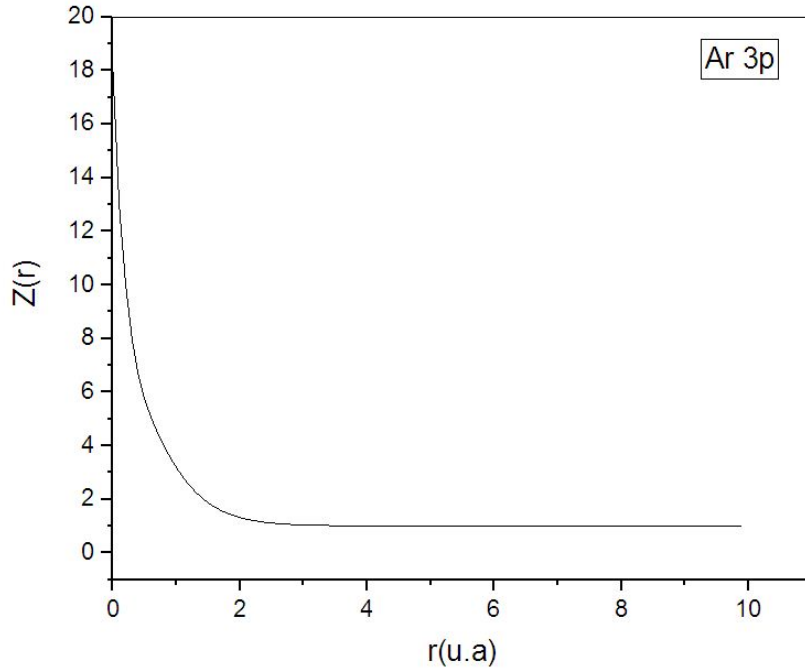


FIGURE 3.3: Variation de la charge effective Z en fonction de r dans le cas d'ionisation de l'orbitale atomique $3p$ de l'argon.

Remarque 3.2. On voit clairement que la charge diminue de $Z = 2$ à la valeur asymptotique $Z = 1$ pour He (figure 3.1), de $Z = 10$ à $Z = 1$ pour $Ne2p$ (figure 3.2) et de $Z = 18$ à $Z = 1$ pour $Ar3p$ (figure 3.3).

3.4 Calcul de la charge variable de quelques molécules

Pour les molécules, la charge variable est calculée de la même manière que les atomes, il faut juste inclure les interactions dues aux différents atomes constituant la molécule.³. Le potentiel moléculaire est donné par

$$V_j(\vec{r}_1, \vec{R}_j) = - \sum_{N=1}^M \frac{Z_N}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_N|} + \sum_{i=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_i(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r}, \quad (3.14)$$

3. Les cibles moléculaires sont aléatoirement orientées dans presque toutes les études expérimentales, ce qui présente une complication pour la théorie. Il faut donc prendre en compte les degrés de liberté internes (rotationnels et vibratoires).

où M est le nombre de noyaux, Z_N leurs charges et \vec{R}_N leurs positions par rapport au centre de la masse moléculaire. Notre modèle consiste à prendre une fonction d'onde monocentrique ϕ_i pour décrire les orbitales moléculaires. Il faut cependant noter qu'au lieu du potentiel anisotrope V_j réel, on utilise le potentiel radial moyenné U_j en effectuant une moyenne angulaire sur l'angle solide comme dans le cas atomique pour extraire la charge variable $Z(r)$.

La molécule d'eau

La molécule d'eau⁴ possède une géométrie non linéaire, dont l'atome d'oxygène occupe presque le centre. Les orbitales moléculaires de H_2O sont au nombre de cinq centrées sur le noyau d'oxygène, chaque orbitale contient deux électrons⁵. La configuration électronique fondamentale de la molécule d'eau est représentée comme suit [8]

$$H_2O : (1a_1)^2(2a_1)^2(1b_2)^2(3a_1)^2(1b_1)^2.$$

Dans le cas de l'ionisation de l'orbitale moléculaire $3a_1$, le potentiel moyen donné par l'équation (3.14) devient

$$\begin{aligned} U(r_1) &= \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{2}{R_1} - \frac{8}{r_1} + 2 \int \frac{|\phi_{1a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{2a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{1b_2}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + \int \frac{|\phi_{3a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right. \\ &\quad \left. + 2 \int \frac{|\phi_{1b_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1} \quad r_1 < R_1 \\ U(r_1) &= \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{2}{r_1} - \frac{8}{r_1} + 2 \int \frac{|\phi_{1a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{2a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{1b_2}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + \int \frac{|\phi_{3a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right. \\ &\quad \left. + 2 \int \frac{|\phi_{1b_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1} \quad r_1 > R_1 \end{aligned} \quad (3.15)$$

4. L'eau constitue un élément important de recherche dans l'étude de l'ionisation de petites molécules à cause de son abondance dans la matière vivante.

5. La molécule H_2O ($Z = 10$) est composée d'un atome d'oxygène ($Z = 8$) et deux atomes d'Hydrogène ($Z = 1$).

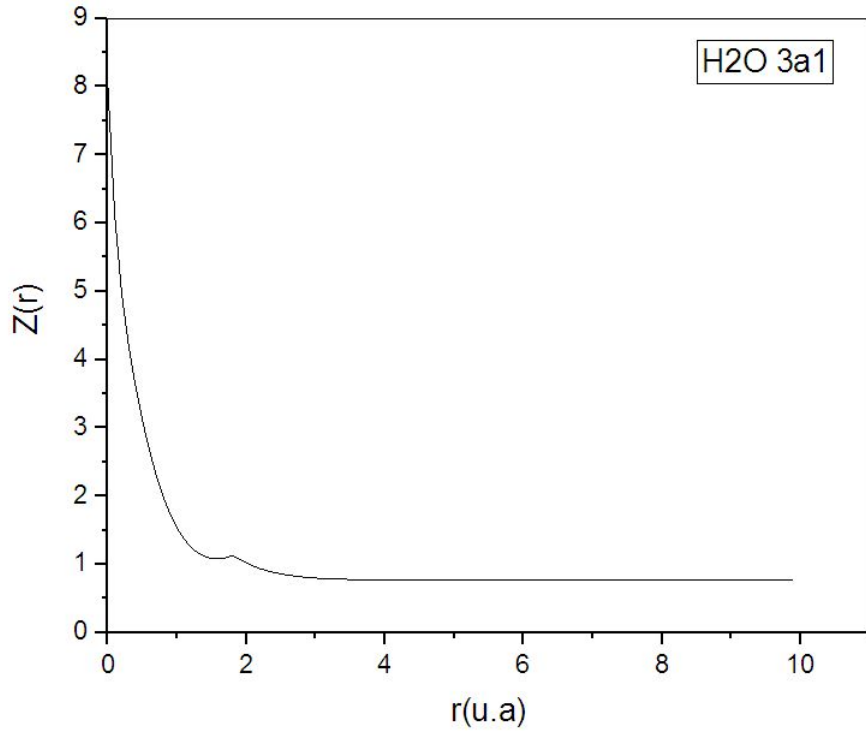


FIGURE 3.4: La charge $Z(r)$ vue par l'électron éjecté dans le cas d'ionisation de l'orbitale moléculaire $3a_1$ de la molécule d'eau.

Dans le cas de l'ionisation de l'orbitale moléculaire $1b_1$, le potentiel moyen donné par l'équation (3.14) devient

$$\begin{aligned}
 U(r_1) &= \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{2}{R_1} - \frac{8}{r_1} + 2 \int \frac{|\phi_{1a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{2a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{1b_2}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{3a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right. \\
 &\quad \left. + \int \frac{|\phi_{1b_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1} \quad r_1 < R_1 \\
 U(r_1) &= \frac{1}{4\pi} \int \left[-\frac{2}{r_1} - \frac{8}{r_1} + 2 \int \frac{|\phi_{1a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{2a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{1b_2}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} + 2 \int \frac{|\phi_{3a_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right. \\
 &\quad \left. + \int \frac{|\phi_{1b_1}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \right] d\Omega_e = -\frac{Z(r_1)}{r_1} \quad r_1 > R_1
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

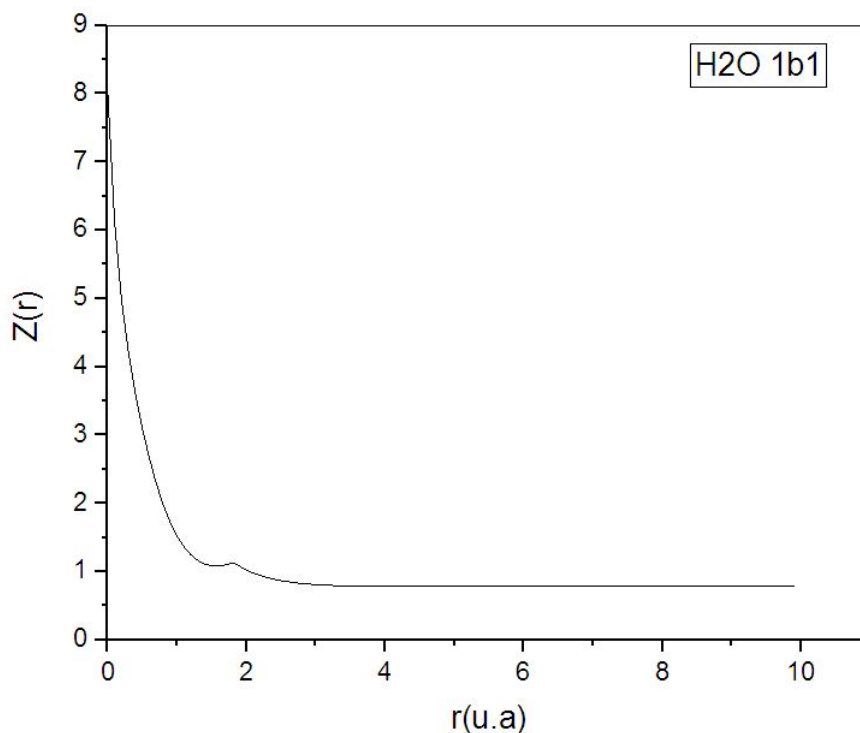


FIGURE 3.5: La charge $Z(r)$ vue par l'électron éjecté dans le cas d'ionisation de l'orbitale moléculaire $1b_1$ de la molécule d'eau.

Remarque 3.3. *l'électron éjecté voit une charge $Z = 8$ (celle de l'atome d'oxygène) au centre qui diminue progressivement jusqu'à atteindre la valeur asymptotique $Z = 1$.*

On remarque également l'existence d'un point anguleux au voisinage de la longueur de liaison ($r = R_1 = 1.8140(u.a)$), une propriété purement moléculaire qu'on n'observe pas dans le cas atomique.

3.5 Modèles approximatés de distorsion

Dans le but d'étudier la dynamique de l'ionisation par impact électronique des atomes et molécules, nous avons développé des modèles approximatés de distorsion qui tiennent compte de l'interaction post collisionnelle. Dans la présente modélisation, les deux électrons sortants sont décrits par une onde coulombienne avec des charges variables $Z(r)$ tandis que l'électron incident est décrit par une onde plane, en tenant compte de l'interaction (PCI). Les calculs sont effectués dans le cadre de la cinématique asymétrique coplanaire, et les résultats seront commentés et comparés avec les résultats expérimentaux.

Modèle ($BBK2CWZ$)

Ce modèle tient compte simultanément des effets de distorsion et l'interaction post collisionnelle (PCI). Le modèle ($BBK2CWZ1$) est une extension du modèle (BBK), où les deux électrons sortants (éjecté et diffuse) sont représentés par une onde coulombienne avec des charges variables $Z(r)$.

Dans la réaction $(e, 2e)$ l'électron incident d'impulsion k_i et d'énergie E_i interagit avec la cible A . Dans l'état final, deux électrons émergents sont détectés en coïncidence avec des moments k_e et k_s et des énergies E_e et E_s dans des directions bien définies, les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned}\frac{k_i^2}{2} &= \frac{k_e^2}{2} + \frac{k_s^2}{2} + E_{ion} \\ \vec{k}_i &= \vec{k}_e + \vec{k}_s + \vec{q}.\end{aligned}\quad (3.17)$$

E_{ion} représente l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale de la cible et \vec{q} représente la quantité de mouvement de l'ion résiduel.

Dans les expériences de coïncidence $(e, 2e)$, les données expérimentales représentent la $(SETD)$ qui s'écrit :

$$\sigma^{(3)} = \frac{d\sigma^3}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e} = (2\pi)^4 \frac{k_e k_s}{k_i} |T_{if}|^2. \quad (3.18)$$

Dans le cadre de l'approximation à un électron actif, l'amplitude de diffusion T_{if} s'écrit

$$T_{if} = \langle \phi_c^Z(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^Z(\vec{k}_e, \vec{r}_1) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) |V(r_0, r_1)| (2\pi)^{(-3/2)} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \phi_j(\vec{r}_1) \rangle. \quad (3.19)$$

Où ϕ_c^Z est une onde coulombienne avec la charge variable $Z(r)$ s'écrit

$$\phi_c^Z(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} {}_1F_1\left(-i\frac{Z(r)}{k}, 1, -i(kr + \vec{k} \cdot \vec{r})\right) e^{\frac{\pi Z(r)}{2k}} \Gamma\left(1 + i\frac{Z(r)}{k}\right), \quad (3.20)$$

pour le potentiel $V(r_0, r_1)$ on prend le potentiel purement coulombien

$$V(r_0, r_1) = \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0}$$

tandis que le terme décrivant l'interaction mutuelle électron-électron (PCI) est décrite par la fonction :

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) = e^{-\frac{\pi}{4k_{se}}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{se}}\right) {}_1F_1\left(-i\alpha_{01}, 1, -i(k_{se}r_{01} + \vec{k}_{se} \cdot \vec{r}_{01})\right) \quad (3.21)$$

avec $\vec{k}_{se} = \frac{1}{2}(\vec{k}_s - \vec{k}_e)$ et $\alpha_{01} = -\frac{1}{2k_{se}}$.

Nous présentons, dans ce qui suit, les différentes possibilités de représenter la charge variable des électrons dans la voie de sortie lors de leur interaction avec l'ion résiduel [31].

L'électron éjecté voit une charge $Z_e = Z_N$ au centre de la cible et $Z_e = 1$ asymptotiquement. Pour l'électron diffusé, nous devons souligner un détail important⁶. Au centre de la cible, l'électron diffusé voit une charge $Z_s = Z_N$, tandis qu'asymptotiquement deux alternatives doivent être prises en compte : premièrement, l'électron diffusé peut voir asymptotiquement une charge $Z_s = 1$ comme celle éjectée, le modèle est alors appelé $(BBK2CWZ1)$. D'autre part, puisque l'électron diffusé est plus rapide, l'électron éjecté pourrait apparaître comme un constituant de la cible ionique, l'électron diffusé voit ainsi une charge asymptotique $Z_s = 0$, le modèle est alors appelé $(BBK2CWZ0)$.

6. Puisque nous considérons ici une cinématique coplanaire asymétrique, l'électron diffusé est plus rapide que l'électron éjecté.

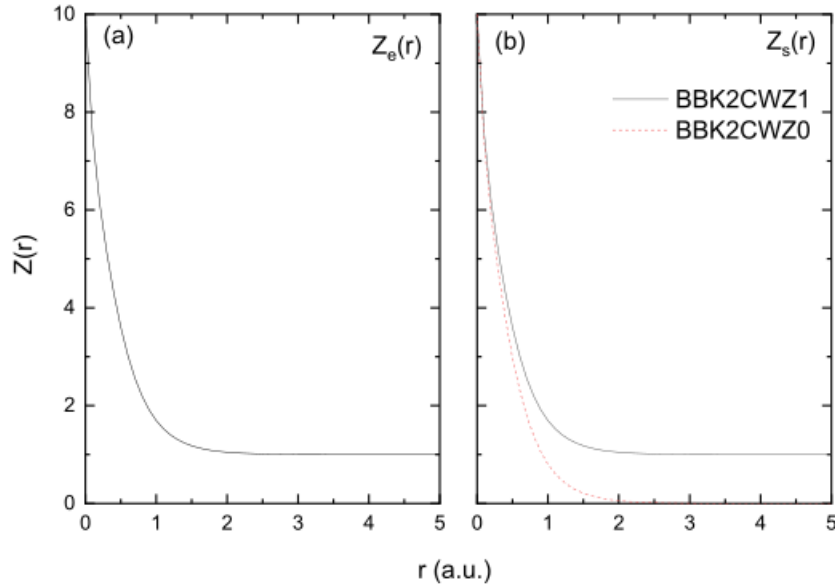


FIGURE 3.6: Charge variable $Z(r)$ vue par l'électron éjecté (a) et l'électron diffusé (b) pendant le processus d'ionisation pour l'orbitale atomique $2p$ de Ne . Les lignes noires pleines et les pointillés rouges correspondent respectivement aux modèles ($BBK2CWZ1$) et ($BBK2CWZ0$).

Dans la [figure 3.6](#), nous présentons les charges variables $Z_e(r)$ et $Z_s(r)$ correspondant respectivement aux électrons éjectés et diffusés pour l'ionisation du néon $2p$, correspondant aux deux modèles ($BBK2CWZ1$) et ($BBK2CWZ0$). On voit que $Z_e(r)$ diminue de $Z_e = 10$ et tend asymptotiquement à $Z_e = 1$, tandis que $Z_s(r)$ diminue de $Z_s = 10$ et tend soit vers $Z_s = 1$, soit $Z_s = 0$ selon le modèle utilisé.

Dans le cas d'une molécule, le même constat est fait pour l'ionisation de l'orbitale moléculaire $1b_1$ de H_2O .

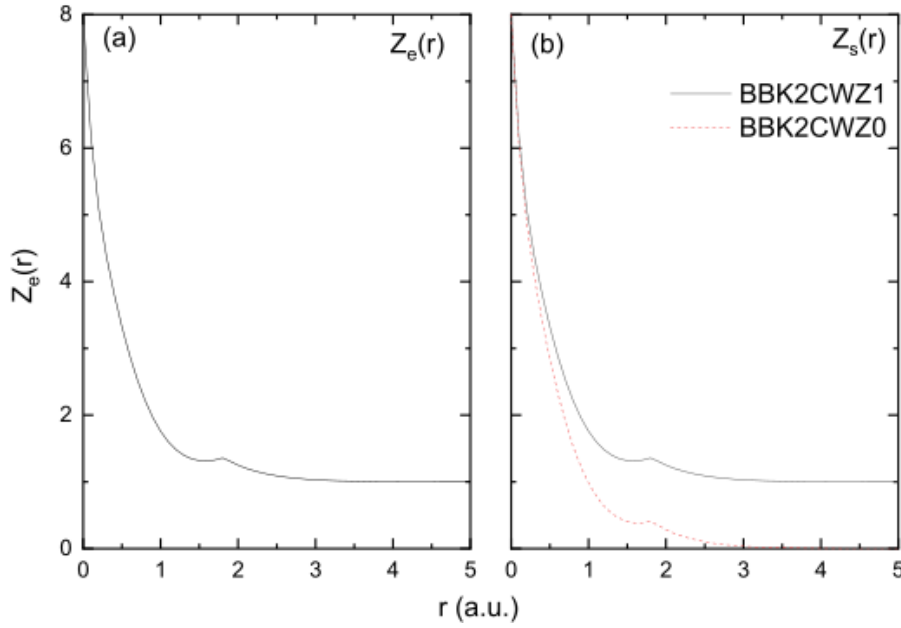


FIGURE 3.7: Charge variable $Z(r)$ vue par l'électron éjecté (a) et l'électron diffusé (b) pendant le processus d'ionisation pour l'orbitale moléculaire $1b_1$ de H_2O . Les lignes noires pleines et les pointillés rouges correspondent respectivement aux modèles (BBK2CWZ1) et (BBK2CWZ0).

L'électron sortant voit une charge $Z_N = 8$ au centre du système (ici, la charge de l'atome⁷ d'oxygène). De l'autre côté, la charge variable $Z(r)$ présente un point angulaire proche de $r = R = 1,814(u.a)$ (correspondant à la longueur de liaison), qui représente une signature purement moléculaire (voir [figure3.7](#)).

Remarque 3.4. Dans les deux cas illustrés ici (pour Ne et H_2O) on constate que les charges variables $Z_s(r)$ et $Z_e(r)$ diminuent rapidement à $Z = 1$ ou $Z = 0$ pour une distance inférieure à $r = 4(u.a)$ dans les deux modèles.

Nous rappelons que, tous les états liés sont représentés dans le cas atomique par des combinaisons linéaires d'ondes de type fonctions de Slater [39] et par des orbitales moléculaires monocentriques de Moccia [6], [7], [8]. De plus la (SETD) des molécules s'écrit comme suit

$$\sigma^{(4)}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_{Euler}d\Omega_s d\Omega_e dE_e} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2 \quad (3.22)$$

avec, $d\Omega_{Euler} = \sin(\beta) d\beta d\alpha d\gamma$

Comme les cibles moléculaires sont orientées de manière aléatoire [18], l'équation (3.22) doit être moyennée sur les angles d'Euler⁸, et la (SETD) est alors défini comme suit

$$\sigma^{(3)} = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} \sigma^{(4)}(\alpha, \beta, \gamma) d\gamma \quad (3.23)$$

7. L'atome le plus lourd (atome d'oxygène pour H_2O)

8. Les fonctions d'ondes de la molécule sont représentées dans le repère de la molécule mais les sections efficaces sont mesurées dans le repère du laboratoire. En d'autres termes lors des expériences les molécules sont dans un état gazeux et sont donc orientées de façon aléatoire. Pour tenir compte de toutes les orientations on effectue donc une moyenne angulaire par rapport aux angles d'Euler ce qui signifie qu'on passe du repère de la molécule au repère du laboratoire (tel que $(\alpha, \beta$ et $\gamma)$ sont les angles d'Euler).

3.6 Validité du modèle (BBK2CWZ)

Les deux modèles (BBK2CWZ1) et (BBK2CWZ0) sont utilisés pour évaluer les sections efficaces triplement différentielles pour l'ionisation par impact d'électrons d'atomes ou de molécules. Nous essayons donc de valider ces deux modèles en faisant une comparaison avec les expériences disponibles. En outre, la validité de l'utilisation d'une onde Coulombienne avec charge variable $Z(r)$ a été étudiée en comparant sa (SETD) avec celle obtenue par une onde distordue pure [29], pour cela nous considérons l'onde distordue pure ψ_{dw} et l'onde Coulombienne sphérique ψ_{cw} , définie respectivement comme

$$\psi_{dw}(\vec{k}, \vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{l,m} i^l e^{(-i\delta_l)} \frac{u_{dw}(r)}{kr} Y_{l,m}(\hat{k}) Y_{l,m}^*(\hat{r}). \quad (3.24)$$

$$\psi_{cw}(\vec{k}, \vec{r}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{l,m} i^l e^{(-i\sigma_l)} \frac{u_{cw}(r)}{kr} Y_{l,m}(\hat{k}) Y_{l,m}^*(\hat{r}) \quad (3.25)$$

tel que u_{dw} est la solution de l'équation de Schrödinger radiale

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2U_j(r) + k^2 \right) u_{dw}(r) = 0, \quad (3.26)$$

où U_j est le potentiel sphériquement moyen défini dans l'équation (3.4).

La solution radiale exacte d'une onde Coulombienne sphérique est

$$u_{cw}(r) = 2^l e^{\frac{\pi Z}{2k}} \frac{|\Gamma(l+1 - \frac{iZ}{k})|}{(2l+1)!} e^{ikr} (kr)^{l+1} {}_1F_1\left(l+1 - \frac{iZ}{k}, 2l+2, -2ikr\right). \quad (3.27)$$

On procède alors à une étude comparative entre f_{dw} et f_{cw} , définies respectivement comme

$$f_{dw} = |u_{dw}|^2 \quad \text{et} \quad f_{cw} = |u_{cw}|^2.$$

Après comparaison, on voit que les deux ondes définies dans les équations (3.24) et (3.25) coïncident et sont pratiquement identiques [31].

Nous concluons que les ondes partielles utilisant une onde distordue pure ou une onde coulombienne sphérique avec charge variable deviennent généralement comparables et même identiques pour les plus faibles valeurs du moment cinétique l .

Remarque 3.5. *le modèle (BBK2CWZ), basé sur un traitement de charge variable, offre des avantages intéressants en termes d'économie de temps de calcul.*

Notre étude est présentée ci-dessous dans le cadre de cette modélisation pour différents cibles atomiques et moléculaires.

3.7 Résultats et discussion

Nous avons calculé les (SETD) de quelques cibles atomiques, plusieurs cinématiques sont considérées pour décrire les réactions ($e, 2e$) tel que Ne et Ar .

Dans un premier temps, nous étudions certaines situations particulières où les résultats sont comparés aux données absolues réalisées à différentes cinématiques pour le néon et l'argon.

3.7.1 Application à l'atome de Néon

On considère d'abord l'ionisation de l'orbitale $2p$ du néon à près de 600 eV et 150 eV d'énergie d'impact [22]. Sur la [figure 3.8](#), les résultats de la (*SETD*) pour l'ionisation du néon $2p$ avec une énergie d'impact d'environ 600 eV sont présentés pour les modèles (*BBK*), (*BBK2CWZ1*) et (*BBK2CWZ0*) pour une énergie de l'éjection de $E_e = 74\text{ eV}$ et un angle de diffusion de $\theta_s = 6^\circ$. Il est clairement observé que le meilleur accord avec les données est exposé par (*BBK2CWZ1*). Dans la région binaire, l'accord avec les données absolues est parfait, tandis que dans la région de recul, les données sont quelque peu sous-estimées. Nous observons également que le modèle (*BBK2CWZ0*) et les résultats de (*BBK*) sous-estiment les données dans les deux régions, tandis que dans la région du recul, les trois modèles sont globalement équivalents. Il faut noter que les résultats du modèle (*BBK2CWZ0*) sont plus proches de ceux de (*BBK2CWZ1*) que de (*BBK*),

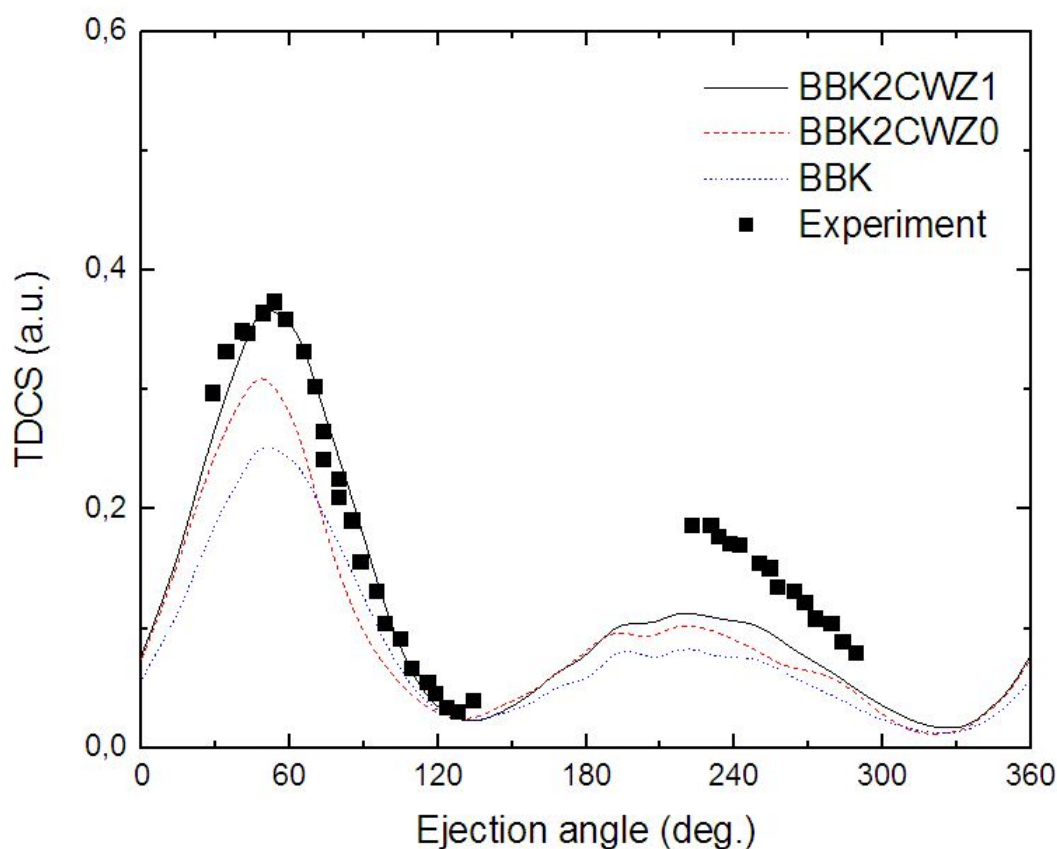


FIGURE 3.8: (*SETD*) absolue pour l'ionisation du néon $2p$ en fonction de l'éjection θ_e à angle de diffusion fixe $\theta_s = 6^\circ$. les électrons diffusés et éjectés ont des énergies $E_s = 500\text{ eV}$ et $E_e = 74\text{ eV}$. Les modèles théoriques sont (*BBK2CWZ1*) (ligne continue noire), (*BBK2CWZ0*) (ligne discontinue rouge) et (*BBK*) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont des carrés noirs tirés de [22].

Remarque 3.6. Notons que, les positions des pics sont légèrement décalées vers les angles inférieurs pour le modèle (*BBK2CWZ0*).

La deuxième situation cinématique, représentée sur la [figure 3.9](#), concerne toujours l'ionisation du néon $2p$ à un projectile de plus faible énergie $E_i = 150\text{ eV}$, une énergie d'éjection

$E_e = 10 \text{ eV}$ et un angle de diffusion $\theta_s = 5^\circ$. Dans l'ensemble, les trois modèles présentent des formes très similaires dans la région du recul où les données sont assez proches de la théorie. Dans la région binaire, des divergences évidentes entre la théorie et les expériences sont observées pour des angles inférieurs à 60° , cependant, le deuxième pic binaire est mieux reproduit, en particulier par (*BBK*). Dans la région binaire, les trois modèles présentent qualitativement le même comportement, cependant, les amplitudes sont nettement différentes.

Nous remarquons également que les positions maximales de (*BBK2CWZ0*) sont décalées vers des angles plus bas comme dans la situation précédente (*figure 3.8*).

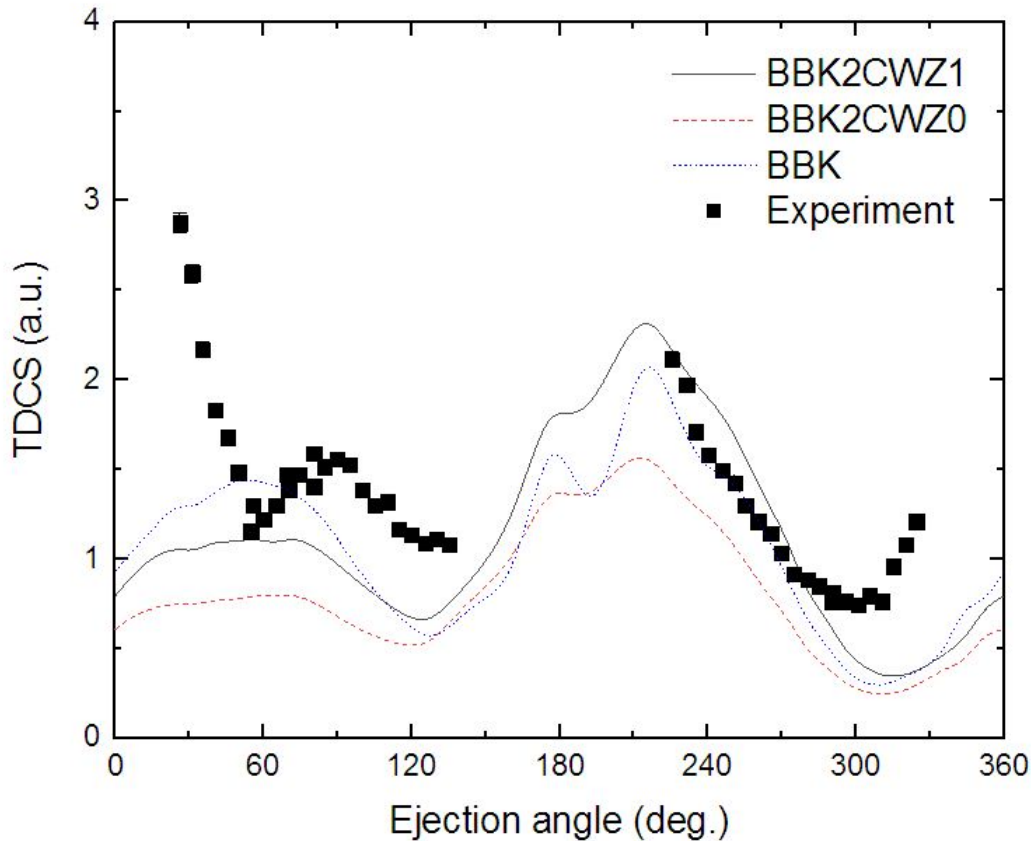


FIGURE 3.9: (*SETD*) absolue pour l'ionisation du néon $2p$ par énergie d'impact $E_i = 150 \text{ eV}$ en fonction de l'éjection θ_e . Le projectile est diffusé à un angle $\theta_s = 5^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté avec une énergie $E_e = 10 \text{ eV}$. Les résultats théoriques sont (*BBK2CWZ1*) (ligne continue noire), (*BBK2CWZ0*) (ligne discontinue rouge) et (*BBK*) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont des carrés noirs tirés de [22].

Remarque 3.7. Les lacunes observées dans la *figure 3.9* peuvent être attribuées à la description de l'énergie incidente de l'électron dans notre théorie par une onde plane, à cette énergie d'impact faible (150 eV) l'électron incident devrait être décrit de façon plus rigoureuse.

3.7.2 Application à l'atome de l'Argon

On considère d'abord l'ionisation de l'argon $2p$ avec une énergie de projectile de l'ordre de 8 keV où les données expérimentales sont encore une fois absolues. Nous étudions la cinématique à une énergie d'impact de $E_i = 8400 \text{ eV}$, une énergie d'éjection de $E_e = 150 \text{ eV}$ et un

angle de diffusion de $\theta_s = 2^\circ$. La (*SETD*) calculée est représentée sur la *figure 3.10* et comparée aux données expérimentales absolues [13]. Les résultats sont impressionnants pour les modèles (*BBKCWZ1*) et (*BBK2CWZ0*) où l'accord avec les expériences est parfait. La forme et l'amplitude de la (*SETD*) est bien reproduite par les deux modèles et leurs résultats sont pratiquement identiques, alors que (*BBK*) n'est pas en mesure de décrire correctement cette réaction ($e, 2e$) et s'avère incapable de reproduire la majeure partie de l'expérience.

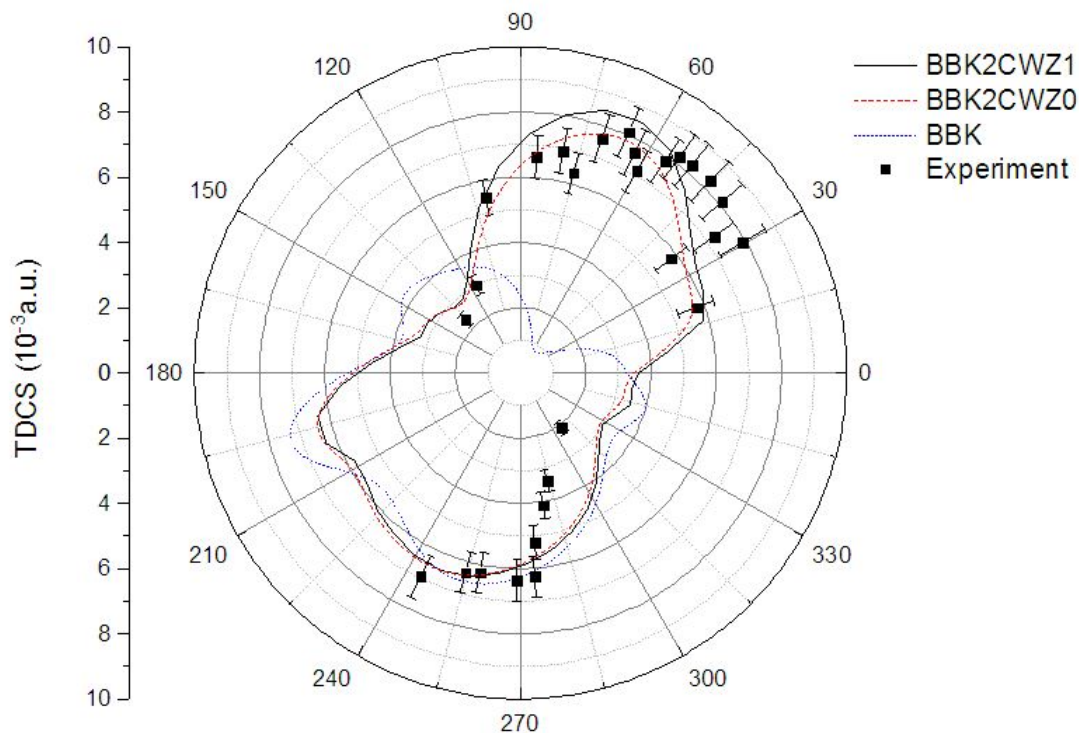


FIGURE 3.10: Représentation polaire de la (*SETD*) absolue de l'orbitale $2p$ de l'atome Ar , en $10^{-3}(u.a.)$, par une énergie d'impact $E_i = 8400 eV$ en fonction de l'angle d'éjection θ_e . Le projectile est diffusé à un angle $\theta_s = 2^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté avec une énergie $E_e = 150 eV$. Les résultats théoriques sont (*BBKCWZ1*) (ligne continue noire), (*BBK2CWZ0*) (ligne discontinue rouge) et (*BBK*) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont les carrés noirs tirés de [13].

La (*SETD*) absolue de l'argon $3p$ à une énergie d'impact intermédiaire de $E_i = 195 eV$ et une énergie éjectée de $E_e = 10 eV$ est maintenant présentée dans la *figure 3.11*. Nous nous intéressons ici à la situation particulière correspondant à une coupe dans le plan yz prise à partir d'une image $3D$ donnée dans [24] pour évaluer la (*SETD*) pour ces cinématiques. On observe que les données absolues sont bien reproduites par les trois modèles. Dans la région binaire, les données sont plus proches du modèle (*BBK2CWZ0*) tandis que dans le recul, le modèle (*BBK2CWZ1*) décrit beaucoup mieux l'expérience.

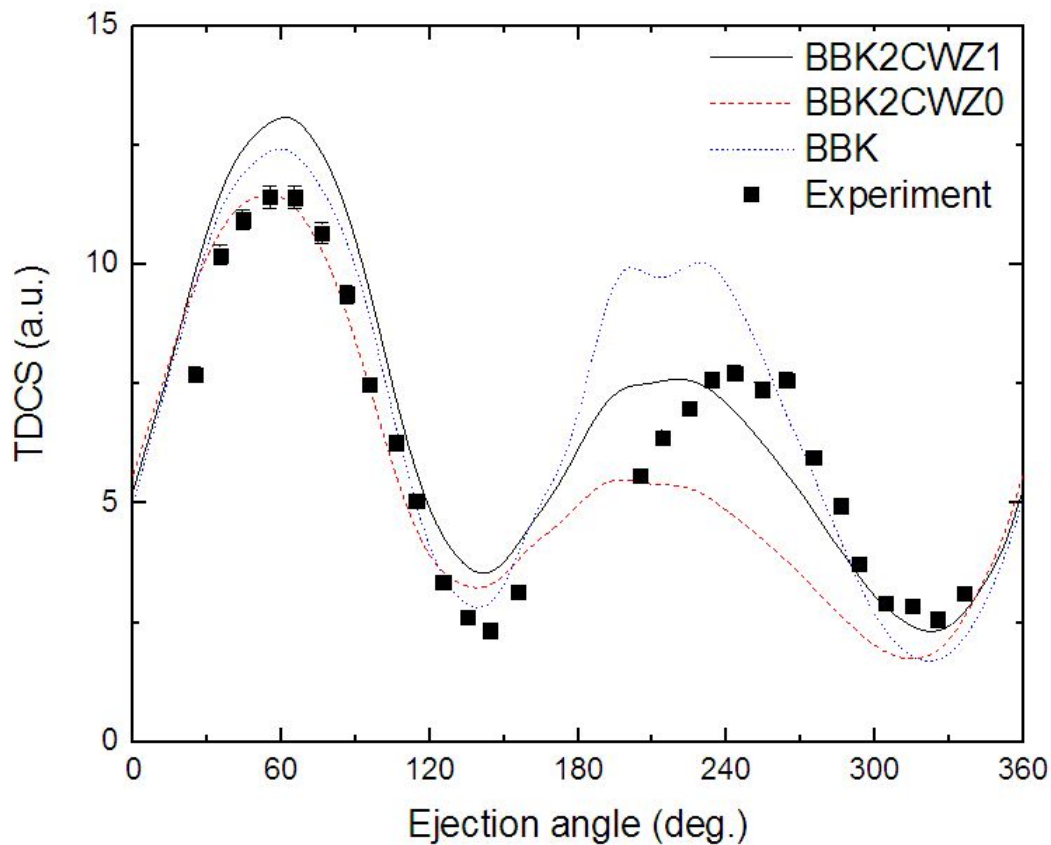


FIGURE 3.11: (*SETD*) absolue pour l'ionisation de l'argon $3p$ par une énergie d'impact $E_i = 195 \text{ eV}$ en fonction de l'angle d'éjection θ_e . Les paramètres cinématiques correspondent à une coupe dans le plan yz prise à partir d'une image $3D$ où le projectile est diffusé à un angle $\theta_s = 5^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté avec une énergie $E_e = 10 \text{ eV}$. Les résultats théoriques sont (*BBKCWZ1*) (ligne continue noire), (*BBK2CWZ0*) (ligne discontinue rouge) et (*BBK*) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont les carrés noirs tirés de [24].

Dans ce qui suit, nos résultats sont comparés avec les données relatives expérimentales [19] [28] dans différentes cinématiques avec une énergie de projectile plus élevée de l'ordre de 1 keV . Les (*SETD*) obtenues sont ensuite présentés sur les figures 3.12 et 3.13, tous les résultats sont alors normalisés par rapport au modèle (*BBKCWZ1*).

La figure 3.12 montre la (*SETD*) en fonction de l'angle d'éjection correspondant à des énergies incidente et d'éjection de 1 KeV et 13 eV respectivement et un angle de diffusion $\theta_s = 1.2^\circ$. Il apparaît que les trois modèles présentent des formes quasi similaires. L'accord entre la théorie et les expériences est tout à fait raisonnable dans les régions binaires et de recul, il est évident qu'il n'y a pas de concurrence substantielle entre les modèles.

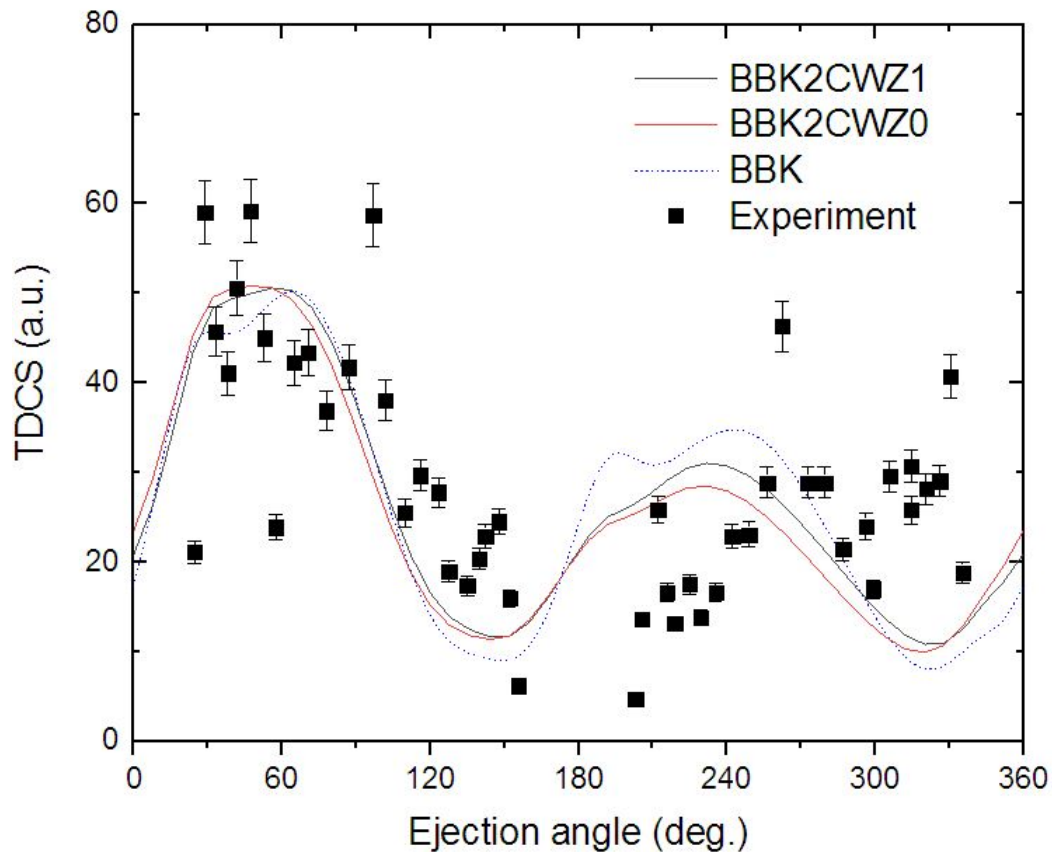


FIGURE 3.12: (*SETD*) pour l'ionisation de l'argon $3p$ par une énergie d'impact $E_i = 1 \text{ keV}$ en fonction de l'angle d'éjection θ_e . Le projectile est diffusé à un angle $\theta_s = 1.2^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté avec une énergie $E_e = 13 \text{ eV}$. Les résultats théoriques sont les suivants : (*BBKCWZ1*) (ligne continue noire), (*BBK2CWZ0*) (ligne discontinue rouge) et (*BBK*) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont les carrés noirs tiré de [28]. Les données expérimentales ainsi que les résultats théoriques ont été normalisés aux résultats de (*BBKCWZ1*) au maximum de pic binaire.

On considère à présent d'autres conditions cinématiques [19] correspondant à des expériences réalisées à une énergie incidente d'environ 500 eV et à une énergie d'éjection de 205 eV (figure 3.13). Les résultats sont maintenant complètement différents, le modèle (*BBK*) semble incapable de reproduire la plupart des données expérimentales puisque la (*SETD*) ne présente aucune structure au-delà d'un angle d'éjection d'environ 90° . En revanche, les modèles (*BBKCWZ1*) et (*BBKCWZ0*) présentent une forme complètement différente en bon accord avec les données expérimentales⁹, on voit clairement que les modèles (*BBKCWZ1*) et (*BBKCWZ0*) fournissent des résultats proches des données de l'expérience dans presque toutes les parties de la (*SETD*), de façon similaire à celle fournie¹⁰ par le modèle (*DWBA - G*) [20].

9. Les données ont été normalisées pour un meilleur accord visuel avec la théorie.

10. basé sur une description d'onde distordue avec le facteur de Gamow pour tenir compte du (*PCI*) (voir chapitre 2).

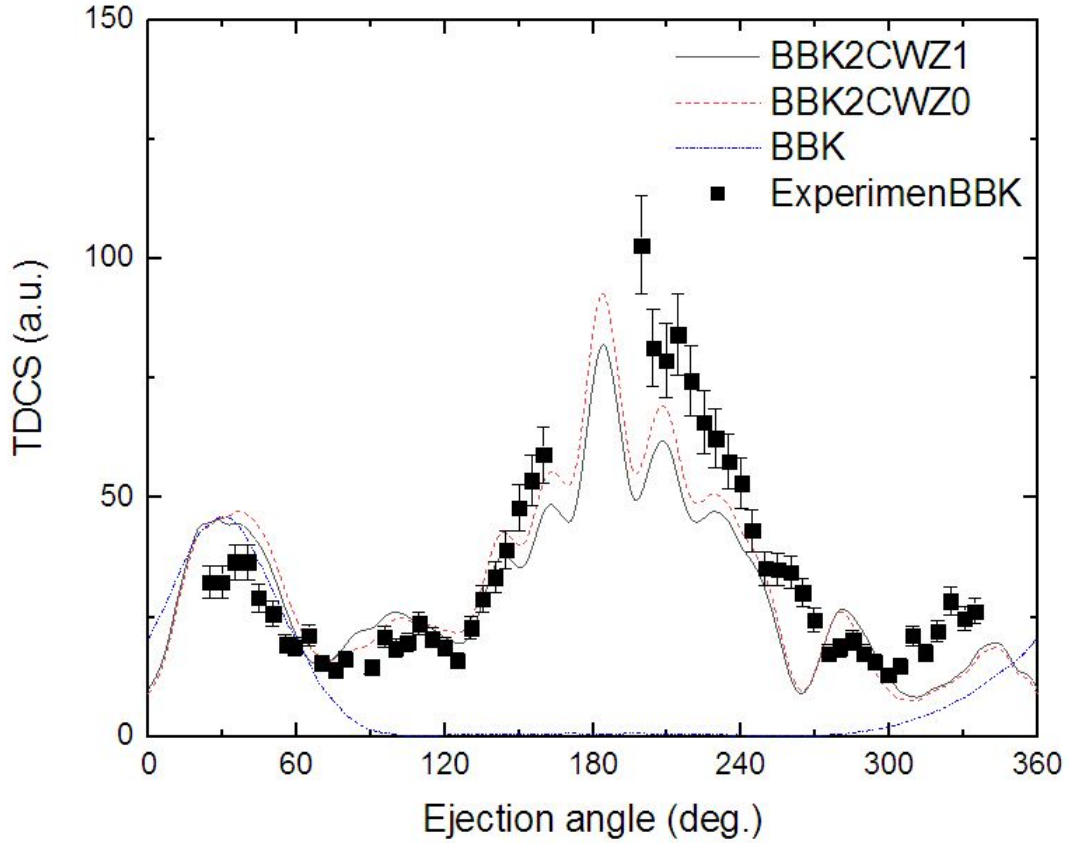


FIGURE 3.13: $(SETD) \cdot 10^{-4}$ pour l'ionisation de l'Argon $3p$ en fonction de l'angle d'éjection θ_e pour un angle de diffusion fixe $\theta_s = 3^\circ$. Le projectile est dispersé avec une énergie $E_s = 500 \text{ eV}$ en coïncidence avec l'électron éjecté ayant une énergie $E_e = 205 \text{ eV}$. Les résultats théoriques sont ($BBK2CWZ1$) (ligne continue noire), ($BBK2CWZ0$) (ligne discontinue rouge) et (BBK) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont les carrés noirs tirés de [19]. Les résultats théoriques ont été normalisés par rapport au modèle ($BBK2CWZ1$) au maximum du pic binaire .

Pour interpréter les anomalies observées entre les [figures 3.12](#) et [3.13](#), il faut introduire le moment de transfert $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$, il s'agit d'un paramètre essentiel dans la description des processus collisionnels en général. En effet, la cinématique représentée dans la [figure 3.13](#) correspond à un transfert de quantité de mouvement K assez important (environ $1,27(u.a.)$) impliquant un grand moment de recul q absorbé par la cible (jusqu'à $5,2(u.a.)$). Par conséquent, l'interaction avec la cible, en particulier celle des électrons sortants, avec l'ion résiduel est importante. La modélisation du processus dans le recul représente donc un défi pour la théorie, dans ce cas, (BBK) s'avère complètement incapable de décrire ces cinématiques dans la région de recul. Cependant, ($BBK2CWZ1$) et ($BBK2CWZ0$), qui représentent en fait une sorte d'approximation d'une onde distordue, donnent une meilleure description de la ($SETD$) dans la région du recul. En revanche, pour la cinématique présentée dans la [figure 3.12](#), le moment du transfert K est assez faible (environ $0,22(u.a.)$) avec un moment de recul q (environ $4,9(u.a.)$), ce qui implique une faible contribution de l'ion résiduel. Le processus pour cette situation peut donc être mieux décrit par le modèle (BBK).

3.8 Conclusion

En conclusion, deux modèles améliorés appelés (*BBK2CWZ1*) et (*BBK2CWZ0*) ainsi que le modèle (*BBK*) standard ont été appliqués pour étudier le processus ($e, 2e$) pour des cibles atomiques et moléculaires dans plusieurs conditions cinématiques. Il a été constaté que :

- Les trois modèles sont presque équivalents pour une faible quantité de mouvement.
- Les modèles (*BBK2CWZ1*) et (*BBK2CWZ0*) présentent une meilleure description du processus ($e, 2e$) et sont pratiquement équivalents dans toutes les cinématiques.
- Pour les réactions caractérisées par des moments de transfert importants, les modèles (*BBK2CWZ1*) et (*BBK2CWZ0*) sont globalement capables de produire la plupart des parties de la (*SETD*), tandis que (*BBK*) n'arrive pas du tout à décrire la région de recul.

En perspective, les insuffisances observées pour les atomes à faible impact, à des énergies d'impact intermédiaires et un moment de transfert important, pourraient être améliorées en incorporant une meilleure description de l'électron incident.

Chapitre 4

Le modèle (3CWZ) résultats et discussions

4.1 introduction

L'ionisation par impact d'électrons d'atomes et de molécules représente théoriquement un problème à plusieurs corps qui reste encore non résolu puisque l'équation de Schrödinger ne peut pas être résolue analytiquement pour plus de deux particules en interaction. Expérimentalement, les techniques de coïncidence ont permis d'obtenir des informations complètes sur toutes les particules, ces expériences, également appelées réactions $(e, 2e)$ [15] [30], fournissent les informations les plus précieuses sur la réaction. En particulier, la section efficace triplement différentielle (*SETD*) représente un test rigoureux pour les modèles les plus efficaces. Nous rappelons brièvement ici quelques modèles qui sont actuellement connus pour fournir la meilleure description de la réaction $(e, 2e)$, ces modèles pourraient donc représenter un bon outil de comparaison pour toute étude théorique comme celle que nous proposons dans ce travail. L'approximation de Born aux ondes distordues (*DWBA*), dans laquelle les électrons du continuum sont tous représentés par des ondes distordues mais qui ne prend pas en compte l'interaction post-collisionnelle (*PCI*), reste parmi les modèles les plus efficaces. Le modèle (*DWBA*) a été amélioré par Madison aux atomes en incluant le terme (*PCI*) et a été généralisé plus tard pour les molécules, cette modélisation a été appelée (*3DW*) pour les atomes et (*M3DW*) pour les molécules. Dans l'ensemble, le modèle a été appliqué avec succès et a fourni dans beaucoup de situations de bonnes prédictions de la (*SETD*) [21]. Une approche hybride (*DWBA – RM*) basée sur l'approximation (*DWBA*) et la méthode de la matrice *R* [23] est un modèle également très performant qui nécessite des moyens de calculs énormes. Dans sa version « premier ordre d'interaction projectile-cible » ce modèle est dénoté (*DWB1 – RM*), il est noté (*DWB2 – RM*) lorsqu'on tient compte de cette interaction au deuxième ordre. Une autre version du modèle (*DWBA*) est le modèle (*DWBA – G*) qui a été décrit par Kheifets et al. [20], dans ce modèle l'interaction (*PCI*) est introduite par le biais du facteur de Gamow.

Ces nouvelles approches ont permis aux chercheurs de réaliser des expériences cinématiquement complètes sur les cibles atomiques, alors que les cibles moléculaires ont été étudiées avec un support théorique limité en raison de leur caractère multicentrique ainsi que des contraintes de temps de calcul. En conséquence, les mesures $(e, 2e)$ peuvent maintenant être correctement prédites pour les atomes légers comme l'Hydrogène et l'Hélium par des modèles

sophistiqués. Cependant, pour les atomes plus complexes, l'accord n'est pas automatiquement aussi bon. En particulier, l'argon a présenté, un grand défi pour la théorie [22]. Notre objectif, dans ce travail, est d'étudier plus en détail l'ionisation¹ de l'argon 3p à l'aide d'une nouvelle approche théorique dans diverses cinématiques². Dans un travail précédent [31], nous avons présenté un modèle appelé (*BBK2CWZ1*), où les deux électrons sortants ont été décrits par des ondes coulombiennes avec une charge variable tandis que l'électron incident était représenté par une onde plane, cela a été considéré comme un modèle (*BBK*) amélioré. Le modèle a été appliqué avec succès à des cibles atomiques et moléculaires à des énergies d'impact intermédiaires et élevées, une amélioration globale de l'accord avec les mesures a été observée par rapport aux résultats du modèle standard du (*BBK*). Dans ce travail, nous améliorons notre modélisation en représentant tous les électrons du continuum par des ondes coulombiennes avec une charge variable ou, en d'autres termes, l'électron incident sera décrit maintenant par une onde coulombienne avec charge variable au lieu d'une onde plane. Ce modèle, appelé (*3CWZ*), qui devrait constituer une approche plus élaborée de la réaction (*e, 2e*) que (*BBK2CWZ1*), est appliquée à des énergies d'impact intermédiaires et faibles.

4.2 Description de l'interaction

L'ionisation par impact d'électrons d'un atome Ar dans son état fondamental est schématisé comme suit :



Dans ce qui suit, nous donnons quelques éléments théoriques concernant notre modèle, de plus amples informations peuvent être trouvés dans les travaux [27] [29] [31]. Dans ce travail, nous tenons compte des effets d'échange qui ont été omis précédemment (*Annexe C*). La section efficace triplement différentielle d'une sous-couche atomique (*n, l, m*) s'écrit, après avoir moyenné sur tous les états de spin initiaux [20] [21],

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e dE_e} = (2\pi)^4 \frac{k_e k_s}{k_i} (|T_{dir}|^2 + |T_{exc}|^2 + |T_{dir} - T_{exc}|^2). \quad (4.2)$$

Les éléments de la matrice de transition T_{dir} et T_{exc} sont donnés par

$$\begin{aligned} T_{dir} &= \left\langle \phi_c^Z(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^Z(\vec{k}_e, \vec{r}_1) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) |V(r_0, r_1)| \phi_c^Z(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) \right\rangle \\ T_{exc} &= \left\langle \phi_c^Z(\vec{k}_s, \vec{r}_1) \phi_c^Z(\vec{k}_e, \vec{r}_0) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) |V(r_0, r_1)| \phi_c^Z(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) \right\rangle, \end{aligned} \quad (4.3)$$

où \vec{k}_i , \vec{k}_s et \vec{k}_e sont, respectivement, les vecteurs de quantité de mouvement des électrons incidents, diffusés et éjectés, ces vecteurs sont nécessaires pour décrire la loi de conservation de la quantité de mouvement. $\vec{q} = \vec{K} - \vec{k}_e$, où \vec{q} est la quantité de mouvement de recul et K est le moment de transfert. ϕ_c^Z est une onde coulombienne, avec la charges variable $Z(r)$, s'écrit [33]

pour une onde sortante

$$\phi_c^Z(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} {}_1F_1\left(-i\frac{Z(r)}{k}, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})\right) e^{\frac{\pi Z(r)}{2k}} \Gamma\left(1 + i\frac{Z(r)}{k}\right), \quad (4.4)$$

1. Nous nous concentrerons essentiellement sur l'ionisation de l'Ar 3p par impact d'électrons car c'est le système d'électrons le plus étudié et pour lequel beaucoup d'expériences ont été réalisées.

2. Il convient de noter que, dans la plupart des cas, les études se sont limitées à la géométrie coplanaire qui a été admise comme contenant l'ensemble des éléments physiques du processus (dans la géométrie coplanaire, le projectile et les électrons sortants sont détectés dans un plan commun appelé plan de diffusion).

et pour une onde entrante

$$\phi_c^Z(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} {}_1F_1\left(i\frac{Z(r)}{k}, 1, -i(kr + \vec{k}\cdot\vec{r})\right) e^{-\frac{\pi Z(r)}{2k}} \Gamma\left(1 - i\frac{Z(r)}{k}\right), \quad (4.5)$$

pour le potentiel $V(r_0, r_1)$, on prend le potentiel purement coulombien

$$V(r_0, r_1) = \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0}$$

tandis que le terme décrivant l'interaction mutuelle électron-électron (*PCI*) est décrite par la fonction :

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) = e^{-\frac{\pi}{4k_{se}}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{se}}\right) {}_1F_1\left(-i\alpha_{01}, 1, -i(k_{se}r_{01} + \vec{k}_{se}\cdot\vec{r}_{01})\right), \quad (4.6)$$

avec $\vec{k}_{se} = \frac{1}{2}(\vec{k}_s - \vec{k}_e)$ et $\alpha_{01} = -\frac{1}{2k_{se}}$.

ψ_{nlm} est la fonction d'onde liée de la cible atomique, développée dans la méthode de Roothaan-Hartree-Fock comme une combinaison linéaire de fonctions d'onde de type Slater [39].

La charge variable est calculée analytiquement à l'aide de la méthode potentiel sphérique moyen de la cible vue par l'électron, voir [chapitre 3](#). Dans notre modélisation, les électrons éjectés et diffusés voient une charge $Z = Z_N$ au centre de la cible et $Z = 1$ asymptotiquement, tandis que l'électron incident voit une charge $Z = Z_N$ au centre et $Z = 0$ asymptotiquement. Ces charges variables sont appelées $Z_i(r)$, $Z_s(r)$ et $Z_e(r)$ pour l'électron incident, diffusé, et l'électron éjecté, respectivement. Dans la [figure 4.1](#), nous présentons les charges variables pour l'ionisation de l'Ar 3p, les trois panneaux affichent $Z(r)$ correspondant aux électrons du continuum. On voit clairement que $Z_s(r)$ et $Z_e(r)$ diminuent à partir de $Z = 18$ à $Z = 1$ tandis que $Z_i(r)$ diminue de $Z = 18$ à $Z = 0$; les valeurs asymptotiques de $Z(r)$ sont atteintes rapidement à une distance environ $r = 3(u.a.)$. Il convient de noter que la validité de l'utilisation de la modélisation de la charge variable dans notre traitement a été discutée et justifiée dans [31] en effectuant une analyse comparative d'une vraie onde distordue et une onde coulombienne avec charge variable.

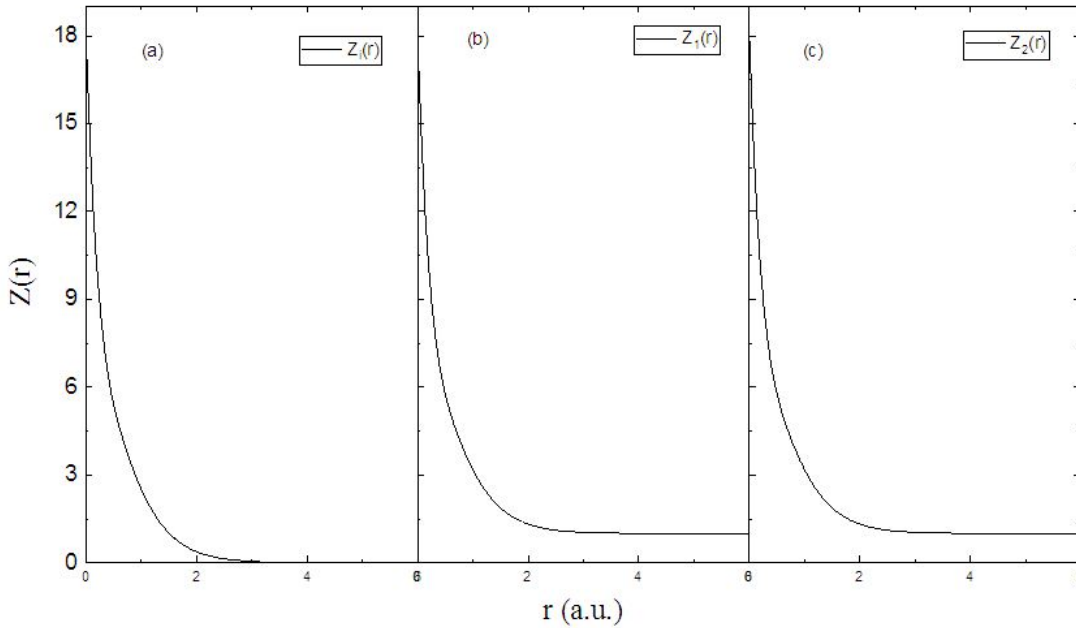


FIGURE 4.1: Charge variable $Z(r)$ vue par l'électron incident (a), l'électron diffusé (b) et l'électron éjecté (c) pendant l'ionisation d'Ar 3p.

Pour vérifier la validité de notre analyse actuelle, nous effectuons une comparaison entre le potentiel statique utilisé ici pour déduire la charge variable et le potentiel de distorsion complet du modèle (*DWBA*). Le potentiel de distorsion complet s'écrit comme suit [11] [12] :

$$U(r) = V_{stat}(r) + V_{exc}(r) + V_p(r), \quad (4.7)$$

La charge variable $Z(r)$ a été calculée en ne tenant compte que des V_{stat} dans l'équation (4.7), qui s'écrit en fait $V_{stat} = -\frac{Z(r)}{r}$. La distribution radiale du potentiel V_{stat} ainsi que le potentiel de distorsion complet $U(r)$ sont illustrés à la *figure 4.2*. On voit que les deux potentiels présentent à peu près la même forme et pourrait être considéré comme semblable. Les différences les plus notables sont observées dans la région à court terme, tandis que les deux potentiels sont pratiquement les mêmes ailleurs, par conséquent, l'approche utilisée dans ce travail pour calculer la charge variable semble assez raisonnable.

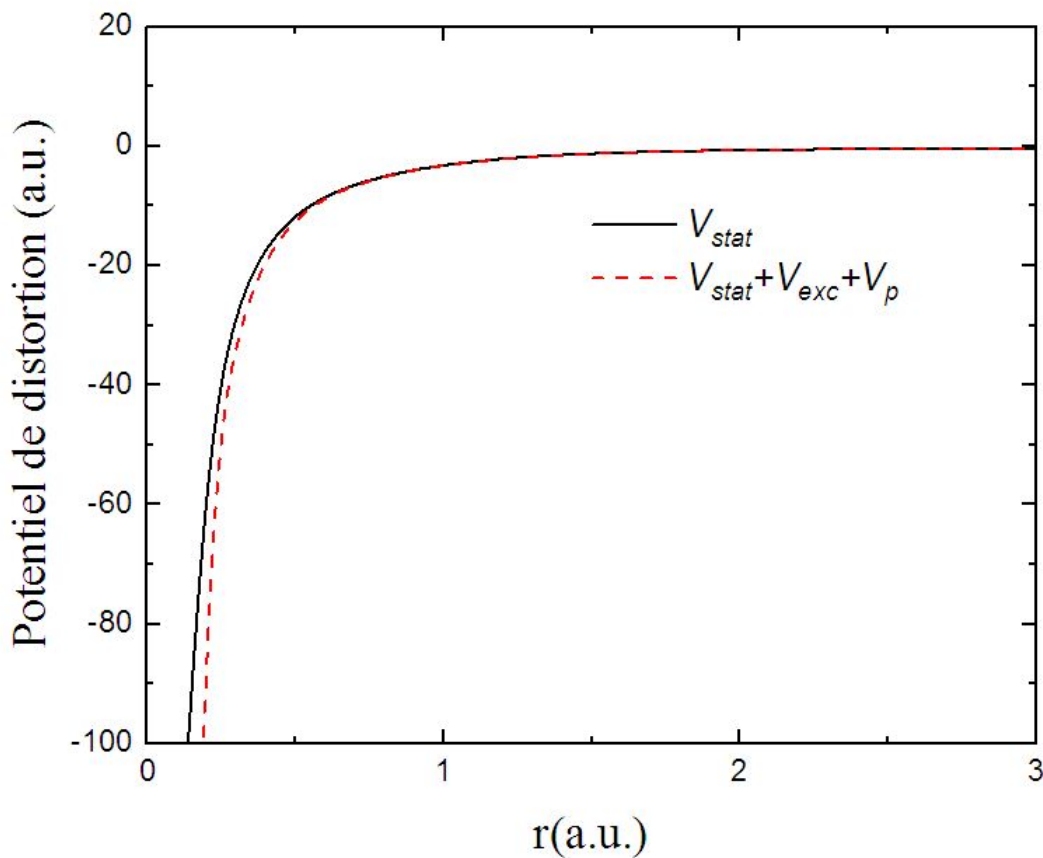


FIGURE 4.2: Potentiel de distorsion $U(r)$ senti par l'électron éjecté.

L'objet de ce travail concerne l'utilisation de cette modélisation de charge variable, qui représente en quelque sorte un modèle d'une onde distordue approximatif complet qui s'appelle (3CWZ) (une sorte de modèle (3DW)), et de vérifier comment cela affectera la (*SETD*) dans la réaction ($e, 2e$) de argon 3p en considérant plusieurs cinématiques. Les résultats obtenus dans le cadre de ce modèle sont comparés à l'expérience et à d'autres théories.

4.3 Résultats et discussion

Nous avons calculé la (*SETD*) pour l'ionisation de l'argon 3p à l'aide du modèle (3CWZ). Les résultats obtenus sont maintenant présentés et discutés en considérant plusieurs cinématiques dans des géométries asymétriques. La *figure 4.3* montre les (*SETD*) calculées dans une géométrie asymétrique coplanaire à une énergie incidente d'environ 721 eV et à une énergie éjectée de 205 eV. Trois séries de données expérimentales réalisées pour trois angles diffusés $\theta_s = 3^\circ$, 6° et 9° . Nos résultats sont comparés aux données expérimentales [19] ainsi qu'aux modèles théoriques (*DWB2 - RM*) et (*DWBA - G*). Comme les expériences sont données sur une échelle relative, nous normalisons les données ainsi que les calculs théoriques à l'échelle du modèle (3CWZ).

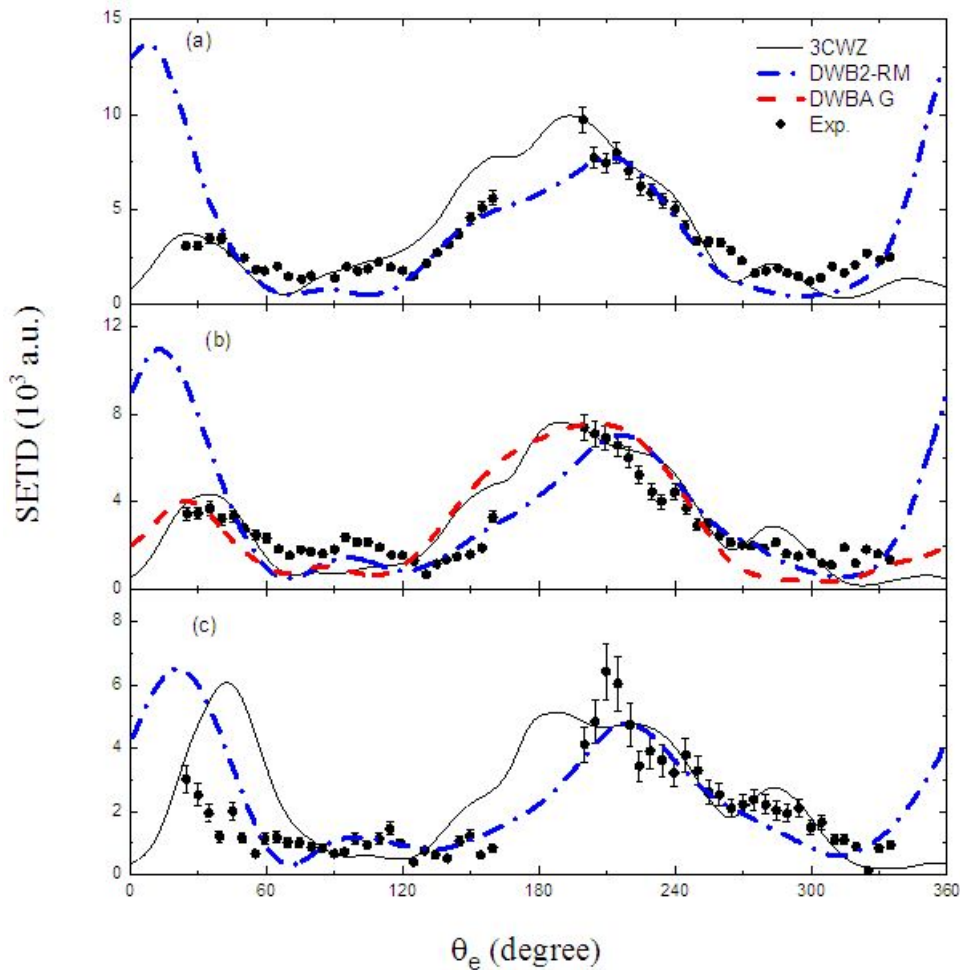


FIGURE 4.3: (*SETD*) pour l'ionisation de Ar 3p en fonction de l'angle d'éjection θ_e à énergie de diffusion et éjection fixés $E_s = 500$ eV et $E_e = 205$ eV. Le projectile est diffusé à un angle de diffusion fixé (a) $\theta_s = 3^\circ$, (b) $\theta_s = 6^\circ$ et (c) $\theta_s = 9^\circ$. Les résultats théoriques sont (3CWZ) (ligne continue noire), (*DWBA - G*) (ligne discontinue rouge), (*DWB2 - RM*) (ligne pointillée bleue). Les données expérimentales sont les cercles noirs tirés de [19]. Les données ont été normalisées pour le meilleur accord visuel avec la théorie. L'échelle absolue indiquée est celle des calculs du modèle (3CWZ). Les résultats de (*DWB2 - RM*) ont été multipliés par 0,34 (a), 0,33 (b) et 0,25 (c). Les résultats (*DWBA - G*) ont été multipliés par 1,34 (b).

Ces cinématiques sont caractérisées par un moment de transfert important ($K = 1,27, 1,4$ et $1,6$ (u.a.)) et un grand moment de recul absorbée par l'atome (q jusqu'à $5,48$ (u.a.)), ce qui indique que l'ion de recul participe fortement à la réaction, ce qui nécessite une modélisation adéquate du processus d'ionisation. De plus, dans cette situation particulière, le (PCI) influe fortement sur la ($SETD$), car les énergies sont assez proches les unes des autres. Il convient de noter que le modèle (BBK) s'est déjà révélé incapable de décrire la région de recul de la ($SETD$) [31], des modèles plus complets sont donc nécessaires à l'étude de la dynamique réactionnelle pour ces cinématiques particulières.

En analysant la [figure 4.3](#) en détail, on voit que dans l'ensemble, le modèle ($DWB2 - RM$) décrit bien de bonnes parties de la ($SETD$) mais présente dans tous les cas un pic binaire nettement plus grand que celui de la région de recul, on peut surtout observer que le modèle ($3CWZ$) est capable de reproduire assez bien la ($SETD$) dans la plupart des parties de la distribution angulaire de la ($SETD$), en particulier, les pics dans les régions binaires et de recul sont beaucoup mieux décrits que ceux de ($DWB2 - RM$). D'autre part, on voit que ($DWBA - G$) [20] (pour lequel seuls les résultats pour $\theta_s = 6^\circ$ sont disponibles) fournit des résultats assez proches d'expériences comme celles du ($3CWZ$) [panneau (b)].

Remarque 4.1. *Nous rappelons que ($DWB2 - RM$) est un modèle puissant qui est en principe capable de décrire généralement bien la réaction ($e,2e$). Néanmoins, ce modèle ne tient pas compte de l'interaction (PCI), importante ici, c'est ce qui explique malheureusement les insuffisances de ce modèle observées dans la [figure 4.3](#).*

Pour donner une interprétation de ces résultats, le modèle ($DWBA - G$) est un modèle d'onde entièrement distordue où le (PCI) est inclus via le facteur de Gamow. L'échec du modèle ($DWB2 - RM$) à prédire certaines régions de la ($SETD$) souligne l'importance de l'effet (PCI), qui n'est pas pris en compte dans ce modèle pour ces cinématiques particulières. De plus, le modèle ($3CWZ$) est une sorte d'approche approximative de l'onde entièrement distordue avec le (PCI).

Remarque 4.2. *Le modèle ($DWBA - G$) n'est en fait pas pratique pour la comparaison avec les mesures absolues, car le facteur de Gamow est connu pour violer fortement la normalisation, mais peut être efficace pour la comparaison avec des données relatives comme celles considérées ici.*

Dans ce qui suit, nous étudions le cas d'énergie d'impact plus faible et d'un moment de transfert aussi plus faible où les calculs théoriques sont maintenant comparés aux données absolues [22]. La [figure 4.4](#) montre une comparaison entre les résultats du modèle ($3CWZ$) et les données absolues à des énergies d'impact de 200 et $113,5$ eV, respectivement, les prédictions théoriques des modèles ($3DW$), ($DWBA$) et ($DWB2 - RM$) sont également présentées. En regardant la [figure 4.4](#), on constate que, malheureusement, aucun des modèles théoriques n'est capable de reproduire correctement l'amplitude de la ($SETD$). Dans l'ensemble, le modèle ($3CWZ$) reproduit le double pic dans la région binaire qualitativement bien, le deuxième pic binaire est cependant plus grand que le premier dans toutes les cinématiques.

À une énergie d'impact de 200 eV [panneau (a) et (b)], nous pouvons déjà voir que les données absolues sont sous-estimées par toutes les théories. On observe cependant que ($3CWZ$) reproduit assez bien le double pic binaire, nous notons également que les résultats de ($3CWZ$) sont assez proches de ceux de ($DWB2 - RM$) dans la région binaire alors que le modèle ($3DW$), qui représente en principe une modélisation assez sophistiquée du processus, ne reproduit pas

le double pic binaire [panneau (a)] comme on pourrait s'y attendre. Le modèle (*DWBA*) présente à peu près le même comportement que (*3DW*) à $E_e = 10 \text{ eV}$ [panneau (a)], il reproduit néanmoins le double pic binaire à $E_e = 5 \text{ eV}$ [panel (b)]. Les mêmes tendances sont toujours observés à une énergie de projectile de $113,5 \text{ eV}$. En outre, il convient d'indiquer que les données sont sous-estimés par (*3CWZ*) et (*DWB2 - RM*), alors que (*3DW*) et (*DWBA*) prédisent des intensités beaucoup plus élevées [panneau (c)]. Aussi les résultats du modèle (*3CWZ*) sont plus proches de ceux de (*DWB2 - RM*) observés pour une énergie d'impact de 200 eV . Dans la zone de recul, aucun des modèles théoriques n'est capable de reproduire correctement les données.

Pour résumer la discussion de la [figure 4.4](#), nous pouvons affirmer que le modèle (*3CWZ*) ne décrit pas correctement les données absolues, mais reproduit qualitativement la forme de la (*SETD*) dans la région binaire. Nous notons néanmoins que (*3CWZ*) donne des résultats qui sont au moins au même niveau d'accord avec les expériences que d'autres modèles très développés. Dans l'ensemble, (*3CWZ*) ainsi que toutes les théories considérées dans ce travail, fournissent des résultats dont l'accord avec les expériences est quelque peu mitigé, aucune compétition entre les théories n'est visible pour ces cinématiques. Des études plus approfondies nous permettraient probablement d'acquérir davantage d'informations sur la réaction d'ionisation.

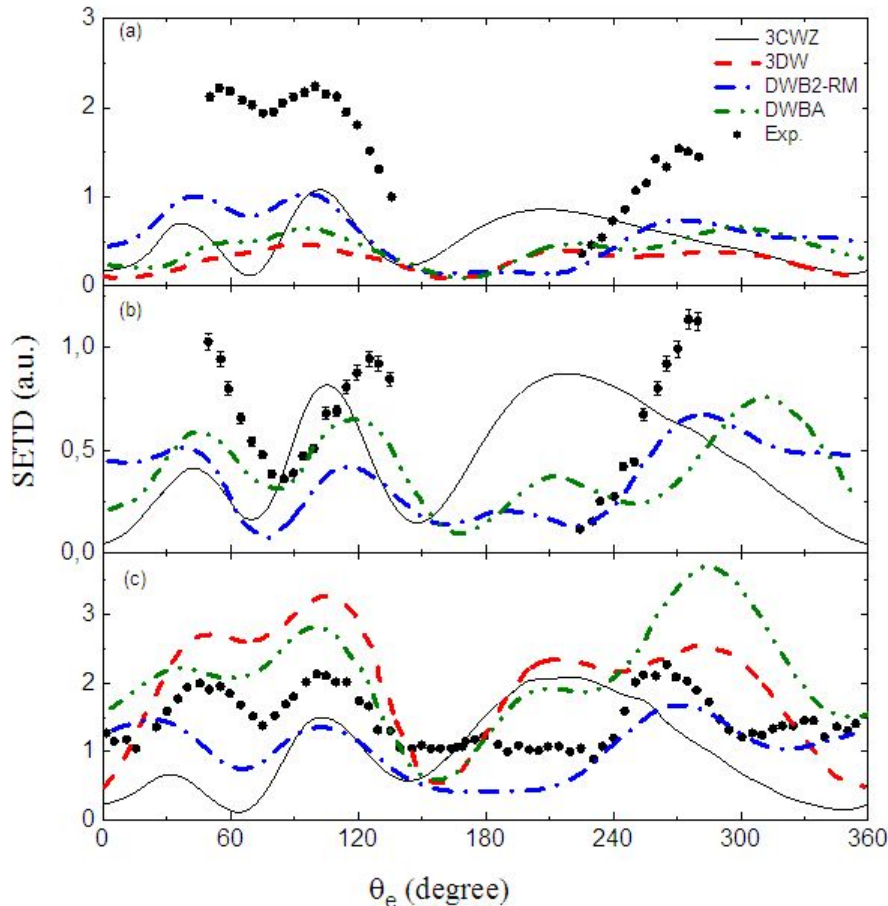


FIGURE 4.4: (*SETD*) absolue pour l'ionisation de Ar 3p en fonction de l'angle d'éjection θ_e à un angle de diffusion fixé $\theta_s = 15^\circ$. Les énergies d'incidence et d'éjection sont respectivement (a) $E_i = 200 \text{ eV}$ et $E_e = 10 \text{ eV}$, (b) $E_i = 200 \text{ eV}$ et $E_e = 5 \text{ eV}$ et (c) $E_i = 113,5 \text{ eV}$ et $E_e = 5 \text{ eV}$. Les résultats théoriques sont (*3CWZ*) (ligne continue noire), (*3DW*) (ligne discontinue rouge), (*DWB2 - RM*) (ligne pointillée bleue), et (*DWBA*) (ligne pointillée-pointillée-verte). Les données expérimentales sont les cercles noirs tirés de [22].

Afin de mieux comprendre la dynamique de la réaction ($e, 2e$), nous nous intéressons à l'étude de la réaction d'ionisation à une énergie d'impact de 195 eV. La nouveauté est que les ($SETD$) mesurés dans cette nouvelle génération d'expériences couvrent une grande partie de l'angle solide complet des électrons éjectés. En conséquence, de nouvelles cinématiques sont données au-delà de la géométrie coplanaire, ce qui permet de fournir des informations complètes sur la dynamique d'ionisation. Une image tridimensionnelle de la ($SETD$) est donc donnée en fonction de l'angle solide d'émission (θ_e, φ_e) pour une valeur particulière de l'angle de diffusion θ_s . Pour des comparaisons plus riches, des coupes de la ($SETD$) dans trois plans orthogonaux sont données. Ces coupes correspondent au plan XZ (plan de diffusion), au plan YZ (plan semi-perpendiculaire) et au plan XY (plan perpendiculaire).

Remarque 4.3. *Il est intéressant de noter que la géométrie coplanaire a été utilisée pendant longtemps dans les études ($e, 2e$) car elle était supposée contenir la plupart des informations sur la réaction ($e, 2e$), tandis que les expériences des géométries hors plan restait très rares.*

Notre étude porte sur l'ionisation par impact électronique de Ar 3p à des énergies d'impact de 195 eV pour des angles de diffusion fixes allant de $\theta_s = 5^\circ$ à $\theta_s = 20^\circ$. Les résultats sont présentés sur les figures 4.5 à 4.7 pour trois énergies d'éjection de 10 eV, 15 et 20 eV, respectivement. L'intérêt de la présente étude réside dans le fait que les expériences sont données sur une échelle absolue [24] qui fournit alors une situation idéale pour la comparaison avec la théorie.

La figure 4.5 montre les coupes absolues de la ($SETD$) dans les trois plans perpendiculaires pour une énergie d'éjection $E_e = 10$ eV (la convention adoptée ici est telle que $\varphi_e = 0$ correspond à l'axe des x). Les coupes transversales dans les plans xz , yz et xy sont présentées sous la forme d'une fonction de l'angle d'éjection pour un ensemble d'angles de diffusion $\theta_s = 5^\circ, 10^\circ, 15^\circ$ et 20° . Les résultats du (3CWZ) sont ensuite comparés aux expériences ainsi qu'aux prédictions de ($DWB2 - RM$).

Dans le plan de diffusion (colonne de gauche), on voit que, dans l'ensemble, le modèle (3CWZ) prédit assez bien les données, le modèle reproduit très bien le pic binaire de la ($SETD$) pour $\theta_s = 5^\circ$, mais l'accord devient moins bon avec l'augmentation des angles de diffusion. Lorsque nous comparons avec les résultats de ($DWB2 - RM$), on constate que le modèle (3CWZ) tend à mieux décrire le processus ($e, 2e$) que ($DWB2 - RM$), en particulier pour des angles de diffusion plus élevés $\theta_s = 15^\circ$ et 20° . De plus, la structure à double pic pour des angles de diffusion plus élevés est mieux reproduite par le modèle (3CWZ). Il convient de noter que le pic de recul est décalé vers les angles inférieurs pour le modèle (3CWZ).

Remarque 4.4. *On note également que le pic binaire observé pour $\theta_s = 5^\circ$ se divise en deux avec des angles de diffusion croissants, Il est bien connu que cette structure à double pic est attribuée au caractère p de l'enveloppe externe de l'Argon.*

Lorsque l'on considère le plan yz (colonne centrale) on peut déjà voir que les données sont symétriques d'environ 180° , le modèle ($DWB2 - RM$) reproduit beaucoup mieux l'ensemble de la forme de la ($SETD$) tandis que (3CWZ) présente un fort pic de recul dans tous les cas. La région binaire n'est pas correctement reproduite par (3CWZ) sauf pour $\theta_s = 5^\circ$ où un pic binaire proche des expériences est visible. Dans l'ensemble, le modèle ($DWB2 - RM$) décrit mieux la forme des pics dans les régions binaires et de recul, mais des écarts importants d'amplitude avec les données sont malheureusement observés.

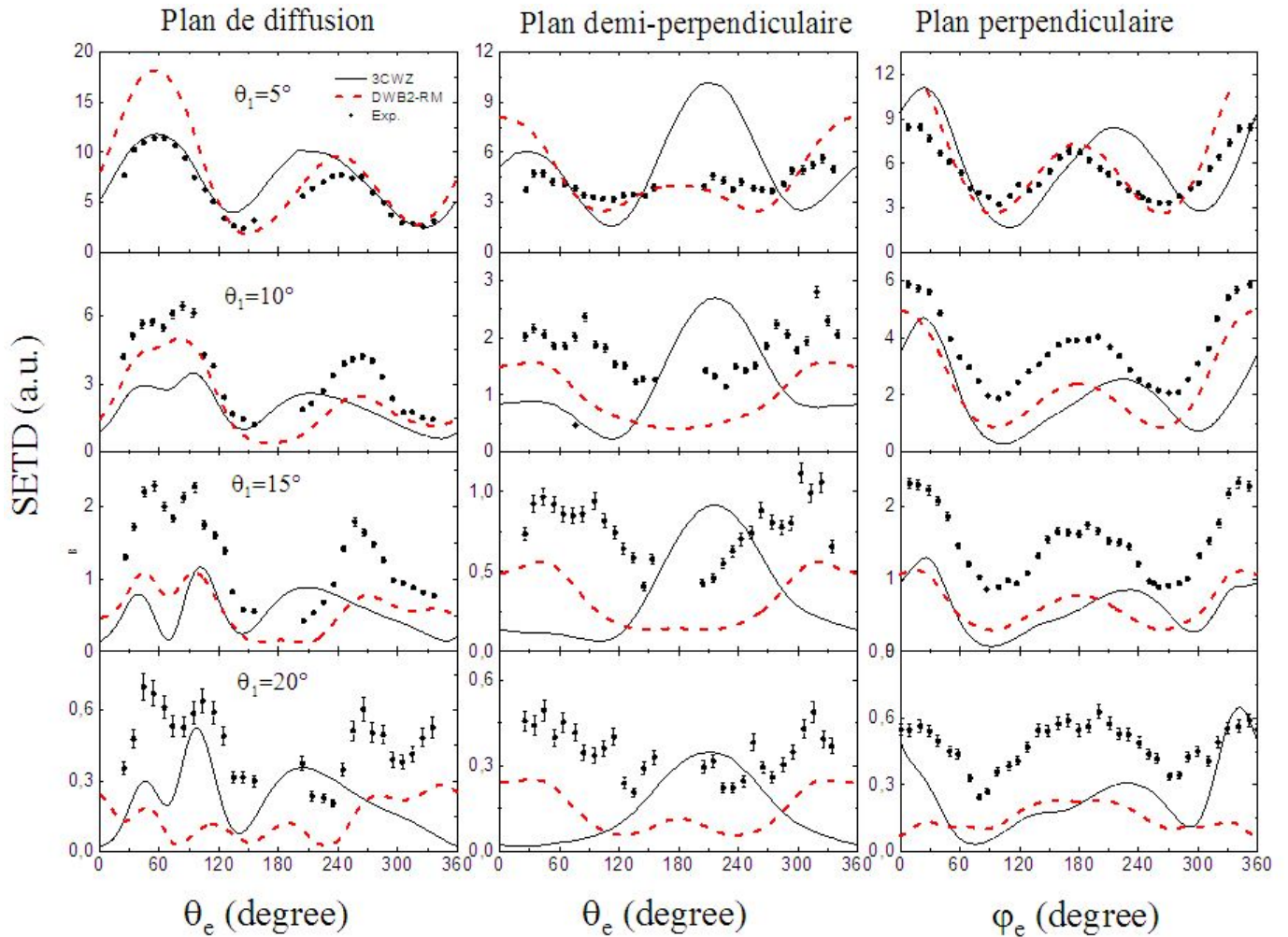


FIGURE 4.5: ($SETD$) absolue (présenté sous forme de coupes de l'image 3D) pour l'ionisation de l'Ar 3p par une énergie d'impact $E_i = 195$ eV en fonction de l'angle solide d'éjection (θ_e, φ_e). Le projectile est diffusé aux angles $\theta_s = (5^\circ, 10^\circ, 15^\circ, 20^\circ)$ en coïncidence avec l'électron éjecté avec une énergie $E_e = 10$ eV. Colonne de gauche : ($SETD$) dans le plan de diffusion (xz). Colonne centrale : ($SETD$) dans le plan demi-perpendiculaire (yz). Colonne de droite : ($SETD$) dans le plan perpendiculaire (xy). Les résultats théoriques sont (3CWZ) (ligne continue noire), (DWB2-RM) (ligne discontinue rouge). Les données expérimentales sont les cercles noirs tirés de [24].

Dans le plan xy (colonne de droite), on voit globalement que l'accord avec les expériences est quelque peu mitigé lorsque l'on regarde en détail les ($SETD$) fournies par les modèles (3CWZ) et (DWB2-RM). Le modèle (DWB2-RM) semble mieux reproduire la ($SETD$) pour ces cinématiques ($E_e = 10$ eV). La concordance avec les données est assez bonne à des faibles angles de diffusion (5° et 10°). Cependant, cette concordance n'est plus observée avec des angles de diffusion croissants où les données sont largement sous-estimées (d'un facteur allant jusqu'à 2), l'accord est encore mieux reproduit par (3CWZ) à un angle de diffusion de 20° .

Les figures 4.6 et 4.7 montrent les ($SETD$) absolues avec les mêmes ensemble d'angles de diffusion, mais pour les énergies d'éjection ($E_e = 15$ et 20 eV), respectivement. Nos résultats théoriques sont à nouveau comparés aux expériences ainsi qu'à ceux du modèle (DWB2-RM). Les tendances générales observées sont assez similaires à celles de la figure 4.5.

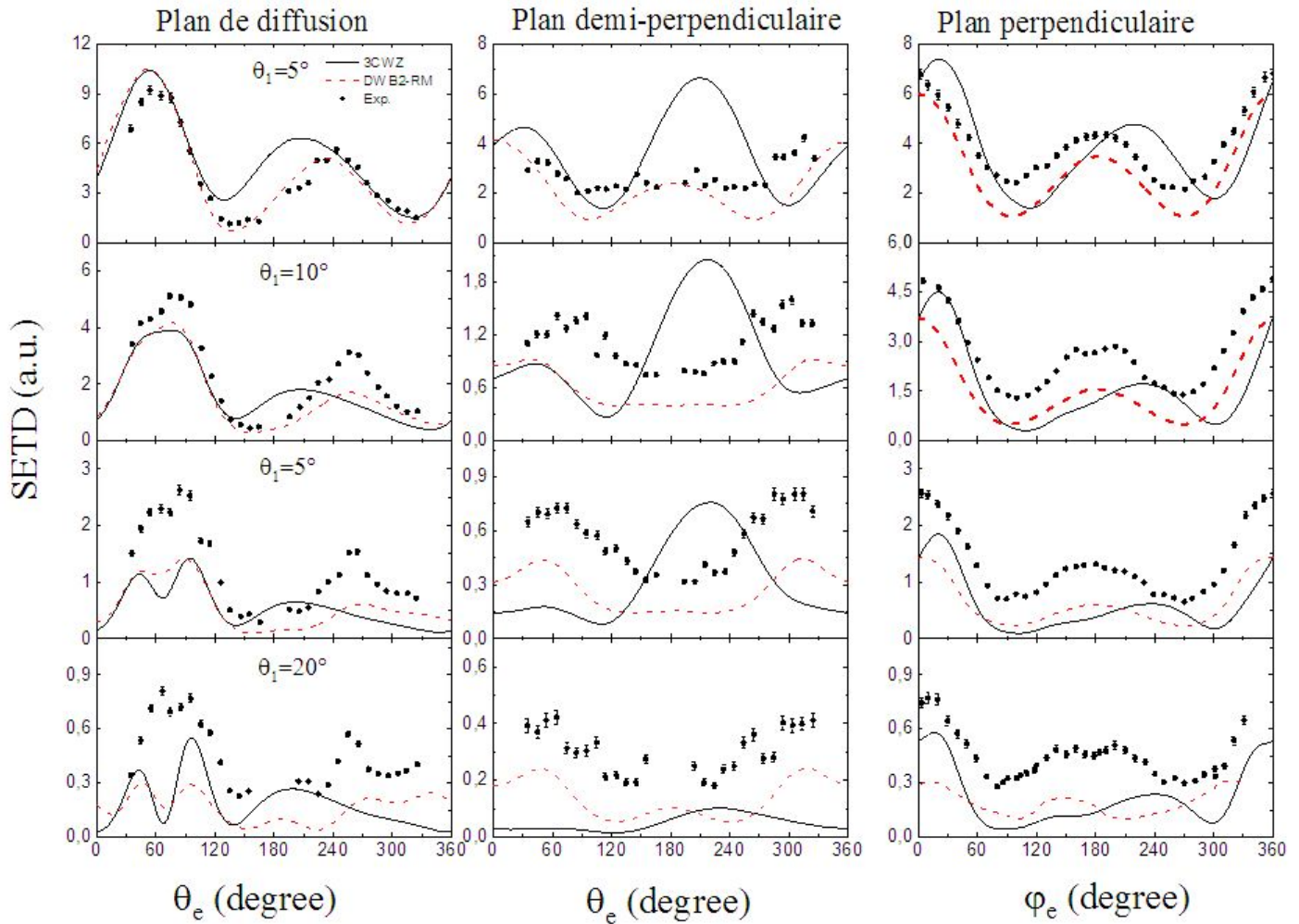


FIGURE 4.6: Identique à la Fig. 4.5 mais pour une énergie d'éjection $E_e = 15 \text{ eV}$.

Comme on peut le voir, la (*SETD*) est qualitativement bien reproduite par les deux modèles dans le plan XZ où la structure à double pic est toujours reproduite pour des angles plus élevés, en accord avec les expériences. Le modèle (3CWZ) fournit toujours une meilleure description de la (*SETD*) absolue, en particulier à $\theta_s = 20^\circ$. Dans le plan semi-perpendiculaire (plan yz), (*DWB2 - RM*) reproduit mieux la forme de la (*SETD*) où les pics binaires et de recul sont encore qualitativement reproduits, l'amplitude la (*SETD*) est néanmoins largement sous-estimée pour tous les angles de diffusion.

Les résultats du (3CWZ) sont également moins bons que ceux de (*DWB2 - RM*), le pic binaire est un peu plus visible pour ces deux énergies (meilleur que pour $E_e = 10 \text{ eV}$) et un grand pic de recul est toujours reproduit. La situation est différente pour le plan xy : le modèle (3CWZ) décrit mieux la (*SETD*) en forme et en magnitude, et un pic à environ $\varphi_e = 20^\circ$ est observé pour tous les angles de diffusion. D'autre part, (*DWB2 - RM*) n'arrive pas à reproduire les données, en particulier à des angles de diffusion plus élevés $\theta_e = 15^\circ$ et 20° , où des écarts évidents sont observés.

Remarque 4.5. *Il est à noter que (*DWB2 - RM*) est a priori un traitement sophistiqué, les lacunes observées sont probablement dues au fait que le (*PCI*) n'est pas du tout pris en compte pour ce modèle. À l'inverse, (3CWZ) reproduit assez bien les données dans de nombreux cas, bien qu'il soit basé sur une modélisation assez simple. Cela montre bien l'importance de l'interaction (*PCI*) qui est comptabilisée ici et traitée de façon exacte. Notons tout de même que pour les*

géométries hautement asymétriques (où le terme (PCI) peut être négligé), (DWB2 – RM) est connu pour être très efficace.

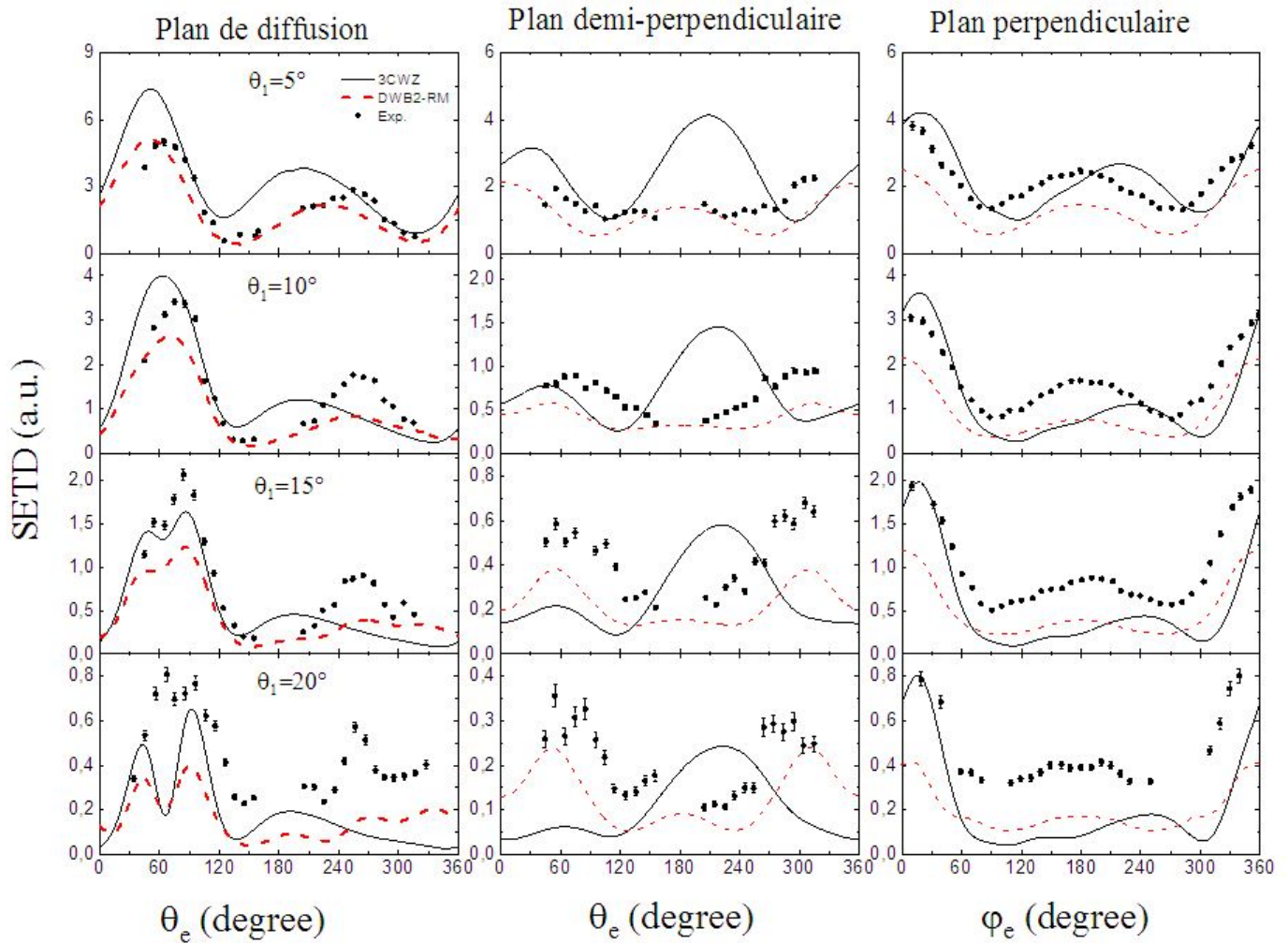


FIGURE 4.7: Identique à la Fig. 4.5 mais pour une énergie d'éjection $E_e = 20 \text{ eV}$.

En résumé, pour toutes les énergies d'éjection, notre modélisation reproduit assez bien la (*SETD*) dans le plan de diffusion (xz), un double pic binaire apparaît progressivement avec des angles de diffusion croissants, en meilleur accord avec les données expérimentales que (*DWB2 – RM*). Dans les géométries hors plan de diffusion, (*3CWZ*) s'avère moins efficace, en particulier dans le plan semi-perpendiculaire (plan yz) dans la région de recul, où l'on observe un pic fort assez éloigné des expériences pour tous les angles de diffusion. Dans le plan perpendiculaire complet (plan xy), les modèles (*3CWZ*) et (*DWB2 – RM*) sont capables de décrire la réaction dans des cinématique particulières. Alors que (*DWB2 – RM*) reproduit assez bien les données à une énergie d'éjection de 10 eV , en particulier à des faibles angles de diffusion, (*3CWZ*) décrit beaucoup mieux la (*SETD*) à des énergies d'éjection plus élevées (15 et 20 eV), où les données sont plus proches des résultats de (*3CWZ*) pour tous les angles de diffusion.

4.4 Conclusion

Dans ce travail, une étude théorique ($e, 2e$) de l'argon 3p a été rapportée en cinématique asymétrique. Un modèle (3CWZ), basé sur une description complète de l'onde coulombienne avec des charges variables, a été utilisé pour étudier l'ionisation ($e, 2e$) dans plusieurs cinématiques. Les résultats obtenus ont été comparés à des expériences et à d'autres prédictions théoriques.

Dans un premier temps, la géométrie asymétrique coplanaire a été considérée. À une énergie d'impact relativement élevée (près de 700 eV) et un moment de transfert important (jusqu'à 1,6 $u.a.$) où les énergies d'éjection et de diffusion sont assez proches, les résultats du (3CWZ) se sont avérés en bon accord avec les données relatives bien meilleurs que ceux de (DWB2 – RM). Contrairement au cas précédent (*figure 4.3*), l'accord avec les expériences absolues à 200 et 113,5 eV était beaucoup moins satisfaisant (*figure 4.4*), notant en tout cas que les résultats du modèle (3CWZ) étaient au même niveau de concordance avec les données expérimentales que d'autres modèles sophistiqués.

Dans un deuxième temps, nous avons envisagé un autre type d'expérience rapportée à une échelle absolue, où la (SETD) est présenté sous la forme d'une image tridimensionnelle en fonction de l'angle solide d'éjection. Des comparaisons avec des coupes de la (SETD) dans trois plans orthogonaux sont donc faites pour une série de cinématiques. Dans l'ensemble, les résultats du (3CWZ) sont en mauvais accord avec les données dans le plan semi-perpendiculaire yz . En revanche, dans les plans de diffusion xz et de perpendiculaire xy , les résultats basés sur le modèle (3CWZ) se révèlent en meilleur accord avec les expériences. Dans le plan xz , l'accord avec les données est tout à fait satisfaisant et en bien meilleur accord que le modèle (DWB2 – RM), plutôt puissant. Dans le plan xy , les deux modèles théoriques sont capables de bien reproduire les données dans certaines cinématiques.

Compte tenu des lacunes observées dans ce travail, la méthode devrait être appliquée à d'autres atomes et à d'autres cinématiques pour une interprétation plus exhaustive du processus d'ionisation. Cette modélisation représente une sorte d'approche d'onde distordue entièrement approchée avec le terme (PCI), dont l'avantage est justifié par un gain de temps de calcul significatif.

Cela permet ainsi son application à des cibles moléculaires qui représentent en fait un grand défi pour la théorie. En fait, les études théoriques de ($e, 2e$) pour les molécules restent relativement rares en raison de sa nature multicentrique ainsi que de l'orientation aléatoire de la molécule. L'avancement des modèles théoriques dépend également de la disponibilité d'expériences fiables à des fins de comparaison.

Conclusion générale

Les formalismes théoriques décrivant l'ionisation des particules chargées avec une cible atomique ou moléculaire sont essentiels dans divers domaines de la physique. Pour cette raison nous avons consacré ce travail à l'étude du processus $(e, 2e)$ à l'aide d'un modèle complet décrivant ce processus que nous venons de développer.

Nous avons en particulier présenté dans ce travail l'étude de l'ionisation $(e, 2e)$ de l'argon par impact électronique. Après avoir rappelé dans le chapitre 1 les notions de base concernant l'étude de l'ionisation $(e, 2e)$ de cibles atomiques, le calcul des sections efficaces associées et les différents mécanismes gouvernant cette dernière ont été présentés. Ensuite nous avons défini les conditions cinématiques et les différentes situations expérimentales dans lesquelles sont réalisées les expériences du processus $(e, 2e)$ où, nous avons notamment vu que la géométrie asymétrique coplanaire est généralement utilisée pour comprendre aussi bien la dynamique des collisions ionisantes que la structure interne de la cible.

Dans le deuxième chapitre nous avons brièvement exposé une description globale de la réaction $(e, 2e)$ en utilisant le modèle du coeur gelé, puis nous avons présenté les différents modèles pour la description des électrons du continuum, où nous avons remarqué que le choix de bonnes fonctions d'ondes décrivant les états liés de la cible et les états du continuum joue un rôle important dans la description du processus de collision.

Nous avons par la suite présenté dans le chapitre 3 une étude théorique des collisions par impact électroniques, où les électrons sortants sont représentés par une onde distordue approximative qui est une onde coulombienne avec une charge variable $Z(r)$ au lieu d'une charge effective constante Z . Cette approximation conduit à une économie de temps de calcul précieuse lorsqu'elle est appliquée dans des modèles complexes. Nous avons calculé l'amplitude de diffusion à l'aide des modèles $(BBK2CWZ1)$ et $(BBK2CWZ0)$ puis nous avons déduit la $(SETD)$ en géométrie asymétrique coplanaire. Tous les résultats ont été commentés et comparés avec les résultats expérimentaux, il s'est avéré que les modèles $(BBK2CWZ1)$ et $(BBK2CWZ0)$ où les effets de distorsion et les effets post-collisionnels sont inclus, présentent une meilleure description du processus $(e, 2e)$ et sont pratiquement équivalents dans toutes les cinématiques. Une amélioration globale de l'accord avec les mesures a été observée par rapport aux résultats du modèle standard (BBK) . Il existe par conséquent une différence claire lorsqu'on tient compte de la distorsion des électrons sortants, cette distorsion doit être prise en considération surtout dans le cas des basses énergies.

Nous avons enfin présenté dans le quatrième chapitre une étude théorique plus complète du processus d'ionisation par un impact électronique. Le travail théorique avait pour but d'élaborer un modèle capable de générer une bonne description de la simple ionisation de l'atome d'argon et également à toute cible atomique ou moléculaire. L'hypothèse était d'utiliser le modèle (BBK) (qui donne un accord parfait avec l'expérience pour des énergies intermédiaires) en

incluant les effets de distorsion. Nous avons en fait donné une autre description de l'état initial de l'électron incident en utilisant l'approche des ondes distordues, en d'autres termes, l'électron incident est décrit maintenant par une onde coulombienne avec charge variable au lieu d'une onde plane. Ce modèle, appelé (3CWZ), qui devrait constituer une approche plus élaborée de la réaction ($e, 2e$) que celle de (BBK2CWZ1), est appliquée à des énergies d'impact intermédiaires et faibles sachant que la validité de notre modélisation de la charge variable est bien établie. Le modèle (3CWZ), basé sur une description complète de l'onde coulombienne avec des charges variables, a été utilisé pour étudier l'ionisation ($e, 2e$) dans différentes cinématiques. Les résultats obtenus ont été comparés à l'expérience et à d'autres prédictions théoriques.

Dans un premier temps, lorsqu'on applique le modèle (3CWZ), les résultats se sont avérés en bon accord avec les données relatives bien meilleurs que ceux de (DWB2 - RM), notant en tout cas que les résultats du modèle (3CWZ) étaient au même niveau de concordance avec les données expérimentales que d'autres modèles sophistiqués.

Dans une deuxième étape, nous avons envisagé un autre type d'expérience rapportée à l'échelle absolue. Des comparaisons avec des coupes de la (SETD) dans trois plans orthogonaux sont donc faites pour une série de cinématiques. Dans l'ensemble, les résultats du (3CWZ) sont en mauvais accord avec les données dans le plan semi-perpendiculaire yz . Mais, dans les plans de diffusion xz et perpendiculaire xy , les résultats basés sur le modèle (3CWZ) semblent mieux s'accorder avec les expériences. Dans le plan xz , l'accord avec les données est tout à fait satisfaisant et en bien meilleur accord que le modèle très connu (DWB2 - RM). En bref, ce modèle arrive à reproduire l'essentiel de l'allure de la (SETD) dans la quasi totalité des régions énergétiques, et nous avons remarqué aussi que l'accord global des résultats de la (SETD) avec l'ensemble des expériences est raisonnable.

Compte tenu des lacunes observées dans ce travail, la méthode devrait être appliquée dans d'autres atomes et à d'autres cinématiques pour une interprétation plus exhaustive du processus d'ionisation. Il est donc raisonnable d'envisager une application à des cibles moléculaires qui représentent en fait un grand défi pour la théorie.

Annexe A

Orbitales atomiques

Les fonctions d'onde, qu'on appelle orbitales atomiques¹, sont définies par 3 nombres quantiques. Pour les atomes à plusieurs électrons les fonctions d'ondes sont données sous la forme d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques (*CLOA*). Ces orbitales atomiques sont données sous la formes de fonctions Slater, Hydrogénoïdes ou même Gaussienne :

- le nombre quantique principal n , déjà rencontré dans l'expression de l'énergie, et qui peut prendre toute valeur entière strictement positive,
- le nombre quantique de moment angulaire l , qui peut prendre n valeurs entières de 0 à $(n - 1)$,
- le nombre quantique magnétique m , qui peut avoir $(2l + 1)$ valeurs de $-l$ à $+l$ (y compris zéro).

Ci dessous, on peut lire l'algorithme simple pour tracer les orbitales atomiques en utilisant *Matlab* (on prend l'exemple de la fonction $3d_0$).

```
h=pi/100;
th=0 :h :pi;
ph=0 :h :2*pi;
n=length(th);
m=length(ph);
X=[]; Y=[]; Z=[];
for i=1 :n
    cord=[];
    for j=1 :m
        r=abs(3*cos(th(i))*cos(th(i))-1);
        cord=[cord; r*sin(th(i))*cos(ph(j)),r*sin(th(i))*sin(ph(j)),r*cos(th(i))];
    end
    X=[X , cord( :,1)]; Y=[Y , cord( :,2)]; Z=[Z , cord( :,3)];
end
figure
colormap hsv
surf(X,Y,Z,'FaceColor','interp','EdgeColor','none','FaceLighting','gouraud')
camlight left
```

1. On appelle orbitale une fonction des coordonnées de position d'un seul électron, une orbitale décrit donc les propriétés d'un électron dans un environnement donné. On parlera ainsi d'une orbitale atomique ou d'orbitale moléculaire selon que l'électron se trouve dans un atome ou une molécule.

```

colormap([0.7 0.7 0.7])
axis equal
set(gca,'XTick',[],'YTick',[],'ZTick',[])

```

TABLE A.1: Description quantique de l'atome d'hydrogène : orbitales atomiques

$n = 1$	$l = 0$	$m = 0$	$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\frac{r}{a_0}}$
$n = 2$	$l = 0$	$m = 0$	$\psi_{2s} = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$
$n = 2$	$l = 1$	$m = 0$	$\psi_{2p_z} = \psi_{2p_0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta$
$n = 2$	$l = 1$	$m = 1$	$\psi_{2p_x} = \psi_{2p_1} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta \cos \varphi$
$n = 2$	$l = 1$	$m = -1$	$\psi_{2p_y} = \psi_{2p_{-1}} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta \sin \varphi$
$n = 3$	$l = 0$	$m = 0$	$\psi_{3s} = \frac{1}{9\sqrt{3\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(3 - 2\frac{r}{a_0} + \frac{2}{9}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$
$n = 3$	$l = 1$	$m = 0$	$\psi_{3p_z} = \psi_{3p_0} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos \theta$
$n = 3$	$l = 1$	$m = 1$	$\psi_{3p_x} = \psi_{3p_1} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \cos \varphi$
$n = 3$	$l = 1$	$m = -1$	$\psi_{3p_y} = \psi_{3p_{-1}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \sin \varphi$
$n = 3$	$l = 2$	$m = 0$	$\psi_{3d_0} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} (3 \cos^2 \theta - 1)$
$n = 3$	$l = 2$	$m = 1$	$\psi_{3d_1} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta \cos \varphi$
$n = 3$	$l = 2$	$m = -1$	$\psi_{3d_{-1}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta \sin \varphi$
$n = 3$	$l = 2$	$m = 2$	$\psi_{3d_2} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin^2 \theta \cos 2\varphi$
$n = 3$	$l = 2$	$m = -2$	$\psi_{3d_{-2}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin^2 \theta \sin 2\varphi$

où a_0 est le rayon de Bohr $a_0 = 0.529\text{Å}$

Annexe B

Amplitude de diffusion dans le modèle (BBK)

Le problème consiste à calculer de façon analytique l'élément de matrice suivant :

$$T_{if} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle$$

Avec

$$\begin{aligned} \psi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0, \vec{r}_1) &= \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \phi_{nlm}(\vec{r}_1) \\ \psi_f^*(\vec{k}_s, \vec{k}_e, \vec{r}_0, \vec{r}_1) &= \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Où encore

$$\begin{aligned} \psi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0, \vec{r}_1) &= (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \phi_{nlm}(\vec{r}_1) \\ \psi_f^*(\vec{k}_s, \vec{k}_e, \vec{r}_0, \vec{r}_1) &= (2\pi)^{-3/2} e^{-i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} e^{-\frac{\pi\alpha_0}{2}} \Gamma(1+i\alpha_0) {}_1F_1\left(i\alpha_0, 1, i(k_s r_0 + \vec{k}_s \cdot \vec{r}_0)\right) \\ &\times {}_1(2\pi)^{-3/2} e^{-i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1} e^{-\frac{\pi\alpha_1}{2}} \Gamma(1+i\alpha_1) {}_1F_1\left(i\alpha_1, 1, i(k_e r_1 + \vec{k}_e \cdot \vec{r}_1)\right) \\ &\times C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Vest le potentiel coulombien entre l'électron incident et l'électron actif qui sera éjecté après la collision.

$$V(r_0, r_1) = \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0}$$

Dans ce modèle, l'interaction entre l'électron éjecté et l'ion résiduel et celle entre l'électron diffusé et l'ion résiduel est décrite à chaque fois par une fonction d'onde coulombienne, où $\alpha_0 = \frac{Z_0}{k_s}$ et $\alpha_1 = \frac{Z_1}{k_e}$. Le troisième terme décrit l'interaction (PCI) entre les deux électrons sortants :

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) = e^{-\frac{\pi}{4k_{se}}} \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{se}}\right) {}_1F_1\left(-i\alpha_{01}, 1, -i(k_{se} r_{01} + \vec{k}_{se} \cdot \vec{r}_{01})\right) \quad (\text{B.3})$$

Avec $\vec{k}_{se} = \frac{1}{2}(\vec{k}_s - \vec{k}_e)$ et $\alpha_{01} = \frac{Z_{01}}{k_{01}}$ où $Z_{01} = -\frac{1}{2}$. Le calcul de l'élément de matrice T_{if} nécessite une intégrale à six dimensions ayant la forme générale :

$$T_{if} = \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01}) \left(\frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0}\right) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \quad (\text{B.4})$$

A ce stade de la procédure il s'agit de séparer l'amplitude de diffusion T_{if} en deux intégrales $T_{if} = I + I'$

Où

$$I = \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) d\vec{r}_0 \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \frac{\phi(\vec{r}_{01})}{r_{01}} \quad (\text{B.5})$$

$$I' = \int \frac{1}{r_0} \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) d\vec{r}_0 \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \phi(\vec{r}_{01}) \quad (\text{B.6})$$

Avec $\phi(\vec{r}_{01}) = C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{se}, \vec{r}_{01})$

Pour se débarrasser des termes en r_{01} , nous appliquons la méthode de Kornberg et Miraglia où les transformées de Fourier sont utilisées.

$$\phi(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \bar{\phi}(\vec{p}) d\vec{p} \quad (\text{B.7})$$

$$\bar{\phi}(\vec{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}) d\vec{r}$$

D'où l'on tire

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi^3} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'} \phi(\vec{r}') d\vec{r}' d\vec{p} \quad (\text{B.8})$$

Nous utilisons la définition de la transformée de Fourier sur la fonction ϕ , et nous calculons par exemple l'intégrale I :

$$I = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \int (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_{01}} \frac{\phi(\vec{r}'_{01})}{r'_{01}} \times e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} d\vec{r}'_{01} d\vec{p} \quad (\text{B.9})$$

Rappelons que $\vec{r}_{01} = \vec{r}_0 - \vec{r}_1$

Alors on obtient,

$$I = \frac{1}{2\pi^3} \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) e^{i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \int (2\pi)^{-3/2} \frac{\phi(\vec{r}'_{01})}{r'_{01}} \times e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} d\vec{r}'_{01} d\vec{p} \quad (\text{B.10})$$

En introduisant deux paramètres qui doivent tendre vers 0 sans atteindre cette valeur, l'équation (B.10) sera :

$$I \simeq \frac{1}{2\pi^3} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int \left[\int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) e^{i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0} e^{-\gamma r_0} d\vec{r}_0 \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \times \int (2\pi)^{-3/2} \frac{\phi(\vec{r}'_{01})}{r'_{01}} e^{i(\vec{k}_{01} - \vec{p})\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-i\vec{k}_{01}\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-\lambda r'_{01}} d\vec{r}'_{01} \right] d\vec{p} \quad (\text{B.11})$$

l'intégrale donné par l'équation (B.5) est finalement réduit à

$$I = \frac{1}{2\pi^3} \int I_0(\vec{p}) I_1(\vec{p}) I_{01}(\vec{p}) d\vec{p} \quad (\text{B.12})$$

Où I_0 , I_1 et I_{01} sont donnés par :

$$I_1 = \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \quad (\text{B.13})$$

$$I_0 = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) e^{i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0} e^{-\gamma r_0} d\vec{r}_0$$

$$I_{01} = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int (2\pi)^{-3/2} \frac{\phi(\vec{r}'_{01})}{r'_{01}} e^{i(\vec{k}_{01} - \vec{p})\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-i\vec{k}_{01}\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-\lambda r'_{01}} d\vec{r}'_{01}$$

Remarque B.1. *Nous avons trouvé que pour $\gamma = \lambda = 0,005$ nous obtenons un bon accord en comparant avec quelques résultats analytiques connus.*

Chacune des trois intégrales (sur $d\vec{r}_0, d\vec{r}_1$ et $d\vec{r}'_{01}$) se calcule analytiquement à l'aide des sous-routines habituelles développées pour le calcul des transformées de Fourier Coulomb en utilisant *Fortran*. Il reste donc une intégrale triple numérique sur $d\vec{p} = p^2 dp \sin\theta_p d\theta_p d\varphi_p$, permettant une économie considérable de temps de calcul.

L'amplitude de diffusion donnée par l'équation (B.4) s'écrit finalement

$$\begin{aligned}
T_{if} &= \frac{1}{2\pi^3} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int_{\gamma \rightarrow 0} \left[\int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_1} \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) e^{i(\vec{k}_i + \vec{p}) \cdot \vec{r}_0} e^{-\gamma r_0} d\vec{r}_0 \right. \\
&\times \int (2\pi)^{-3/2} \frac{\phi(\vec{r}'_{01})}{r'_{01}} e^{i(\vec{k}_{01} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'_{01}} e^{-i\vec{k}_{01} \cdot \vec{r}'_{01}} e^{-\lambda r'_{01}} d\vec{r}'_{01} - \int \phi_c^*(\vec{k}_e, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_1} \phi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \\
&\times \left. \int \frac{\phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0)}{r_0} e^{i(\vec{k}_i + \vec{p}) \cdot \vec{r}_0} e^{-\gamma r_0} d\vec{r}_0 \int (2\pi)^{-3/2} \phi(\vec{r}'_{01}) e^{i(\vec{k}_{01} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'_{01}} e^{-i\vec{k}_{01} \cdot \vec{r}'_{01}} e^{-\lambda r'_{01}} d\vec{r}'_{01} \right] d\vec{p} \quad (\text{B.14})
\end{aligned}$$

Annexe C

Effets d'échange

Simple ionisation de l'hydrogène

Dans cette étude on va étudier les termes d'échange possibles.

Il y a 4 états possible pour décrire l'état initial et également 4 états possibles pour l'état finaux. Pour calculer une section efficace différentielle il faut tenir compte de tous les états finaux et diviser par le nombre d'états initiaux.

Soient les états initiaux :

$D_i^1 = |k_i 1s|$ avec $M_S = +1$, D_i^1 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_i(\vec{r}_1)\alpha(1) & k_i(\vec{r}_2)\alpha(2) \\ 1s(\vec{r}_1)\alpha(1) & 1s(\vec{r}_2)\alpha(2) \end{pmatrix} \text{ qui donne après calcul :}$$

$$D_i^1 = (k_i(\vec{r}_1)1s(\vec{r}_2) - k_i(\vec{r}_2)1s(\vec{r}_1)) \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\alpha(2)).$$

La fonction de spin est symétrique quand on échange (1) en (2) et celle d'espace antisymétrique quand on échange \vec{r}_1 en \vec{r}_2 , donc la fonction d'espace et de spin est globalement antisymétrique.

$D_i^2 = |k_i 1\bar{s}|$ avec $M_S = 0$, D_i^2 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_i(\vec{r}_1)\alpha(1) & k_i(\vec{r}_2)\alpha(2) \\ 1s(\vec{r}_1)\beta(1) & 1s(\vec{r}_2)\beta(2) \end{pmatrix} \text{ qui donne après calcul :}$$

$$D_i^2 = (k_i(\vec{r}_1)1s(\vec{r}_2)\alpha(1)\beta(2) - k_i(\vec{r}_2)1s(\vec{r}_1)\alpha(2)\beta(1)) \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$D_i^3 = |\bar{k}_i 1s|$ avec $M_S = 0$, D_i^3 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_i(\vec{r}_1)\beta(1) & k_i(\vec{r}_2)\beta(2) \\ 1s(\vec{r}_1)\alpha(1) & 1s(\vec{r}_2)\alpha(2) \end{pmatrix} \text{ qui donne après calcul :}$$

$$D_i^3 = (k_i(\vec{r}_1)1s(\vec{r}_2)\beta(1)\alpha(2) - k_i(\vec{r}_2)1s(\vec{r}_1)\beta(2)\alpha(1)) \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$D_i^4 = |\bar{k}_i 1\bar{s}|$ avec $M_S = -1$, D_i^4 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_i(\vec{r}_1)\beta(1) & k_i(\vec{r}_2)\beta(2) \\ 1s(\vec{r}_1)\beta(1) & 1s(\vec{r}_2)\beta(2) \end{pmatrix} \text{ qui donne après calcul :}$$

$$D_i^4 = (k_i(\vec{r}_1)1s(\vec{r}_2) - k_i(\vec{r}_2)1s(\vec{r}_1)) \frac{1}{\sqrt{2}} \beta(1)\beta(2).$$

La fonction d'espace et de spin est globalement antisymétrique.

On va faire opérer le moment cinétique de spin S^2 sur les D_i avec $S^2 = S_-S_+ + S_z + S_z^2$.

$S_z D_i^1 = 1D_i^1$, $S_+ D_i^1 = 0$ d'où $S^2 D_i^1 = 2D_i^1$ et donc $S = 1$ et $M_S = +1$, D_i^1 est bien fonction propre de S^2 .

$S_z D_i^4 = -1D_i^4$, $S_+ D_i^4 = D_i^2 + D_i^3$ et $S_- S_+ D_i^4 = 2D_i^4$, $S^2 D_i^4 = 2D_i^4$ et donc $M_S = -1$, $S = 1$. D_i^4 est bien fonction propre de S^2 .

$S_z D_i^2 = 0$, $S_+ D_i^2 = D_i^1$ et $S_- S_+ D_i^2 = D_i^2 + D_i^3$ donc D_i^2 n'est pas état propre.

$S_z D_i^3 = 0$, $S_+ D_i^3 = D_i^1$ et $S_- S_+ D_i^3 = D_i^2 + D_i^3$ donc D_i^3 n'est pas état propre.

L'opérateur S^2 , dans la base formée par D_i^2 et D_i^3 , sera représenté par la matrice : $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Les valeurs propres sont $\lambda = 0$ et $\lambda = 2$. Les états propres seront :

$$D_i^{2'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(D_i^2 - D_i^3) \text{ pour } \lambda = 0 (S = 0, M_S = 0) \text{ et } D_i^{3'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(D_i^2 + D_i^3) \text{ pour } \lambda = 2 (S = 1, M_S = 0).$$

Soient les états finaux :

$D_f^1 = |k_s k_e|$ avec $M_s = +1$, D_f^1 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_s(\vec{r}_1)\alpha(1) & k_s(\vec{r}_2)\alpha(2) \\ k_e(\vec{r}_1)\alpha(1) & k_e(\vec{r}_2)\alpha(2) \end{pmatrix} \text{ et donne après calcul :}$$

$$D_f^1 = (k_s(\vec{r}_1)k_e(\vec{r}_2) - k_s(\vec{r}_2)k_e(\vec{r}_1)) \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\alpha(2)).$$

La fonction de spin est symétrique quand on échange (1) en (2) et celle d'espace antisymétrique quand on échange \vec{r}_1 en \vec{r}_2 , donc la fonction d'espace et de spin est globalement antisymétrique.

$D_f^2 = |k_s \bar{k}_e|$ avec $M_s = 0$, D_f^2 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_s(\vec{r}_1)\alpha(1) & k_s(\vec{r}_2)\alpha(2) \\ k_e(\vec{r}_1)\beta(1) & k_e(\vec{r}_2)\beta(2) \end{pmatrix} \text{ et donne après calcul :}$$

$$D_f^2 = (k_s(\vec{r}_1)k_e(\vec{r}_2)\alpha(1)\beta(2) - k_s(\vec{r}_2)k_e(\vec{r}_1)\alpha(2)\beta(1)) \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$D_f^3 = |\bar{K}_s k_e|$ avec $M_S = 0$, D_f^3 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_s(\vec{r}_1)\beta(1) & k_s(\vec{r}_2)\beta(2) \\ k_e(\vec{r}_1)\alpha(1) & k_e(\vec{r}_2)\alpha(2) \end{pmatrix} \text{ et donner après calcul :}$$

$$D_f^3 = (k_s(\vec{r}_1)k_e(\vec{r}_2)\beta(1)\alpha(2) - k_s(\vec{r}_2)k_e(\vec{r}_1)\beta(2)\alpha(1))\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

$D_f^4 = |\bar{k}_s\bar{k}_e|$ avec $M_S = -1$, D_f^4 est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} k_s(\vec{r}_1)\beta(1) & k_s(\vec{r}_2)\beta(2) \\ k_e(\vec{r}_1)\beta(1) & k_e(\vec{r}_2)\beta(2) \end{pmatrix} \text{ et donner après calcul :}$$

$$D_f^4 = (k_s(\vec{r}_1)k_e(\vec{r}_2) - k_s(\vec{r}_2)k_e(\vec{r}_1))\frac{1}{\sqrt{2}}\beta(1)\beta(2).$$

La fonction d'espace et de spin est globalement antisymétrique.

On va faire opérer le moment cinétique de spin S^2 sur les D_f avec $S_z D_f^1 = 1D_f^1$, $S_+ D_f^1 = 0$ d'où $S^2 D_f^1 = 2D_f^1$ et donc $S = 1$ et $M_S = +1$, D_f^1 est bien fonction propre de S^2 .

$S_z D_f^4 = -1D_f^4$, $S_+ D_f^4 = D_f^2 + D_f^3$ et $S_- S_+ D_f^4 = 2D_f^4$, $S^2 D_f^4 = 2D_f^4$ et donc $M_S = -1$, $S = 1$. D_f^4 est bien fonction propre de S^2 .

$S_z D_f^2 = 0$, $S_+ D_f^2 = D_f^1$ et $S_- S_+ D_f^2 = D_f^2 + D_f^3$ donc D_f^2 n'est pas état propre.

$S_z D_f^3 = 0$, $S_+ D_f^3 = D_f^1$ et $S_- S_+ D_f^3 = D_f^2 + D_f^3$ donc D_f^3 n'est pas état propre.

L'opérateur S^2 , dans la base formée par D_f^2 et D_f^3 , sera représenté par la matrice : $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$.

Les valeurs propres sont $\lambda = 0$ et $\lambda = 2$. Les états propres seront :

$D_f^{2'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(D_f^2 - D_f^3)$ pour $\lambda = 0 (S = 0, M_S = 0)$ et $D_f^{3'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(D_f^2 + D_f^3)$ pour $\lambda = 2 (S = 1, M_S = 0)$. Soient

$$D_2^{f'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1))\frac{1}{\sqrt{2}}(k_s(1)k_e(2) + k_s(2)k_e(1))$$

$$D_3^{f'} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1))\frac{1}{\sqrt{2}}(k_s(1)k_e(2) - k_s(2)k_e(1))$$

Le potentiel d'interaction est ici $V = -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{12}}$, r_1 étant la distance entre l'électron incident et le noyau, r_{12} étant la distance entre l'électron incident et l'électron de l'hydrogène et r_2 désignant la distance entre l'électron de l'hydrogène et le noyau.

On a donc 4 éléments de transition : soit le premier correspondant à $S = 0$ et $M_S = 0$

$$M_{2,2} = \langle D_f^{2'} | V | D_i^{2'} \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(k_s(1)k_e(2) + k_s(2)k_e(1)) | V | \frac{1}{\sqrt{2}}(k_i(1)1s(2) + k_i(2)1s(1)) \right\rangle$$

$$M_{2,2} = \frac{1}{2}(f_1 + g_2 + g_1 + f_2)$$

$$\text{Avec } f_1 = \left\langle k_s(1)k_e(2) \left| -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} \right| k_i(1)1s(2) \right\rangle, g_2 = \left\langle k_s(1)k_e(2) \left| -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} \right| k_i(2)1s(1) \right\rangle$$

$$g_1 = \left\langle k_s(2)k_e(1) \left| -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} \right| k_i(1)1s(2) \right\rangle, \text{ et } f_2 = \left\langle k_s(2)k_e(1) \left| -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} \right| k_i(2)1s(1) \right\rangle$$

(Note : il faut faire attention à l'interaction électron incident-noyau (terme $-1/r_1$ ou $-1/r_2$) suivant $k_i(1)$ et $k_i(2)$)

On a directement $f_1 = f_2 = f$ (amplitude direction) et $g_1 = g_2 = g$ (amplitude d'échange), d'où $M_{2,2} = f + g$.

Soit le deuxième correspondant à $S = 1$ et $M_S = -1$

$$M_{4,4} = \langle D_f^4 | V | D_i^4 \rangle = \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}(k_s(1)k_e(2) - k_s(2)k_e(1)) | V | \frac{1}{\sqrt{2}}(k_i(1)1s(2) + k_i(2)1s(1)) \right\rangle$$

$$M_{4,4} = \frac{1}{2}(f_1 - g_2 - g_1 + f_2) = f - g$$

On peut montrer que $M_{4,4} = M_{3,3} = M_{1,1}$

La section efficace sera alors proportionnelle à

$$MM^* = \frac{1}{4}|f + g|^2 + \frac{3}{4}|f - g|^2$$

Annexe D

Calcul de la charge variable

Application au Hélium

Pour calculer la charge variable $Z(r)$ on utilise le potentiel statique V_{stat} de la cible vue par l'électron éjecté. Dans le cas des atomes, le potentiel V_{stat} (dans le cas d'une orbitale j) est donné par :

$$V_j(r_0) = -\frac{Z}{r_0} + \sum_{i=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{r} = -\frac{Z(r_0)}{r_0} \quad (D.1)$$

La charge variable est calculée analytiquement en utilisant le développement multipolaire

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{l,m}^*(\Omega_i) Y_{l,m}(\Omega_j), \quad (D.2)$$

nous avons choisi la fonction d'onde de Hylleraas pour représenter l'électron actif de l'atome d'Hélium

$$\phi_{1s}(\vec{r}) = 2\alpha^{3/2} e^{-\alpha r} Y_{0,0}(\Omega), \quad (D.3)$$

avec $\alpha = \frac{27}{16}$.

Le problème revient alors à calculer la quantité suivante

$$I = \int \frac{|\phi_{1s}|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{r}, \quad (D.4)$$

en utilisant le développement multipolaire l'intégral I devient

$$I = 4\alpha^3 \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \int e^{-2\alpha r} Y_{0,0}(\Omega) Y_{0,0}(\Omega) \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_{l,m}^*(\Omega) Y_{l,m}(\Omega) r^2 dr d\Omega, \quad (D.5)$$

ou encore,

$$I = 4\alpha^3 Y_{l,m}(\Omega_0) Y_{0,0} \sum_{l,m} \frac{4\pi}{2l+1} \int e^{-2\alpha r} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} r^2 dr \int Y_{0,0}(\Omega) Y_{l,m}^*(\Omega) d\Omega, \quad (D.6)$$

l'intégrale sur les variables angulaires nous permet écrire

$$I = 4\alpha^3 \int e^{-2\alpha r} \frac{r^2}{r_{>}} dr, \quad (D.7)$$

pour l'intégrale radiale, en changeant les bornes d'intégrations sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} j &= \int_0^{+\infty} e^{-2ar} \frac{r^2}{r_0} dr = \int_0^{r_0} e^{-2ar} \frac{r^2}{r_0} dr + \int_{r_0}^{+\infty} e^{-2ar} \frac{r^2}{r} dr \\ &= \frac{1}{r_0} \int_0^{r_0} e^{-2ar} r^2 dr + \int_{r_0}^{+\infty} e^{-2ar} r dr, \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

par soucis de simplification, on peut écrire aussi

$$j = \frac{1}{r_0} \left[\int_0^{+\infty} e^{-2ar} r^2 dr - \int_{r_0}^{+\infty} e^{-2ar} r^2 dr + r_0 \int_{r_0}^{+\infty} e^{-2ar} r dr \right]. \quad (\text{D.9})$$

Par ailleurs nous avons encore

$$\begin{aligned} \int_{r_0}^{+\infty} e^{-ar} dr &= \frac{e^{-ar_0}}{\alpha} \\ \int_{r_0}^{+\infty} r e^{-ar} dr &= -\frac{d}{d\alpha} \left[\frac{e^{-ar_0}}{\alpha} \right] = \frac{(1 + ar_0)e^{-ar_0}}{\alpha^2} \\ \int_{r_0}^{+\infty} r^2 e^{-ar} dr &= -\frac{d}{d\alpha} \left[\frac{(1 + ar_0)e^{-ar_0}}{\alpha^2} \right] = \frac{1}{\alpha^3} [2 + 2ar_0 + (ar_0)^2] e^{-ar_0}. \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

Il suit alors

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{r_0} \left[\frac{2}{\alpha^3} - \frac{1}{\alpha^3} [2 + 2ar_0 + (ar_0)^2] e^{-ar_0} + \frac{ar_0(1 + ar_0)e^{-ar_0}}{\alpha^3} \right] \\ &= \frac{1}{r_0} \left[\frac{2}{\alpha^3} - \frac{1}{\alpha^3} [2 + ar_0] e^{-ar_0} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

en remplaçant $\alpha \rightarrow 2\alpha$, l'équation (D.11) devient

$$j = \frac{1}{r_0} \frac{2}{(2\alpha)^3} [1 - [1 + ar_0] e^{-2ar_0}]. \quad (\text{D.12})$$

Et par conséquent,

$$I = \frac{1}{r_0} [1 - [1 + ar_0] e^{-2ar_0}]. \quad (\text{D.13})$$

Nous avons finalement,

$$\begin{aligned} V_j(r_0) &= -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_0} [1 - [1 + ar_0] e^{-2ar_0}] \\ &= -\frac{Z(r_0)}{r_0}, \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

ce qui donne

$$Z(r_0) = [1 + [1 + ar_0] e^{-2ar_0}]. \quad (\text{D.15})$$

On peut vérifier aisément que la charge $Z(r_0)$ satisfait

$$Z(0) = Z \text{ et } \lim_{r_0 \rightarrow +\infty} Z(r_0) = 1.$$

où $Z = 2$ est la charge au centre de l'ion résiduel.

Electron-impact ionization of argon $3p$ in asymmetric kinematicsK. Bechane ¹, S. Houamer ^{1,*}, T. Khatir ^{1,2}, A. Tamin ¹ and C. Dal Cappello³¹*LPQSD, Department of Physics, Faculty of Sciences, University Sétif 1, Sétif 19000, Algeria*²*CRNA, 02, Boulevard Frantz Fanon, Boîte Postale 399, Alger RP, Algeria*³*LPCT, UMR CNRS 7019, University of Lorraine, Boîte Postale 95823, 57078 METZ Cedex3, France*

(Received 7 September 2023; revised 1 November 2023; accepted 19 December 2023; published 19 January 2024)

Triple differential cross sections are presented for the electron impact ionization of a $3p$ shell of argon, using a model called 3CWZ. Within this model, the projectile as well as the ejected electrons are represented by Coulomb waves with variable charges $Z(r)$ instead of an effective charge; the postcollision interaction (PCI) is also included and treated exactly at all orders of perturbation theory. Our results are compared with recent experiments and other theoretical predictions in a range of several kinematics.

DOI: [10.1103/PhysRevA.109.012812](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.012812)**I. INTRODUCTION**

Electron impact ionization of atoms and molecules represents theoretically a few-body problem which remains still unresolved since the Schrödinger equation cannot be analytically solvable for more than two interacting particles. There has been, however, impressive progress in theoretical studies, especially with the emergence of new generations of experiences allowing one to probe the validity of any theory. Experimentally, coincidence techniques have allowed for complete information about all particles, and are currently widely used to investigate the electronic structure of the targets besides the fundamental interactions involved in the reaction. These coincidence experiments, also called $(e, 2e)$ reactions [1–3], provide the most valuable information of the reaction and constitute a real challenging test for theories; in particular, the measured triple differential cross section (TDCS) represents a rigorous test for the most efficient models. Accordingly, advanced theoretical studies have been carried out from the early days in response to the discrepancies observed between theory and experiments. The history of this three-body problem is rather long and rich; a detailed description of theoretical models developed gradually to investigate the ionization reaction can be found in [4]. We briefly recall here some efficient models which are nowadays known to provide the best description of the $(e, 2e)$ reaction; these models could hence represent a good tool of comparison for any theoretical study like that we propose in this work. The distorted wave Born approximation (DWBA), where the continuum electrons are all represented by distorted waves, has been proven to be one of the most successful models in describing $(e, 2e)$ experiments for multielectron targets [5–8]. The model does not take into account the PCI; its advantage lies, however, in the simplicity of including the different contributions to the ionization process such as exchange and distortion effects. The DWBA model was refined and

extended for the first time by Prideaux and Madison to atoms [9] by including the PCI in the final state and was generalized later for molecules [10,11]. As a result any physics contained in the wave function is contained to all orders of perturbation theory; this modeling was called 3DW for atoms and M3DW for molecules. Overall, the model has been successfully applied and has given good predictions of the triple differential cross section [12–14]. A hybrid approach based upon DWBA and the R -matrix [15] models has also been developed; this description treats the many-electron process in the ionized target in a more elaborate way than that used in the DWBA model. Theoretical calculations were primarily first-order R matrix [16,17] and extended to second-order R matrix [18,19]; the models are called DWB1-RM and DWB2-RM, respectively. Rather sophisticated nonperturbative models were also developed, following the impressive development of computer resources such as the CCC [20,21] and BSR [22,23] models. In the CCC (convergent close-coupling) approximation, the total wave function is expanded in terms of a sum of products of the target Hamiltonian eigenstates and unknown wave functions related to the projectile; these unknown wave functions are determined by solving a system of integro-differential equations. Besides, the R -matrix method is based on the partition of the configuration space into inner and outer regions; the wave function of the target is required to be totally contained within this inner region. The BSR method is based upon a two-step treatment: (i) the method uses the nonperturbative close-coupling expansion, and (ii) the close-coupling equations are solved using the R -matrix method. There has been significant progress in experimental $(e, 2e)$ techniques which have allowed for complete kinematic information since the first measurements of Jung *et al.* [24] followed over the years by no-less-valuable works which provided additional insight into the ionization process [25–27]. Further techniques have emerged since then, such as the COLd-target recoil-ion momentum spectroscopy technique (COLTRIMS) which was developed during the late 1980s and which contributed extensively in the development of the coincidence measurements [28]; this new technique has allowed researchers to perform

*s_houamer@univ-setif.dz

kinematically complete experiments involving photons, ions, and electrons. While molecular targets have been investigated with limited theoretical support due to their multicenter character as well as to computation time constraints, considerable attention has been given to atoms for a long time. As a result, $(e, 2e)$ measurements can now be correctly predicted for light atoms like hydrogen and helium by sophisticated models [29]. However, for more complex atoms the agreement is not automatically as good; in particular, argon has proven to present a great challenge for theory [30]. Further investigations in this respect are then called for to clarify the origin of the observed discrepancies between theory and experiment. There have been many experiments devoted to the ionization of argon atoms in several kinematics where relative as well as absolute measurements have been provided [31–33]. It should be noted that in almost cases, studies were restricted to coplanar geometry which was admitted to contain the relevant physics of the process (in the coplanar geometry, the incoming projectile and the outgoing electrons are detected in a common plane called the scattering plane). With the appearance of new techniques like those using an advanced reaction microscope, where a nearly full solid angle data collection can be achieved, more valuable information about the $(e, 2e)$ process can now be provided, in many kinematics [34]. Our aim in this work is to further investigate the ionization of argon $3p$ using a theoretical approach in various kinematics.

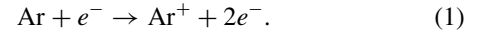
In a previous work [35], we presented a model called BBK2CWZ1, where the two outgoing electrons were described by Coulomb waves with variable charges while the incoming electron was represented by a plane wave; this was considered as an improved BBK model. The model was applied successfully to some atomic and (the Brauner, Briggs and Klar (BBK) model is defined and discussed in [35] and references therein) molecular targets at intermediate and high

impact energies where the use of a plane wave for the incoming electron is justified; an overall improvement in the agreement with measurements was observed compared to the standard BBK results. In this work we improve our modeling by representing all the continuum electrons by Coulomb waves with variable charges or, in other words, the incoming electron will be described now by a Coulomb wave instead of a plane wave as was done in [35]. This model called 3CWZ, which is expected to constitute a more elaborate approach to the $(e, 2e)$ reaction than BBK2CWZ1, is applied at intermediate and low impact energies. We will focus basically on the ionization of argon $3p$ by electron impact because it is the most extensively studied many-electron system and for which rather valuable experiments have been performed.

The paper is organized as follows: the theoretical model is outlined in the next section. Our results are presented and discussed in the third section. We finish by a Conclusion and outlook. Atomic units are used throughout, unless specified otherwise.

II. THEORY

The electron impact ionization of an argon atom in its ground state is schematized as



The theoretical background of the $(e, 2e)$ process can be found in our former works [35–37]. In this work we take into account the exchange effects which were omitted previously as we considered only highly asymmetric coplanar geometric kinematics and relatively high impact energy. Briefly, in the single-particle picture, the triple differential cross section of an atomic subshell (n, l, m) is written, after summing over all final and averaging over all initial spin states, as [4]

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} (|T_{\text{dir}}|^2 + |T_{\text{exc}}|^2 + |T_{\text{dir}} - T_{\text{exc}}|^2). \quad (2)$$

The transition matrix elements T_{dir} and T_{exc} are given by

$$T_{\text{dir}} = \left\langle \phi_c^Z(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \phi_c^Z(\vec{k}_2, \vec{r}_1) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) \left| \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \right| \phi_c^Z(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Psi_{nlm}(\vec{r}_1) \right\rangle, \quad (3)$$

$$T_{\text{exc}} = \left\langle \phi_c^Z(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^Z(\vec{k}_2, \vec{r}_0) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) \left| \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \right| \phi_c^Z(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Psi_{nlm}(\vec{r}_1) \right\rangle, \quad (4)$$

where \vec{k}_i , \vec{k}_1 , and \vec{k}_2 are, respectively, the momentum vectors of the incident, scattered, and ejected electrons while $\phi_c^Z(\vec{k}, \vec{r})$ represents a Coulomb wave with variable charge $Z(r)$:

$$\phi_c^Z(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} {}_1F_1 \left[-i \frac{Z(r)}{k}, 1, -i(\vec{k} \cdot \vec{r} + \vec{k}r) \right] \exp \left[\frac{\pi Z(r)}{2k} \right] \Gamma \left[1 + i \frac{Z(r)}{k} \right]. \quad (5)$$

$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01})$ is the full final Coulomb interaction dealing with the PCI and is given by

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) = \exp \left(-\frac{\pi}{4k_{01}} \right) \Gamma \left(1 - \frac{i}{2k_{01}} \right) {}_1F_1 \left[-i\alpha_{01}, 1, -i(\vec{k}_{01} \cdot \vec{r}_{01} + k_{01}r_{01}) \right], \quad (6)$$

with $\vec{k}_{01} = \frac{1}{2}(\vec{k}_0 - \vec{k}_1)$ and $\alpha_{01} = -\frac{1}{2k_{01}}$.

$\Psi_{nlm}(\vec{r})$ is the bound wave function of the atomic target, expanded in the Roothaan-Hartree-Fock method as a linear combination of Slater-type wave functions [38].

The momentum vectors are required to fulfill the conservation law $\vec{q} = \vec{K} - \vec{k}_2$, where \vec{q} is the recoil momentum and $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_1$ is the momentum transfer.

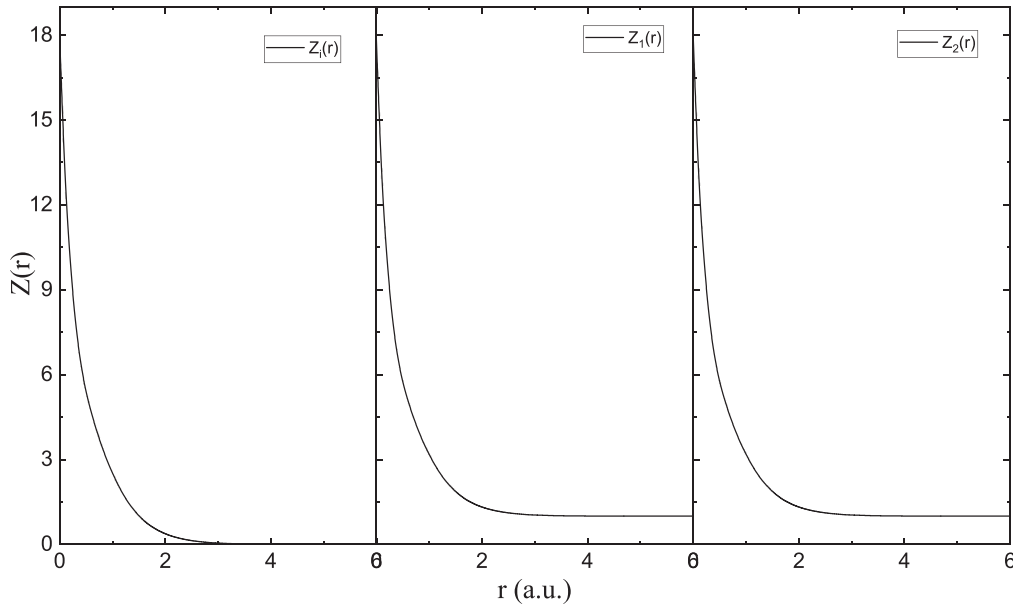


FIG. 1. Variable charge $Z(r)$ seen by the incident electron (a), the ejected electron (b), and the scattered electron (c) during the ionization process for the 3p subshell of Ar.

The variable charge is calculated analytically by using the spherically averaged potential of the target viewed by the electron:

$$U_i(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\vec{r}_1) d\Omega_1 = -\frac{Z(r_1)}{r_1}, \quad (7)$$

where $V_i(\vec{r}_1)$ is the standard Hartree potential defined for atoms by

$$V_i(\vec{r}_1) = -\frac{Z}{r_1} + \sum_{i=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r}. \quad (8)$$

In our modeling the ejected and scattered electrons see a charge $Z = N$ at the center of the target and $Z = 1$ asymptotically, while the incident electron sees a charge $Z = N$ at the center and $Z = 0$ asymptotically. These variable charges are called $Z_i(r)$, $Z_1(r)$, and $Z_2(r)$ for the incident, scattered, and ejected electron, respectively. In Fig. 1 we present the variable charges for the ionization of argon 3p; the three panels display $Z(r)$ corresponding to the continuum electrons. One can clearly see that $Z_1(r)$ and $Z_2(r)$ decrease from $Z = 18$ to $Z = 1$ whereas $Z_i(r)$ decreases from $Z = 18$ to $Z = 0$; the asymptotic values of $Z(r)$ are reached rapidly at a distance of about $r = 3$ au. It is worth noting that the validity of using the variable charge modeling in our treatment has been discussed and justified in our previous work [35] by performing a partial wave comparative analysis between a true distorted wave and a spherical Coulomb wave with variable charge. To further check the validity of our present analysis, we make a comparison between the static potential used here to deduce the variable charge with the full distorting potential of the DWBA model. The full distorting potential is written as

$$U(r) = V_{\text{stat}}(r) + V_{\text{ex}}(r) + V_p(r), \quad (9)$$

where the local exchange $V_{\text{ex}}(r)$ and polarization $V_p(r)$ potentials are widely used in collision theory and their expressions

are well known (see [39] for $V_{\text{ex}}(r)$ and [40] or $V_p(r)$). The variable charge $Z(r)$ has been calculated by keeping only $V_{\text{stat}}(r)$ in Eq. (9), which is actually written as $V_{\text{stat}}(r) = -\frac{Z(r)}{r}$. For comparison purposes, the radial distribution of the static potential $V_{\text{stat}}(r)$ as well as the full distorting potential $U(r)$ are displayed in Fig. 2. It is seen that the two potentials exhibit somewhat the same shape and could be considered roughly similar. The most notable differences are observed in the short range region, while the two potentials are practically the same elsewhere; thereby the approach used in this work to calculate the variable charge appears to be fairly reasonable.

The object of this work concerns the use of this variable charge modeling, which somehow represents a full approximate distorted wave model (a kind of a 3DW model), and to check how this will affect the TDCS in the $(e, 2e)$ reaction of argon 3p by considering several kinematics. The model

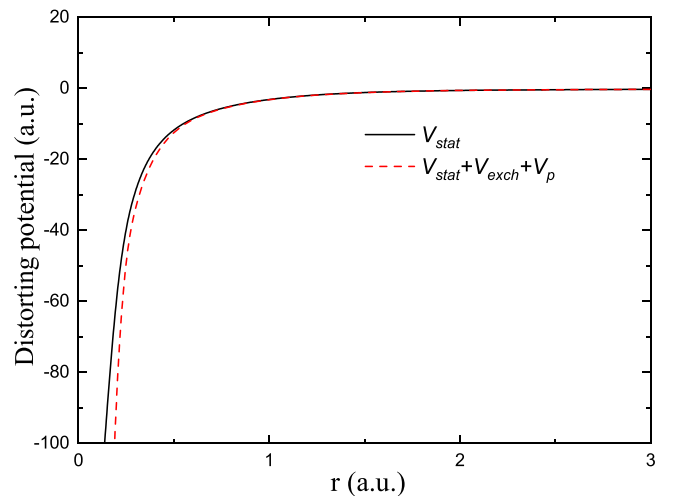


FIG. 2. Distorting potential $U(r)$ seen by the ejected electron.

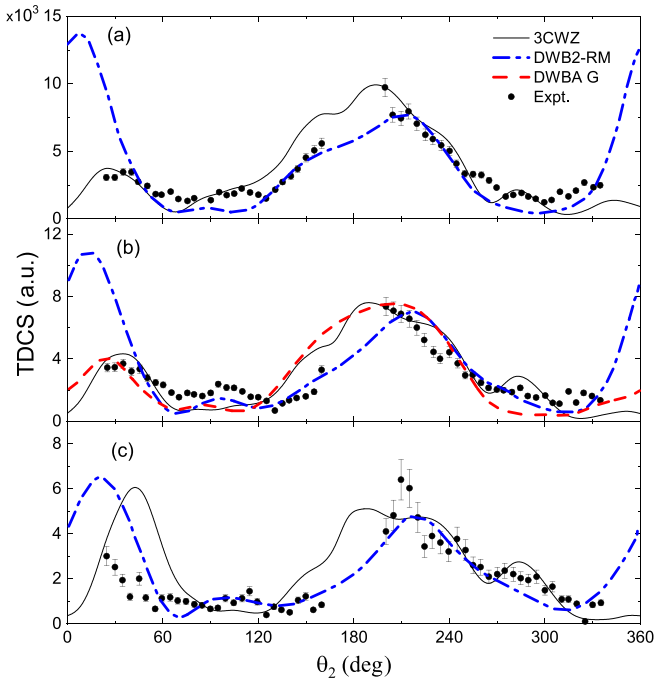


FIG. 3. TDCS for the ionization of argon $3p$ as a function of the ejection angle θ_2 at fixed scattering and ejected energies $E_1 = 500$ eV and $E_2 = 205$ eV. The projectile is scattered at a fixed scattering angle (a) $\theta_1 = 3^\circ$, (b) $\theta_1 = 6^\circ$, and (c) $\theta_1 = 9^\circ$. Theoretical results are black solid line (3CWZ), red dashed line (DWBA-G) and blue dash-dot line (DWB2-RM). The experimental data are black circles taken from [41]. The data have been normalized for the best visual agreement with theory. The absolute scale shown is that of the 3CWZ calculations. The DWB2-RM results have been multiplied by 0.34 (a), 0.33 (b), and 0.25 (c). The DWBA-G results have been multiplied by 1.34 (b).

is called 3CWZ; the obtained results within this model are compared with experiments and other theories. We would like to note that the evaluation of matrix elements (3) and (4) requires great care; we used in this work a Fourier transform scheme to carry out calculations in a rather convenient way (see, e.g., [37], and references therein).

III. RESULTS

We have calculated the TDCS for the ionization of the argon $3p$ subshell using the 3CWZ model; obtained results are now presented and discussed by considering several kinematics in asymmetric geometries. Figure 3 exhibits calculated TDCSs in coplanar asymmetric geometry at an incident energy of about 721 eV and an ejected energy of 205 eV. Three sets of experimental data performed for three scattered angles $\theta_1 = 3^\circ$, 6° , and 9° display the TDCS as a function of the ejection angle. Our results are compared with experiments [41] as well as DWB2-RM and DWBA-G theoretical models. Since experiments are given on a relative scale, we normalize the data as well as the theoretical calculations to the 3CWZ model. These kinematics are characterized by large momentum transfer ($K = 1.27, 1.4$, and 1.6 a.u.) and large recoil momentum absorbed by the atom (q up to 5.48 a.u.)

which indicates that the recoil ion participates strongly in the reaction which would require a rigorous modeling of the ionization process. Also, in this particular situation the PCI is expected to strongly affect the TDCS as the ejected and scattered energies are rather close to each other. We should note that BBK has already proven to fail completely in describing the recoil region of the TDCS [35]; more sophisticated models are therefore needed for the study of the reaction dynamics for these particular kinematics. Looking at Fig. 3 in detail, it is seen that overall the DWB2-RM model describes many parts of the TDCS well but exhibits in all cases a binary peak significantly larger than that of the recoil region, in clear contradiction with the data. Besides, it can be observed that 3CWZ is able to reproduce quite well the TDCS in most parts of the angular distribution of the TDCS; in particular, the peaks in the binary and the recoil regions are much better described compared to those of DWB2-RM. On the other hand it is seen that DWBA-G [42] (for which only results for $\theta_1 = 6^\circ$ are available) provides results rather closer to experiments like those of 3CWZ [panel (b)]. To give an interpretation of these findings we recall that DWB2-RM is a powerful model which is in principle able to generally well describe the $(e, 2e)$ reaction. Nevertheless this model does not account for the PCI, which is important here; this explains unfortunately the shortcomings observed in Fig. 3. In contrast, the DWBA-G model is a full distorted wave model where the PCI is included via the Gamow factor. This model is in fact not convenient for comparison with absolute measurements, as the Gamow factor is known to violate strongly the normalization, but can be efficient for comparison with relative data like those considered here. The failure of the DWB2-RM model to correctly predict some regions of the TDCS highlights the importance of the PCI effect, which is not accounted for within this model for these particular kinematics. Furthermore, 3CWZ is a kind of an approximate full distorted wave approach with PCI; the spherical static potential which enables resolving the Schrödinger equation in the true distorted wave description is used instead to calculate the variable charge $Z(r)$ in the 3CWZ model.

In the following we investigate the case of lower impact energy and lower momentum transfer where theoretical calculations are now compared with absolute data [30]. Figure 4 shows a comparison between 3CWZ results with the absolute data at 200 and 113.5 eV impact energies, respectively; also included are the theoretical predictions of the 3DW, DWBA, and DWB2-RM models. Looking at the figure in detail, it is seen that unfortunately none of the theoretical models is able to correctly reproduce the magnitude of the TDCS. It is overall observed that 3CWZ reproduces the double peak in the binary region qualitatively well; the second binary peak is, however, larger than the first one in all kinematics. At 200 eV impact energy [panels (a) and (b)], we can already see that the absolute data are underestimated by all theories. It is, however, observed that 3CWZ reproduces quite well the double binary peak; we also note that the 3CWZ results are rather close to those of DWB2-RM in the binary region while DWBA and 3DW predict nearly the same shape and magnitude for the TDCS. Surprisingly, 3DW, which represents in principle a rather sophisticated modeling of the process, does not reproduce the double binary peak [panel (a)] as would

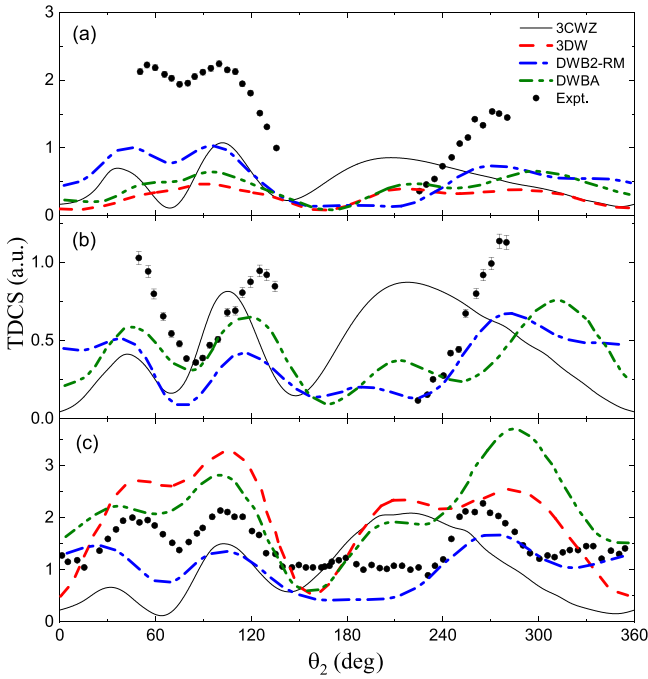


FIG. 4. Absolute TDCS for the ionization of argon $3p$ as a function of the ejection angle θ_2 at fixed scattering angle $\theta_1 = 15^\circ$. The incident and ejected electrons have respective energies (a) $E_i = 200$ eV and $E_2 = 10$ eV, (b) $E_i = 200$ eV and $E_2 = 5$ eV, and (c) $E_i = 113.5$ eV and $E_2 = 5$ eV. Theoretical results are black solid line (3CWZ), red dashed line (3DW), blue dash-dot line (DWB2-RM), and green dash-dot-dot line (DWBA). The experimental data are black circles taken from [30].

be expected. DWBA exhibits somewhat the same behavior as 3DW at $E_2 = 10$ eV [panel (a)]; it reproduces nevertheless the double binary peak at $E_2 = 5$ eV [panel (b)]. The same trends are still observed at 113.5 eV projectile energy, noting anyway that in the present case the absolute data are much closer to all theories. Furthermore, it should be indicated that the data are underestimated by 3CWZ and DWB2-RM, whereas 3DW and DWBA predict much higher intensities [panel (c)]. Also seen, 3CWZ results are closer to those of DWB2-RM as was observed for 200 eV impact energy. In the recoil region, none of the theoretical models is able to correctly reproduce the data.

To summarize discussion of Fig. 4, we can state that the 3CWZ model does not correctly describe the absolute data but qualitatively reproduces the shape of the TDCS in the binary region. We nevertheless note that 3CWZ provides results which are at least at the same level of agreement with experiments as other highly developed models. Overall, 3CWZ as well as all theories considered in this work, provides results whose agreement with experiments is somewhat mixed; no competition between theories is visible for these kinematics. More extensive studies would likely allow us to gain deep insight into the ionization reaction.

Lastly, in order to get more insight into the dynamics of the $(e, 2e)$ reaction, we are interested in the study of the ionization reaction at 195 eV impact energy where experiments have been performed using an efficient reaction microscope

especially designed for electron impact experiments [34]. It is worth noting that the coplanar geometry was used for a long time in $(e, 2e)$ studies as it was assumed to contain most of the relevant physics of the reaction, while experiments investigating out-of-plane geometries remained scarce [43]. The novelty is that the measured TDCSs in this new generation of experiences cover a large part of the full solid angle of the ejected electrons; these ejected electrons are detected outside the scattering plane with energies that can reach 25 eV, representing thereby a new challenge for theory. Accordingly, new kinematics are given beyond the coplanar geometry, which allows one to provide comprehensive information of the ionization dynamics. A three-dimensional TDCS image is therefore given as a function of the emission solid angle (θ_2, ϕ_2) for a particular value of the scattering angle θ_1 . For more valuable comparisons, TDCS cuts in three orthogonal planes are given; these cuts correspond to the xz plane (scattering plane), the yz plane (half-perpendicular plane), and the xy plane (full-perpendicular plane).

Our study is focused in the following on the electron impact ionization of argon $3p$ at 195 eV impact energies for fixed scattering angles ranging from $\theta_1 = 5^\circ$ to $\theta_1 = 20^\circ$. The results are displayed in Figs. 5–7 for three ejection energies of 10 eV, 15, and 20 eV, respectively. The interesting aspect of the present study lies in the fact that the experiments are given on an absolute scale [44] which would provide a benchmark for comparison with theory.

Figure 5 shows absolute TDCS cuts in the three perpendicular planes for an ejection energy $E_2 = 10$ eV (the convention adopted here is so that $\phi_2 = 0$ corresponds to the x axis). The cross sections in the xz , yz , and xy planes are displayed as a function of the ejected angle for a set of scattering angles $\theta_1 = 5^\circ, 10^\circ, 15^\circ$, and 20° ; 3CWZ results are then compared with experiments as well as DWB2-RM predictions. In the scattering plane (left-hand column) it is shown that, overall, the 3CWZ model predicts the data quite well; the model reproduces the binary peak of the TDCS for $\theta_1 = 5^\circ$ very well, but agreement becomes less good with increasing scattering angles (and then increasing momentum transfer). We also note that the binary peak observed for $\theta_1 = 5^\circ$ splits in two with increasing scattering angles in agreement with the data; it is well known that this double peak structure is attributed to the p character of the outer shell of argon. When we compare with the DWB2-RM results, it is seen that the 3CWZ model tends to better describe the $(e, 2e)$ process than DWB2-RM, especially for higher scattering angles $\theta_1 = 15^\circ$ and 20° ; also the double peak structure for higher scattering angles is better exhibited by the 3CWZ model. We should note anyway that the recoil peak is shifted to lower angles by 3CWZ. When we consider the yz plane (central column) we can already see that the data are symmetric about 180° ; the DWB2-RM model reproduces the whole shape of the TDCS much better while 3CWZ exhibits a strong recoil peak in all cases. The binary region is not correctly reproduced by 3CWZ except for $\theta_1 = 5^\circ$ where a binary peak close to experiments is visible. Overall, the DWB2-RM model better describes the shape of the peaks in the binary and recoil regions, significant discrepancies in magnitude with the data are unfortunately observed. In the xy plane (right-hand column), it is seen overall that the agreement with experiments is somewhat mixed when we look in detail

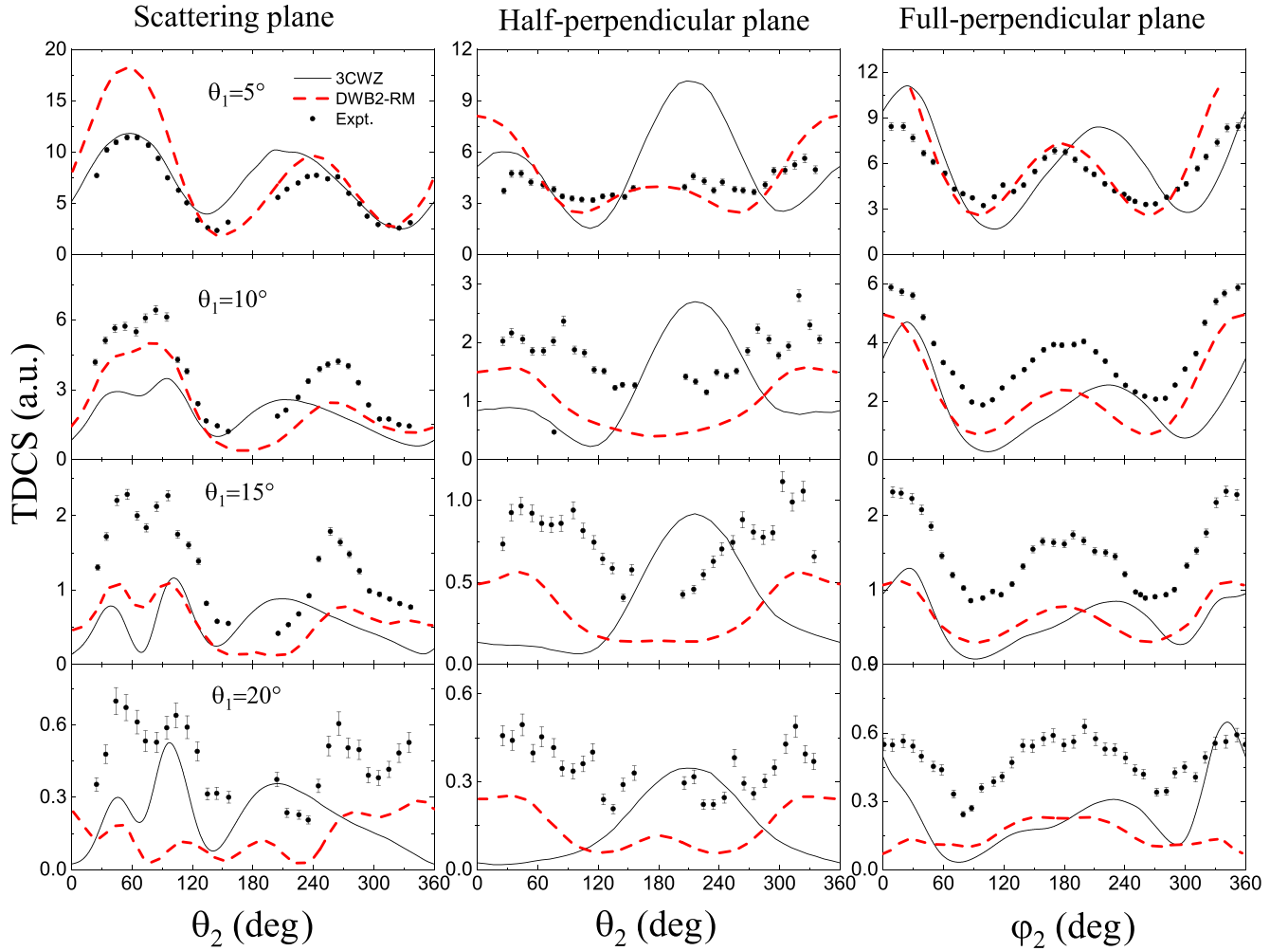


FIG. 5. Absolute TDCS (presented as cuts of the 3D image) for the ionization of argon $3p$ by an impact energy $E_i = 195$ eV as a function of the ejection solid angle (θ_2 , ϕ_2). The projectile is scattered at angles $\theta_1 = (5^\circ, 10^\circ, 15^\circ, 20^\circ)$ in coincidence with the ejected electron with an energy $E_2 = 10$ eV. Left-hand column: TDCS in scattering (xz) plane. Central column: TDCS in the half-perpendicular (yz) plane. Right-hand column: TDCS in the full-perpendicular (xy) plane. Theoretical results are black solid line (3CWZ) and red dashed line (DWB2-RM). The experimental data are black circles taken from [44].

at the TDCSs provided by the 3CWZ and DWB2-RM models. The DWB2-RM model seems to better reproduce the TDCS for these kinematics ($E_2 = 10$ eV); the agreement with the data is quite good at low scattering angles (5° and 10°). However, this good agreement is no longer observed with increasing scattering angles where the data are substantially underestimated (by a factor up to 2); the agreement becomes even better reproduced by 3CWZ at a 20° scattering angle.

Figures 6 and 7 show the absolute TDCSs with the same set of scattering angles but for ejection energies $E_2 = 15$ and 20 eV, respectively. Our theoretical results are compared with experiments as well as those of the DWB2-RM model once again; general trends observed are quite similar to those of Fig. 5. As seen, the TDCS is qualitatively reproduced by the two models in the xz plane where the double peak structure is still shown for higher angles, in agreement with experiments. The 3CWZ model still provides a better description of the absolute TDCS, especially at $\theta_1 = 20^\circ$. In the half-perpendicular plane (yz plane) DWB2-RM is better at reproducing the shape of the TDCS where the binary and recoil peaks are still

qualitatively reproduced; the magnitude of the TDCS is nevertheless substantially underestimated for all scattering angles. The 3CWZ results are also in worse agreement compared to DWB2-RM; the binary peak is somewhat more visible for these two energies (better than for $E_2 = 10$ eV) and a large recoil peak is reproduced too. The situation is different for the xy plane: the 3CWZ model better describes the TDCS in shape and magnitude, and a peak at about $\phi_2 = 20^\circ$ is observed for all scattering angles. On the other hand, DWB2-RM does not reproduce the data, especially at higher scattering angles, $\theta_1 = 15^\circ$ and 20° , where clear discrepancies are observed.

It should be noted that DWB2-RM is *a priori* a more sophisticated treatment as it uses accurate multiconfiguration expansion of the final ionic states as well as the initial bound state instead of a single-configuration scheme; the observed shortcomings are presumably due to the fact that the PCI is not accounted for at all for this model. In contrast, 3CWZ appears to reproduce the data quite well in many cases, at least for this intermediate impact energy (195 eV), although it is based on a rather simple modeling. This indicates the importance

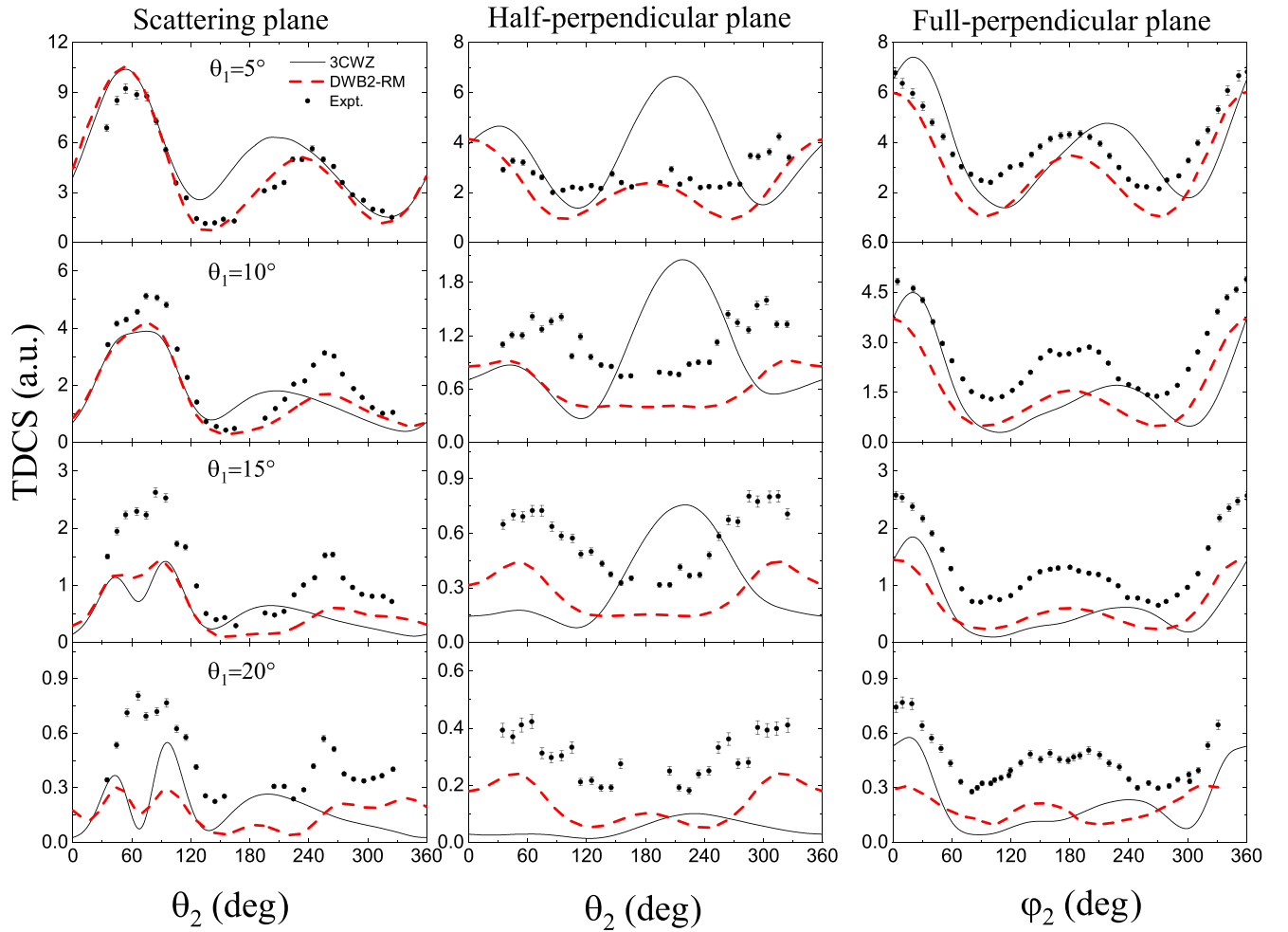


FIG. 6. Same as Fig. 5 but for an ejection energy $E_2 = 15$ eV.

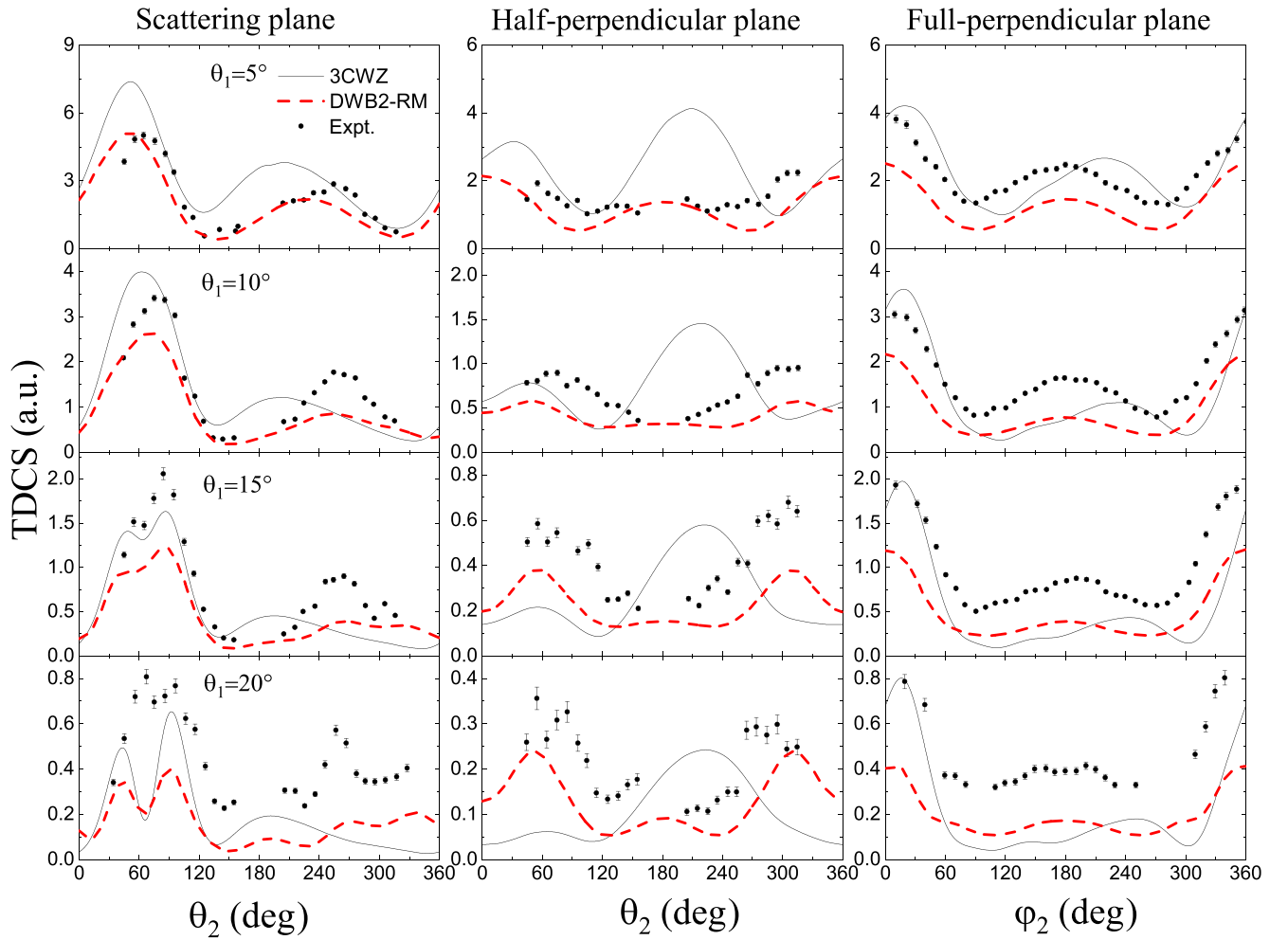
of the PCI which is accounted here and exactly treated. We should note anyway that for highly asymmetric geometries (where PCI may be neglected), DWB2-RM is known to be very efficient.

In summary, for all ejection energies, our modeling reproduces the TDCS in the scattering (xz) plane quite well; a double binary peak appears gradually with increasing scattering angles, in rather better agreement with the data than DWB2-RM. In the out-of-plane geometries, 3CWZ turns out to be less efficient, especially in the half-perpendicular (yz plane) in the recoil region, where a strong peak quite far from experiments is observed for all scattering angles. In the full-perpendicular plane (xy plane) both the 3CWZ and DWB2-RM models are able to describe the reaction in some particular kinematics. While DWB2-RM reproduces the data at 10 eV ejection energy quite well, especially at low scattering angles, 3CWZ is much better at describing the TDCS at higher ejection energies (15 and 20 eV), where the data are closer to 3CWZ results for all scattering angles.

IV. CONCLUSION

In this work, an $(e, 2e)$ theoretical study of argon $3p$ has been reported in asymmetric kinematics. A 3CWZ model,

based upon a full Coulomb wave description with variable charges, has been used to investigate the $(e, 2e)$ ionization reaction in several kinematics; obtained results have been compared with experiments and other theoretical predictions. In a first step, coplanar asymmetric geometry has been considered. At relatively high impact energy (nearly 700 eV) and large momentum transfer (up to 1.6 a.u.) where ejection and scattering energies are rather close, 3CWZ results turned out to be in good agreement with the relative data much better than DWB2-RM. Unlike the previous case (Fig. 3), the agreement with absolute experiments at 200 and 113.5 eV impact energies was found to be rather mixed at lower impact energies and lower momentum transfer (Fig. 4), noting anyway that 3CWZ results were at the same level of agreement with the data as other sophisticated models. In a second step we considered an alternative type of experiment reported on an absolute scale, where the TDCS is presented as a three-dimensional image as a function of the ejection solid angle; comparisons with TDCS cuts in three orthogonal planes are hence made for a series of kinematics. Overall, 3CWZ results are in poor agreement with the data in the half-perpendicular (yz) plane. In the scattering (xz) and the full-perpendicular (xy) planes, on the other hand, results based upon the 3CWZ model seem to agree better with experiments. In the xz plane

FIG. 7. Same as Fig. 5 but for an ejection energy $E_2 = 20$ eV.

the agreement with the data is quite satisfying and in much better agreement than the rather powerful DWB2-RM model. In the xy plane both theoretical models are able to well reproduce the data in some kinematics.

Given the shortcomings observed in this work the method should be applied for other atoms and in other kinematics [45] for a more exhaustive interpretation of the ionization process. This modeling represents a kind of a full approximated distorted wave approach with PCI, whose advantage is justified by significant savings in computing time. This thereby enables its application to molecular targets which represent actually a great challenge for theory. In fact, theoretical investigations of $(e, 2e)$ for molecules remain relatively scarce due to its multicenter nature as well as the random orientation of the

molecule; the advancement of theoretical models also depends on the availability of reliable experiments for purposes of comparison. Despite all the experimental difficulties, some valuable data are now available for molecules in a range of various kinematics [46,47]; we are able to generalize our 3CWZ to molecules for a more detailed analysis of the $(e, 2e)$ process.

ACKNOWLEDGMENT

This work was supported by the Direction Générale de la Recherche Scientifique et du Développement Technologique (DGRSDT-Algeria), PRFU Grant No. B00L02UN190120200003.

- [1] A. Lahmam-Bennani, *J. Phys. B* **24**, 2401 (1991).
- [2] S. J. Cavanagh and B. Lohmann, *J. Phys. B* **32**, L261 (1999).
- [3] R. El Mir, K. Kaja, A. Naja, E. M. Staicu Casagrande, S. Houamer, and C. Dal Cappello, *J. Phys. B* **54**, 015201 (2021).
- [4] D. H. Madison and O. Al-Hagan, *J. At., Mol., Opt. Phys.* **2010**, 367180 (2010).

- [5] D. H. Madison, R. V. Calhoun, and W. N. Shelton, *Phys. Rev. A* **16**, 552 (1977).
- [6] J. Rasch, C. T. Whelan, R. J. Allan, S. P. Lucey, and H. R. J. Walters, *Phys. Rev. A* **56**, 1379 (1997).
- [7] M. A. Stevenson, L. R. Hargreaves, B. Lohmann, I. Bray, D. V. Fursa, K. Bartschat, and A. Kheifets, *Phys. Rev. A* **79**, 012709 (2009).

- [8] F. K. Miller, C. T. Whelan, and H. R. J. Walters, *Phys. Rev. A* **91**, 012706 (2015).
- [9] A. Prideaux and D. H. Madison, *Phys. Rev. A* **67**, 052710 (2003).
- [10] J. Gao, D. H. Madison, and J. L. Peacher, *Phys. Rev. A* **72**, 020701(R) (2005).
- [11] J. Gao, D. H. Madison, and J. L. Peacher, *J. Chem. Phys.* **123**, 204314 (2005).
- [12] S. Jones and D. H. Madison, *J. Phys. B* **27**, 1423 (1994).
- [13] S. Amami, M. Ulu, Z. N. Ozer, M. Yavuz, S. Kazgoz, M. Dogan, O. Zatsarinny, K. Bartschat, and D. Madison, *Phys. Rev. A* **90**, 012704 (2014).
- [14] H. Chaluvasi, Z. N. Ozer, M. Dogan, C. Ning, J. Colgan, and D. H. Madison, *J. Phys. B* **48**, 155203 (2015).
- [15] P. Descouvemont and D. Baye, *Rep. Prog. Phys.* **73**, 036301 (2010).
- [16] K. Bartschat and P. G. Burke, *J. Phys. B* **20**, 3191 (1987).
- [17] K. Bartschat and P. G. Burke, *J. Phys. B* **21**, 2969 (1988).
- [18] Y. Fang and K. Bartschat, *J. Phys. B* **34**, L19 (2001).
- [19] K. Bartschat and O. Vorov, *Phys. Rev. A* **72**, 022728 (2005).
- [20] I. Bray and A. T. Stelbovics, *Phys. Rev. A* **46**, 6995 (1992).
- [21] I. Bray, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 273201 (2002).
- [22] O. Zatsarinny and K. Bartschat, *Phys. Rev. A* **85**, 062709 (2012).
- [23] X. Ren, T. Pflüger, J. Ullrich, O. Zatsarinny, K. Bartschat, D. H. Madison, and A. Dorn, *Phys. Rev. A* **85**, 032702 (2012).
- [24] K. Jung, E. Schubert, D. A. L. Paul, and H. Ehrhardt, *J. Phys. B* **8**, 1330 (1975).
- [25] M. Cherid, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, R. W. Zuraes, R. R. Lucchese, M. C. Dal Cappello, and C. Dal Cappello, *J. Phys. B* **22**, 3483 (1989).
- [26] D. S. Milne-Brownlie, S. J. Cavanagh, B. Lohmann, C. Champion, P. A. Hervieux, and J. Hanssen, *Phys. Rev. A* **69**, 032701 (2004).
- [27] N. Isik, M. Dogan, and S. Bahcelli, *J. Phys. B* **49**, 065203 (2016).
- [28] J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn, R. Dörner, L. Ph. H. Schmidt, and H. Schmidt-Böcking, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 1463 (2003).
- [29] T. N. Rescigno, M. Baertschy, W. A. Isaacs, and C. W. McCurdy, *Science* **286**, 2474 (1999).
- [30] R. L. Hargreaves, M. A. Stevenson, and B. Lohmann, *J. Phys. B* **43**, 205202 (2010).
- [31] A. Lahmam-Bennani, H. F. Wellenstein, A. Duguet, and A. Daoud, *Phys. Rev. A* **30**, 1511 (1984).
- [32] M. Stevenson, G. J. Leighton, A. Crowe, K. Bartschat, O. K. Vorov, and D. H. Madison, *J. Phys. B* **38**, 433 (2005).
- [33] G. Purohit and D. Kato, *Phys. Rev. A* **96**, 042710 (2017).
- [34] X. Ren, A. Senftleben, T. Pflüger, A. Dörn, K. Bartschat, and J. Ullrich, *J. Phys. B* **43**, 035202 (2010).
- [35] M. Attia, S. Houamer, T. Khatir, K. Bechane, and C. Dal Cappello, *J. Phys. B* **56**, 075201 (2023).
- [36] M. Chinoune, S. Houamer, C. Dal Cappello, and A. Galstyan, *J. Phys. B* **49**, 205201 (2016).
- [37] T. Khatir, S. Houamer, and C. Dal Cappello, *J. Phys. B* **52**, 245201 (2021).
- [38] C. Clementi and C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables* **14**, 177 (1974).
- [39] J. B. Furness and I. E. McCarthy, *J. Phys. B* **6**, 2280 (1973).
- [40] N. T. Padial and D. W. Norcross, *Phys. Rev. A* **29**, 1742 (1984).
- [41] F. Catoire, E. M. Staicu-Casagrande, M. Nekkab, C. Dal Cappello, K. Bartschat, and A. Lahmam-Bennani, *J. Phys. B* **39**, 2827 (2006).
- [42] A. Kheifets, A. Naja, E. M. Staicu Casagrande, and A. Lahmam Bennani, *J. Phys. B* **41**, 145201 (2008).
- [43] A. J. Murray, N. J. Bowering, and F. H. Read, *J. Phys. B* **33**, 2859 (2000).
- [44] X. Ren, A. Senftleben, T. Pflüger, A. Dorn, K. Bartschat, and J. Ullrich, *Phys. Rev. A* **83**, 052714 (2011).
- [45] X. Ren, S. Amami, O. Zatsarinny, T. Pflüger, M. Weyland, W. Y. Baek, H. Rabus, K. Bartschat, D. Madison, and A. Dorn, *Phys. Rev. A* **91**, 032707 (2015).
- [46] M. Gong, X. Li, S. B. Zhang, S. Niu, X. Ren, E. Wang, A. Dorn, and X. Chen, *Phys. Rev. A* **98**, 042710 (2018).
- [47] E. Wang, X. Ren, M. Gong, E. Ali, Z. Wang, C. Ma, D. Madison, X. Chen, and A. Dorn, *Phys. Rev. A* **102**, 062813 (2020).

Bibliographie

- [1] I Langmuir and HA Jones, Collisions between electrons and gas molecules, Phys Rev, (1928).
- [2] E. Rudberg, Energy losses of electrons in nitrogen, Proc. Roy. Soc. London A 129 628 (1930).
- [3] H. A. Bethe, Ann, Phys Lpz. 5, 325 (1930).
- [4] A. L. Hughes and J. H. McMillen, Inelastic and Elastic Electron Scattering in Argon, Phys Rev, 39, 585 (1932).
- [5] H. S. W. Massey and C. B. O Mohr, Proc. Roy. Soc. (London) 613 (1933).
- [6] R. Moccia, One-Center Basis Set SCF MO's. I. HF , CH_4 , and SiH_4 , J. Chem. Phys 40 2164 (1964).
- [7] R. Moccia, One-Center Basis Set SCF MO's. II. NH_3 , NH_4^+ , PH_3 , PH_4^+ , J. Chem. Phys 40 2176 (1964).
- [8] R. Moccia, One-Center Basis Set SCF MO's. III. H_2O , H_2S , and HCl , J. Chem. Phys 40 2187 (1964).
- [9] U. Amaldi, A. Egidi, R. Marconero, G. Pizzella, Use of a Two Channeltron Coincidence in a New Line of Research in Atomic Physics, Rev. Sci. Instrum 40 1001 (1969).
- [10] H. Ehrhardt, K.H. Hesselbacher, K. Jung, M. Schulz and K. Willmann, Collisional ionization of helium by 250 eV electrons : experiments with completely determined kinematics, J.Phys.B 5 (1972).
- [11] J. B. Furness and I. E. McCarthy, Semiphenomenological optical model for electron scattering on atoms, J.Phys.B 6, 2280 (1973).
- [12]] N. T. Padial and D. W. Norcross, Parameter-free model of the correlation-polarization potential for electron-molecule collisions, Phys. Rev. A 29, 1742 (1984).
- [13] A. Lahmam-Bennani, H.F. Wellenstein and A. Duguet, Absolute ($e, 2e$) cross sections measured for the $2p$ orbital of argon, Phys. Rev. A 30 1511 (1984).
- [14] M. Brauner, J.S. Briggs and H. Klar, Triply-differential cross sections for ionization of hydrogen atoms by electrons and positrons, J.Phys.B 22 (1989).
- [15] A. Lahmam-Bennani, Recent developments and new trends in ($e, 2e$) and ($e, 3e$) studies, J.Phys.B 24 (1991).
- [16] P. Bickert, W. Hink, C. Dal Cappello and A. Lahmam-Bennani, Triple differential cross section of single $Ar(2p)$ ionization by electron impact in the keV region, J.Phys.B 24 (1991).
- [17] S. Houamer, A. Mansouri, C. Dal Cappello, A. Lahmam-Bennani, S. Elazzouzi, M. Moulay and I. Charpentier, Second Born approximation for the ionization of H_2 by electron impact, J.Phys.B 36 (2003).
- [18] C. Champion, C. Dal Cappello, S. Houamer, and A. Mansouri, Single ionization of the water molecule by electron impact : Angular distributions at low incident energy, Phys. Rev. A 73 012717 (2006).

- [19] F. Catoire, E. M. Staicu-Casagrande, M. Nekkab, C. Dal Cappello, K. Bartschat and A. Lahmam-Bennani, Investigation of the $(e, 2e)$ single ionisation of He and Ar at large energy loss close to minimum momentum transfer, *J. Phys. B* 39 2827 (2006).
- [20] A.S. Kheifets, A. Naja, E.M. Staicu Casagrande and A. Lahmam-Bennani, DWBA-G calculations of electron impact ionization of noble gas atoms, *J.Phys.B* 41 145201 (2008).
- [21] D. H. Madison and O. Al-Hagan, the distorted-wave Born approach for calculating electron- impact ionization of molecules, *J. At. Mol. Opt. Phys* 367180 (2010).
- [22] R.L. Hargreaves, M.A. Stevenson and B. Lohmann, Absolute triple-differential cross sections for intermediate energy electron impact ionization of neon and argon, *J.Phys.B* 43 205202 (2010).
- [23] P. Descouvemont, D. Baye, The R-matrix Theory, *Rep. Prog. Phys.* (2010).
- [24] X.Ren, A. Senftleben, T. Pflüger, A. Dörn, K. Bartschat and J. Ullrich , Benchmark experiment for electron-impact ionization of argon : Absolute triple-differential cross sections via three-dimensional electron emission images, *Phys. Rev. A* 83 052714 (2011).
- [25] M.S. Schöffler, O. Chuluunbaatar, Yu.V. Popov, S. Houamer, J. Titze, T. Jahnke, L.Ph.H. Schmidt, O. Jagutzki, A.G. Galstyan, and A.A. Gusev, Transfer ionization and its sensitivity to the ground-state wave function, *Phys.Rev.A* 87 (2013).
- [26] S. Amami, M. Ulu, Z. Nur Ozer, M. Yavuz, S. Kazgoz, M. Dogan, O. Zatsarinny, K. Bartschat, and D. Madison ,Theoretical and experimental investigation of $(e,2e)$ ionization of argon $3p$ in asymmetric kinematics at intermediate energy, *Phys. Rev. A* 90, 012704 (2014).
- [27] M. Chinoune, S. Houamer, C. Dal Cappello and A. Galstyan , Transfer ionization and its sensitivity to the ground-state wave function, *J. Phys. B* 49 205201 (2016).
- [28] J. Gavin, O. G. de Lucio and R.D. DuBois, Triply differential measurements of single ionization of argon by 1 keV positron and electron impact, *Phys. Rev. A* 95 062703 (2017).
- [29] T. Khatir, S. Houamer and C. Dal Cappello , Theoretical study of the collision dynamics in $(e, 2e)$ reactions, *J. Phys. B* 52 245201 (2019).
- [30] R.El Mir, K. Kaja, A. Naja, E. M. Staicu Casagrande, S. Houamer and C. Dal Cappello, New investigation of the electron-impact ionization of the intermediate valence state of ammonia, *J. Phys. B* 54 015201 (2021).
- [31] M. Attia, S. Houamer, T. Khatir, K. Bechane and C. Dal Cappello , Electron impact ionization of atoms and molecules : an improved BBK model, *J. Phys. B* 56 075201 (2023).
- [32] K. Bechane, S. Houamer, T. Khatir, A. Tamin and C. Dal Cappello, Electron-impact ionization of argon $3p$ in asymmetric kinematics, *Phys. Rev. A* 109, 012812 (2024).
- [33] L.D. Landou and E.M. Lifshitz, Quantum Mecanics, non relativistic theory, Pergmon Press Publication, third edition (1981).
- [34] Walter S. Struve, Fundamentals of molecular spectroscopy, A WILEY-Interscience Publication, (1989).
- [35] B.H. Bransden, C.J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall Publication, second edition (2003).
- [36] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, Quantum Mechanics : An elementary approach to the quantum theory of scattering by a potential, Wiley (2005).
- [37] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products, Elsevier Academic Press Publication, Seventh edition (2007).
- [38] ZETTILI Nouredine, Quantum Mechanics concepts and applications, A John Wiley and Sons, Ltd Publication, second edition (2009).

- [39] E.Clementi and C. Roetti, ROOTHAAN-HARTREE-FOCK ATOMIC WAVE FUNCTIONS Basis Functions and Their Coefficients for Ground and Certain Excited States of Neutral and ionized Atoms $Z \leq 54$ At. Data Nucl. Data. Tables 14 177, (1974).
- [40] Claude DAL CAPPELLO, Etudes en structures électroniques par collisions ($e, 2e$) asymétriques, thèse de doctorat, université de METZ (1986).
- [41] NAJJARI Bennaceur, Etude des processus d'ionisation ($e, 2e$), ($e, 3e$) et ($\gamma, 2e$) des systèmes atomiques à deux électrons, thèse de doctorat, université de METZ (1997).
- [42] EL BOUDALI Farid, Ionisation ($e, 2e$) du Lithium atomique et diatomique, influence des électrons du coeur dans la détermination, par ondes distordues de la section efficace multiplement différentielle, thèse de doctorat, université de METZ (2001).
- [43] HOUAMER Salim, Ionisation de la molécule d'hydrogene par impact d'électrons : une approche monocentrique pour le calcul de la section efficace triplement différentielle, thèse de doctorat, université de Sétif (2004).
- [44] KADA Imene, Double ionisation de la molécule d'eau par impact d'électrons, thèse de doctorat, université de Sétif (2009).
- [45] REZKALLAH Zahira, Ionisations de petites molécules par impact d'électrons : études dynamique et de structure, thèse de doctorat, université de Sétif (2010).
- [46] EL MIR Rayan , Étude théorique et expérimentale de l'ionisation simple et double de molécules par impact d'électrons, thèse de doctorat, université de Lorraine (2015).
- [47] NEHAOUA Samra. Ionisation d'atomes et de molécules par impact d'électrons : contribution de l'orthogonalisation et des effets de distorsion, thèse de doctorat, université de Sétif (2016).
- [48] Chinoune Mehdi . Ionisation de molécules par impact de particules chargées : Étude des mécanismes réactionnels, thèse de doctorat, université de Sétif (2017).
- [49] KHATIR Tarek . Ionisation de molécules par impact d'électrons : effets post collisionnels et de distorsion, thèse de doctorat, université de Sétif (2021).