

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ FERHAT ABBAS – SETIF1  
FACULTÉ DES SCIENCES  
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

## THÈSE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

**DOCTORAT 3<sup>ème</sup> cycle**

**En : Physique**

**Spécialité : Physique Théorique**

*Par : Omar ZAIDI*

## THÈME

**Description des effets post-collisionnels dans les réactions  
d'ionisation d'atomes par impact d'électrons et de positrons**

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

<b>M. Kamal BENCHEIKH</b>	Prof. à l'UFA Sétif-1	Président
<b>Mme. Imene KADA</b>	M.C.A. à l'UFA Sétif-1	Examinatrice
<b>Mme. Saida MOKRANI</b>	M.C.A. à l'UMM Tizi Ouzou	Examinatrice
<b>M. Yacine BOUGUERRA</b>	M.C.A. à l'UFA Sétif-1	Examinateur
<b>M. Abdelaziz MANSOURI</b>	Prof. à l'UFA Sétif-1	Directeur de thèse
<b>M. Salim HOUAMER</b>	Prof. à l'UFA Sétif-1	Membre invité

# Remerciements

La formation doctorale dont j'ai bénéficié pour la réalisation de cette thèse s'est déroulée au sein du 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 présenter dans cette thèse ont été menés sous la direction de M. Abdelaziz MANSOURI, Professeur à l'Université Ferhat Abbas Sétif 1.

Je tiens à exprimer mes plus sincères remerciements à M. Abdelaziz MANSOURI, mon directeur de thèse, qui m'a proposé ce sujet passionnant et m'a accompagné avec une grande bienveillance tout au long de ces années de recherche. Je lui suis reconnaissant pour la confiance qu'il m'a accordée, pour la liberté qu'il m'a laissée dans mes recherches, et pour ses conseils précieux lors de nos nombreuses discussions scientifiques. Son professionnalisme, sa gentillesse et sa disponibilité ont été pour moi une source d'inspiration.

Je tiens également à exprimer ma profonde gratitude à M. Salim HOUAMER, Professeur à l'Université Ferhat Abbas Sétif 1, pour son rôle déterminant dans l'aboutissement de cette thèse. Par ses conseils éclairés, ses encouragements infaillibles et sa disponibilité exemplaire, il a su m'accompagner à chaque étape de ce travail. Sa rigueur intellectuelle, sa générosité académique et son engagement constant ont été pour moi une source d'inspiration et ont grandement contribué à la qualité et à la richesse de cette recherche. Son soutien indéfectible m'a permis de surmonter les défis inhérents à ce projet, et je lui en suis profondément reconnaissant.

Je souhaite également exprimer ma profonde gratitude à M. Claude Dal Cappello, Professeur à l'Université de Metz, pour m'avoir accueilli au sein du laboratoire LPCT lors d'un séjour de recherche de deux mois. Son accueil chaleureux, ainsi que son aide et ses conseils précieux, ont été d'une grande importance pour l'avancement de ce travail. Merci, M. Dal Cappello, pour le temps que vous m'avez consacré et pour les échanges scientifiques enrichissants qui ont permis de renforcer la qualité de cette thèse.

Je souhaite exprimer ma profonde gratitude à M. Kamal BENCHEIKH, Professeur à l'université Ferhat Abbas Sétif 1, pour avoir accepté de présider le jury de cette thèse. Mes remerciements vont aussi à Mme Imene KADA, Maître de Conférences à l'université

Ferhat Abbas Sétif 1, et à Mme Saida MOKRANI, Maître de Conférences à l'université Mouloud Mammeri de Tizi Ouzou, pour leurs remarques et leurs critiques constructives en tant qu'examinatrices, ainsi qu'à M. Yacine BOUGUERRA, Maître de Conférences à l'université Ferhat Abbas Sétif 1, pour le temps qu'il m'a accordé pour étudier ce travail de thèse. Je suis honoré par votre présence au sein de ce jury.

Je tiens par ailleurs à adresser mes sincères remerciements à mes collègues et amis du laboratoire LPQSD, en particulier à Ayoub Tamin, Tarek Khatir, Wafa Sakhraoui, Maroua Attia, Sana Mekhalfa et Imene Khiat, pour leur soutien indéfectible et leur précieuse aide tout au long de ce parcours. Leur encouragement, leur camaraderie et leur générosité ont été essentiels à la réalisation de cette thèse et ont rendu ces années de recherche plus enrichissantes et agréables. Merci pour tous les moments partagés, pour vos conseils et pour votre soutien constant qui m'a soutenu dans les moments de doute.

Finalement, un dernier remerciement à ma chère petite sœur, Meriem Zaidi, membre du laboratoire Chimie Ingénierie Moléculaire et Nano-structures (LCIMN), pour son aide précieuse. Son engagement a été d'une grande valeur pour mon travail. Merci pour ta patience, ton enthousiasme et ta bienveillance.

## ملخص

في هذا العمل، تم دراسة كل من التأين الأحادي والمزدوج للذرات. بالنسبة للتأين الأحادي، قمنا بتحليل التأين بواسطة تأثير الإلكترونات والبوزيترونات باستخدام نموذج  $3CWZ$  لدراسة تأثيرات الشحنة على ذرة الأرجون. أما بالنسبة للتأين المزدوج، فقد تم استخدام نموذجين نظريين هما  $BBK2DW$  و  $BBK2CWZ$  تم تطبيق تقريب من الدرجة الأولى على هذه النماذج لدراسة تأثيرات التشوه والتأثيرات ما بعد التصادم على ذرات مختلفة.

**الكلمات المفتاحية:** التأين، تأثيرات الشحنة، التشوه

## Abstract

In this work, both single and double ionization of atoms have been studied. For single ionization, we investigated ionization by electron and positron impact using the  $3CWZ$  model to study charge effects on the argon atom. For double ionization, two theoretical models,  $BBK2DW$  and  $BBK2CWZ$ , were used. A first-order approximation was applied to these models on different atoms to study both distortion and post-collision effects.

**Keywords:** ionization, charge effects, distortion

## Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié à la fois l'ionisation simple et double des atomes. Pour l'ionisation simple, nous avons analysé l'ionisation par impact d'électrons et de positrons en utilisant le modèle  $3CWZ$  afin d'étudier les effets de charge sur l'atome d'argon. Concernant l'ionisation double, deux modèles théoriques ont été considérés : le  $BBK2DW$  et le  $BBK2CWZ$ . Une approximation de premier ordre a été appliquée pour ces modèles sur différents atomes dans le but d'analyser les effets de distorsion ainsi que les effets post-collisionnels.

**Mots Clée :** ionisation, effets de charge, distorsion

# Table des matières

Table des figures	i
Liste des tableaux	iv
Introduction Générale	1
Bibliographie . . . . .	6
<b>1 PRINCIPES FONDAMENTAUX DE LA SIMPLE IONISATION</b>	<b>9</b>
1.1 Introduction . . . . .	9
1.2 Description d'une réaction (e,2e) . . . . .	10
1.3 Notion de section efficace . . . . .	11
1.4 Section efficace différentielle . . . . .	12
1.4.1 Section efficace simplement différentielle (SDCS) . . . . .	13
1.4.2 Section efficace doublement différentielle (DDCS) . . . . .	13
1.4.3 Section efficace triplement différentielle (TDCS) . . . . .	14
1.5 Développement de Born . . . . .	14
1.6 Cinématiques de la réaction (e, 2e) . . . . .	15
1.6.1 Géométrie asymétrique coplanaire . . . . .	15
1.6.2 Géométrie symétrique . . . . .	17
1.7 Notion de corrélation électronique . . . . .	19
1.8 Type de corrélation . . . . .	20
1.8.1 Corrélation structurale . . . . .	20
1.8.2 Corrélation dynamique . . . . .	21
1.9 Détermination de la matrice de transition . . . . .	21
1.9.1 Description de l'état initial . . . . .	22
1.9.2 Description de l'état final . . . . .	23
1.10 Modèles Théoriques . . . . .	24
1.10.1 L'approximation de Born aux ondes planes (PWBA) . . . . .	24
1.10.2 L'approximation de Born aux ondes coulombiennes (CWBA) . . . . .	25

1.10.3	Modèle CCC	26
1.10.4	Modèle BSR	26
1.10.5	L'approximation de Born aux ondes distordues (DWBA)	26
1.10.6	Modèle de Brauner, Briggs et Klar (BBK)	27
1.11	Conclusion	28
	Bibliographie	29
<b>2</b>	<b>THÉORIE DE LA DOUBLE IONISATION</b>	<b>30</b>
2.1	Introduction	30
2.2	Les expériences $(e,3e)$	30
2.3	Comparaison entre la simple ionisation et la double ionisation	31
2.4	Description de la réaction $(e,3e)$	32
2.5	Section efficace quintuplement différentielle	33
2.6	Section efficace quadruplement différentielle	34
2.7	Mécanismes de la double ionisation	34
2.7.1	<i>Shake-Off (SO)</i>	35
2.7.2	<i>Two step 1 (TS1)</i>	35
2.7.3	<i>Two step 2 (TS2)</i>	36
2.8	Complexité des modèles théoriques de la double ionisation	37
2.9	Détermination des fonctions d'onde du système collisionnel	38
2.9.1	Exemple sur l'atome d'Hélium	39
2.9.2	Atome de type $np^6$	40
2.10	Conclusion	41
	Bibliographie	42
<b>3</b>	<b>PROCESSUS DE SIMPLE IONISATION DE L'Argon PAR IMPACT D'ÉLECTRONS ET POSITRONS</b>	<b>44</b>
3.1	Motivations et but du travail	44
3.2	Historique du modèle $3CWZ$	45
3.3	Application du modèle $3CWZ$ pour l'Argon	46
3.3.1	Description de la cible	46
3.4	Approximation de la charge variable	46
3.5	Description théorique du $3CWZ$	48
3.6	Résultats et discussion	51
3.6.1	Résultats dans le cas de positrons	52
3.6.2	Résultats dans le cas d'électrons	55

3.6.3	Étude comparative de l'ionisation par impact d'électrons et de positrons . . . . .	57
3.6.4	Étude de l'effet de la charge du projectile sur le processus d'ionisation	58
3.6.5	Analyse comparative avec d'autres modèles théoriques . . . . .	60
3.7	Conclusion . . . . .	62
	Bibliographie . . . . .	63
<b>4</b>	<b>ÉTUDE DES EFFETS POST-COLLISIONNELS ET LES EFFETS DE DISTORSION DANS LES RÉACTIONS (<math>e, 3e</math>)</b>	<b>64</b>
4.1	Motivation et but du travail . . . . .	64
4.2	Description des cibles . . . . .	65
4.2.1	Atome d'Argon . . . . .	65
4.2.2	Atome de Krypton . . . . .	65
4.3	Description théorique du processus de double ionisation . . . . .	67
4.4	Notion et application du modèle $BBK2DW$ . . . . .	68
4.5	Modèle $BBK2CWZ$ . . . . .	71
4.6	Résultats et discussion . . . . .	72
4.6.1	Résultats du modèle $BBK2DW$ . . . . .	72
4.6.2	Comparaison du modèle $BBK2DW$ avec $BBK2CW$ et $BBK2CWZ$	77
4.6.3	Application du $BBK2CWZ$ pour l'Argon . . . . .	78
4.7	Conclusion . . . . .	81
	Bibliographie . . . . .	83
	<b>Conclusion Générale</b>	<b>84</b>
<b>A</b>	<b>Calcul de l'amplitude de diffusion pour le modèle de BBK dans le cas de la simple et double ionisation .</b>	<b>1</b>
A.1	Cas de la simple ionisation . . . . .	1
A.2	Cas de la double ionisation . . . . .	3
<b>B</b>	<b>DOUBLE IONISATION D'UN ATOME DE TYPE <math>np^6</math> : section efficace différentielle.</b>	<b>6</b>
B.1	Les états d'un atome $np^6$ . . . . .	6
B.2	Section Efficace . . . . .	10

# Table des figures

1.1	Expérience de diffusion . . . . .	12
1.2	Schéma simplifié du développement de Born . . . . .	15
1.3	Schéma de Géométrie Asymétrique Coplanaire . . . . .	17
1.4	Schéma de Géométrie Symétrique Coplanaire . . . . .	18
1.5	Schéma de géométrie symétrique non-coplanaire . . . . .	19
2.1	Schémas de la réaction du double ionisation ( $e, 3e$ ) . . . . .	33
2.2	Illustration du processus « <i>Shake-Off</i> » ( <i>SO</i> ). . . . .	35
2.3	Illustration du processus « <i>Two-Step 1</i> » ( <i>TS1</i> ). . . . .	36
2.4	Illustration du processus « <i>Two-Step 2</i> » ( <i>TS2</i> ). . . . .	37
3.1	Schéma du processus d'ionisation en géométrie asymétrique coplanaire pour le modèle <i>3CWZ</i> . Le projectile (électron/positron) avec un moment initial $\vec{k}_i$ est diffusé avec un moment $\vec{k}_1$ selon un angle $\theta_1$ , en coïncidence avec un électron ayant un moment $\vec{k}_2$ sous un angle $\theta_2$ . Les positions de l'électron (ou positron) diffusé et de l'électron éjecté sont respectivement $\vec{r}_0$ et $\vec{r}_1$ . . .	49
3.2	Charge variable $Z(r)$ ressentie par l'électron incident fig(a) et les électrons sortants fig(b) lors du processus d'ionisation de l'orbitale $3p$ de l'Argon. . .	50
3.3	TDCS pour l'ionisation de l'Argon $3p$ par positron en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV. Le projectile est diffusé à une angle $\theta_1 = 2^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté ayant des énergies comprises entre 2,6 et 19 eV. Les résultats théoriques absolus sont représentés par la ligne noire pleine ( <i>3CWZ</i> ). Les données expérimentales normalisées de manière croisée (voir texte) sont représentées par des carrés noirs, extraites de [1]. Les lignes verticales en pointillé indiquent la direction du moment de transfert $\vec{K}$ et sa direction opposée $-\vec{K}$ . . . . .	52
3.4	La même que figure (3.3) mais avec $\theta_1 = 3^\circ$ . . . . .	53
3.5	La même que figure (3.3) mais avec $\theta_1 = 4^\circ$ . . . . .	53

3.6	TDCS pour l'ionisation de l'Argon $3p$ par électron en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV. Le projectile est diffusé à un angle $\theta_1 = 2^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté ayant des énergies comprises entre 2,6 et 19 eV. Les résultats théoriques absolus sont représentés par la ligne noire pleine ( $3CWZ$ ). Les données expérimentales normalisées de manière croisée (voir texte) sont représentées par des carrés noirs, extraites de [1]. Les lignes verticales en pointillé indiquent la direction du moment de transfert $\vec{K}$ et sa direction opposée $-\vec{K}$ . . . . .	55
3.7	La même que figure (3.6) mais avec $\theta_1 = 3^\circ$ . . . . .	56
3.8	La même que figure (3.6) mais avec $\theta_1 = 4^\circ$ . . . . .	56
3.9	TDCS pour l'ionisation de l'Argon $3p$ par positron (ligne noire pleine) et par électron (ligne rouge en pointillés) en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV. Le projectile est diffusé à des angles $\theta_1 = 2^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté ayant une énergie $E_2 = 2.6eV$ (panneau a) et $E_2 = 19eV$ (panneau b). Les résultats théoriques ont été normalisés à l'unité dans la région binaire pour un meilleur ajustement visuel. . . . .	59
3.10	Résultats théoriques de TDCS pour l'ionisation de l'Argon $3p$ par positron (panneau a) et par électron (panneau b), en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV et un angle de diffusion $\theta_1 = 3^\circ$ en coïncidence avec l'électron éjecté ayant une énergie $E_2$ . Les données expérimentales sont représentées par des cercles noirs pleins (pour $E_2 = 4.4eV$ ) et des cercles rouges ouverts (pour $E_2 = 6.4eV$ ) extraites de [1]. Les résultats théoriques, correspondant à $E_2 = 5.4eV$ sont : $3CWZ$ (ligne rouge pleine), $CDW-EIS$ (ligne verte en pointillés courts) [14], $DWBA$ (ligne bleue en pointillés) [13] et $DWBA$ (ligne pourpre en pointillés et pointillés) [15]. La théorie et les expériences ont été normalisées à l'unité dans la région binaire pour un meilleur ajustement visuel. . . . .	61
4.1	processus de la double ionisation . . . . .	67
4.2	Schémas pour processus de double ionisation pour le modèle $BBK2DW$ . . . . .	69
4.3	Charge variable vue par les éjectés . . . . .	71
4.4	Schémas pour processus de double ionisation pour le modèle $BBK2CWZ$ . . . . .	72
4.5	Section efficace différentielle (FDCS) de Krypton $4p$ avec une énergie de diffusion $E_s = 5500eV$ et $\theta_s = 1^\circ$ en fonction de l'angle d'éjection de l'électron $\theta_1$ , pour des angles d'éjection de l'électron 2 fixes de $\theta_2 = 104^\circ$ et $\theta_2 = 254^\circ$ . Les graphiques comparent le modèle théorique $BBK2DW$ (ligne rouge pleine) aux données expérimentales (points noirs avec barres d'erreur). . . . .	74

4.6	Section efficace différentielle (FDCS) de Krypton $4p$ avec une énergie de diffusion $E_s = 5500eV$ et $\theta_s = 1^\circ$ en fonction de l'angle d'éjection de l'électron $\theta_1$ , pour des angles d'éjection de l'électron 2 fixes de $\theta_2 = 104^\circ$ et $\theta_2 = 254^\circ$ . Les graphiques comparent les modèles théoriques ( $BBK2DW$ , $BBK2CW$ et $BBK2CWZ$ ) aux données expérimentales (EXP) pour diverses énergies d'éjection pour électron 1. Les modèles présentent des prédictions différentes pour les distributions angulaires : $BBK2DW$ (ligne rouge pleine), $BBK2CW$ (ligne verte en pointillés) et $BBK2CWZ$ (ligne bleue en pointillés et pointillés) sont comparés aux mesures expérimentales (points noirs avec barres d'erreur). . . . .	77
4.7	Sections efficaces différentielles (FDCS) de l'Argon $3p$ pour différents angles d'éjection dans la réaction $(e,3e)$ . Les figures (a) à (g) montrent la comparaison entre les données expérimentales (DATA) et les prédictions des modèles théoriques $BBK2CWZ$ (en noir) et $2CWZ$ (en rouge) . . . . .	80

# Liste des tableaux

3.1	Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation des orbitales atomique de l'atome d'Argon . . . . .	46
4.1	Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation d'orbitale atomique $S$ de Krypton . . . . .	66
4.2	Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation d'orbitale atomique $P$ . . . . .	66
4.3	Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation d'orbitale atomique $D$ . . . . .	66
4.4	Les angles des pics observés pour (figure 4.5) . . . . .	75
4.5	Les angles des pics observés pour (figure 4.7) . . . . .	81

# Introduction Générale

L'étude des phénomènes de collision et des processus d'ionisation remonte à la fin du XIXe siècle, lorsque les premières théories de la mécanique classique ont commencé à être appliquées aux interactions entre particules. L'intérêt pour ces phénomènes a été fortement motivé par les travaux pionniers de scientifiques comme Ernest Rutherford, qui a mené, au début du XXe siècle, ses fameuses expériences de diffusion de particules alpha. Ces expériences ont non seulement révélé la structure du noyau atomique, mais ont aussi permis de comprendre les mécanismes de collision entre particules à haute énergie, ouvrant ainsi la voie à l'étude approfondie des processus d'ionisation.

L'ionisation est un phénomène par lequel un électron est arraché à un atome ou à une molécule, ce qui conduit à la formation d'un ion. Ce processus a joué un rôle clé dans le développement de la physique atomique et de la physique des plasmas, où l'étude des collisions entre particules chargées, comme les électrons et les ions, est cruciale. Dans les premières décennies du XXe siècle, des modèles théoriques ont été développés pour décrire les interactions entre particules, en particulier dans le cadre de la naissance de la mécanique quantique. Des figures emblématiques comme Niels Bohr, Arnold Sommerfeld, et Werner Heisenberg ont contribué à la formulation de théories plus précises pour comprendre ces collisions, notamment dans les cas de l'ionisation par impact de particules chargées.

L'ionisation des atomes et des molécules par des particules chargées est un processus fondamental intervenant dans de nombreux domaines, tels que la physique des plasmas et les systèmes biologiques vivants [1,2]. Lors de l'ionisation simple, ce processus de collision conduit à la production de deux particules non liées évoluant dans le champ de l'ion résiduel. De nombreuses études théoriques et expérimentales se sont concentrées sur l'ionisation par divers projectiles, y compris les électrons [3,4], les protons [5,6] et les ions [7,8]. Les techniques de mesure en coïncidence constituent un outil essentiel pour améliorer et augmenter la précision des études expérimentales dans le domaine. Cette technique assure

que les particules détectées proviennent d'un seul événement d'interaction. Elle a contribué au développement progressif d'instruments expérimentaux sophistiqués pour analyser avec précision le canal de sortie [9].

Dans notre travail, nous nous intéressons dans un premier temps à l'ionisation simple par impact d'électron et de positron. Ce processus peut être considéré comme une collision entre la matière (l'électron) et l'antimatière (le positron). L'une des grandeurs expérimentales clés est la section efficace triplement différentielle (TDCS), qui permet de tirer le maximum d'information sur le processus de collision. La réaction d'ionisation par impact d'électron, connue sous le nom  $(e,2e)$  fait l'objet de nombreuses études, car elle est couramment utilisée dans divers domaines, tels que les dommages radiatifs dans les systèmes biomoléculaires [10, 11]. En revanche, l'ionisation par impact de positrons est relativement récente et a suscité un intérêt croissant, en particulier pour ses applications dans la caractérisation des matériaux [12], les phénomènes atomiques fondamentaux [13], et la médecine, notamment à travers la tomographie par émission de positrons (TEP) [14]. Une comparaison entre les électrons et les positrons comme projectiles permet de mieux comprendre comment la charge du projectile influence le processus d'ionisation. L'ionisation par impact d'électron est généralement décrite comme un mécanisme de "forte ionisation" et a fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales [15]. Les premières expériences d'ionisation par impact de positrons ont été réalisées par Roy et Étienne [16], ils ont utilisé une chambre de Wilson pour étudier l'ionisation de l'azote et de l'argon. Par la suite, de nombreuses études se sont concentrées sur l'hélium [17], puis sur une plus large gamme de cibles [18–20], résultat précieux et complémentaires [21, 22].

Au niveau théorique, des recherches approfondies ont été menées sur l'ionisation par impact d'électrons au fil du temps, et de nombreux modèles théoriques ont été développés dans le but de parvenir à une compréhension complète de la réaction d'ionisation, incluant des traitements perturbatifs et non perturbatifs. Les modèles non perturbatifs représentent des méthodes numériques intensives, développées initialement pour les atomes d'hydrogène et d'hélium [23], puis étendues à des cibles atomiques plus complexes [24]. Le modèle de couplage étroit convergent (CCC) a été développé en réponse aux écarts observés entre la théorie et l'expérience, qui restaient inexplicables. Ce modèle est reconnu pour reproduire des résultats de référence pour les atomes légers [25] et les systèmes atomiques quasi mono-électroniques [26]. La théorie a depuis fait des progrès impressionnants dans la description du processus d'ionisation en utilisant divers modèles non perturbatifs tels que les modèles ECS [27], TDCC [28] et BSR [29], qui se sont avérés capables de prédire avec précision les résultats expérimentaux. Par ailleurs, de nombreuses approches perturbatives

développées se sont avérées performantes, car une bonne concordance entre la théorie et l'expérience a été obtenue. Parmi ces approches nous citons les modèles DWBA [30], DWB1-RM [31], DWB2-RM [32] et 3DW [33]. Grâce à la disponibilité de nouvelles études expérimentales, un intérêt théorique croissant pour l'étude de l'ionisation par impact de positrons a émergé récemment. De nombreux modèles théoriques ont ainsi été développés pour les atomes et les molécules dans le cadre de différentes approches théoriques [34]. Ce nouveau domaine de recherche, qui se concentre sur les effets de la charge du projectile, suscite actuellement beaucoup d'attention, comme cela a été montré très récemment pour l'argon  $3p$  au niveau de la section efficace simplement différentielle [35]

Le second volet de notre travail, nous calculons les sections efficaces pour les réactions de double ionisation sur les gaz rares. La description des corrélations dans la voie de sortie pour ces réactions devient plus complexe. En outre les calculs théoriques sont limités par les résultats expérimentaux. Les expériences associées à ces réactions deviennent plus difficiles à réaliser, et la section efficace pour la double ionisation est beaucoup plus faible que celle de l'ionisation simple.

D'une autre part, pour éviter la complexité des calculs, nous nous limitons aux calculs des sections efficaces quintuplement différentielles pour des énergies du projectile assez élevées (3 keV - 5 keV) afin de pouvoir négliger les effets d'échange entre l'électron diffusé et éviter d'introduire le second terme de l'approximation Born. Afin de comparer nos résultats nous nous limitons aux conditions des mesures expérimentales existantes sur les réactions  $(e,3e)$  des gaz rares [36–38].

D'un point de vue théorique, la double ionisation de l'hélium est la réaction la plus étudiée, car elle permet une modélisation plus accessible avec des calculs moins complexes. Dans les modèles décrivant cette réaction, l'état final est constitué de trois électrons (éjectés et diffusé) évoluant dans le champ de l'ion résiduel. Le premier modèle notable est le modèle BBK [39], qui décrit l'interaction entre deux électrons (dans la voie de sortie) à l'aide d'une fonction onde coulombienne. Initialement appliqué à la simple ionisation, il a ensuite été étendu à la double ionisation de l'hélium [40]. Ce modèle offre un accord relativement bon avec les résultats expérimentaux, y compris pour des électrons éjectés de basse énergie (à partir de 10 eV). Toutefois, cet accord se dégrade significativement pour des électrons éjectés à 4 eV.

Des modèles plus sophistiqués, tels que le modèle CCC, la matrice J et la Fonction Sturmienne Généralisée [41–43]) améliorent l'accord avec l'expérience, bien qu'aucun ne parvienne à une correspondance parfaite. De plus, aucun de ces modèles avancés n'a encore été appliqué à la double ionisation des gaz rares. Jusqu'à présent, seul le modèle BBK a

été utilisé pour étudier la double ionisation du néon [44] et de l'argon [45], mais avec un accord limité, même pour des électrons éjectés ayant une énergie supérieure ou égale à 10 eV.

Pour améliorer l'accord des calculs théoriques avec les données expérimentales, un modèle modifié, nommé BBK2DW, a été récemment développé. Dans ce modèle, les électrons éjectés sont décrits par des ondes distordues, afin de mieux prendre en compte l'influence des potentiels sur leurs trajectoires. Ce choix est particulièrement important dans le cas de la double ionisation, où l'interaction complexe entre les électrons éjectés et l'ion résiduel est mieux représentée (par une onde distordue) et non par une simple onde coulombienne. L'utilisation du modèle BBK2DW a permis d'obtenir un accord amélioré avec les mesures expérimentales, en particulier pour les cibles comme le Krypton, où les modèles précédents montraient des écarts significatifs [45].

Cette avancée souligne l'importance de prendre en compte les effets de distorsion dans la description des électrons éjectés pour mieux décrire la dynamique de la double ionisation. En intégrant des ondes distordues dans le formalisme BBK, le modèle BBK2DW se montre prometteur pour une meilleure représentation des processus de double ionisation dans les gaz rares, ce qui ouvre de nouvelles perspectives pour l'étude des effets de distorsion dans systèmes atomiques.

Ce travail se compose de quatre chapitres. Dans le premier, nous abordons la simple ionisation, en exposant les principes fondamentaux du processus d'ionisation ainsi que les méthodes de calcul de la section efficace. Ce chapitre présente également différents modèles théoriques employés pour décrire ce phénomène, en précisant leurs hypothèses de base et leurs domaines d'application.

Le second chapitre est consacré à la double ionisation. Nous y décrivons les bases théoriques de ce processus, en mettant en avant les mécanismes spécifiques à la double ionisation. Les différences entre la simple et la double ionisation y sont discutées, tant du point de vue théorique qu'expérimental, afin d'illustrer les défis supplémentaires que présente la double ionisation.

Dans le troisième chapitre, nous appliquons le modèle 3CWZ pour étudier les processus d'ionisation par impact d'électrons et de positrons. Une attention particulière est accordée à l'effet de la charge du projectile sur le processus d'ionisation, permettant ainsi d'analyser son influence sur les résultats obtenus.

Enfin, le dernier chapitre est consacré à l'analyse des résultats ainsi qu'à la discussion

sur les effets de distorsion et les effets post-collisionnels dans le cas de la double ionisation de l'argon et du krypton. Nous évaluons la validité des approximations utilisées pour les ondes distordues en comparant les résultats théoriques aux données expérimentales dans différentes conditions cinématiques.

## Bibliographie

- [1] A. E. Davletov, F. Kurbanov, and Ye .S. Mukhametkarimov. *Phys. Rev. E*, **101** :15, 2020.
- [2] L. Sanche. *Eur. Phys. J. D*, **35** :367–390, 2005.
- [3] S. Nehaoua, S. Houamer, C. Dal Cappello, M. Chinoune, A. Galstyan, and A. C.Roy. *Eur. Phys. J. D*, **69** :86, 2013.
- [4] M. Chinoune, S. Houamer, C. Dal Cappello, , and A. Galstyan. *J. Phys. B*, **49** :205201, 2016.
- [5] M. S. Schöffler, O. Chuluunbaatar, S. Houamer, A. Galstyan, J. N. Titze, L. Ph. H. Schmidt, T. Jahnke, H. Schmidt-Böcking, R. Dörner, Yu. V. Popov, A. A. Gusev, and C. Dal Cappello. *Phys. Rev. A*, **88** :042710, 2013.
- [6] S. Houamer, Y. V. Popov, and C. Dal Cappello. *Phys. Lett. A*, **373** :4447–4452, 2009.
- [7] D. Ohsawa, Y. Sato, Y. Okada, V. P. Shevelko, and F. Soga. *Phys. Rev. A*, **72** :062710, 2005.
- [8] C. Champion, O. Boudrioua, C. Dal Cappello, Y. Sato, and D. Ohsawa. *Phys. Rev. A*, **75** :032724, 2007.
- [9] M. J. Ford, J. P. Doering, M. A. Coplan, J. W. Cooper, and J. H. Moore. *Phys. Rev. A*, **51** :418–423, 1995.
- [10] F. Martin, P. D. Burrow, Z. Cai, P. Cloutier, D. Hinting, and L. Sanche. *Phys. Rev. Lett.*, **93** :068101, 2004.
- [11] C. Dal Cappello, Z. Rezkallah, S. Houamer, I. Charpentier, A. C. Roy, P. A. Hervieux, and F. Ruiz-Lopez. *Eur. Phys. J. D*, **67** :117, 2013.
- [12] P. J. Schultz and K. G. Lynn. *Rev. Mod. Phys.*, **60** :701–779, 1988.
- [13] H. H. Andersen, L. E. Rehn, and M. H. Holzscheiter. *Nucl. Inst. Methods B*, **192** :21–31, 2002.
- [14] V. Sharma, G. D. Luker, and D. Piwnica-Worms. *J. Magn. Reson. Imaging*, **16** :336–51, 2002.
- [15] D. H. Madison and O. Al-Hagan. *J. At. Mol. Opt. Phys.*, **2010** :081002, 2010.
- [16] R. R. Roy and M. Etienne. *Nature*, **172** :953, 1953.
- [17] D. Fromme, G. Kruse, W. Raith, and G. Sinapius. *Phys. Rev. Lett.*, **57** :3031–3034, 1986.
- [18] G. Laricchia, P. Van Reeth, M. Szluinska, and J. Moxom. *J. Phys. B*, **35** :2525, 2002.

- [19] A. Kover, K. Paludan, and G. Laricchia. *J. Phys. B*, **34** :L219, 2001.
- [20] J. Moxom, D. M. Schrader, G. Laricchia, J. Xu, and L. D. Hulett. *Phys. Rev. A*, **62** :052708, 2000.
- [21] J. Gavin, O. G. de Lucio, and R. D. DuBois. *Phys. Rev. A*, **95** :062703, 2017.
- [22] R. D. DuBois, J. Gavin, and O. G. de Lucio. *J. Phys. Conf. Series*, **488** :7, 2014.
- [23] M. Dürr, C. Dimopoulou, A. Dorn, B. Najjari, I. Bray, D. V. Fursa, Z. Chen, D. H. Madison, K. Bartschat, and J. Ullrich. *J. Phys. B*, **39** :4097, 2006.
- [24] S. D. Loch, C. J. Favreau, and M. S. Pindzola. *J. Phys. B*, **52** :055205, 2019.
- [25] V. Karaganov, I. Bray, P. J. O. Teubner, and P. Farrell. *Phys. Rev. A*, **54** :R9–R12, 1996.
- [26] K. A. Stockman, V. Karaganov, I. Bray, and P. J. O. Teubner. *J. Phys. B*, **34** :1105, 2001.
- [27] T. N. Rescigno, M. Baertschy, W. A. Isaacs, and C. W. McCurdy. *Science*, **286** :2474–2479, 1999.
- [28] J. Colgan and M. S. Pindzola. *Phys. Rev. A*, **74** :012713, 2006.
- [29] O. Zatsarinny and K. Bartschat. *J. Phys. B*, **46** :112001, 2013.
- [30] A. Kheifets, A. Naja, E. M. Staicu Casagrande, and A. Lahmam Bennani. *J. Phys. B*, **41** :209801, 2008.
- [31] K. Bartschat and P. G. Burke. *J. Phys. B*, **21** :2969, 1988.
- [32] R. H. G. Reid, K. Bartschat, and A. Raeker. *J. Phys. B*, **31** :563, 1998.
- [33] X. Ren, S. Amami, O. Zatsarinny, T. Pfluger, M. Weyland, W. Y. Baek, H. Rabus, K. Bartschat, D. H. Madison, and A. Dorn. *Phys. Rev. A*, **91** :032707, 2015.
- [34] R. I. Campeanu. *Nucl. Instr. Method B*, **267** :239–243, 2009.
- [35] K. Tokesi and R. D. Dubois. *J. Phys. B*, **57** :035202, 2024.
- [36] A. Lahmam-Bennani, C. Dupré, and A. Duguet. *Phys. Rev. Lett.*, **63** :1582–1585, 1989.
- [37] C. D. Schröter, B. El Marji, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, M. Lecas, and L. Spielberger. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **31** :131, 1998.
- [38] B. El Marji, C. D. Schröter, A. Duguet, A. Lahmam-Bennani, M. Lecas, and L. Spielberger. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **30** :3677, 1997.
- [39] M. Brauner, J. S. Briggs, and H. Klar. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **22** :2265, 1989.

- [40] B. Joulakian, C. Dal Cappello, and M. Brauner. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **25** :2863, 1992.
- [41] A. Kheifets, I. Bray, J. Berakdar, and C. Dal Cappello. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **35** :L15, 2002.
- [42] M. Silenou Mengoue, M. G. Kwato Njock, B. Piraux, Yu. V. Popov, and S. A. Zaitsev. *Phys. Rev. A*, **83** :013420, 2011.
- [43] M. J. Ambrosio, F. D. Colavecchia, G. Gasaneo, D. M. Mitnik, and L. U. Ancarani. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **48** :5, 2015.
- [44] I. Kada, C. Dal Cappello, and A. Mansouri. *Eur. Phys. J. D*, **71** :41, 2017.
- [45] A. Herbadji, I. Kada, A. Mansouri, and C. Dal Cappello. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **54** :21, 2021.

# Chapitre 1

## PRINCIPES FONDAMENTAUX DE LA SIMPLE IONISATION

### 1.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous introduirons les outils théoriques fondamentaux pour l'étude et l'interprétation des résultats d'expériences de collisions ionisantes par impact de particules chargées, ces particules chargées émises sont détectées en coïncidence.

Nous commencerons par définir la section efficace multiplement différentielle, qui décrit les processus collisionnels et est directement liée à la probabilité de transition entre l'état initial et l'état final du système. Ensuite, nous détaillerons les méthodes utilisées pour calculer la matrice de transition, en nous appuyant sur le développement de Born et diverses approches théoriques spécifiques à l'ionisation par impact de particules chargées. Nous nous intéresserons en particulier au processus de simple ionisation par impact d'électrons.

Il est courant que les thèses dans le domaine des collisions débutent par une introduction à la théorie de la diffusion, abordant les concepts de diffusion élastique et inélastique, les sections efficaces, ainsi que les méthodes de résolution des équations de Schrödinger pour des systèmes à  $N$  corps. Cette approche est largement documentée et disponible dans la littérature [1–3], tant dans les ouvrages classiques que dans les publications récentes. Pour cette raison, nous avons choisi de nous concentrer sur des méthodes de calcul plus spécifiques et adaptées à l'étude des processus d'ionisation par impact d'électrons, offrant ainsi une analyse plus approfondie des mécanismes d'interaction complexes qui régissent ces phénomènes.

**REMARQUE :** Dans la suite de cette thèse, toutes les expressions mathématiques seront données en unités atomiques :

$$a_0 = m_e = \hbar = e = 1$$

Avec :

$a_0 = 0.53 \times 10^{-10}$ m	Rayon de Bohr
$m_e = 9.1 \times 10^{-31}$ kg	La masse d'un électron
$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ; $h = 6.62 \times 10^{-34}$ J/s	$h$ : la constante de Planck
$e = -1.6 \times 10^{-19}$ C	La charge d'un électron

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

Ce type de réaction implique l'arrachement, par un électron projectile d'impulsion  $\vec{k}_i$  et d'énergie  $E_i$ , d'un électron d'impulsion  $\vec{k}_1$  et d'énergie  $E_1$  d'une cible  $C$  (qu'elle soit atomique ou moléculaire), conduisant à la formation d'un ion résiduel  $C^+$ , conformément à l'équation suivante :

$$e_i(\vec{k}_i, E_i) + C \rightarrow C^+ + e_1(\vec{k}_1, E_1) + e_s(\vec{k}_s, E_s). \quad (1.1)$$

Étant l'électron diffusé d'impulsion  $\vec{k}_s$  et d'énergie  $E_s$ . Ce processus de réarrangement obéit strictement aux lois de conservation. D'un point de vue quantique, les deux électrons émergeant après la collision sont indiscernables, rendant les termes "diffusé" et "éjecté" équivalents. Cependant, lorsque l'un des électrons est rapide et l'autre lent, le premier est généralement qualifié de "diffusé", tandis que le second est dit "éjecté".

Étant donné que le projectile est beaucoup plus léger que la cible, le transfert d'énergie cinétique de l'électron à l'ion peut être négligé. Les équations de conservation de l'énergie totale et de la quantité de mouvement sont ainsi données par :

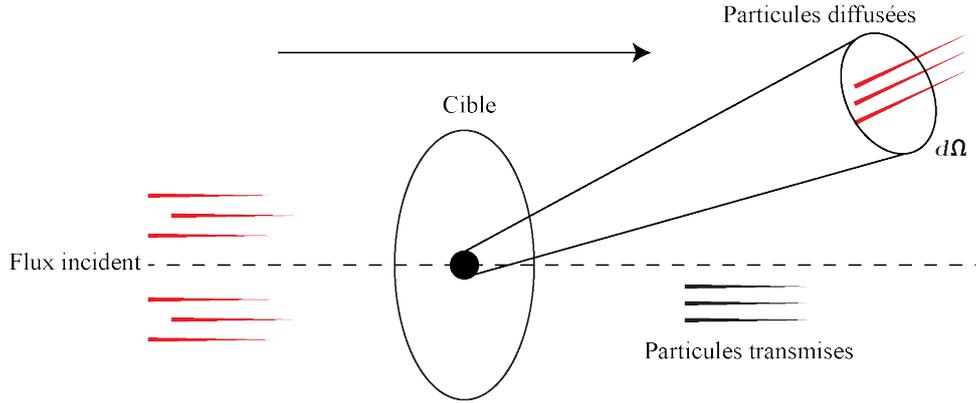
$$\begin{aligned} E_i &= E_1 + E_s + E_{ion}, \\ \vec{k}_i &= \vec{k}_1 + \vec{k}_s + \vec{q}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

Où  $E_{ion}$  représente l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale de la cible avec  $E_{ion} = E_{C^+} - E_C$  et  $\vec{q}$  est le moment de recul. Nous définissons également le moment de transfert  $\vec{K}$  qui représente la différence des quantités du mouvement de l'électron incident et diffusé :  $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$

## 1.3 Notion de section efficace

Dans une expérience de collision classique, on considère un flux  $F$  de particules incidentes homogènes, toutes de même énergie, entrant en interaction avec des particules cibles identiques  $N_i$  dans un état gazeux. Du point de vue pratique, on fait l'hypothèse que la densité des particules cibles et le flux de particules incidentes sont suffisamment faibles pour garantir qu'une seule collision se produise par particule incidente. Cette condition permet d'éviter la prise en compte des phénomènes complexes liés aux collisions multiples, qui compliqueraient considérablement la modélisation et l'interprétation des résultats. À une distance suffisante de la région d'interaction, un détecteur est placé pour mesurer le nombre  $N$  de particules diffusées par unité de temps dans un élément d'angle solide. Ces mesures sont essentielles pour caractériser l'efficacité de la collision, et dans le cadre de l'analyse expérimentale, les résultats sont interprétés à travers la mesure d'une grandeur clé appelée section efficace. La section efficace représente la probabilité qu'une collision se produise entre les particules incidentes et les cibles. Elle est exprimée en fonction de la géométrie de l'interaction, des propriétés des particules impliquées, et des conditions expérimentales :

- **La géométrie de l'interaction** : Cela inclut la configuration spatiale des particules avant et après la collision. Par exemple, l'angle sous lequel les particules diffusées sont observées peut influencer sur la section efficace, car certaines directions de diffusion sont plus probables que d'autres.
- **Les propriétés des particules impliquées** : La section efficace dépend des caractéristiques des particules qui entrent en collision, telles que leur masse, leur charge, leur taille, et leur énergie. Par exemple, une particule plus massive ou plus énergétique peut interagir différemment qu'une particule plus légère ou moins énergétique, ce qui peut modifier la probabilité de collision.
- **Les conditions expérimentales** : Des conditions spécifiques peuvent également inclure l'état d'excitation des particules ou la présence de champs externes (électriques ou magnétiques), qui affectent le comportement des particules lors de la collision.



**Figure 1.1:** Expérience de diffusion

La section efficace joue un rôle central en physique des collisions, car elle permet de quantifier l'interaction entre les particules, que ce soit pour des collisions élastiques, inélastiques ou des processus plus complexes tels que l'ionisation ou la capture d'électrons. Elle est donnée par [3] :

$$\sigma = \frac{N}{N_i F} \quad (1.3)$$

Elle est exprimée en mètres carrés ( $\text{m}^2$ ) et est directement liée à la probabilité de transition  $P_{if}$  entre l'état initial et l'état final par unité de temps, selon la relation suivante [2] :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{if}}{F} \quad (1.4)$$

La probabilité de transition est liée à l'élément de matrice de transition à travers la relation suivante :

$$P_{if} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \delta(E_i - E_f) \delta(k_i - k_f) \left| \langle \psi_f | \hat{T} | \psi_i \rangle \right|^2 F \quad (1.5)$$

Cette équation, développée plus en détail dans les sections ultérieures, formalise la connexion entre l'état initial et l'état final du système via l'élément de matrice  $\langle \psi_f | \hat{T} | \psi_i \rangle$  (que l'on définira plus tard) tout en tenant compte des conditions de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Pour plus de détails, voir [3] et [4].

## 1.4 Section efficace différentielle

Dans le cadre de la simple ionisation, le système atteint un état final composé d'un électron éjecté, d'un électron diffusé, et d'un ion résiduel. Pour calculer la section efficace, on intègre sur toutes les valeurs possibles des impulsions, des énergies (comme spécifié dans 1.2). Cette intégration doit se conformer aux lois de conservation de l'énergie totale

et de la quantité de mouvement (voir [2]).

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int d\vec{k}_s d\vec{k}_1 d\vec{q} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{k}_i - (\vec{k}_s + \vec{k}_1 + \vec{q})) |T_{if}|^2 \quad (1.6)$$

Après l'intégration sur  $d\vec{q}$ , tenant compte de la fonction  $\delta(\vec{k}_i - (\vec{k}_s + \vec{k}_1 + \vec{q}))$ , ça devient :

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int d\vec{k}_s d\vec{k}_1 \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2 \quad (1.7)$$

### 1.4.1 Section efficace simplement différentielle (SDCS)

**Notation :**

$$\sigma^{(1)} = \frac{d\sigma}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int k_s^2 dk_s d\vec{k}_1 \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2 \quad (1.8)$$

**Explication :**

- $d\sigma$  représente un élément infinitésimal de la section efficace, c'est-à-dire une petite partie de la probabilité totale d'une interaction.
- $d\Omega$  est l'élément infinitésimal d'angle solide. En d'autres termes, il décrit une petite portion de l'espace angulaire dans lequel la particule est détectée après la collision.

La section efficace simplement différentielle indique donc la probabilité de détecter une particule dans une certaine direction après la collision [5].

### 1.4.2 Section efficace doublement différentielle (DDCS)

**Notation :**

$$\sigma^{(2)} = \frac{d^2\sigma}{d\Omega_s dE_1} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_1 \int d\Omega_1 |T_{if}|^2 \quad (1.9)$$

**Explication :**

- $d\Omega_s$  est, comme précédemment, l'élément d'angle solide associé à la direction de la particule diffusée.
- $dE_1$  est un élément infinitésimal d'énergie de la particule éjectée. Cette section efficace mesure donc la probabilité de détecter une particule dans une certaine direction tout en ayant une certaine énergie [6].

### 1.4.3 Section efficace triplement différentielle (TDCS)

**Notation :**

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 dE_1} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_1 |T_{if}|^2 \quad (1.10)$$

**Explication :**

- $d\Omega_s$  représente l'élément d'angle solide pour la particule diffusée.
- $d\Omega_1$  représente l'élément d'angle solide pour la particule éjectée.
- $dE_1$  est l'élément d'énergie associé à la particule éjectée.

La TDCS prend en compte les directions de deux particules détectées après la collision, ainsi que l'énergie de la particule éjectée. Elle mesure la probabilité que la première particule soit détectée avec une énergie spécifique dans une certaine direction, tout en tenant compte de la direction de la deuxième particule.

## 1.5 Développement de Born

La complexité du calcul de l'élément de matrice associé à l'opérateur de transition, noté précédemment  $\hat{T}$ , réside dans la difficulté de traiter la répulsion électrostatique, qui empêche d'obtenir une solution exacte. Cela impose le recours à plusieurs approximations, notamment le développement de Born [7], basé sur la théorie des perturbations. Ce développement permet de représenter l'opérateur de transition sous la forme d'une série en fonction de l'opérateur de potentiel d'interaction.

Étant donné que ce potentiel est indépendant du temps, il est possible de relier l'opérateur d'évolution à l'opérateur de transition en utilisant l'opérateur de Green, associé à l'hamiltonien du système [4, 8]. La méthode de Born conduit ainsi à un développement en puissances du potentiel, interprétable comme une série de diffusions multiples. Dans cette série, le projectile interagit de manière répétée avec le potentiel  $V$ , tout en se propageant librement entre deux interactions successives. Cette formulation donne lieu à l'expression suivante [6] :

$$T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon} V + \dots \quad (1.11)$$

Autrement écrit :

$$T = V + VG_0^+V + VG_0^+VG_0^+V + \dots \quad (1.12)$$

où  $G_0^+ = \frac{1}{E_i - H_0 + i\epsilon}$  représente l'opérateur de Green avec  $H_0$  le hamiltonien du système

(électron incident+cible) à l'état initial en l'absence de toute interaction  $V$  entre l'électron incident et la cible.

La première approximation de Born (First Born Approximation), ne prend en compte que du premier terme de la série. Dans la seconde approximation de Born (Second Born Approximation), en plus du premier terme, on inclut également le second. Au-delà de ce dernier, les calculs deviennent pratiquement impossibles.

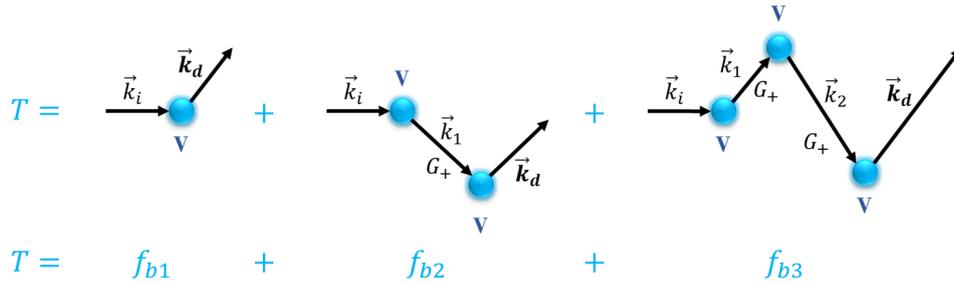


Figure 1.2: Schéma simplifié du développement de Born

Les calculs du premier et du deuxième terme sont donnés en détail dans [9, 10].

## 1.6 Cinématiques de la réaction $(e, 2e)$

La réaction  $(e, 2e)$  dépend des énergies des électrons ainsi que de la valeur du moment de transfert  $\vec{K}$ . Les cinématiques utilisées pour mesurer la section efficace triplement différentielle (TDCS) sont classées en différentes catégories selon les géométries, qui peuvent être symétriques ou asymétriques, coplanaires ou non coplanaires. Chaque géométrie est choisie en fonction d'un objectif spécifique lors de l'étude du processus d'ionisation.

### 1.6.1 Géométrie asymétrique coplaire

Dans cette configuration géométrique, les impulsions des deux électrons,  $\vec{k}_i$  et  $\vec{k}_s$ , se situent dans le même plan, ce qui définit une géométrie coplaire. Pour optimiser la résolution expérimentale, l'angle de diffusion  $\theta_s$  de l'électron incident est maintenu fixe et inférieur à  $20^\circ$ . Cette faible valeur angulaire permet de minimiser les incertitudes liées à la détection de l'électron diffusé tout en maximisant la précision des mesures.

En revanche, l'angle d'éjection  $\theta_1$ , qui correspond à la direction dans laquelle est expulsé l'électron ionisé, est laissé variable afin d'explorer un large éventail de configurations possibles. Les électrons impliqués dans cette réaction ont des énergies très différentes :

l'électron diffusé est généralement beaucoup plus rapide que l'électron éjecté. L'électron rapide, issu du processus de diffusion, est souvent celui qui interagit directement avec le projectile initial, tandis que l'électron éjecté provient de la cible ionisée.

Dans cette situation particulière, les effets d'échange entre les deux électrons peuvent être négligés en raison des différences importantes d'énergie. En effet, les processus d'échange, qui apparaissent lorsque deux électrons ont des caractéristiques similaires (notamment en termes d'énergie), ne jouent pas un rôle significatif ici, ce qui simplifie l'analyse théorique et expérimentale.

Les expériences réalisées dans cette géométrie sont effectuées sur une large gamme d'énergies d'électrons incidents, allant des hautes énergies (supérieures à 600 eV), aux énergies intermédiaires (entre 100 et 600 eV), et jusqu'aux basses énergies (inférieures à 100 eV). Chacune de ces gammes permet d'explorer différents régimes physiques de la réaction, offrant une vue d'ensemble sur les mécanismes d'ionisation sous diverses conditions.

#### 1.6.1.1 Hautes énergies ( $E_0 \geq 600$ eV)

- **Régime impulsif :** Dans ce régime, la réaction se déroule via une collision binaire entre l'électron incident et un des électrons de la cible. Le moment de transfert  $\vec{K}$  est élevé et la TDCS présente un pic unique dans la direction de  $\vec{K}$ . Ce mécanisme peut être décrit par un modèle de Born de premier ordre.
- **Régime dipolaire :** Ici, la réaction n'est plus binaire. L'électron incident, très rapide, se comporte comme un pseudo-photon. La TDCS présente deux lobes : un lobe binaire dans la direction de  $\vec{K}$ , et un lobe de recul dans la direction opposée  $-\vec{K}$ , causé par la réflexion de l'électron incident à travers son interaction avec le noyau de la cible.

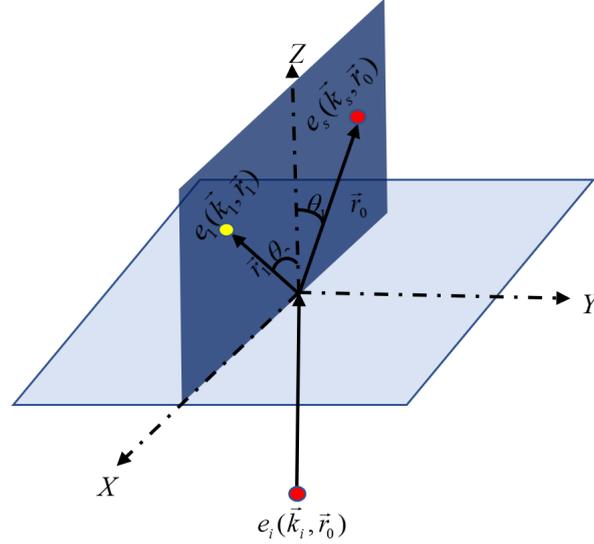
#### 1.6.1.2 Énergies intermédiaires ( $100$ eV $\leq E_0 < 600$ eV)

À ces énergies, la TDCS montre également deux lobes, binaire et de recul, mais ces lobes sont décalés vers des grands angles en raison des interactions post-collisionnelles (PCI), c'est-à-dire l'interaction entre les électrons diffusé et éjecté. Pour calculer théoriquement la TDCS, il est nécessaire de prendre en compte ces interactions avec des modèles appropriés.

#### 1.6.1.3 Basses énergies ( $20$ eV $\leq E_0 < 100$ eV)

Dans cette gamme d'énergies, deux pics apparaissent également : un pic binaire et un pic de recul, décalés vers des grands angles. Plusieurs effets interviennent dans le processus de collision, tels que les interactions post-collisionnelles, les effets de distorsion

des électrons éjectés, ainsi que les effets de polarisation de la cible. Lorsqu'on décrit l'électron éjecté, il est crucial de prendre en compte l'influence de l'ion résiduel.



**Figure 1.3:** Schéma de Géométrie Asymétrique Coplanaire

## 1.6.2 Géométrie symétrique

La géométrie symétrique permet l'étude des collisions dans lesquelles les deux électrons détectés possèdent des énergies et des angles égaux, mais des orientations azimutales différentes. Elle est utilisée pour examiner la structure de la cible en fonction de l'impulsion de recul.

Dans cette configuration, les deux électrons détectés ont des angles de diffusion égaux  $\theta_s = \theta_1 = \theta$  et des énergies égales  $E_s = E_1 = \frac{E_i - E_{ion}}{2}$ ,  $E_i$  est l'énergie incidente et  $E_{ion}$  l'énergie d'ionisation. Cependant, les angles azimutaux  $\varphi_s$  et  $\varphi_1$  diffèrent, permettant ainsi d'étudier les propriétés de la cible en fonction de l'impulsion de recul  $q$ , définie par [11] :

$$q = \left[ (2k_s \cos \theta - k_i)^2 + 4k_s^2 \sin^2 \theta \sin^2 \left( \frac{\phi}{2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.13)$$

où  $\phi = \pi - |\varphi_s - \varphi_1|$ .

### 1.6.2.1 Géométrie symétrique coplanaire

Dans cette configuration spécifique, les deux électrons se propagent dans un plan commun, et la section efficace triplement différenciée (TDCS) est mesurée en fonction de l'angle d'émission. Le rôle des effets d'échange entre les électrons est fondamental et doit être rigoureusement pris en compte, car il modifie de manière significative la mécanique

de la réaction. Ces effets sont particulièrement prépondérants dans les collisions où l'interaction entre l'électron diffusé et l'électron éjecté intervient de façon non négligeable, influençant de manière décisive la dynamique et les résultats de la collision.

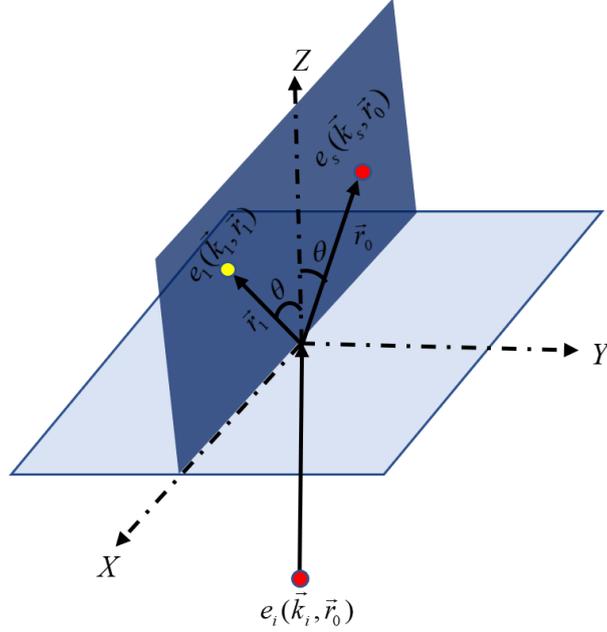


Figure 1.4: Schéma de Géométrie Symétrique Coplanaire

### 1.6.2.2 Géométrie symétrique non-coplanaire

Contrairement à la géométrie coplanaire, ici, les électrons ne se situent pas dans le même plan. La TDCS est mesurée soit en fonction de l'angle azimutal  $\varphi$ , soit en fonction du moment de recul  $q$  de la cible. Cette géométrie est souvent utilisée pour étudier les densités de moments électroniques, une technique connue sous le nom EMS (*electron momentum spectroscopy*). Elle est appliquée dans des conditions d'énergie comprises entre 1 keV et 2 keV, et constitue un test rigoureux pour la validation des fonctions d'onde de la cible.

Expérimentalement, la TDCS est mesurée en fonction du moment de recul  $q$ , en utilisant une approximation d'ondes planes (PWBA – *Plane Waves Born Approximation*). Dans ce cadre théorique, le projectile et les électrons éjectés sont modélisés par des ondes planes, permettant ainsi de simplifier l'analyse des résultats expérimentaux.

Cette configuration représente un excellent moyen de tester les fonctions d'onde de la cible en détail.

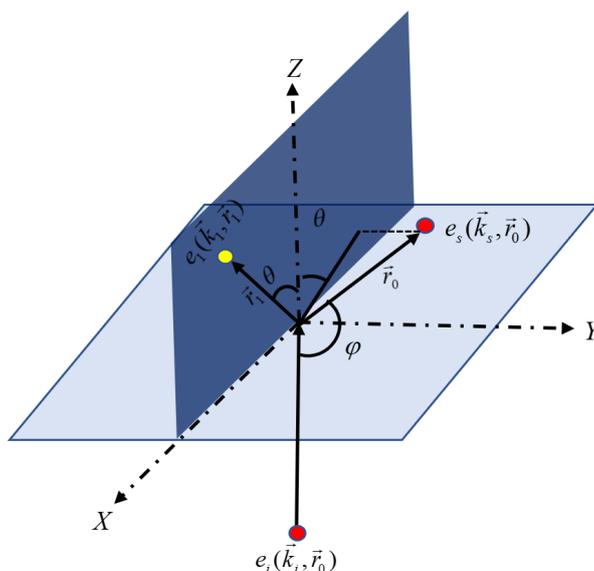


Figure 1.5: Schéma de géométrie symétrique non-coplanaire

## 1.7 Notion de corrélation électronique

Les corrélations électroniques jouent un rôle essentiel dans les expériences d'ionisation, et il est fondamental d'en donner une définition claire. Le terme "corrélation" a été utilisé pour la première fois dans les années 1930 par Wigner et Seitz. [12] Plus tard, Löwdin, en 1959, a introduit une définition plus précise de la corrélation électronique spécifiquement pour les systèmes atomiques et moléculaires.

En physique atomique et moléculaire, la corrélation électronique fait référence à l'interdépendance entre les électrons dans un système. Contrairement aux modèles simplifiés où les électrons sont considérés comme se déplaçant indépendamment, dans les systèmes réels, les électrons interagissent constamment les uns avec les autres via leurs forces d'attraction et de répulsion. Cette interaction est due à leur charge électrique et au fait qu'ils obéissent aux lois de la mécanique quantique. Concrètement, cela signifie qu'une modification dans l'état d'un électron (comme un changement de position, d'énergie, ou de spin) affecte directement l'état des autres électrons dans le système. Par exemple, si un électron est éjecté d'un atome lors d'une ionisation, les autres électrons réagissent immédiatement à cette perturbation, modifiant leurs positions ou énergies pour rétablir un nouvel équilibre dans le système.

Ces interactions sont essentielles à comprendre, car elles influent de manière significative les résultats des expériences d'ionisation. Ignorer ces corrélations reviendrait à

simplifier excessivement le comportement des électrons et à manquer des phénomènes physiques importants qui peuvent se produire lors de la collision.

Pour modéliser avec précision ces systèmes complexes, il est indispensable d'utiliser une fonction d'onde qui tienne compte de ces corrélations électroniques. Une fonction d'onde antisymétrique, par exemple, peut inclure ces effets en représentant correctement la manière dont les électrons se répartissent dans l'espace et interagissent entre eux. En résumé, prendre en compte ces corrélations permet de mieux décrire la dynamique électronique et d'obtenir des interprétations plus précises des processus d'ionisation.

## 1.8 Type de corrélation

### 1.8.1 Corrélation structurelle

La corrélation structurelle se réfère aux interactions coulombiennes entre les électrons liés au sein de la cible, ainsi qu'aux interactions entre les électrons du continuum (électrons éjectés) après ionisation. Ces interactions coulombiennes, qui suivent une loi de type  $\frac{1}{r_{ij}}$ , rendent extrêmement difficile la résolution exacte de l'équation de Schrödinger pour les systèmes atomiques contenant plus d'un électron, en raison de la complexité des forces d'interaction mutuelle entre les électrons.

Cette corrélation est généralement abordée par des méthodes approchées, telles que les approximations basées sur les fonctions d'onde de Hartree-Fock [13] ou des approches de type Monte Carlo [14]. La méthode d'interaction de configuration (CI) [13] est une approche variationnelle qui permet de décrire les états électroniques complexes d'un atome ou d'une molécule. Elle repose sur le développement de la fonction d'onde totale du système en une combinaison linéaire d'une base de fonctions d'onde à une particule. Le terme « configuration » se réfère à cette représentation, où l'état global est approximé par un ensemble de configurations électroniques construites à partir des fonctions d'onde de chaque particule. Le terme « interaction » quant à lui, met en évidence le processus de mélange des configurations électroniques, reflétant les effets de corrélation entre électrons, qui sont cruciaux pour une description précise des états excités ou des processus d'ionisation.

Dans la pratique, cette méthode consiste à combiner plusieurs configurations électroniques, souvent en les pondérant selon leur importance pour l'état global, afin de minimiser l'énergie du système par une approche variationnelle. Les fonctions de base utilisées pour ces configurations varient selon la précision requise et leur adaptation au système étudié.

Par exemple, les fonctions de Slater sont souvent privilégiées pour leur exactitude près du noyau atomique, les fonctions de type gaussien facilitent les calculs par leur simplicité mathématique, et les fonctions orthogonales de Laguerre [15] sont parfois employées pour des propriétés spécifiques. Chacune de ces bases offre des avantages selon la nature de l'interaction électronique et les exigences du modèle.

Afin d'obtenir des solutions optimisées à des niveaux de précision accrus. Ces solutions approchées permettent de prendre en compte l'effet des interactions coulombiennes sans recourir à une résolution exacte, qui serait impraticable pour les systèmes multi-électroniques complexes.

### 1.8.2 Corrélation dynamique

La corrélation dynamique fait référence aux effets d'interaction générés par la collision elle-même. Cette interaction peut être subdivisée en deux types distincts :

- **Corrélation dynamique en voie d'entrée** : Ce type de corrélation se produit lorsque l'électron incident, avec une énergie relativement faible (de l'ordre de quelques centaines d'eV), interagit avec la cible et induit une polarisation de celle-ci. Cette polarisation modifie simultanément la fonction d'onde de l'électron incident, ce qui affecte la dynamique de la collision. Les effets de cette corrélation sont souvent modélisés par des méthodes à ondes distordues, qui permettent de corriger les perturbations introduites par l'interaction à courte portée entre le projectile et la cible.
- **Corrélation dynamique en voie de sortie** : Après l'ionisation, une fois que les électrons sont éjectés dans le continuum, les interactions coulombiennes entre les électrons éjectés doivent également être prises en compte. Ces effets d'interaction entre électrons éjectés influencent la description de l'état final du système et sont intégrés dans les fonctions d'onde finales. La prise en compte de ces corrélations est essentielle pour une modélisation précise de la dynamique post-ionisation.

## 1.9 Détermination de la matrice de transition

Dans le cadre des collisions provoquant une ionisation, l'élément de matrice de transition est une composante centrale pour calculer les probabilités de transition entre l'état initial du système (cible intacte et projectile incident) et l'état final (cible ionisée et deux

particules éjectées). Cet élément est donné par l'expression suivante :

$$T_{if} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (1.14)$$

Où :

- $\Psi_i$  est la fonction d'onde décrivant l'état initial du système.
- $\Psi_f$  est la fonction d'onde de l'état final après l'ionisation.
- $V$  représente le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible.

### 1.9.1 Description de l'état initial

L'état initial du système avant la collision est généralement décrit comme un produit de la fonction d'onde du projectile  $\psi_i$  et de celle de la cible  $\phi$  dans son état lié. Mathématiquement, cela peut être exprimé sous la forme :

$$\Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \psi_i(\vec{r}_0)\phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \quad (1.15)$$

Pour les atomes complexes et les molécules, où le problème se ramène généralement à un système à N corps, il est essentiel de prendre en compte l'interaction de tous les électrons de la cible pour déterminer la fonction d'onde de chaque orbitale. La complexité de ce calcul augmente rapidement avec le nombre d'électrons, cela exige l'utilisation des approximations comme approximation de cœur gelé qui repose sur le principe que seuls les électrons situés à l'extérieur, c'est-à-dire les électrons de valence, influencent de manière significative les propriétés physico-chimiques d'un système, tandis que les électrons internes (ou de cœur) sont peu affectés par l'environnement extérieur. Cette approche permet de simplifier les calculs et d'accélérer les simulations numériques en se focalisant uniquement sur les électrons de valence. La deuxième approximation appelée seul électron actif (ou image à une particule), consiste à ne considérer que la fonction d'onde de l'électron étudié. Dans ce cas l'équation (1.15) devient

$$\Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1) = \psi_i(\vec{r}_0)\phi(\vec{r}_1) \quad (1.16)$$

Où :

$\vec{r}_0$  est le vecteur position pour l'électron incident( la distance entre l'électron et le noyau de la cible). Tandis que  $\vec{r}_1$  est la position de l'électron de la cible (toujours la distance entre le noyau et l'électron actif). La fonction d'onde de la cible  $\phi$ , est généralement obtenue à partir d'approximations numériques comme l'approximation de Hartree-Fock, qui suppose

que l'électron lié se meut dans le champ moyen créé par les autres électrons.

### 1.9.2 Description de l'état final

L'état final d'un processus d'ionisation représente la configuration du système après que l'électron cible a été éjecté. Dans une approche théorique, il est crucial de bien modéliser à la fois l'électron ionisé, qui se retrouve dans le continuum, et la particule incidente qui continue à évoluer après la collision. Cette description est essentielle pour prédire avec précision les observables expérimentales, telles que les distributions angulaires ou les énergies des électrons éjectés.

Dans le cadre théorique, il existe une grande diversité de modèles qui visent à décrire la fonction d'onde finale du système après un processus d'ionisation. Ces modèles se distinguent principalement par la manière dont ils prennent en compte les interactions entre les particules résiduelles et l'électron éjecté. La description précise de l'état final dépend de plusieurs facteurs, tels que l'importance des interactions coulombiennes, les effets de polarisation de la cible résiduelle, et les corrélations dynamiques entre les particules.

Certains modèles simplifient considérablement le problème en adoptant des hypothèses permettant de réduire la complexité des calculs, tandis que d'autres cherchent à intégrer des interactions plus complexes et des effets post-collision plus subtils. L'enjeu principal réside dans la capacité à représenter avec précision la configuration finale du système, qui inclut l'électron ionisé, la cible résiduelle (souvent un ion), et parfois la particule incidente qui continue à évoluer après la collision.

L'un des défis majeurs dans cette description est de traiter correctement les corrélations entre l'électron éjecté et les autres électrons de la cible, qui peuvent influencer son mouvement et son énergie. La fonction d'onde finale doit également refléter les effets de distorsion des trajectoires dus aux forces coulombiennes résiduelles, qui agissent même après l'éjection de l'électron. Chaque approche théorique propose ainsi une vision distincte de la fonction d'onde finale, en accordant plus ou moins d'importance à certains phénomènes physiques. Certains modèles optent pour des approximations simples, où l'électron éjecté est traité comme une particule libre, tandis que d'autres intègrent des interactions complexes, comme les effets de rétrodiffusion, la polarisation de la cible, ou encore les corrélations multi-électrons. Le choix du modèle dépend des conditions expérimentales et des objectifs visés : la description précise des distributions angulaires, des énergies cinétiques des particules, ou encore des mécanismes d'interaction entre les différents constituants du

système.

## 1.10 Modèles Théoriques

La manière dont les états initial et final sont modélisés a un impact direct sur la forme et la valeur de l'élément de matrice de transition, et donc sur les résultats théoriques des sections efficaces d'ionisation. Par exemple, des modèles simplifiés peuvent sous-estimer les effets de corrélation électronique, tandis que d'autres plus sophistiqués, qui incluent des interactions complexes dans les états initial et final, donnent des résultats plus précis qui concordent mieux avec les données expérimentales.

### 1.10.1 L'approximation de Born aux ondes planes (PWBA)

Le modèle **PWBA** est utilisé pour calculer la section efficace triplement différentielle (TDCS) dans les processus de simple ionisation. Il suppose que le projectile incident/diffusé (par exemple, un électron ou un positron) et l'électron éjecté peuvent être décrits par des ondes planes, traitant l'interaction entre le projectile et l'atome cible comme une perturbation de premier ordre.

$$\begin{aligned}\psi_{i/s}(\vec{r}_0) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ik_{i/s} \cdot \vec{r}_0} \\ \psi_1(\vec{r}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{ik_1 \cdot \vec{r}_1}\end{aligned}\tag{1.17}$$

Dans ce modèle, la TDCS est obtenue en évaluant les éléments de matrice de l'interaction coulombienne entre l'état initial lié et l'état final du système, où l'état final se compose d'ondes planes libres pour le projectile diffusé et l'électron éjecté.

$$T_{if} = \langle \psi_s(\vec{r}_0) \psi_1(\vec{r}_1) | V | \psi_i(\vec{r}_0) \Psi(\vec{r}_1) \rangle\tag{1.18}$$

$\Psi(\vec{r}_1)$  est fonction d'onde de type Slater

$V = -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|}$  est le potentiel coulombien entre l'électron incident et l'électron actif qui sera éjecté après la collision. En intégrant sur  $\vec{r}_0$  on trouve (détails dans [11]) :

$$T_{if} = -\frac{2}{K^2} \langle \psi_1(\vec{r}_1) | e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} - 1 | \Psi(\vec{r}_1) \rangle\tag{1.19}$$

Où  $\vec{K} = \vec{k}_s - \vec{k}_i$  est le moment de transfert. La fonction d'onde de la cible est une combinaison linéaire de fonction de type Slater de la forme :

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}^\xi(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (1.20)$$

Où  $R_{n,l}^\xi(r)$  sont les fonctions radiales données sous la forme des fonctions de type Slater par :

$$R_{n,l}^\xi(r) = \frac{(2\xi)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r} \quad (1.21)$$

$Y_{l,m}(\theta, \phi)$  sont les harmoniques sphériques normalisées.

L'avantage principal de ce modèle réside dans sa simplicité, le rendant facilement utilisable, et il fonctionne bien pour les collisions à haute énergie où les distorsions des fonctions d'onde sont minimales. Cependant, ses limitations incluent une faible précision à basse énergie, car il néglige la distorsion des ondes entrantes et sortantes par le potentiel de la cible, et il ne tient compte que d'une seule interaction entre le projectile et la cible, ce qui le rend moins fiable pour les processus d'ionisation plus complexes [16].

### 1.10.2 L'approximation de Born aux ondes coulombiennes (CWBA)

Ce modèle s'inscrit aussi dans le cadre de l'approximation de Born, où l'électron incident et l'électron diffusé sont décrits par des ondes planes. Dans cette approximation, on prend en compte l'interaction entre l'électron éjecté et l'ion résiduel de charge  $Z$ . L'électron éjecté perçoit ainsi une charge ponctuelle située au centre du système. L'équation de Schrödinger régissant le mouvement de l'électron éjecté dans ce contexte est alors exprimée par :

$$\left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r} \right) \psi_1(\vec{r}) = E_1 \psi_1(\vec{r}) \quad (1.22)$$

L'équation (1.22) constitue l'équation aux valeurs propres pour les états du continuum (c'est-à-dire les états non-liés) d'un atome hydrogénoïde. La solution analytique de cette équation peut être formulée de manière explicite, par exemple sous la forme d'une fonction Coulombienne parabolique, décrivant le comportement de l'électron sous l'influence d'un potentiel coulombien central [2] :

$$\varphi_c(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Gamma \left( 1 + i \frac{Z}{k} \right) e^{\frac{-\pi Z}{2k}} {}_1F_1 \left( -i \frac{Z}{k}, 1, -i(kr + \vec{k} \cdot \vec{r}) \right) \quad (1.23)$$

Où  $\Gamma(1 + i \frac{Z}{k})$  et  ${}_1F_1$  sont respectivement la fonction Gamma et la fonction hypergéométrique.

métrique confluyente.

Cette approche permet de modéliser de façon simplifiée les processus d'ionisation en négligeant certaines corrélations électroniques complexes tout en conservant une description adéquate de l'interaction électron-ion.

### 1.10.3 Modèle CCC

Le modèle Convergent Close-Coupling (CCC) est reconnu comme la méthode la plus fiable pour décrire la diffusion d'électrons sur des cibles d'hélium, couvrant un large spectre d'énergies de projectile. Cette méthode permet de résoudre numériquement le problème de diffusion électronique avec une grande précision, sans nécessiter d'approximation. Initialement proposée par Massey et Mohr [17] pour l'ionisation de l'hélium, cette approche entièrement numérique repose sur le développement de la fonction d'onde totale du système en une somme de produits entre les fonctions décrivant le mouvement du projectile et les états propres de l'Hamiltonien. Les coefficients de ce développement sont obtenus en résolvant un ensemble d'équations intégral-différentielles couplées, permettant ainsi de calculer la section efficace triplement différentielle avec précision [18].

### 1.10.4 Modèle BSR

Le modèle **B-Spline R-Matrix(BSR)** est une méthode numérique avancée largement utilisée pour analyser les processus de collision, d'excitation et d'ionisation dans des systèmes atomiques complexes [19]. Il combine l'approche du **R-Matrix**, qui divise l'espace de collision en régions intérieure et extérieure pour simplifier la résolution du problème de diffusion [20], avec l'utilisation de fonctions *B-spline*, offrant une représentation précise des fonctions d'onde, en particulier pour les systèmes à plusieurs électrons actifs.

Ce modèle est efficace pour traiter des collisions à basse et moyenne énergie et permet de calculer des sections efficaces très précises, même dans des cas complexes comme les atomes lourds ou les états excités [21]. Bien que flexible et précis, le modèle BSR est aussi numériquement exigeant. Il excelle dans la modélisation des structures fines et des corrélations électroniques, où d'autres méthodes manquent souvent de précision [21].

### 1.10.5 L'approximation de Born aux ondes distordues (DWBA)

Le modèle **DWBA** est particulièrement utilisée pour décrire les processus de diffusion et d'ionisation lors des collisions. Elle constitue une extension du développement de Born, qui traite les interactions entre le projectile et la cible dans le cadre d'une perturbation. Contrairement à l'approximation de Born classique, dans laquelle les particules incidentes

et diffusées sont modélisées par des ondes planes, la DWBA utilise des fonctions d'onde dites "distordues" qui s'écrivent :

$$\chi(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} i^l e^{i\delta_l} \frac{F_l(k, r)}{kr} Y_{l,m}^*(\hat{k}) Y_{l,m}(\hat{r}) \quad (1.24)$$

où  $\delta_l$  représente le déphasage total, et  $F_l(k, r)$  est la fonction d'onde radiale qui satisfait l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] F_l(k, r) = 0 \quad (1.25)$$

à la présence d'un potentiel statique moyenné :

$$U_i(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\vec{r}_1) d\Omega_1. \quad (1.26)$$

Avec  $V_i(\vec{r}_1)$  est le potentiel de Hartree standard défini pour une interaction électron-atom :

$$V_i(\vec{r}_1) = \frac{Z}{r_1} - \sum_{j=1}^{N_0} N_{i,j} \int \frac{|\phi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \quad (1.27)$$

$N_0$  et  $N_{i,j}$  sont respectivement le nombre d'orbitales atomiques et le nombre d'électrons dans chaque orbitale (plus de détails [9, 10]).

Ces éléments prennent en compte l'influence du potentiel de la cible sur le projectile avant et après l'interaction. Cette approche est particulièrement efficace dans les situations où les effets du champ, notamment les interactions coulombiennes fortes, ne peuvent être négligés.

Ainsi, l'approche DWBA est largement employée pour les processus d'ionisation par impact de particule chargée, où le projectile subit des déviations importantes sous l'effet du potentiel de la cible avant de se propager ou d'induire l'éjection d'électrons. La combinaison de cette technique avec les avancées théoriques modernes permet une analyse fine et rigoureuse des mécanismes d'interaction lors des processus de diffusion et d'ionisation.

### 1.10.6 Modèle de Brauner, Briggs et Klar (BBK)

Afin de prendre en compte la corrélation entre les électrons dans la voie de sortie, Brauner, Briggs et Klar ont introduit ce modèle dans le cadre de l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène. Ils ont utilisé une description asymptotique exacte de la fonction d'onde de l'état final, qui est définie comme le produit de trois ondes coulombiennes (d'où l'autre nom du modèle **3C**).

$$\Psi_f = \varphi_s(\vec{r}_0, \vec{k}_s) \varphi_1(\vec{r}_1, \vec{k}_1) C(\alpha_{01}, \vec{r}_{01}, \vec{k}_{s1}) \quad (1.28)$$

Deux de ces ondes sont présenter par des ondes coulombiens comme (1.23)

Tandis que  $C(\alpha_{01}, \vec{r}_{01}, \vec{k}_{s1})$  la troisième représente l'interaction post-collisionnelle (PCI) entre les deux électrons eux-mêmes.

$$C(\alpha_{01}, \vec{r}_{01}, \vec{k}_{s1}) = \Gamma(1 + i\alpha_{01}) e^{\frac{\pi\alpha_{01}}{2}} {}_1F_1\left(-i\alpha_{01}, 1, -i(k_{s1}r_{01} + \vec{k}_{s1} \cdot \vec{r}_{01})\right) \quad (1.29)$$

avec :  $\vec{k}_{s1} = \frac{1}{2}(\vec{k}_s - \vec{k}_1)$  et  $\alpha_{01} = -\frac{1}{2k_{s1}}$

Il convient de souligner que le modèle BBK s'avère particulièrement adapté à l'étude des petites cibles atomiques, notamment l'hydrogène et l'hélium [22,23] Ce modèle permet d'obtenir des résultats remarquables, tant en termes de précision que de cohérence avec les données expérimentales, ce qui en fait un outil précieux pour l'analyse des processus de simple ionisation.

## 1.11 Conclusion

Ce chapitre a exploré les bases des réactions d'ionisation simple par impact électronique, en introduisant les notions de sections efficaces (SDCS, DDCS, TDCS) et en détaillant les approches cinématiques utilisées pour analyser ces collisions. Le développement de Born a fourni une base théorique pour la modélisation des interactions électron-électron, avec une attention particulière aux corrélations électroniques, tant structurelles que dynamiques. Enfin, plusieurs modèles théoriques ont été présentés (PWBA, CCC, BSR, DWBA, BBK), chacun offrant des perspectives distinctes sur la description des états initiaux et finaux. Après avoir examiné en détail les processus d'ionisation simple, il est essentiel de passer à l'étude de l'ionisation double. Dans le prochain chapitre, nous aborderons les défis liés à l'ionisation double, en mettant en lumière les aspects spécifiques qui la rendent beaucoup plus difficile à traiter, tant sur le plan expérimental que théorique. Les corrélations électroniques deviennent ici encore plus cruciales, et les modèles théoriques doivent être adaptés pour tenir compte de l'interaction complexe entre les deux électrons éjectés.

## Bibliographie

- [1] B. H. Bransden and C. J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Longman Publishing Group, 1982.
- [2] C. J. Joachain. *Quantum Collision Theory*. North-Holland Pub. Co., 1976.
- [3] M. L. Goldberger and K. M. Watson. *Quantum Collision Theory*. JOHN WILEY SONS, INC., 1964.
- [4] B. Najjari. Thèse de doctorat. Université de Lorraine, 1997.
- [5] H. Houamer. Thèse de doctorat. Université de Sétif1, 2004.
- [6] B. Boudali. Thèse de doctorat. Université de Lorraine, 2001.
- [7] M. Born. *Z. Phys.*, **37** :863–867, 1926.
- [8] A. Messiah and O. W. Greenberg. *Phys. Rev.*, **136** :B248–B267, 1964.
- [9] A. Herbadji. Thèse de doctorat. Université de Sétif1, 2022.
- [10] T. Khatir. Thèse de doctorat. Université de Sétif1, 2021.
- [11] M. Chinoune. Thèse de doctorat. USTHB, 2017.
- [12] J. H. McGuire. *Introduction to Dynamic Correlation in Atomic Collisions*. Cambridge University Press, 1997.
- [13] A. Szabo and N. S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry : Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. DOVER PUBLICATIONS, INC., 1996.
- [14] B. L. Hammond, W. A. Lester Jr., and P. J. Reynolds. *Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1994.
- [15] Z. Rezkallah. Thèse de doctorat. Université de Sétif1, 2011.
- [16] I. E. McCarthy. *J. Phys. B*, **6** :2358, 1973.
- [17] H. S. Massey and C. B. O. Mohr. *Proc. Roy. Soc. A*, **140** :613–636, 1933.
- [18] I. E. McCarthy and E. Weigold. *Phys. Rev. A*, **27** :127–179, 1976.
- [19] T. Zatsarinny. *Computer Physics Communications*, **174** :273–356, 2006.
- [20] P. G. Burke. *R-matrix theory of atomic collisions : Application to atomic, molecular and optical processes*. 2011.
- [21] O. Zatsarinny. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **46** :112001, 2013.
- [22] B. Joulakian, C. Dal Cappello, and M. Brauner. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **25** :2863, 1992.
- [23] B. Joulakian and C. Dal Cappello. *Phys. Rev. A*, **47** :3788–3795, 1993.

# Chapitre 2

## THÉORIE DE LA DOUBLE IONISATION

### 2.1 Introduction

La double ionisation désigne le processus par lequel deux électrons sont éjectés simultanément d'un atome ou d'une molécule à la suite d'une interaction avec une particule incidente, telle qu'un photon, un électron ou un ion. Ce phénomène est particulièrement intéressant en physique atomique en raison des fortes corrélations électroniques impliquées. Contrairement à l'ionisation simple, où un seul électron est arraché, la double ionisation met en jeu des interactions complexes entre les électrons et peut se produire de manière directe ou indirecte. La théorie de la double ionisation cherche à modéliser ces mécanismes et à prédire des observables expérimentales comme les sections efficaces ou les distributions angulaires.

Dans ce chapitre, on explore la double ionisation. Nous examinerons les expériences  $(e, 3e)$ , les sections efficaces quintuplement et quadruplement différentielles, ainsi que les mécanismes fondamentaux de la double ionisation tels que le *Shake off* ( $SO$ ) et les processus *Two Step* ( $TS1$  et  $TS2$ ). De plus, la détermination des fonctions d'onde pour décrire ces interactions sera abordée, illustrée par des exemples concrets comme l'atome d'hélium et des atomes de type  $np^6$

### 2.2 Les expériences $(e, 3e)$

Les expériences de type  $(e, 3e)$  permettent d'observer en coïncidence la détection simultanée des deux électrons éjectés de la cible ainsi que de l'électron diffusé, offrant

un aperçu détaillé des mécanismes de double ionisation. Ces expériences, particulièrement complexes à mettre en œuvre, ont vu leur développement technique s'accélérer au cours des dernières décennies. En 1989, Lahmam-Bennani et al [1] ont réalisé la première mesure des sections efficaces quintuplement différentielles pour la double ionisation de l'Argon, marquant une avancée majeure dans le domaine. Cette étude a ouvert la voie à des investigations similaires sur d'autres gaz rares comme l'hélium [2–7], le krypton [8], l'Argon [9,10], le néon [11] et le magnésium [12]. Toutefois, Lahmam-Bennani et al. [13,14] et El Marji [15] ont observé que le taux de détection en coïncidence des trois particules émergentes (les deux électrons éjectés et l'électron diffusé) restait limité, notamment pour l'atome d'hélium, en raison des corrélations électroniques complexes en jeu. Pour pallier cette limitation, une nouvelle approche expérimentale, dénommée  $(e,3e-1)$ , a été proposée, permettant la détection en coïncidence de seulement deux des trois particules émises. Actuellement, les expériences de type  $(e,3e)$  et  $(e,3e-1)$  sont conduites dans plusieurs laboratoires à travers le monde, avec des contributions notables de Dorn et al. [6], Lahmam-Bennani et al. [14], Takahashi et al. [16] et Bolognesi et al. [17]

## 2.3 Comparaison entre la simple ionisation et la double ionisation

En termes expérimentaux, l'ionisation simple est plus accessible à la mesure, car elle implique moins de corrélations complexes entre les particules. Les techniques expérimentales, comme la spectroscopie de photoélectrons, permettent d'observer directement les caractéristiques de l'électron ionisé, telles que son énergie cinétique et sa distribution angulaire. Cela rend l'interprétation des résultats relativement plus aisée.

En revanche, l'ionisation double est beaucoup plus complexe, tant sur le plan théorique et expérimental. Ce processus implique l'éjection simultanée de deux électrons, soit à partir d'une interaction avec un seul projectile (ionisation double directe), soit via un mécanisme d'ionisation en cascade, où un premier électron est éjecté, suivi d'un second électron éjecté par un transfert d'énergie au sein de la cible (ionisation double indirecte).

La modélisation théorique de l'ionisation double est un véritable défi. Contrairement à l'ionisation simple, il est nécessaire de prendre en compte les corrélations électroniques entre les deux électrons éjectés. Ces corrélations dynamiques ajoutent une complexité supplémentaire, car les trajectoires des deux électrons sont influencées à la fois par leurs interactions coulombiennes mutuelles et par le champ résiduel de la cible ionisée. Les

approches théoriques doivent modéliser non seulement l'interaction avec la particule incidente, mais aussi la réorganisation interne des électrons restants après l'éjection du premier électron. Les modèles multi-corps, qui tiennent compte de ces effets de corrélation, sont souvent nécessaires pour décrire avec précision ce phénomène.

D'un point de vue expérimental, l'ionisation double est également beaucoup plus difficile à observer et à caractériser. Les dispositifs de détection doivent être capables de suivre simultanément deux électrons éjectés avec des distributions d'énergie et d'angle très variables, ce qui nécessite des techniques sophistiquées comme la coïncidence électronique ou les spectromètres de masse à très haute résolution. De plus, les taux d'ionisation double sont beaucoup plus faibles que ceux de l'ionisation simple, ce qui rend les mesures statistiquement moins significatives et exige des intensités de faisceau plus élevées ou des temps d'acquisition plus longs. En résumé, l'ionisation double est nettement plus complexe que l'ionisation simple, tant sur le plan théorique que sur le plan expérimental. La nécessité de prendre en compte les corrélations électroniques complexes et les interactions multi-corps rend la description théorique plus difficile, tandis que les défis expérimentaux résident dans la détection et la caractérisation simultanée des deux électrons éjectés. Ces aspects font de l'ionisation double un domaine d'étude avancé, qui continue de poser des questions ouvertes dans les domaines de la physique atomique et moléculaire.

## 2.4 Description de la réaction $(e, 3e)$

La réaction de double ionisation  $(e, 3e)$  d'une cible atomique implique l'interaction d'un électron incident avec une cible atomique  $X$  initialement dans son état fondamental d'énergie  $E_X$ .

Cette réaction peut être schématiser comme suit :

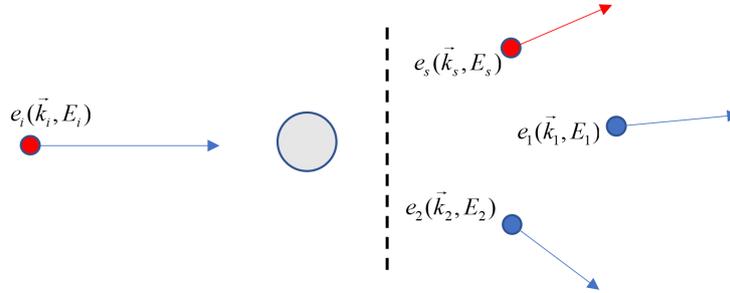
$$e_i(\vec{k}_i, E_i) + X \rightarrow X^{++} + e_1(\vec{k}_1, E_1) + e_2(\vec{k}_2, E_2) + e_s(\vec{k}_s, E_s) \quad (2.1)$$

L'électron incident provient d'un faisceau monoénergétique caractérisé par une énergie  $E_i$  et un moment  $\vec{k}_i$ , définis par rapport au centre de masse du système cible-projectile. À la suite de cette interaction, deux électrons sont éjectés de la cible, possédant respectivement des énergies cinétiques  $E_1$  et  $E_2$ , ainsi que des moments  $\vec{k}_1$  et  $\vec{k}_2$ .

L'électron projectile, après avoir interagi avec la cible, ressort avec une énergie finale  $E_s$  et un moment  $\vec{k}_s$ , tandis que l'ion résiduel se retrouve dans un état d'énergie  $E_{X^{++}}$ .

Ce processus respecte les lois de conservation de l'énergie et du moment, reliant ainsi les trois électrons impliqués (les deux éjectés et le projectile diffusé) et l'ion restant. La

détection en coïncidence de ces trois particules émergentes permet de révéler les corrélations électroniques complexes et les dynamiques microscopiques qui gouvernent la double ionisation.



**Figure 2.1:** Schémas de la réaction du double ionisation ( $e, 3e$ )

Les lois de conservations des énergies et des quantités de mouvement seront écrites comme suit :

$$\begin{aligned} E_i + E_x &= E_1 + E_2 + E_{x^{++}} + E_s + E_{recul} \\ \vec{k}_i &= \vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \vec{k}_s + \vec{q} \end{aligned} \quad (2.2)$$

$\vec{q}$  représente la quantité de mouvement de recul transférée à l'ion résiduel après le choc. Nous définissons également le moment de transfert  $\vec{K}$  comme suit :

$$\begin{aligned} \vec{K} &= \vec{k}_i - \vec{k}_s \\ \vec{q} &= \vec{K} - (\vec{k}_1 + \vec{k}_2) \end{aligned} \quad (2.3)$$

En notant l'énergie de double ionisation de la cible par  $I^{++} = E_{x^{++}} - E_x$  et en tenant compte du fait que l'énergie de recul  $E_{recul}$  de l'ion est très faible comparée à celles des autres particules, en raison de la grande masse de l'ion, l'équation (2.2) se réduit à :

$$E_i = E_1 + E_2 + E_s + E_{recul} + I^{++} \quad (2.4)$$

## 2.5 Section efficace quintuplement différentielle

Lors des expériences de double ionisation (DI), trois électrons sont présents dans l'état final, chacun étant défini par neuf paramètres cinématiques. En adoptant une géométrie coplanaire et en appliquant la conservation de l'énergie avant et après la collision, ces neuf paramètres peuvent être réduits à cinq : les énergies des deux électrons éjectés  $E_1$  et  $E_2$ , ainsi que les directions des trois électrons  $\Omega_1$ ,  $\Omega_2$  et  $\Omega_s$ . Lorsque ces cinq paramètres sont complètement déterminés, on parle d'une expérience « complète », et la section efficace correspondante est appelée section efficace quintuplement différentielle (5DCS ou FDCS).

**Notation :**

$$\sigma^{(5)} = \frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1 dE_2} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_1 k_2 |T_{if}|^2 \quad (2.5)$$

**Explication :**

- $d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2$  sont les éléments d'angle solide pour trois particules détectées.
- $dE_1 dE_2$  sont les éléments d'énergie associés aux deux particules éjectées.

La section efficace quintuplement différentielle est la plus détaillée. Elle mesure la probabilité de détecter trois particules dans des directions spécifiques, avec des énergies spécifiques pour les deux premières. Ce niveau de détail est particulièrement utile pour des processus de collision complexes où plusieurs particules sont impliquées et où il est crucial de comprendre l'interaction entre elles [18].

## 2.6 Section efficace quadruplement différentielle

Une section efficace quadruplement différentielle, désignée par 4DCS, associée à la réaction notée  $(e, 3e-1)$ . Nous remarquons deux types de ces sections efficaces : Si le détecteur détecte en coïncidence seulement les deux électrons éjectés

**Notation :**

$$\sigma^{(4)} = \int \sigma^{(5)} d\Omega_s = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1 dE_2} \quad (2.6)$$

**Explication :**

- $d\Omega_1 d\Omega_2$  sont les éléments d'angle solide pour les particules détectées.
- $dE_1 dE_2$  sont les éléments d'énergie pour ces deux particules respectives.

Si le détecteur détecte en coïncidence l'électron diffusé et un des deux électrons éjectés, l'expression de la section efficace associée s'écrit :

$$\sigma^{(4)} = \int \sigma^{(5)} d\Omega_2 = \frac{d^4\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_s dE_1 dE_s} \quad (2.7)$$

## 2.7 Mécanismes de la double ionisation

D'un point de vue phénoménologique, basé sur la théorie perturbative à plusieurs corps, trois mécanismes principaux ont été proposés pour expliquer la double ionisation

(DI) d'un atome.

Ces mécanismes sont connus sous les noms de «*Shake-Off*» (*SO*) et des mécanismes à deux étapes, nommés *TS1* et *TS2* respectivement. Les deux premiers (*SO* et *TS1*) impliquent une seule interaction du projectile avec la cible et correspondent à un processus perturbatif de premier ordre en termes d'interaction du projectile. Le *TS2*, en revanche, est un mécanisme de second ordre en ce qui concerne le projectile [19–25]

### 2.7.1 *Shake-Off* (*SO*)

Le mécanisme de «*Shake-Off*» (*SO*) est un processus de premier ordre. Il débute par une première ionisation causée par une collision binaire entre un électron incident et un électron de la cible, entraînant l'éjection de ce dernier. La seconde éjection d'électron résulte d'une relaxation électronique induite par la variation soudaine du potentiel d'interaction, due à la diminution de la charge de la cible d'une unité [26, 27]. Ce mécanisme est illustré dans la figure (2.2)

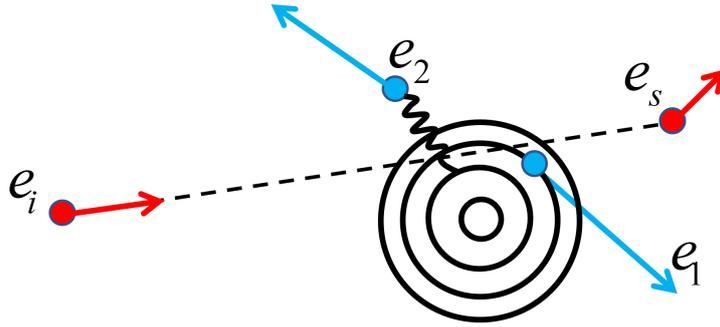


Figure 2.2: Illustration du processus «*Shake-Off*» (*SO*).

L'amplitude de transition pour ce processus peut être décrite comme une simple transition entre l'état initial et l'état final, sous l'influence du potentiel  $V$ , dans le cadre de la double ionisation de l'hélium. L'expression de cette amplitude est donnée par [28] :

$$f_{SO} = -\frac{1}{2\pi} \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (2.8)$$

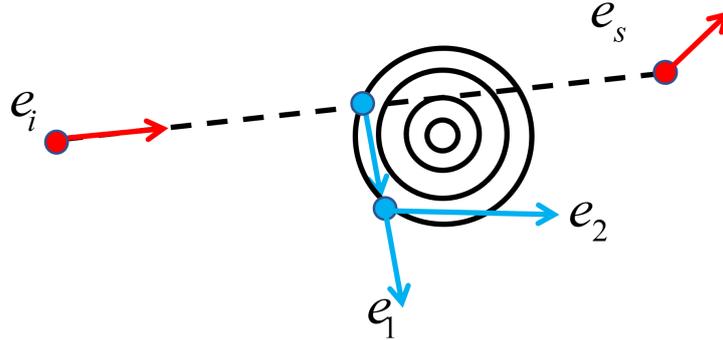
### 2.7.2 *Two step 1* (*TS1*)

Le mécanisme *TS1*, proposé par [29], est un processus de double ionisation en deux étapes, tout en restant de premier ordre dans l'interaction entre le projectile et la cible. Lors de la première étape, l'électron incident éjecte un premier électron de la cible. Ensuite, cet électron éjecté entre en collision avec un second électron de la cible, provoquant

à son tour l'éjection de ce dernier. Ce processus est ainsi appelé « *Two-Step 1* » (*TS1*). L'amplitude de diffusion de ce mécanisme est donnée par le second terme du développement de Born et peut être exprimée pour la double ionisation de l'hélium [28].

$$\begin{aligned}
 f_{TS1} = & -\frac{1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_m}{(2\pi)^3 [k_i^2 - k_m^2 - k_s^2 - 2I_n]} \left\langle \psi_f(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \psi_n^+(\vec{k}_m, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\
 & \times \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \psi_n^-(\vec{k}_m, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle
 \end{aligned} \tag{2.9}$$

$\psi_n^+$  et  $\psi_n^-$  représentent un état intermédiaire du 1<sup>er</sup> électron éjecté, de vecteur d'onde  $\vec{k}_m$ .  $\sum_n$  désigne la sommation sur tous ces états intermédiaires possibles,  $I_n$  est l'énergie nécessaire pour arracher un électron de l'ion  $\text{He}^+$  dans son état fondamental ( $n = 1$ ) ou excité ( $n > I$ ).  $V = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|}$  est le potentiel d'interaction entre l'électron incident et les deux électrons éjectés et  $V' = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$  représente le potentiel d'interaction entre les deux électrons de la seconde étape. Ce mécanisme est représenté schématiquement dans la figure (2.3)



**Figure 2.3:** Illustration du processus « *Two-Step 1* » (*TS1*).

### 2.7.3 *Two step 2 (TS2)*

Le troisième mécanisme, connu sous le nom de « *Two-Step 2* » (*TS2*), est un processus de second ordre au sens du développement de Born, dans lequel l'électron incident interagit à deux reprises avec la cible.

Dans une première étape, l'interaction initiale de l'électron incident entraîne l'ionisation de la cible. Par la suite, l'électron incident interagit de nouveau avec la cible désormais ionisée, provoquant l'éjection d'un second électron. Ce mécanisme *TS2* est illustré par la figure (2.4). L'amplitude de diffusion associée à ce processus est donnée par le deuxième terme du développement de Born et s'exprime comme suit pour la double ionisation de

l'hélium [28]

$$\begin{aligned}
 f_{TS2} = & -\frac{1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_m}{(2\pi)^3 [k_i^2 - k_m^2 - k_1^2 - 2I_n]} \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \psi_f(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}_0} \psi_n^+(\vec{r}_2) \right\rangle \\
 & \times \left\langle e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}_0} \psi_n^-(\vec{k}_1, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\
 & - \frac{1}{\pi} \sum_n \int \frac{d\vec{k}_m}{(2\pi)^3 [k_i^2 - k_m^2 - k_2^2 - 2I_n]} \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \psi_f(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \left| \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} \right| e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}_0} \psi_n^+(\vec{r}_1) \right\rangle \\
 & \times \left\langle e^{i\vec{k}_m \cdot \vec{r}_0} \psi_n^-(\vec{k}_2, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_2|} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Cette équation décrit les interactions successives entre l'électron incident et les deux électrons de la cible.

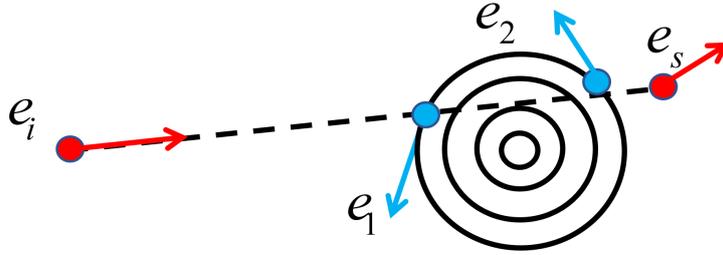


Figure 2.4: Illustration du processus « Two-Step 2 » (TS2).

## 2.8 Complexité des modèles théoriques de la double ionisation

Les modèles théoriques appliqués à la double ionisation, bien qu'ils partagent certaines similitudes avec ceux de la simple ionisation, doivent surmonter des défis considérablement plus complexes. La double ionisation implique l'éjection simultanée de deux électrons, ce qui nécessite de prendre en compte non seulement les interactions entre le projectile et chaque électron cible, mais également les corrélations électroniques entre les électrons eux-mêmes. Cela conduit à des modèles beaucoup plus sophistiqués que ceux basés sur des approximations de premier ordre, telles que la première approximation de Born (FBA). Bien que cette approximation soit utile pour simplifier l'interaction projectile-cible, elle montre ses limites, même à haute énergie. À basse énergie, cette approche devient insuffisante, et un traitement plus rigoureux est nécessaire, comme l'inclusion des termes d'ordre supérieur, par exemple la seconde approximation de Born (SBA), qui prend en compte les interactions successives entre le projectile et les deux électrons cibles.

L'un des modèles les plus avancés dans l'étude de la double ionisation est l'approche basée sur la fonction d'onde de Coulomb à quatre corps, également connue sous le nom de modèle 6C. Ce modèle prend en considération toutes les interactions mutuelles entre les différentes particules en jeu dans la voie de sortie, à savoir l'électron diffusé, les deux électrons éjectés, et l'ion résiduel. L'idée clé derrière le modèle 6C est d'utiliser une fonction d'onde finale composée de six ondes coulombiennes, chacune représentant une interaction coulombienne entre les particules. Cette approche permet une description beaucoup plus précise des interactions complexes au sein du système, mais elle présente des défis considérables en termes de temps de calcul. En effet, l'évaluation numérique de cette fonction nécessite de calculer une intégrale à neuf dimensions dans le continuum, ce qui rend les simulations extrêmement lourdes et coûteuses en ressources [30–32].

Des études ont montré que le modèle 6C offre un très bon accord avec les données expérimentales, en particulier pour des énergies d'électrons incidents élevées, comme celles observées à 601 eV [33]. Toutefois, pour réduire la complexité computationnelle du modèle 6C, certaines variantes ont été proposées, telles que l'approche A6C (6C approximé). Cette méthode remplace les trois fonctions d'onde décrivant la répulsion électron-électron par des facteurs de Gamow, une approximation qui permet de conserver une grande précision tout en réduisant considérablement le temps de calcul. Bien que cette version simplifiée du modèle 6C puisse donner de bons résultats dans certains cas, elle montre des déficiences dans d'autres, notamment dans des régimes expérimentaux spécifiques.

## 2.9 Détermination des fonctions d'onde du système collisionnel

Dans les traitements non relativistes de l'ionisation par impact électronique sur des cibles atomiques ou moléculaires, l'un des principaux défis est de distinguer les électrons éjectés (du continuum) des électrons liés dans le système. Cela est dû au fait que les électrons sont des particules identiques, ce qui rend impossible de les différencier individuellement.

Pour gérer cette situation, il est nécessaire de construire des fonctions d'onde antisymétriques, c'est-à-dire des fonctions d'onde qui changent de signe lorsque deux électrons sont échangés. Cela permet de respecter le principe d'exclusion de Pauli, selon lequel deux fermions (comme les électrons) ne peuvent pas occuper le même état quantique simultanément. Lors de la construction de ces fonctions d'onde, il faut tenir compte des configurations possibles des spins des électrons. Les électrons peuvent avoir leurs spins

alignés de deux façons :

1. **Spins parallèles** (lorsque les deux spins sont identiques).
2. **Spins antiparallèles** (lorsque les spins sont opposés).

La fonction d'onde antisymétrique est ensuite construite en fonction des états de spin totaux du système, qui correspondent aux combinaisons possibles des spins individuels. Ces états de spin totaux sont des fonctions propres aux opérateurs associés au spin (des objets mathématiques qui décrivent les propriétés de spin du système). En utilisant ces états de spin, on s'assure que la fonction d'onde reflète à la fois l'indiscernabilité des électrons et les règles quantiques fondamentales qui régissent leur comportement.

### 2.9.1 Exemple sur l'atome d'Hélium

Soit l'état initial  $D_i = |1s\bar{1}s\rangle$  avec  $M_L = 0$  et  $M_S = 0$ ,  $D_i$  est un déterminant de Slater associé à la matrice

$$M_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1s(\vec{r}_1)\alpha(1) & 1s(\vec{r}_2)\alpha(2) \\ 1s(\vec{r}_1)\beta(1) & 1s(\vec{r}_2)\beta(2) \end{vmatrix} \quad (2.11)$$

et donne après calcul :

$$D_i = (1s(\vec{r}_1)1s(\vec{r}_2)) \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)) \quad (2.12)$$

Avec  $\alpha$  est l'état de spin up ( $\uparrow$ ) et  $\beta$  l'état de spin down ( $\downarrow$ ). La fonction de spin est antisymétrique quand on échange (1) en (2) et celle d'espace symétrique quand on échange  $\vec{r}_1$  en  $\vec{r}_2$ , donc la fonction d'espace et de spin est globalement **antisymétrique**.

On va faire opérer le moment cinétique orbital  $\hat{L}^2$  et celui de spin  $\hat{S}^2$  sur  $D_i$ .

On rappelle que  $\hat{L}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hat{L}_z$ , (en unités atomiques,  $\hbar = 1$ )

$$\begin{aligned} \hat{L}_z |Y_l^m\rangle &= m |Y_l^m\rangle \\ \hat{L}_\pm |Y_l^m\rangle &= \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |Y_l^{m \pm 1}\rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ici  $\hat{L}_z D_i = 0$ ,  $\hat{L}_- D_i = 0$ ,  $\hat{L}_+ D_i = 0$ ,  $\hat{L}^2 D_i = 0$  et donc  $\hat{L}^2 D_i = 0$ .  $D_i$  est fonction propre de  $\hat{L}^2$  avec la valeur propre  $L = 0$ .

On fait ensuite opérer l'opérateur  $\hat{S}^2 = \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_z^2 + \hat{S}_z$ ,  $\hat{S}_z D_i = 0$ ,  $\hat{S}_+ D_i = 0$  d'où  $\hat{S}^2 D_i = 0$  et donc  $s = 0$ .  $D_i$  est bien fonction propre de  $\hat{L}^2$  et de  $\hat{S}^2$  et est noté  $^1S$ .

On va construire le déterminant de SLATER correspondant aux 2 électrons éjectés désignés par  $k_1$  ou  $\bar{k}_1$  et  $k_2$  ou  $\bar{k}_2$ , qui peuvent être soit des ondes coulombiennes soit des

ondes distordues.

On a au départ deux déterminants de Slater possibles :

$$D'_1 = |k_1 \bar{k}_2| \quad \text{et} \quad D''_1 = |\bar{k}_1 k_2|$$

On applique uniquement l'opérateur  $\hat{S}^2$  :

$$\hat{S}_z D'_1 = 0, \quad \hat{S}_+ D'_1 = |k_1 k_2| \quad \text{et} \quad \hat{S}_- \hat{S}_+ D'_1 = |\bar{k}_1 k_2| + |k_1 \bar{k}_2|$$

D'où  $\hat{S}^2 D'_1 = D'_1 + D''_1$

De même :

$$\hat{S}_z D''_1 = 0, \quad \hat{S}_+ D''_1 = |k_1 k_2| \quad \text{et} \quad \hat{S}_- \hat{S}_+ D''_1 = |\bar{k}_1 k_2| + |k_1 \bar{k}_2|$$

D'où  $\hat{S}^2 D''_1 = D'_1 + D''_1$

L'opérateur  $\hat{S}^2$ , dans la base formée par  $D'_1$  et  $D''_1$ , sera représenté par la matrice :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres sont  $\lambda = 0$  et  $\lambda = 2$ . Ici seul  $S = 0$  convient car on part d'un état initial  $^1S$ .

Le déterminant fonction propre (pour les deux électrons éjectés) de  $\hat{S}^2$  sera :

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |k_1 \bar{k}_2| - |\bar{k}_1 k_2| \right) \quad (2.14)$$

Et en développant :

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1) \right) \left( k_1(1)k_2(2) + k_2(1)k_1(2) \right) \quad (2.15)$$

### 2.9.2 Atome de type $np^6$

Pour calculer une section efficace différentielle lors d'un processus de double ionisation on a besoin de connaître l'état initial et l'état final de la cible. Le cas le plus complexe concerne la double ionisation de la couche  $np^6$  d'un gaz rare tel que le néon, l'Argon, le krypton ou le xénon. Il est clair qu'il est nécessaire de considérer l'ensemble des six électrons de la couche. Une première approximation, certes grossière, consisterait à ne prendre en compte que les deux électrons dits « actifs », c'est-à-dire ceux qui seront éjectés. Dans ce cadre, l'étude de l'état initial implique de considérer deux électrons actifs parmi les six

de la couche  $np^6$ , ce qui donne lieu à  $C_4^6 = \frac{6!}{2!4!} = 15$  configurations distinctes à examiner. Chacune de ces configurations peut être représentée par un déterminant de Slater, qui doit être une fonction propre des opérateurs du moment angulaire  $\hat{L}^2$  et du moment angulaire de spin  $\hat{S}^2$ .

Après la double ionisation, les deux électrons éjectés sont décrits par des fonctions d'onde du continuum, qui peuvent être soit des ondes coulombiennes, soit, de manière plus précise, des ondes distordues. Un modèle plus sophistiqué pourrait également prendre en compte, de façon partielle, les interactions coulombiennes entre les deux électrons éjectés et l'ion résiduel.

En réalité, l'ensemble des six électrons de la couche  $np^6$  contribue au calcul de la section efficace différentielle. Dans l'état initial, ces six électrons sont dans une configuration  $^1S$ , tandis que l'état final se compose de quatre électrons restants dans l'ion et des deux électrons éjectés. L'état final de l'ion  $np^4$  sera caractérisé par la présence de quatre électrons parmi les six, ce qui conduit également à  $C_4^6 = \frac{6!}{2!4!} = 15$  configurations à considérer. Un exemple de calcul de la fonction d'onde initial et final est dans ANNEX B

## 2.10 Conclusion

L'étude de la double ionisation a mis en évidence la complexité des processus impliqués, notamment grâce aux expériences  $(e,3e)$  et à l'analyse des sections efficaces quintuplement et quadruplement différentielles. Les mécanismes comme le *Shake off* et les étapes *Two Step (TS1 et TS2)* ont offert des perspectives claires sur les différentes voies d'éjection des électrons. L'importance des corrélations électroniques a été soulignée à travers la détermination des fonctions d'onde, en particulier avec des exemples concrets comme l'atome d'hélium. La comparaison avec l'ionisation simple a montré les défis supplémentaires posés par la double ionisation, tant sur le plan théorique qu'expérimental. Dans les prochains chapitres, nous présenterons et discuterons les résultats de nos propres travaux.

## Bibliographie

- [1] A. Lahmam-Bennani, C. Dupré, and A. Duguet. *Phys. Rev. Lett.*, **63** :1582–1585, 1989.
- [2] L. Taouil, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, and L. Avaldi. *Phys. Rev. Lett.*, **81** :4600–4603, 1998.
- [3] A. Lahmam-Bennani, L. Taouil, A. Duguet, M. Lecas, L. Avaldi, and J. Berakdar. *Phys. Rev. A*, **59** :3548–3555, 1999.
- [4] A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, M. N. Gaboriaud, L. Taouil, M. Lecas, A. Kheifets, J. Berakdar, and C. Dal Cappello. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **34** :3073, 2001.
- [5] A. Dorn, R. Moshhammer, C. D. Schröter, T. J. Zouros, W. Schmitt, H. Kollmus, R. Mann, and J. Ullrich. *Phys. Rev. Lett.*, **82** :2496–2499, 1999.
- [6] A. Dorn, A. Kheifets, C. D. Schröter, B. Najjari, C. Höher, R. Moshhammer, and J. Ullrich. *Phys. Rev. Lett.*, **86** :3755–3758, 2001.
- [7] M. Dürr, A. Dorn, J. Ullrich, S. P. Cao, A. Czasch, A. S. Kheifets, J. R. Götz, and J. S. Briggs. *Phys. Rev. Lett.*, **98** :193201, 2007.
- [8] A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, A. M. Grisogono, and M. Lecas. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **25** :2873, 1992.
- [9] B. El Marji, C. Schröter, A. Duguet, A. Lahmam-Bennani, and M. Lecas. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **30** :3677, 1997.
- [10] C. C. Jia, A. Lahmam-Bennani, C. Dal Cappello, A. Duguet, and L. Avaldi. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **36** :L17, 2003.
- [11] C. Schröter, B. El Marji, A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, M. Lecas, and L. Spielberger. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **31** :131, 1998.
- [12] M. J. Ford, B. El Marji, J. P. Doering, J. H. Moore, M. A. Caplan, and J. W. Cooper. *Phys. Rev. A*, **57** :325–330, 1998.
- [13] A. Lahmam-Bennani, H. Ehrhardt, C. Dupré, and A. Duguet. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **24** :3645, 1991.
- [14] A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, and S. Roussin. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **35** :L59, 1992.
- [15] B. El Marji, A. Duguet, A. Lahmam-Bennani, M. Lecas, and H. F. Wellenstein. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **28** :L733, 1995.
- [16] M. Takahashi, Y. Khajuria, and Y. Udagawa. *Phys. Rev. A*, **68** :042710, 2003.

- [17] P. Bolognesi, C. C. Jia, L. Avaldi, A. Lahmam-Bennani, K. A. Kouzakov, and Yu. V. Popov. *Phys. Rev. A*, **67** :034701, 2003.
- [18] A. Herbadji. *Thèse de doctorat, Université de Sétif1*, 2022.
- [19] F. W. Byron and J. C. Joachain. *Phys. Rev.*, **164** :1–9, 1967.
- [20] T. Åberg. *Phys. Rev. A*, **2** :1726–1729, 1970.
- [21] M.H. Mittleman. *Phys. Rev. Lett.*, **16** :779–779, 1966.
- [22] J.H. McGuire. *Phys. Rev. Lett.*, **49** :1153–1157, 1982.
- [23] J.H. McGuire, S. Berrah, R.J. Bartlett, J.A.R. Samson, J.A. Tanis, C.L. Cocke, and A. S. Schlachter. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **28** :913, 1995.
- [24] J.H. McGuire and L. Weaver. *Phys. Rev. A*, **16** :41–47, 1977.
- [25] R.E. Olson. *Phys. Rev. A*, **36** :1519–1521, 1987.
- [26] R.J. Tweed. *Z. Phys. D. Atoms, Molecules and Clusters*, **23** :309–320, 1992.
- [27] A. Duguet and A. Lahmam-Bennani. *Z. Phys. D. Atoms, Molecules and Clusters*, **23** :383–388, 1992.
- [28] C. Dal Cappello, R. El Mkhater, and P. A. Hervieux. *Phys. Rev. A*, **57** :R693–R696, 1998.
- [29] T.A. Carlson and M.O. Krause. *Phys. Rev.*, **137** :A1655–A1662, 1965.
- [30] A.W. Malcherek and J.S. Briggs. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **30** :4419, 1997.
- [31] J.R. Götz, M. Walter, and J.S. Briggs. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **36** :L77, 2003.
- [32] S. Jones and D.H. Madison. *Phys. Rev. Lett.*, **91** :073201, 2003.
- [33] S. Elazzouzi, C. Dal Cappello, A. Lahmam-Bennani, and F. Catoire. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **38** :1391, 2005.

# Chapitre 3

## PROCESSUS DE SIMPLE IONISATION DE L'Argon PAR IMPACT D'ÉLECTRONS ET POSITRONS

### 3.1 Motivations et but du travail

L'ionisation d'atomes et de molécules par des particules chargées est essentielle dans des domaines comme la physique des plasmas et la médecine (par exemple, en tomographie par émission de positrons). Cette étude explore ce processus en se concentrant sur l'ionisation de l'Argon par des impacts d'électron et de positron. Bien que l'ionisation par électron ait été largement étudiée, celle par positron est encore peu explorée, ouvrant de nouvelles perspectives pour comprendre l'effet de charge du projectile.

Dans ce chapitre on s'intéresse à l'étude de l'ionisation de l'Argon  $3p$  par impact de positron et d'électron à une énergie d'impact de 200 eV à l'aide d'un modèle théorique appelé *3CWZ*. Dans ce modèle, toutes les particules du continuum sont représentées par des ondes Coulombiennes avec des charges variables  $Z(r)$ , l'interaction post-collisionnelle et les effets d'échange sont également inclus. La section efficace différentielle triple est calculée et comparée aux mesures récentes [1] et à d'autres théories disponibles.

#### **Pourquoi le positron et pourquoi l'Argon ?**

L'impact des positrons dans le processus d'ionisation revêt une importance particulière car, contrairement aux électrons, les positrons représentent une forme d'antimatière.

L'interaction des positrons avec les atomes permet d'explorer des effets uniques dus à leur charge positive, ce qui a des implications sur la compréhension des processus fondamentaux dans les processus de collisions. En analysant l'ionisation par positron, nous accédons à des informations inédites sur les différences de comportement entre matière et antimatière dans les réactions d'ionisation.

L'utilisation de l'atome d'Argon dans cette étude est particulièrement pertinente. Étant un gaz rare, l'Argon possède une structure électronique simple et bien connue, ce qui en fait une cible idéale pour des études de collision détaillées. La disponibilité de données expérimentales pour cet atome, permet de comparer efficacement les effets de la charge du projectile entre positrons et électrons. En conséquence, l'Argon sert de modèle pour observer les subtilités des processus d'ionisation et tester la validité des prédictions théoriques avec précision.

## 3.2 Historique du modèle *3CWZ*

L'histoire du développement du modèle *3CWZ* incarne une démarche de recherche collective visant à approfondir notre compréhension des mécanismes d'ionisation. Le modèle a d'abord été élaborée par Chinoune et al. [2], qui ont introduit pour la première fois une approximation de charge variable dans le cadre du modèle BBK [3], appliquée à diverses cibles atomiques et moléculaires. Cette avancée a permis de mieux saisir la complexité des interactions ionisantes. Par la suite, Khatir et al. [4] (ANNEXE A) ont enrichi ce modèle en ajoutant l'effet du potentiel de courte portée, une composante essentielle pour décrire les interactions à proximité des noyaux atomiques. Dans une nouvelle étape d'amélioration, Attia et al. [5] ont optimisé le modèle BBK avec charge variable, en intégrant deux ondes coulombiennes pour chaque électron, éjecté et diffusé, augmentant ainsi la précision des prédictions. Enfin, la contribution de Bechane et al. [6] a permis une avancée décisive avec l'introduction de trois ondes coulombiennes avec charge variable pour l'électron incident, l'électron éjecté et l'électron diffusé, rendant le modèle plus complet et robuste. Bâtissant sur ce modèle raffiné, nos recherches apportent une nouvelle dimension en appliquant le modèle *3CWZ* aux impacts de positrons, offrant une comparaison unique avec les impacts d'électrons et enrichissant ainsi notre compréhension de la dynamique de l'ionisation sous l'effet de particules d'antimatière.

### 3.3 Application du modèle $3CWZ$ pour l'Argon

#### 3.3.1 Description de la cible

Considérons l'atome d'Argon ( $Z=18$ ), dont la configuration électronique est  $1s^2 2s^2 3s^2 2p^6 3p^6$ . L'électron actif de cet atome est décrit à l'aide des fonctions d'onde de Clementi de type Hartree-Fock utilisant une base de type Slater [7] :

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{N_i} \alpha_{ik} R_{n_{ik}}^{\epsilon_{ik}}(r) Y_{l_{ik} m_{ik}}(\hat{r}) \quad (3.1)$$

Les paramètres associés aux fonctions d'onde de Clementi, notés  $n_{ik}, l_{ik}, m_{ik}, \epsilon_{ik}, \alpha_{ik}$ , ainsi que les énergies d'ionisation des orbitales atomiques de l'atome d'Argon, sont répertoriés dans le tableau ci-après :

$n$	$l$	$m$	$\epsilon$	(1s)	(2s)	(3s)	(2p)	(3p)
3	0	0	18.000	0.97453	-0.27660	0.08642		
3	0	0	21.2848	0.01878	-0.00224	0.00232		
3	0	0	15.5021	0.02233	0.04716	-0.02369		
3	0	0	11.2367	-0.00310	0.36490	-0.10542		
3	0	0	7.5066	0.00215	0.63126	-0.28841		
3	0	0	4.7029	-0.00094	0.04500	-0.05813		
3	0	0	3.2138	0.00038	-0.00186	0.68983		
3	0	0	1.9931	-0.00001	0.00088	0.47773		
2	1	$m$	9.0000				0.64951	-0.18072
4	1	$m$	15.0000				0.01298	-0.01234
4	1	$m$	11.9644				0.02669	0.02183
4	1	$m$	8.7924				0.28421	-0.12559
4	1	$m$	6.3011				0.12881	0.10518
4	1	$m$	3.4327				0.00219	0.58041
4	1	$m$	1.9409				0.00008	0.46149
4	1	$m$	1.0309				-0.00002	0.02249
Énergie d'ionisation (a.u.)				118.61039	12.32219	1.27735	0.957150	0.59102

**Tableau 3.1:** Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation des orbitales atomique de l'atome d'Argon

### 3.4 Approximation de la charge variable

La charge variable  $Z(r)$  est déterminée à partir du potentiel de Hartree qui inclut deux composantes importantes : un potentiel coulombien qui représente l'interaction à

longue portée entre la cible et l'électron éjecté, et un potentiel de courte portée qui prend en compte les effets de polarisation et les interactions électroniques supplémentaires présentes dans l'environnement immédiat de l'atome ou de la molécule cible. Pour les cibles atomiques, ce potentiel est adapté pour chaque orbitale  $i$ , ce qui permet de raffiner encore plus la précision du modèle en tenant compte de la structure électronique spécifique de chaque orbitale. Ce cadre théorique, en intégrant ces interactions complexes, permet une description plus réaliste du processus d'ionisation en représentant fidèlement les effets à la fois de la charge nucléaire et des interactions électroniques locales.

$$V_i(\vec{r}_1) = -\frac{Z}{r_1} + \sum_{j=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_i(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \quad (3.2)$$

Dans cette expression,  $N_0$  représente le nombre total d'orbitales atomiques de la cible, tandis que  $N_{ij}$  indique le nombre d'électrons présents dans la  $i$ ème orbitale. La position de l'électron éjecté est notée  $\vec{r}_1$  et  $Z$  désigne la charge du noyau de l'atome cible. La fonction d'onde  $\phi_i$ , qui représente l'état quantique de l'électron lié dans l'orbital  $i$ , est exprimée comme une combinaison linéaire de fonctions de type Slater. Cette approche permet de modéliser la distribution spatiale de chaque électron autour du noyau, avec les fonctions de Slater offrant une représentation fidèle des orbitales atomiques, intégrant à la fois la décroissance exponentielle de la densité électronique et les effets de l'écran électroniques dus aux autres électrons présents. On peut aussi écrire le potentiel pour l'interaction positron-cible comme suit :

$$V_i(\vec{r}_1) = \frac{Z}{r_1} - \sum_{j=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_i(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \quad (3.3)$$

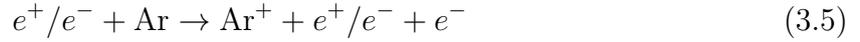
La charge variable est calculée de manière analytique en utilisant le potentiel moyenné sphérique de la cible, tel qu'il est perçu par l'électron (ou positron). Ce potentiel moyen, qui représente la distribution de charge effective de la cible, prend en compte l'influence de l'ensemble des électrons de l'atome ou de la molécule sur la particule incidente, qu'il s'agisse d'un électron ou d'un positron. En moyennant le potentiel dans toutes les directions, cette approche simplifie les calculs en évitant les asymétries directionnelles tout en conservant les caractéristiques essentielles de l'interaction cible-projectile.

$$U_i(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\vec{r}_1) d\Omega_1 = \begin{cases} -\frac{Z(r_1)}{r_1} & \text{(pour électron)} \\ \frac{Z(r_1)}{r_1} & \text{(pour positron)} \end{cases} \quad (3.4)$$

Les expressions analytiques de la charge variable pour diverses cibles atomiques et moléculaires peuvent être trouvées dans les références [2–6].

### 3.5 Description théorique du $3CWZ$

Dans l'ionisation de l'atome d'Argon dans son état fondamental par impact de positron (ou d'électron), la réaction étudiée peut être schématisée comme suit :



La cinématique de la réaction d'ionisation est entièrement déterminée. Par conséquent, toutes les particules émises sont détectées en coïncidence et analysées en termes de directions et d'énergies, de sorte que les expériences appartiennent au processus  $(e, 2e)$  (pour l'impact d'électron) et au processus  $(e^+, e^+e^-)$  (pour l'impact de positron). Le projectile avec une énergie  $E_i$  et un moment  $\vec{k}_i$  est diffusé avec une énergie  $E_1$  et un moment  $\vec{k}_1$  et est détecté en coïncidence avec l'électron émis ayant une énergie  $E_2$  et un moment  $\vec{k}_2$ .

Dans le cas d'une forte asymétrie cinématique, les électrons sortants peuvent être distingués : un électron rapide diffusé et un autre beaucoup plus lent éjecté, ce qui permet d'ignorer les effets d'échange. Cependant, à faible énergie d'impact, cette discernabilité n'est plus valable et les effets d'échange entre les électrons diffusé et éjecté doivent être pris en compte. Dans le cas du processus d'ionisation par impact de positrons, les effets d'échange n'existent pas du tout. Nous utilisons ici l'approximation du cœur gelé et l'approximation de l'électron actif unique [2], largement justifiée dans le cas de l'étude des couches extérieures.

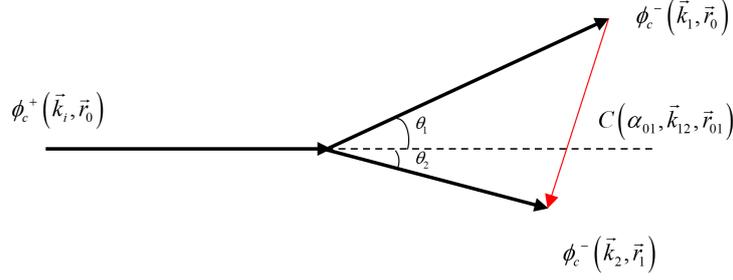
La TDCS pour l'impact d'électron est écrite comme suit :

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} \left( |T_{dir}|^2 + |T_{exc}|^2 + |T_{dir} - T_{exc}|^2 \right) \quad (3.6)$$

et pour l'impact de positron (en prenant  $T_{exc} = 0$ ) la TDCS est donnée par :

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = 2(2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} |T_{dir}|^2 \quad (3.7)$$

Comme cela a déjà été signalé précédemment, le modèle  $3CWZ$  consiste à décrire tous les électrons impliqués dans le processus  $(e, 2e)$  à l'aide d'ondes coulombiennes, qui peut se schématiser comme suit :



**Figure 3.1:** Schéma du processus d'ionisation en géométrie asymétrique coplanaire pour le modèle  $\mathcal{3}CWZ$ . Le projectile (électron/positron) avec un moment initial  $\vec{k}_i$  est diffusé avec un moment  $\vec{k}_1$  selon un angle  $\theta_1$ , en coïncidence avec un électron ayant un moment  $\vec{k}_2$  sous un angle  $\theta_2$ . Les positions de l'électron (ou positron) diffusé et de l'électron éjecté sont respectivement  $\vec{r}_0$  et  $\vec{r}_1$ .

Les termes direct  $T_{\text{dir}}$  et d'échange  $T_{\text{exc}}$  sont respectivement donnés par :

$$\begin{aligned} T_{\text{dir}} &= \left\langle \phi_c^{z(-)}(\vec{k}_1, \vec{r}_0) \phi_c^{z(-)}(\vec{k}_2, \vec{r}_1) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{01}) \left| \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \right| \phi_c^{z(+)}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi_{nlm}(\vec{r}_1) \right\rangle \\ T_{\text{exc}} &= \left\langle \phi_c^{z(-)}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^{z(-)}(\vec{k}_2, \vec{r}_0) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{01}) \left| \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \right| \phi_c^{z(+)}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi_{nlm}(\vec{r}_1) \right\rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

$\Phi_{nlm}$  est la fonction d'onde initiale de la cible représentant l'état lié, tandis que  $\phi_c^{z(+)}$  et  $\phi_c^{z(-)}$  représentent respectivement les ondes Coulombiennes entrantes et sortantes qui sont données comme suit [8] :

$$\begin{aligned} \phi_c^{z(+)}(\vec{k}, \vec{r}) &= \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} {}_1F_1(i\alpha(r), 1, i(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})) e^{\frac{\pi\alpha(r)}{2}} \Gamma(1 - i\alpha(r)) \\ \phi_c^{z(-)}(\vec{k}, \vec{r}) &= \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} {}_1F_1(-i\alpha(r), 1, -i(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})) e^{\frac{\pi\alpha(r)}{2}} \Gamma(1 + i\alpha(r)) \end{aligned} \quad (3.9)$$

Les fonctions  $\phi_c^{z(+)}$  et  $\phi_c^{z(-)}$  sont les solutions de l'équation de Schrödinger pour le spectre continu Coulombien, résolues dans le système des coordonnées paraboliques avec une charge constante  $Z$ .

Cependant, dans le cadre du modèle  $\mathcal{3}CWZ$ ,  $Z$  est remplacée par une charge variable  $Z(r)$  et  $\alpha$  par  $\alpha(r)$  ce qui explique la différence de notation entre ces ondes coulombiennes et celles introduites précédemment dans le chapitre 1.

Le terme décrivant l'interaction mutuelle électron-électron (PCI) est décrit par la fonction :

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{01}) = e^{\frac{\pi}{4k_{12}}} {}_1F_1(-i\alpha_{01}, 1, -i(k_{12}r_{02} - \vec{k}_{12} \cdot \vec{r}_{01})) \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{12}}\right) \quad (3.10)$$

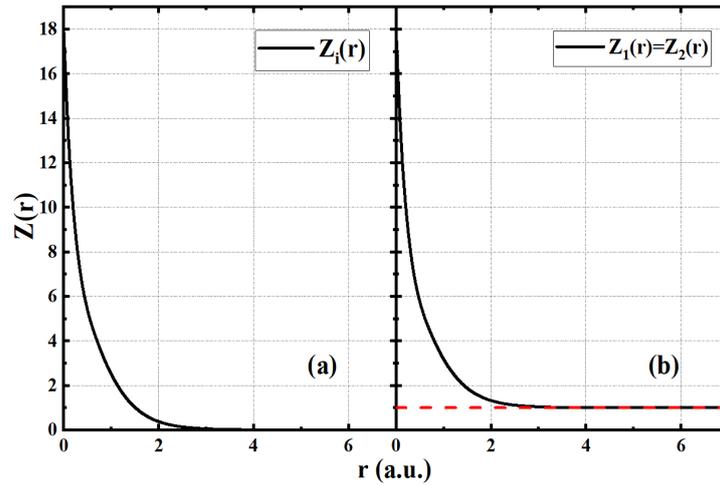
${}_1F_1$  et  $\Gamma$  sont la fonction hypergéométrique confluyente et est la fonction gamma. Pour les électrons on a :

$$\alpha(r) = \frac{Z(r)}{k} \quad \text{et} \quad \alpha_{01} = -\frac{1}{2k_{12}} \quad \text{où} \quad \vec{k}_{12} = \frac{1}{2}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \quad (3.11)$$

Dans le cas de positrons, il faut tout simplement dans les expressions de  $\alpha(r)$  et  $\alpha_{01}$  données ci-dessus pour les électrons le changement suivant :

$$\alpha(r) \rightarrow -\alpha(r) \quad \text{et} \quad \alpha_{01} \rightarrow -\alpha_{01} \quad (3.12)$$

Dans ce qui suit, nous allons présenter les charges variables associées aux trois électrons : l'électron incident, l'électron éjecté et l'électron diffusé. Les charges variables sont notées comme suit :  $Z_i(r)$  est la charge vue par le projectile incident, tandis que  $Z_1(r)$  et  $Z_2(r)$  représentent respectivement les charges ressenties par le projectile diffusé et l'électron éjecté. Pour les deux processus d'ionisation (par impact d'électron ou de positron), le projectile entrant voit une charge variable  $Z = 18$  au centre de l'atome d'Argon et une charge asymptotiquement  $Z = 0$ . Les particules sortantes voient une charge  $Z = 18$  au centre de l'atome et  $Z = 1$  asymptotiquement. Dans la figure (3.2), les charges variables sont tracées pour l'ionisation de l'Argon  $3p$ . Les deux graphiques montrent  $Z(r)$  correspondant aux électrons du continuum, il est clairement observé que  $Z_1(r)$  et  $Z_2(r)$  diminuent de  $Z = 18$  à  $Z = 1$  tandis que  $Z_i(r)$  diminue de  $Z = 18$  à  $Z = 0$



**Figure 3.2:** Charge variable  $Z(r)$  ressentie par l'électron incident fig(a) et les électrons sortants fig(b) lors du processus d'ionisation de l'orbitale  $3p$  de l'Argon.

Revenons maintenant au terme direct  $T_{\text{dir}}$  :

$$T_{\text{dir}} = T_{\text{dir}}^1 - T_{\text{dir}}^0 \quad (3.13)$$

Avec

$$\left\{ \begin{array}{l} T_{\text{dir}}^1 = \int \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_0, Z_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_1, Z_2) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{01}) \times \frac{1}{r_{01}} \\ \quad \times \phi_c(\vec{k}_i, \vec{r}_0, Z_i) \Phi_{\text{nlm}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_{01} \\ T_{\text{dir}}^0 = \int \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_0, Z_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_1, Z_2) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{01}) \times \frac{1}{r_0} \\ \quad \times \phi_c(\vec{k}_i, \vec{r}_0, Z_i) \Phi_{\text{nlm}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_{01} \end{array} \right. \quad (3.14)$$

Les équations (3.14) correspondent à une intégrale numérique à six dimensions, nécessitant un temps de calcul considérable. Pour contourner cette difficulté, nous adoptons la méthode de Kornberg et Miraglia [9], qui utilise les transformations de Fourier afin de simplifier considérablement les calculs (voir aussi les thèses [10, 11]) :

$$\begin{aligned} T_{\text{dir}}^1 = \lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} \lim_{\lambda_2 \rightarrow 0} \frac{\sqrt{4\pi}}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\vec{p} \times \int_0^\infty \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_1, Z_2) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_1} \Phi_{\text{nlm}}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \\ \times \int_0^\infty \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_0, Z_1) \phi_c(\vec{k}_i, \vec{r}_0, Z_i) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}_0} e^{-\lambda_1 r_0} Y_0^0(\vec{r}_0) d\vec{r}_0 \\ \times \int_0^\infty \phi_c^*(\vec{k}_{12}, \vec{r}_{01}) e^{-i(\vec{p} - \vec{k}_{12}) \cdot \vec{r}_{01}} e^{-\lambda_2 r_{01}} d\vec{r}_{01} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Pour le terme d'échange, on applique le même procédé mathématique, avec un simple changement de coordonnées de position entre l'électron diffusé et éjecté autrement dit :

$$r_0 \longleftrightarrow r_1 \quad (3.16)$$

## 3.6 Résultats et discussion

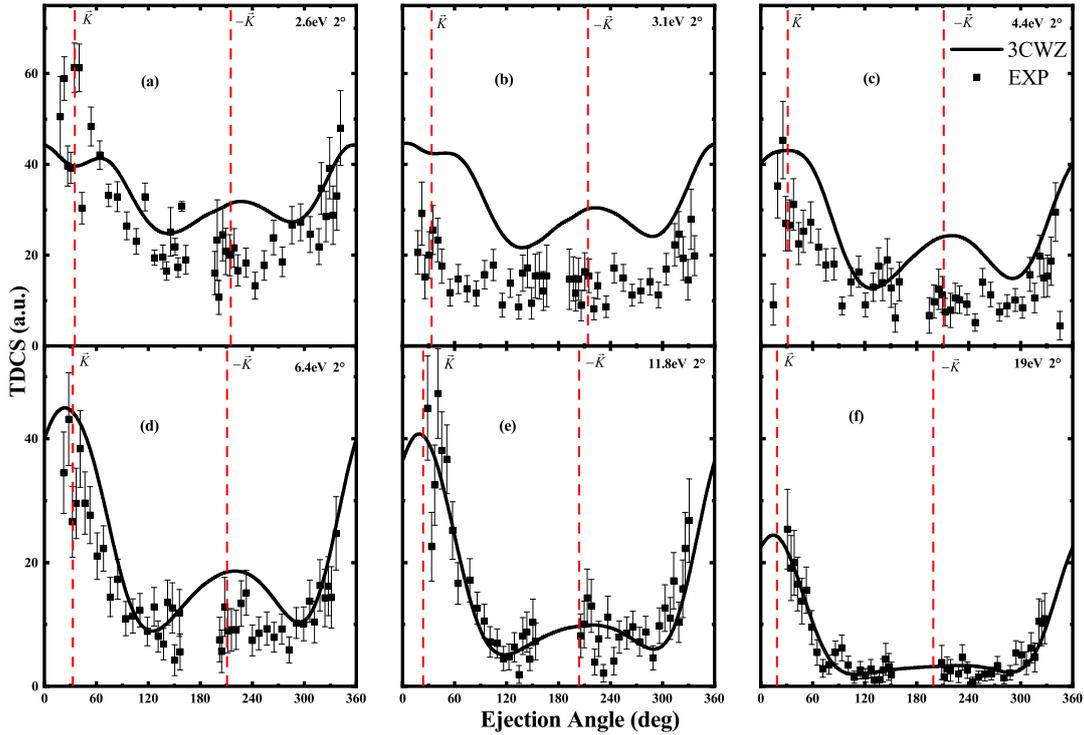
L'ionisation simple de l'Argon 3p par impact d'électrons et de positrons a été étudiée dans une cinématique asymétrique coplanaire, en utilisant le modèle  $\mathcal{BCWZ}$ , où l'interaction post collisionnelle (PCI) et les effets d'échange sont inclus. Les résultats théoriques présentés ici sont comparés aux expériences récentes [1] réalisées à une énergie d'impact de avec trois angles de diffusion  $\theta_1 = 2^\circ, 3^\circ$  et  $4^\circ$  et six énergies d'éjection allant de 2.6 à 19 eV.

Les TDCS correspondantes sont tracées en fonction de l'angle d'émission et discutées dans les figures (3.3) à (3.8). Comme l'ont déclaré Dubois et de Lucio [1], les données de positron et d'électron sont inter-normalisées, car le même dispositif et les mêmes techniques ont été utilisés. Toutes les TDCS ont donc été fournies sur une échelle relative unique. En comparant avec la théorie, un seul facteur commun est nécessaire pour ajuster l'amplitude

relative des expériences et des résultats théoriques. Dans ce travail, le facteur de mise à l'échelle global est obtenu en réalisant le meilleur ajustement visuel des résultats *3CWZ* avec l'expérience pour les conditions cinématiques  $\theta_1 = 2^\circ$  et  $E_1 = 2.6\text{eV}$  (panneau (a) de Fig.3.3), ce facteur vaut 0,26.

Nous voudrions noter que malheureusement aucun résultat théorique n'est présenté dans [1], concernant les données étudiées dans ce travail, notre théorie sera donc confrontée uniquement aux expériences. Nos calculs théoriques sont dans ce qui suit comparés aux données correspondant aux processus d'ionisation par impact de positron (Figs.3.3 à 3.5) et par impact d'électron (Figs.3.6 à 3.8). Dans tous les cas, les lignes verticales en pointillés indiquent la direction de  $\vec{K}$  et  $-\vec{K}$  respectivement, où  $\vec{K}$  est mouvement du transfert défini comme  $\vec{K} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ .

### 3.6.1 Résultats dans le cas de positrons



**Figure 3.3:** TDCS pour l'ionisation de l'Argon  $3p$  par positron en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV. Le projectile est diffusé à une angle  $\theta_1 = 2^\circ$  en coïncidence avec l'électron éjecté ayant des énergies comprises entre 2,6 et 19 eV. Les résultats théoriques absolus sont représentés par la ligne noire pleine (*3CWZ*). Les données expérimentales normalisées de manière croisée (voir texte) sont représentées par des carrés noirs, extraites de [1]. Les lignes verticales en pointillé indiquent la direction du moment de transfert  $\vec{K}$  et sa direction opposée  $-\vec{K}$ .

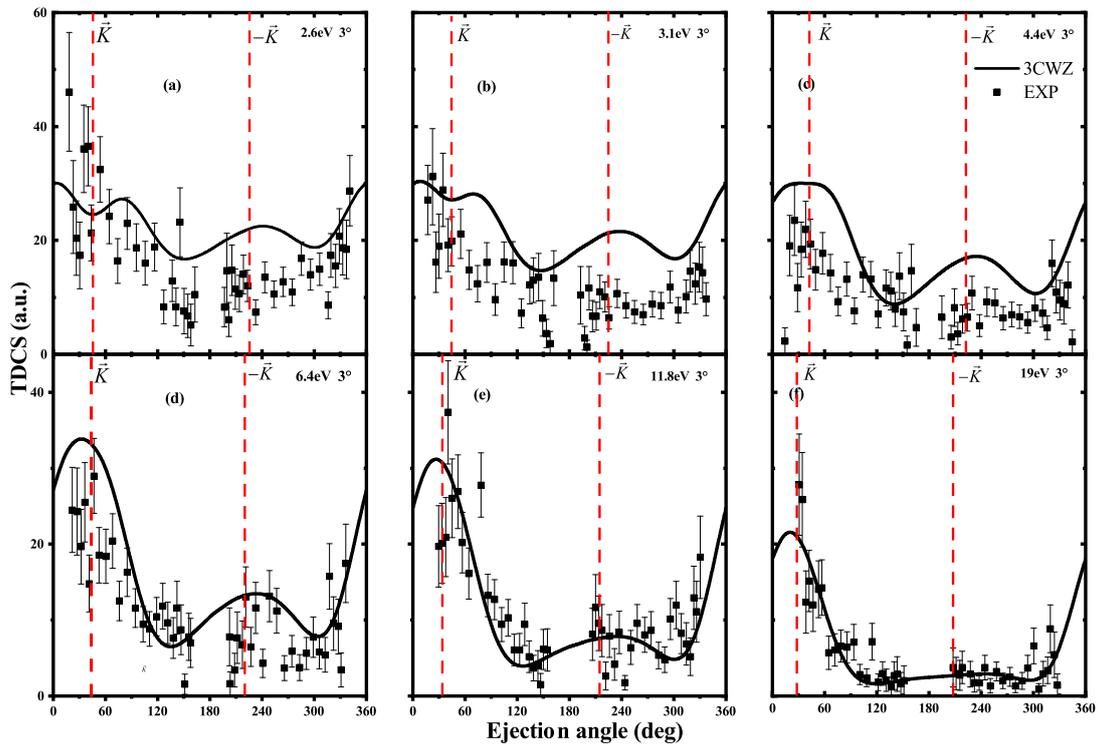


Figure 3.4: La même que figure (3.3) mais avec  $\theta_1 = 3^\circ$

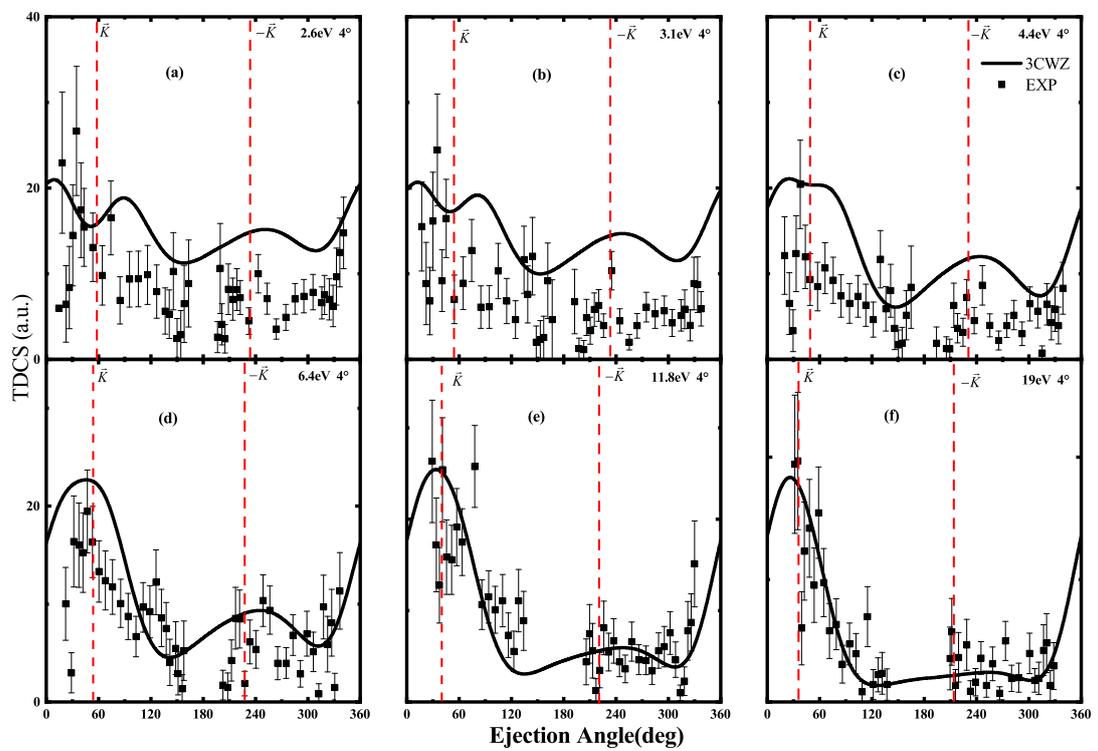
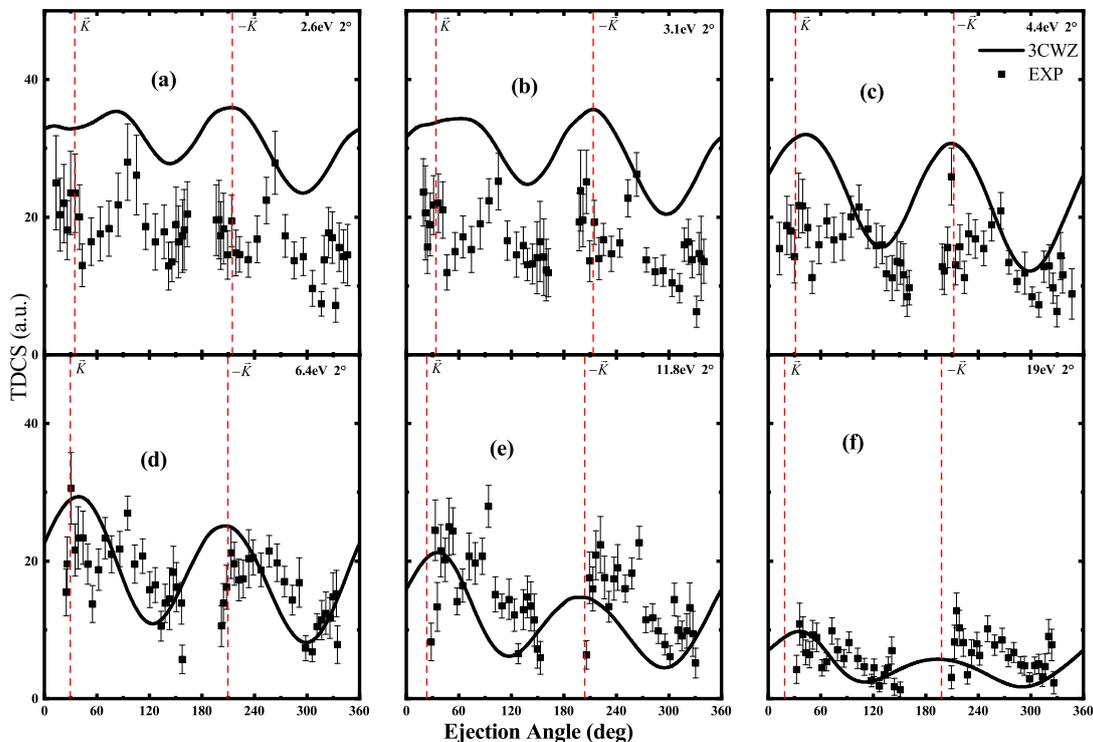


Figure 3.5: La même que figure (3.3) mais avec  $\theta_1 = 4^\circ$

Dans les figures (3.3 à 3.5), les TDCS pour l'ionisation par impact de positron ou la réaction ( $e^+, e^+e^-$ ), sont tracées pour des valeurs fixes de l'angle de diffusion et diverses énergies d'éjection, en fonction de l'angle d'éjection, nos résultats théoriques sont alors comparés aux mesures récentes de Dubois et de Lucio [1]. La première observation que l'on peut déjà faire est qu'un pic de recul est observé dans tous les cas, en accord avec les données expérimentales. Cela était en réalité prévisible, car les cinématiques étudiées ici correspondent à des régimes dipolaires (voir chapitre 1) caractérisés par un faible moment de transfert (dans ces conditions allant de 0.225 à  $1.2u.a$ ). Une structure à double pic dans la région binaire est également observée pour les énergies d'éjection plus faibles  $E_2 = 2.6$  et  $3.1eV$  pour tous les angles de diffusion. Les doubles pics sont plus prononcés dans la Fig.(3.4) (panneaux *a* et *b*) pour et dans la Fig.(3.5) (panneaux *a* et *b*) pour  $\theta_1 = 4^\circ$ . La structure à double pic dans la région binaire est généralement attribuée à la prédominance du caractère *p* de l'orbitale atomique ou moléculaire pour des cinématiques proches du régime de la région de la crête de Bethe ( $K \approx k_2$ ) [12]. Comme on peut le voir, par exemple dans la Fig.(3.4), les cinématiques sont caractérisées par ( $K = 0.319$  and  $k_2 = 0.437$ ) pour le panneau (*a*) et ( $K = 0.322$  and  $k_2 = 0.477$ ) pour le panneau (*b*), il est clair que ces cinématiques sont assez proches du régime de la région de la crête de Bethe.

En ce qui concerne les amplitudes, le modèle *3CWZ* prédit correctement les expériences inter-normalisées dans la plupart des cas. À un angle de diffusion de  $\theta_1 = 2^\circ$ , les données sont globalement bien reproduites par notre modèle, sauf pour l'énergie d'éjection  $E_2 = 3.1eV$  où les données sont nettement surestimées. De plus, aux angles de diffusion  $\theta_1 = 3^\circ$  et  $4^\circ$ , l'accord est moins bon pour les énergies d'éjection plus faibles. Il est effectivement observé dans les Figs.(3.4) et (3.5) (panneaux *a*, *b* et *c*) que les données sont surestimées pour les énergies comprises entre  $E_2 = 2.6$  et  $4.4eV$ . Pour des énergies d'éjection plus élevées, entre  $E_2 = 6.4$  et  $19eV$ , les résultats numériques prédisent bien le processus d'ionisation car ils sont en bien meilleur accord avec les données expérimentales. Nous pouvons donc affirmer que les TDCS calculées par impact de positron avec le modèle *3CWZ*, dans les différentes combinaisons d'angles de diffusion et d'énergies d'éjection, sont globalement en bon accord avec les expériences, sauf pour les énergies d'éjection plus faibles, où les données sont cependant surestimées.

### 3.6.2 Résultats dans le cas d'électrons



**Figure 3.6:** TDCS pour l'ionisation de l'Argon  $3p$  par électron en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV. Le projectile est diffusé à une angle  $\theta_1 = 2^\circ$  en coincidence avec l'électron éjecté ayant des énergies comprises entre 2,6 et 19 eV. Les résultats théoriques absolus sont représentés par la ligne noire pleine (3CWZ). Les données expérimentales normalisées de manière croisée (voir texte) sont représentées par des carrés noirs, extraites de [1]. Les lignes verticales en pointillé indiquent la direction du moment de transfert  $\vec{K}$  et sa direction opposée  $-\vec{K}$ .

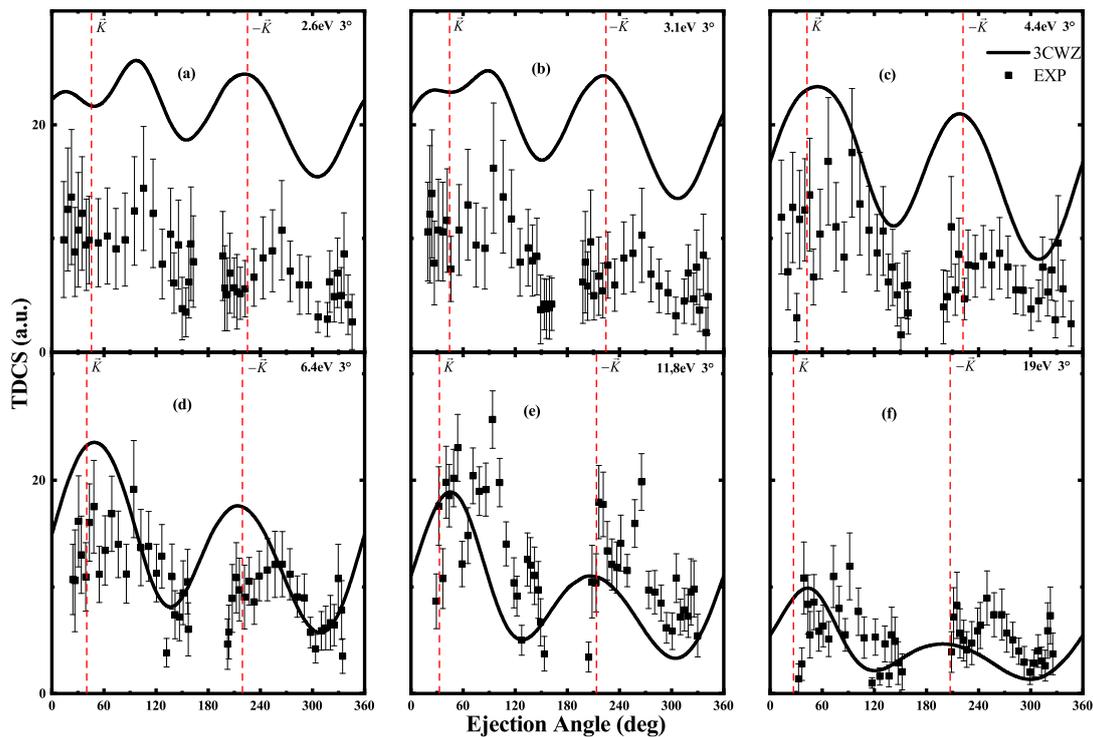


Figure 3.7: La même que figure (3.6) mais avec  $\theta_1 = 3^\circ$

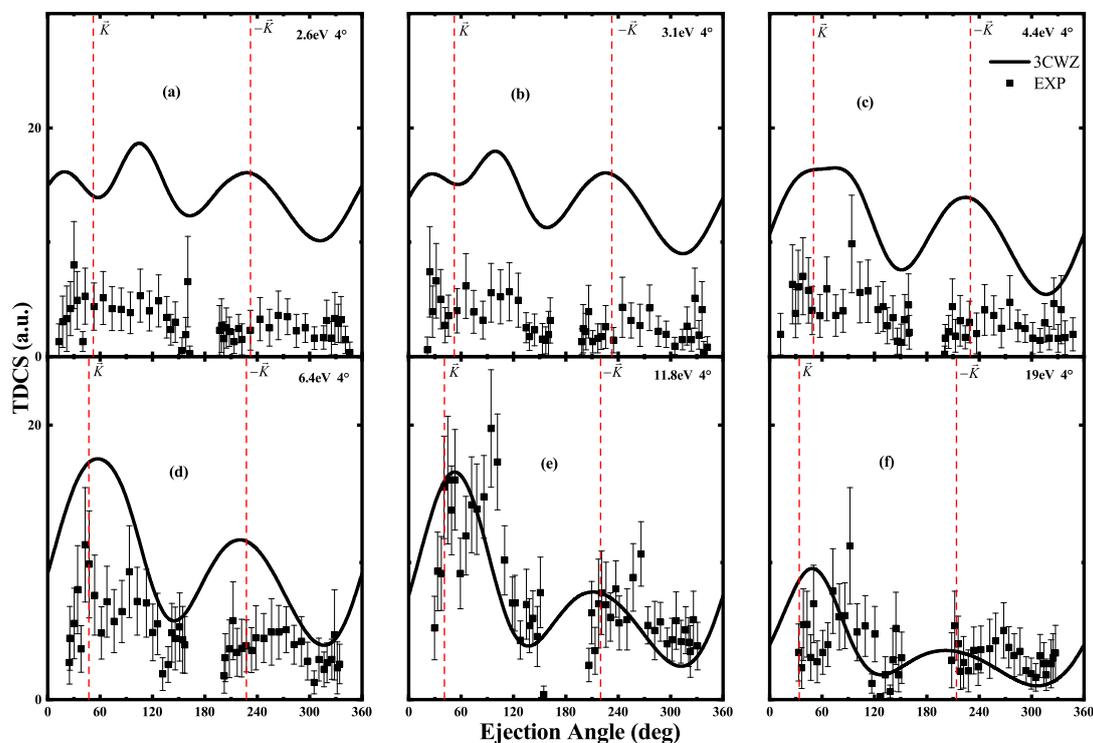


Figure 3.8: La même que figure (3.6) mais avec  $\theta_1 = 4^\circ$

Nous considérons maintenant les calculs dans le cas du processus par impact d'électron, où nos résultats théoriques sont affichés dans les Figs.(3.6 à 3.8) et comparés aux données expérimentales. On tient à rappeler que la normalisation est maintenue en utilisant le même facteur multiplicatif (0,26), car les mesures pour l'impact de positron et d'électron sont inter normalisées. Comme on peut le voir, la TDCS présente un pic de recul dans toutes les cinématiques, représentant une signature des régimes dipolaires, comme cela a été mentionné précédemment pour la réaction d'impact de positron. De plus, le pic de recul est généralement plus faible que le pic binaire dans un régime dipolaire.

Dans la présente étude, nous observons des pics de recul forts à des énergies d'éjection plus faibles ( $E_2 = 2.6, 3.1$  et  $4.4eV$ ) pour tous les angles de diffusion, tandis que pour des énergies d'éjection plus élevées, les pics de recul deviennent plus faibles et plus larges. Lorsque nous comparons nos résultats numériques avec les données dans les Figs.(3.6 à 3.8), il est évident que les expériences sont surestimées à des énergies d'éjection plus faibles ( $E_2 = 2.6, 3.1$  et  $4.4eV$ ) pour tous les angles de diffusion (panneaux *a*, *b* et *c*). La situation s'améliore ensuite pour des énergies d'éjection plus élevées, nos résultats présentent alors un bien meilleur accord avec les données (panneaux *d*, *e* et *f*). Une structure à double pic est également observée dans la région binaire dans la Fig.(3.7) (panneaux *a* et *b*) et la Fig.(3.8)(panneaux *a* et *b*), ces deux cas correspondant à des énergies d'éjection plus faibles ( $E_2 = 2.6$  et  $3.1eV$ ), comme cela a été observé pour les positrons.

### 3.6.3 Étude comparative de l'ionisation par impact d'électrons et de positrons

Pour une comparaison entre les deux processus (positron et électron), nous présentons une étude comparative des rapports des deux pics binaires dans les deux cas. L'intensité du premier pic ( $B_1$ ) est plus élevée que celle du deuxième pic ( $B_2$ ) pour les positrons, alors que pour les électrons, l'intensité de  $B_1$  est inférieure à celle de  $B_2$ . Néanmoins, ces rapports ( $\frac{B_2}{B_1}$ ) sont relativement proches, leurs valeurs étant pratiquement constantes : pour les positrons et pour les électrons. Dans la région de recul, contrairement aux expériences, aucune structure double n'est prédite par le modèle *3CWZ*, ni pour l'impact de positron ni pour l'impact d'électron.

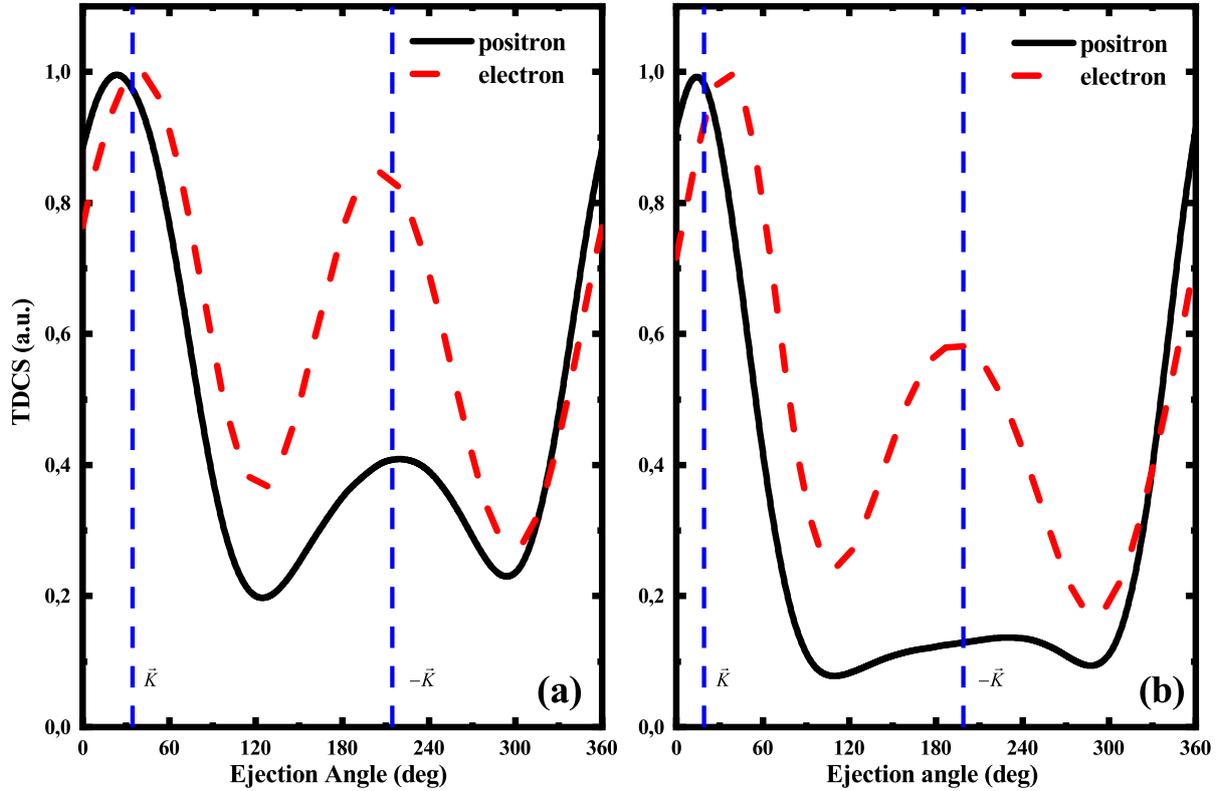
Lorsque nous examinons en détail les TDCS affichées dans les Figs.(3.3 à 3.8), il apparaît que les expériences montrent pratiquement la même amplitude pour les pics binaires et de recul dans toutes les cinématiques pour les électrons, tandis que pour les positrons, l'amplitude des pics de recul tend à diminuer avec l'augmentation des énergies d'éjection.

Nos résultats reproduisent dans l'ensemble les mêmes caractéristiques expérimentales pour les positrons (Figs.(3.3 à 3.5)) où l'accord est assez bon comparé aux données expérimentales. Néanmoins, pour les électrons, les données ne sont pas correctement reproduites dans toutes les cinématiques. En effet, il est observé dans les Figs.(3.6 à 3.8) (panneaux *a*, *b* et *c*) que les TDCS présentent des amplitudes quasi-identiques pour les pics binaires et de recul à tous les angles de diffusion pour des énergies d'éjection plus faibles. Cette tendance n'est malheureusement pas observée pour des énergies d'éjection plus élevées, où l'amplitude du pic de recul diminue de façon significative (panneaux *d*, *e* et *f*).

Lorsqu'on effectue la comparaison entre les intensités des pics binaires et de recul, on constate que le rapport intensité  $\frac{\text{recul}}{\text{binaire}}$  pour un moment de transfert faible est d'environ 75% pour les positrons et de 100% pour les électrons. Ces rapports diminuent avec l'augmentation du moment de transfert, atteignant 10% pour les positrons et 60% pour les électrons. Une autre investigation peut être faite en réalisant une étude comparative entre l'amplitude des pics entre les TDCS pour les résultats par impact de positrons et d'électrons, présentées en échelles absolues du modèle *3CWZ* dans les Figs.(3.3 à 3.8). Il est généralement observé que les pics binaires ont une amplitude plus élevée pour les positrons, tandis que dans la région de recul, les pics sont plus élevés pour les électrons. Nos résultats confirment en fait les interprétations de de Lucio et al. [1]. Une interprétation de ces résultats, attribuée à l'interaction post-collision (PCI), est donnée comme suit : lorsque le projectile et l'électron éjecté se déplacent dans la direction avant, l'électron éjecté est attiré dans le cas de l'impact de positron et repoussé dans le cas de l'impact d'électron, ce qui induit un renforcement du pic binaire pour l'impact de positron. Dans la région de recul, c'est l'inverse qui se produit : dans ce cas, l'électron éjecté subit une rétrodiffusion plus forte par l'ion résiduel pour l'impact d'électron que pour l'impact de positron.

### 3.6.4 Étude de l'effet de la charge du projectile sur le processus d'ionisation

dans cette étude, nous comparerons les deux processus directement afin de mieux comprendre les similitudes et les différences dans les mécanismes d'ionisation qu'ils engendrent, elle fournira également des informations complémentaires pour valider et affiner les modèles théoriques, notamment dans le cadre du modèle *3CWZ*.



**Figure 3.9:** TDCS pour l'ionisation de l'Argon  $3p$  par positron (ligne noire pleine) et par électron (ligne rouge en pointillés) en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de 200 eV. Le projectile est diffusé à des angles  $\theta_1 = 2^\circ$  en coïncidence avec l'électron éjecté ayant une énergie  $E_2 = 2.6 eV$  (panneau a) et  $E_2 = 19 eV$  (panneau b). Les résultats théoriques ont été normalisés à l'unité dans la région binaire pour un meilleur ajustement visuel.

Nous focalisons maintenant notre intérêt sur les positions des pics. Lorsqu'on observe simultanément la position des pics binaires et de recul pour les positrons et les électrons, on constate que, dans la région binaire, les pics binaires sont décalés vers l'arrière par rapport à la position du moment de transfert (vers  $0^\circ$ ) pour les positrons, tandis que pour les électrons, le décalage se fait vers l'avant (vers  $90^\circ$ ). Dans la région de recul, on observe plutôt l'inverse : le pic de recul est décalé vers des angles plus élevés pour les positrons (vers  $180^\circ$ ) et vers des angles plus faibles pour les électrons (vers  $90^\circ$ ). À titre d'illustration, nous présentons dans la Fig.(3.9), les résultats théoriques basés sur le modèle  $3CWZ$ , on voit clairement que les pics sont décalés vers des angles plus faibles (pour les positrons) ou plus élevés (pour les électrons) par rapport à la direction du moment de transfert  $\vec{K}$  dans la région binaire, tandis que dans la région de recul, on observe plutôt l'inverse. Cela révèle en fait une signature claire des effets de charge, prédite par notre modèle dans lequel l'interaction post-collision est incluse et traitée exactement, cela reflète aussi l'importance des effets de l'interaction post-collisionnelle (PCI) nécessaire pour l'interprétation des résultats : l'électron éjecté est soit repoussé par le projectile diffusé dans la

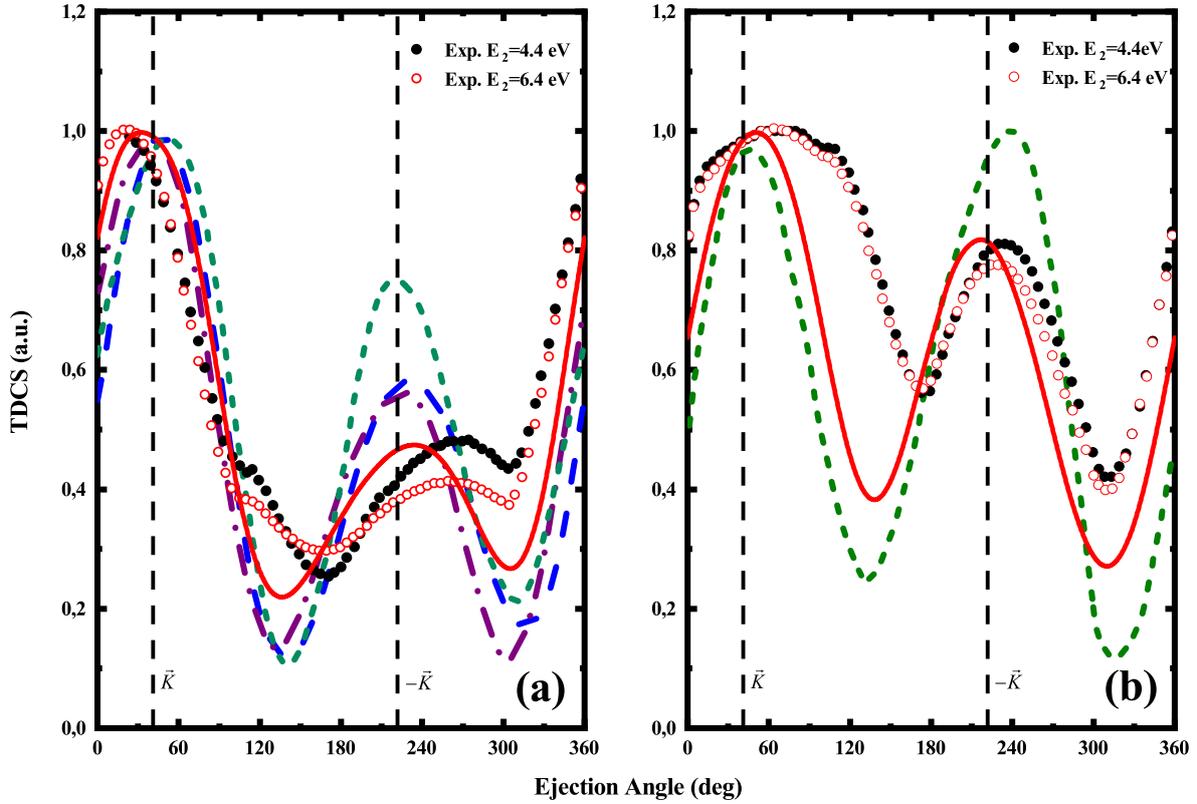
direction avant (pour l'impact d'électron), soit attiré et donc ralenti par le projectile (pour l'impact de positron), ce qui le fait conduit à se déplacer vers des angles plus faibles. Dans la région de recul, l'électron éjecté est attiré par l'ion résiduel, l'interaction post-collision induit alors un décalage vers l'avant pour l'impact de positron et un décalage vers l'arrière pour l'impact d'électron. Ces résultats sont généralement prédits par des modèles sophistiqués tels que l'approche *DWBA* [13], où la PCI est prise en compte via le facteur de Gamow.

### 3.6.5 Analyse comparative avec d'autres modèles théoriques

Nous concluons cette étude en effectuant une comparaison avec d'autres résultats théoriques disponibles. Comme l'ont souligné Dubois et de Lucio [1], les données expérimentales présentent une précision limitée en raison du faible courant de faisceau utilisé lors de l'expérience. Pour permettre une comparaison adéquate avec la théorie, il serait préférable d'appliquer une moyenne des calculs théoriques sur une plage d'énergies.

Nous présentons donc dans la Fig.(3.10) les résultats théoriques réalisés à une énergie d'éjection de  $E_2 = 5.4eV$  et un angle de diffusion de  $\theta_1 = 3^\circ$ , qui sont comparés aux expériences pour des énergies d'éjection simultanées ( $E_2 = 4.4eV$  et  $E_2 = 6.4eV$ ). Comme on peut le voir, nos résultats sont comparés aux données expérimentales et aux résultats théoriques basés sur les modèles *CDW-EIS* [14] et *DWBA* [13, 15]. Il est à noter que les deux modèles prennent en compte la PCI, mais de manières différentes. Le modèle *CDW-EIS* est en plus une approche à onde distordue complète, comme le *DWBA*, mais fournit une meilleure description asymptotique du canal initial. Dans la Fig.(3.10), la TDCS est affichée en fonction de l'angle d'émission pour l'impact de positron (panneau *a*) et l'impact d'électron (panneau *b*). Tous les résultats ont été normalisés à l'unité dans la région binaire pour une meilleure vision des positions des pics.

Pour l'impact de positron, notre TDCS calculée présente deux lobes, le lobe binaire étant plus intense que celui de recul, en accord avec les expériences. De plus, les positions des pics binaires et de recul sont décalées respectivement vers des angles d'émission plus faibles ou plus élevés par rapport à la direction de  $\vec{K}$  (ou  $-\vec{K}$ ), en bon accord avec les données. En effet, le pic binaire est situé à un angle de  $\approx 34^\circ$ , tandis que le pic de recul est à un angle de  $\approx 232^\circ$ . Les directions de  $\vec{K}$  et  $-\vec{K}$  sont respectivement de  $41.2^\circ$  et  $221.2^\circ$ .



**Figure 3.10:** Résultats théoriques de TDCS pour l'ionisation de l'Argon  $3p$  par positron (panneau *a*) et par électron (panneau *b*), en fonction de l'angle d'éjection à une énergie d'impact de  $200 \text{ eV}$  et un angle de diffusion  $\theta_1 = 3^\circ$  en coïncidence avec l'électron éjecté ayant une énergie  $E_2$ . Les données expérimentales sont représentées par des cercles noirs pleins (pour  $E_2 = 4.4 \text{ eV}$ ) et des cercles rouges ouverts (pour  $E_2 = 6.4 \text{ eV}$ ) extraites de [1]. Les résultats théoriques, correspondant à  $E_2 = 5.4 \text{ eV}$  sont :  $3CWZ$  (ligne rouge pleine),  $CDW-EIS$  (ligne verte en pointillés courts) [14],  $DWBA$  (ligne bleue en pointillés) [13] et  $DWBA$  (ligne pourpre en pointillés et pointillés) [15]. La théorie et les expériences ont été normalisées à l'unité dans la région binaire pour un meilleur ajustement visuel.

D'un autre côté, les deux autres modèles théoriques, à savoir  $DWBA$  et  $CDW-EIS$ , présentent des pics binaires et de recul qui ne prédisent pas correctement les positions indiquées par les données. De plus, les calculs  $DWBA$  et  $CDW-EIS$  surestiment clairement les expériences dans la région de recul, tandis que le modèle  $3CWZ$  s'avère plus performant, car il prédit mieux l'amplitude ainsi que la position du pic de recul. De même, une étude comparative est réalisée pour le processus d'impact d'électron (panneau *b*), où dans ce cas seuls les résultats théoriques des modèles  $3CWZ$  et  $CDW-EIS$  sont affichés. On voit que, dans la région binaire, les deux modèles sont capables de prédire quasi-similairement la position du pic binaire, qui est décalée vers l'avant par rapport à la position du moment du transfert  $\vec{K}$ . Dans la région de recul, la situation est différente : les résultats du  $3CWZ$  sont maintenant plus proches de l'expérience en termes d'amplitude et de localisation (la

position du pic est décalée vers l'arrière), tandis que le modèle *CDW-EIS* surestime clairement ces données expérimentales. La position du pic de recul présenté par le *CDW-EIS* est nettement décalée vers des angles plus élevés, en désaccord évident avec les données expérimentales.

Pour résumer la discussion de la Fig.(3.10), nous pouvons affirmer qu'au moins pour cette situation spécifique, le modèle *3CWZ* est capable de reproduire des résultats en meilleur accord avec les données que les modèles sophistiqués *DWBA* et *CDW-EIS*. Le modèle *3CWZ* est capable de prédire de manière satisfaisante les positions des pics binaires et de recul pour les réactions d'impact de positron et d'électron, exhibant effectivement des signatures des effets de charge.

### 3.7 Conclusion

Dans cette étude, l'ionisation de l'Argon  $3p$  par impact de positrons et d'électrons a été analysée en utilisant le modèle *3CWZ*, qui prend en compte l'interaction post collisionnelle de manière exacte. Le modèle prédit correctement la position des pics dans les régions binaires et de recul, montrant des décalages vers l'avant pour les électrons et vers l'arrière pour les positrons, avec des intensités de pics binaires plus fortes pour les positrons et des pics de recul plus marqués pour les électrons. Les comparaisons avec les données expérimentales montrent un bon accord global pour l'impact de positrons, bien que le modèle surestime l'impact des électrons à faible énergie d'éjection, l'accord s'améliore à des énergies plus élevées. Les résultats révèlent des caractéristiques détaillées des effets de charge, mieux que d'autres modèles théoriques connus. Bien que l'accord ne soit pas parfait, il reste satisfaisant, l'extension de cette étude à d'autres cibles enrichirait sûrement la compréhension des dynamiques d'ionisation par impact de positrons et d'électrons.

## Bibliographie

- [1] R. D. Dubois and O. G. de Lucio. *Atoms*, **9** :78, 2021.
- [2] M. Chinoune, S. Houamer, C. Dal Cappello, and A. Galstyan. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **49** :205201, 2016.
- [3] M. Brauner, J. S. Briggs, and H. Klar. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **22** :2265, 1989.
- [4] T. Khatir, S. Houamer, and C. Dal Cappello. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **52** :245201, 2019.
- [5] M. Attia, S. Houamer, T. Khatir, K. Bechane, and C. Dal Cappello. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **56** :075201, 2023.
- [6] K. Bechane, S. Houamer, T. Khatir, A. Tamin, and C. Dal Cappello. *Phys. Rev. A*, **109** :012812, 2024.
- [7] E. Clementi and C. Roetti. *At. Data Nucl. Data. Tables*, **14** :177–478, 1974.
- [8] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics : Non-Relativistic Theory*. Pergamon Press, Oxford, 1981.
- [9] M. A. Kornberg and J. E. Miraglia. *Phys. Rev. A*, **48** :3714–3719, 1993.
- [10] M. Chinoune. Thèse de doctorat. Université de Sétif1, 2017.
- [11] T. Khatir. Thèse de doctorat. Université de Sétif1, 2021.
- [12] H. A. Bethe. *Ann. Phys.*, **5** :325–400, 1930.
- [13] Purohit G., V. Patidar, K. K., and Sud. *Nucl. Instr. Methods B*, **269** :745–751, 2011.
- [14] O. G. de Lucio, S. Otranto, R. E. Olson, and R. D. DuBois. *Phys. Rev. Lett.*, **104** :163201, 2010.
- [15] R. I. Campeanu and C. Whelan. *Atoms*, **9** :33, 2021.

# Chapitre 4

## ÉTUDE DES EFFETS POST-COLLISIONNELS ET LES EFFETS DE DISTORSION DANS LES RÉACTIONS $(e, 3e)$

### 4.1 Motivation et but du travail

Dans cette étude, nous introduisons deux modèles avancés, le *BBK2DW* et le *BBK2CWZ*, développés pour décrire avec précision les interactions complexes entre deux électrons éjectés dans le champ d'ions lourds, comme celui du Krypton. Les deux modèles prennent en compte les effets post-collisionnels (PCI) ainsi que les effets de distorsion. Toutefois, le *BBK2DW* intègre les effets de distorsion réels, tandis que le *BBK2CWZ* utilise une approximation de ces effets, ce qui constitue un compromis avantageux en termes de temps de calcul.

Le modèle *BBK2DW* est appliqué à la double ionisation du Krypton, permettant de décrire avec précision les mécanismes observés, en particulier à des énergies d'impact élevées, et d'offrir des prédictions pour diverses configurations cinématiques des électrons éjectés. Parallèlement, le *BBK2CWZ* est employé pour étudier des cibles atomiques (Krypton et Argon), afin d'élargir la portée des prédictions théoriques et d'explorer comment les effets post-collisionnels et de distorsion varient selon les propriétés des cibles.

En comparant les résultats obtenus avec des différentes expériences existantes, cette étude renforce la fiabilité de l'approche théorique et met en lumière les caractéristiques

spécifiques des mécanismes de double ionisation pour chaque cible atomique. Cette démarche permet non seulement d’approfondir notre compréhension des interactions complexes dans les processus d’ionisation multiple, mais également de valider la capacité des modèles à prédire des observables expérimentales dans des conditions extrêmes.

## 4.2 Description des cibles

### 4.2.1 Atome d’Argon

Comme mentionné précédemment dans le chapitre 3, la description détaillée de l’atome d’Argon y a été traitée de manière exhaustive. Nous y avons abordé les aspects essentiels de sa structure électronique, ses niveaux d’énergie, ainsi que les caractéristiques pertinentes pour les processus de collision impliquant cet élément.

### 4.2.2 Atome de Krypton

Considérons l’élément chimique  $Kr$  ( $Z=36$ ), qui est un gaz inerte dans la dernière colonne du tableau périodique avec une configuration électronique :  $1s^2 2s^2 3s^2 2p^6 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$ .

Pour décrire l’électron actif, on utilise les fonctions d’onde de Clementi, dont les orbitales atomiques sont des fonctions d’onde de type Slater [1] :

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{k=1}^{N_i} \alpha_{ik} R_{n_{ik}}^{\epsilon_{ik}}(r) Y_{l_{ik} m_{ik}}(\hat{r}) \quad (4.1)$$

Où  $R_{n_{ik}}^{\epsilon_{ik}}(r) = N_{l_{ik}} r^{n_{ik}-1} e^{\epsilon_{ik} r}$  est la fonction radial et  $N_{l_{ik}}$  est le facteur de normalisation, les paramètres associés aux fonctions d’onde de Clementi, notés  $n_{ik}, l_{ik}, m_{ik}, \epsilon_{ik}, \alpha_{ik}$ , ainsi que les énergies d’ionisation des orbitales atomiques de l’atome d Krypton, sont répertoriés dans les tableaux (4.1), (4.2) et (4.3) :

Orbital	$\varepsilon$	$\alpha$			
		1S	2S	3S	4S
1S	32.83510	0.71521	0.38139	-0.14543	-0.04349
1S	40.94470	0.29911	-0.00123	0.00181	-0.00148
2S	27.45800	-0.01854	0.17175	-0.09037	-0.03219
2S	16.06600	0.00897	-1.07106	0.49528	0.16451
3S	14.29620	-0.00464	-0.14131	0.25451	0.08852
3S	9.10937	0.00190	-0.01520	-0.48504	-0.16671
3S	6.37181	-0.00088	0.00401	-0.75593	-0.33291
4S	3.84546	0.00026	-0.00122	-0.01203	0.46913
4S	2.57902	-0.00018	0.00562	0.02180	0.55106
4S	1.77192	0.00006	-0.00031	-0.00085	0.13572

**Tableau 4.1:** Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation d'orbitale atomique  $S$  de Krypton

Orbital	$\varepsilon$	$\alpha$		
		2P	3P	4P
2P	17.03660	0.72322	0.30185	0.08488
2P	26.04380	0.06774	0.02508	0.00571
3P	15.51000	0.22056	0.15903	0.04169
3P	9.49403	0.04478	-0.28475	-0.07425
3P	6.57275	-0.01672	-0.76440	-0.26866
4P	5.38507	0.00609	-0.10700	0.01341
4P	3.15603	-0.00195	-0.00562	0.51241
4P	2.02966	0.00111	0.00137	0.42557
4P	1.42733	-0.00040	-0.00053	0.18141

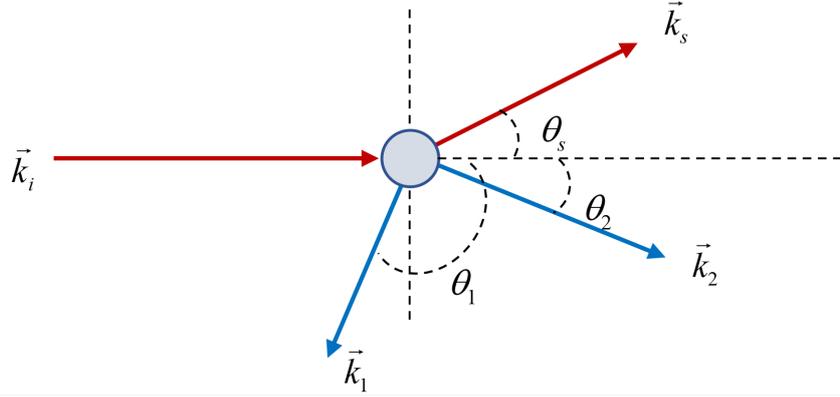
**Tableau 4.2:** Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation d'orbitale atomique  $P$

Orbital	$\varepsilon$	$\alpha$
3D	5.30650	0.50854
3D	3.36240	0.11070
3D	7.94963	0.24778
3D	10.35430	0.20584
3D	17.11420	0.02863

**Tableau 4.3:** Paramètres des fonctions d'onde de Clementi et énergies d'ionisation d'orbitale atomique  $D$

### 4.3 Description théorique du processus de double ionisation

Dans une collision de type ( $e, 3e$ ) qui schématise comme suit :



**Figure 4.1:** processus de la double ionisation

La conservation de l'énergie est assurée selon l'équation suivante :

$$\frac{k_i^2}{2} = \frac{k_s^2}{2} + \frac{k_1^2}{2} + \frac{k_2^2}{2} + E_i^{2+} \quad (4.2)$$

où  $k_i$ ,  $k_s$ ,  $k_1$  et  $k_2$  représentent respectivement les moments des électrons : incident, diffusé et éjectés, et  $E_i^{2+}$  est l'énergie d'ionisation double ( $38.4eV$ ) lorsque l'ion  $Kr^{2+}$  est dans son état fondamental  $^3P$  ( $E_i^{2+} = 40.3eV$  pour l'état  $^1D$  et  $E_i^{2+} = 42.5eV$  pour l'état  $^1S$ ). L'ionisation double du Krypton est étudiée ici dans l'approximation du cœur gelé (seuls les 6 électrons de la couche  $4p^6$  sont pris en compte).

$$e_i + D_i \rightarrow e_s + D_f \quad (4.3)$$

En désignant par  $e_i$  et  $e_s$  l'électron incident et l'électron diffusé respectivement,  $D_i$  est le déterminant de Slater associé à la couche  $4p^6$  :

$$D_i = \left| 4p_0 4\bar{p}_0 4p_1 4\bar{p}_1 4p_{-1} 4\bar{p}_{-1} \right| \quad (4.4)$$

Les états initiaux  $p_m$  et  $\bar{p}_m$  sont des états liés correspondant à des électrons de spin vers le haut/bas avec un nombre quantique magnétique donné  $m_l$ . Ce sont des fonctions d'onde Hartree-Fock répertoriées dans Clementi et Roetti [1] et ont été utilisées pour calculer  $D_i$  ainsi que les états finaux  $D_f$ . Les états finaux correspondant à la double ionisation des électrons de la couche  $4p$  du Krypton sont classés en trois termes symboliques :  $^3P$ ,  $^1D$ ,

et  ${}^1S$ . Ils sont composés de 15 déterminants propres  $D_f$ ,

$$D_f \stackrel{\text{def}}{\rightarrow} \left\{ D_f^{(j)} \right\}_{j=1,15} \quad (4.5)$$

par exemple pour l'ionisation des électrons  $4p_1$  et  $4\bar{p}_1$  :

$$D_f^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left| 4p_0 4\bar{p}_0 4p_{-1} 4\bar{p}_{-1} e_1 \bar{e}_2 \right| - \left| 4p_0 4\bar{p}_0 4p_{-1} 4\bar{p}_{-1} \bar{e}_1 e_2 \right| \right\} \quad (4.6)$$

Où  $e_1$  et  $e_2$  sont les deux électrons éjectés. Chaque déterminant appartenant à  $D_f$  et  $D_i$  est un vecteur propre de l'opérateur de spin  $\hat{S}^2$ , avec une valeur propre  $S = 0$ , ceci est dû à la loi de conservation du spin. Le détail de tous les déterminants se trouve dans ANNEXE B.

Nous appliquons maintenant l'approximation de Born au premier ordre (l'électron incident et l'électron diffusé sont décrits par une onde plane), et la section efficace différentielle cinq-fois (FDCS) est alors exprimée comme suit :

$$\frac{d^5\sigma}{d\Omega_s d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1 dE_2} = \sum_{j=1}^{15} \frac{k_s k_1 k_2}{k_i} |T_{ij}|^2 \quad (4.7)$$

Où

$$T_{ij} = \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} D_j \left| V \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} D_i \right\rangle \quad (4.8)$$

**Remarque :** Dans le chapitre 2, une notation différente ainsi qu'une autre expression de l'onde plane ont été utilisées. Les deux notations sont correctes et aboutissent au même résultat.

Le potentiel d'interaction s'écrit sous la forme (qui représente une interaction coulombienne entre l'électron incident et la cible) :

$$V = \frac{-6}{r_0} + \sum_{m=1}^6 \frac{1}{r_{0m}} \quad (4.9)$$

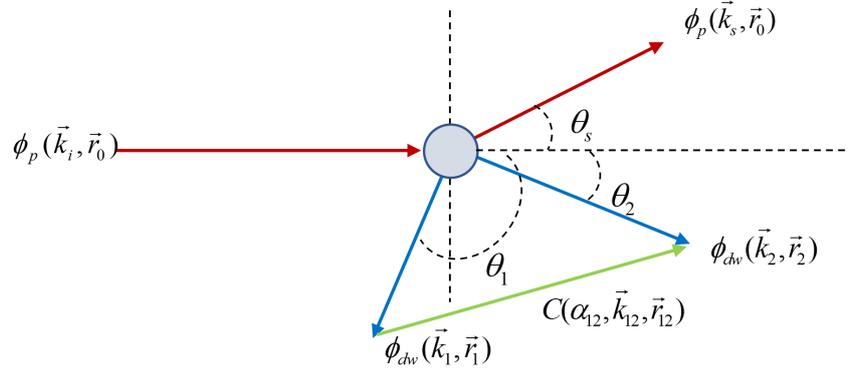
$r_0$  et  $r_m$  désignent la position de l'électron incident et des 6 électrons de la couche  $4p^6$ .

## 4.4 Notion et application du modèle *BBK2DW*

Dans les réactions d'ionisation, les effets de distorsion sont pris en compte en ajustant la description des électrons éjectés. Au lieu de représenter l'électron par une onde Coulombienne simple, on utilise une onde distordue, qui corrige bien la description des in-

teractions entre les électrons éjectés et l'ion résiduel. En fait, cette approche tient compte des modifications de la structure électronique de l'ion résiduel ce qui entraîne une distorsion dans les ondes qui représentent les électrons dans la voie de sortie, ce traitement corrige les comportements des électrons sortant de la réaction (trajectoire et son énergie).

Ces interactions complexes sont souvent modélisées par la théorie des ondes distordues, le modèle a montré de bons résultats et améliore l'accord avec les expériences [2–5]. Notre travail, résulte d'une collaboration entre trois laboratoires — l'Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg (ICPMS), le Laboratoire de Physique et Chimie Théorique (LPCT) de Metz, et le Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques (LPQSD) de Sétif. Nous nous sommes proposés, dans cette étape, de calculer les sections efficaces de réactions (e,3e) des cibles atomiques en utiliserons le modèle *BBK2DW*, qui prend en compte simultanément les effets de distorsion et les effets post-collisionnels. Nous comparons par la suite les résultats obtenus avec l'expérience publiée dans l'article de revue [6]. On peut illustrer le modèle *BBK2DW* comme suit :



**Figure 4.2:** Schémas pour processus de double ionisation pour le modèle *BBK2DW*

$\phi_{dw}$  représente l'onde distordue qui s'écrit :

$$\phi_{dw}(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} 4\pi i^l \exp(-i(\sigma_l + \delta_l)) \frac{F_l^{dw}(\alpha, k, r)}{kr} Y_{l,m}(\theta_k, \varphi_k) Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) \quad (4.10)$$

Où  $\alpha = \frac{Z}{k}$  est le paramètre de Sommerfeld,  $F_l^{dw}(\alpha, k, r)$  est la solution de l'équation différentielle suivante :

$$\left[ \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + E_l - \frac{l(l+1)}{2r^2} - U_{\text{stat}} \right] F_l^{dw}(\alpha, k, r) = 0 \quad (4.11)$$

Le potentiel statique  $U_{\text{stat}}$  est défini comme la somme de deux composantes : le potentiel coulombien  $V_c$ , qui représente l'interaction électrostatique de longue portée entre la

cible et les électrons éjectées, et le potentiel de courte portée  $V_{sr}$ , qui décrit les interactions effectives sur de faibles distances.

$$U_{\text{stat}} = V_c + V_{sr} \quad (4.12)$$

Ce potentiel est le potentiel produit par l'ion résiduel, ressenti par chaque électron éjecté, et responsable d'un déphasage  $\delta_l$  en plus du déphasage coulombien  $\sigma_l$ , ce dernier s'écrit :

$$\sigma_l = \arg \Gamma(l + 1 + i\alpha) \quad (4.13)$$

Nous avons utilisé une méthodologie développée par Salvat et al [7]. Pour calculer  $\delta_l$ . En combinant les fonctions de Bessel sphériques régulières et irrégulières  $F_l$  et  $G_l$ , ainsi que la dérivée logarithmique  $R_l$  de la solution régulière pour le potentiel  $U_{\text{stat}}$ , le déphasage peut être exprimé comme suit :

$$\delta_l = \arctan \left( \frac{R_l F_l - F_l'}{G_l' - R_l G_l} \right) \quad (4.14)$$

l'élément de matrice dans ce modèle s'exprime sous la forme suivante :

$$T_{ij} = \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} D_j' C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \middle| V \middle| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} D_i \right\rangle \quad (4.15)$$

Où  $C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12})$  représente l'interaction post-collisionnelle entre les éjectés.

$$C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) = e^{\frac{\pi}{4k_{12}}} {}_1F_1(-i\alpha_{12}, 1, -i(k_{12}r_{12} - \vec{k}_{12} \cdot \vec{r}_{12})) \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{12}}\right) \quad (4.16)$$

${}_1F_1$  et  $\Gamma$  sont la fonction hypergéométrique confluente et est la fonction gamma.

$$\alpha_{12} = -\frac{1}{2k_{12}} \quad \text{où} \quad \vec{k}_{12} = \frac{1}{2}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \quad (4.17)$$

$D_i$  représente l'état initial, tandis que  $D_j'$  désigne un état final possible où les électrons éjectés,  $e_1$  et  $e_2$ , sont décrits par des ondes distordues :

$$\begin{aligned} \phi_{dw}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} 4\pi i^l \exp(-i(\sigma_l + \delta_l)) \frac{F_l^{dw}(\alpha_1, k_1, r_1)}{k_1 r_1} Y_{l,m}(\theta_{k_1}, \varphi_{k_1}) Y_{l,m}^*(\theta_1, \varphi_1), \\ \phi_{dw}(\vec{k}_2, \vec{r}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} 4\pi i^l \exp(-i(\sigma_l + \delta_l)) \frac{F_l^{dw}(\alpha_2, k_2, r_2)}{k_2 r_2} Y_{l,m}(\theta_{k_2}, \varphi_{k_2}) Y_{l,m}^*(\theta_2, \varphi_2). \end{aligned} \quad (4.18)$$

## 4.5 Modèle *BBK2CWZ*

Dans cette méthode, l'onde distordue est remplacée par une onde coulombienne dont la charge devient variable. Cette charge effective  $Z(r)$ , qui dépend de la distance  $r$ , permet d'approcher les effets de distorsion. Chaque électron voit la charge du noyau  $Z$  ( $Z = 36$ ) à  $r = 0$  et  $Z = 2$  à  $r \rightarrow \infty$  comme présenter dans la figure (4.3)

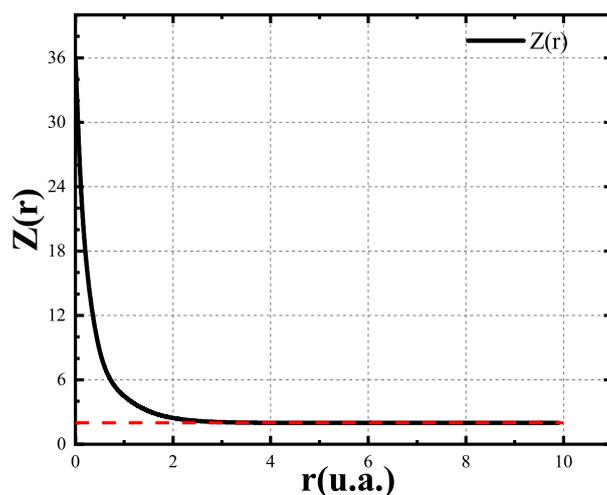
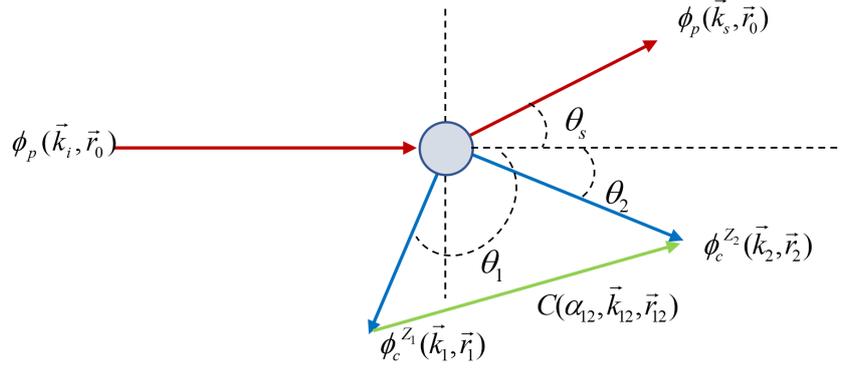


Figure 4.3: Charge variable vue par les éjectés

Le calcul de l'élément de matrice dans ce modèle est extrêmement complexe et demande beaucoup de temps en raison de la nécessité d'évaluer une intégrale en six dimensions. Dans le cas du modèle *BBK2CW*, l'intégrale à six dimensions (sur les variables de la réaction) a été réduite à une intégrale en trois dimensions en utilisant le double transformé de Fourier [8]. Lors de l'utilisation de cette méthode, un paramètre qui doit tendre vers 0 est introduit [9]. Le nombre de points d'intégration nécessaires est d'environ 30000000 [9]. Pour le modèle *BBK2DW*, l'expression analytique des transformées de Fourier n'est plus possible, et il est nécessaire d'effectuer une intégration numérique supplémentaire avec environ une centaine de points ainsi qu'une dizaine d'ondes partielles. Le temps de calcul augmente alors d'un facteur de 10. On peut illustrer ce modèle comme suit :



**Figure 4.4:** Schémas pour processus de double ionisation pour le modèle *BBK2CWZ*

Ainsi, l'élément de matrice dans ce modèle s'exprime sous la forme suivante :

$$T_{ij} = \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} D'_j C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \middle| V \middle| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} D_i \right\rangle \quad (4.19)$$

À l'image de l'élément  $T_{ij}$  dans le modèle *BBK2DW*, mais avec  $e_1$  et  $e_2$  représentés cette fois par des ondes coulombiennes à charge variable, et où  $C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12})$  est traité de la même manière

$$\begin{aligned} \phi_c^{Z_1}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} 4\pi i^l \exp(-i\sigma_l) \frac{\tilde{F}_l(\alpha_1, k_1, r_1)}{k_1 r_1} Y_l^m(\theta_{k_1}, \varphi_{k_1}) Y_l^{m*}(\theta_1, \varphi_1), \\ \phi_c^{Z_2}(\vec{k}_2, \vec{r}_2) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l,m} 4\pi i^l \exp(-i\sigma_l) \frac{\tilde{F}_l(\alpha_2, k_2, r_2)}{k_2 r_2} Y_l^m(\theta_{k_2}, \varphi_{k_2}) Y_l^{m*}(\theta_2, \varphi_2). \end{aligned} \quad (4.20)$$

$\sigma_l$  est le déphasage coulombien,  $\alpha_1 = \frac{Z_1(r)}{k_1}$  et  $\tilde{F}_l(\alpha_1, k_1, r_1)$  est la solution de :

$$\left[ \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr_1^2} + E_1 - \frac{l(l+1)}{2r_1^2} - V_c \right] \tilde{F}_l(\alpha_1, k_1, r_1) = 0 \quad (4.21)$$

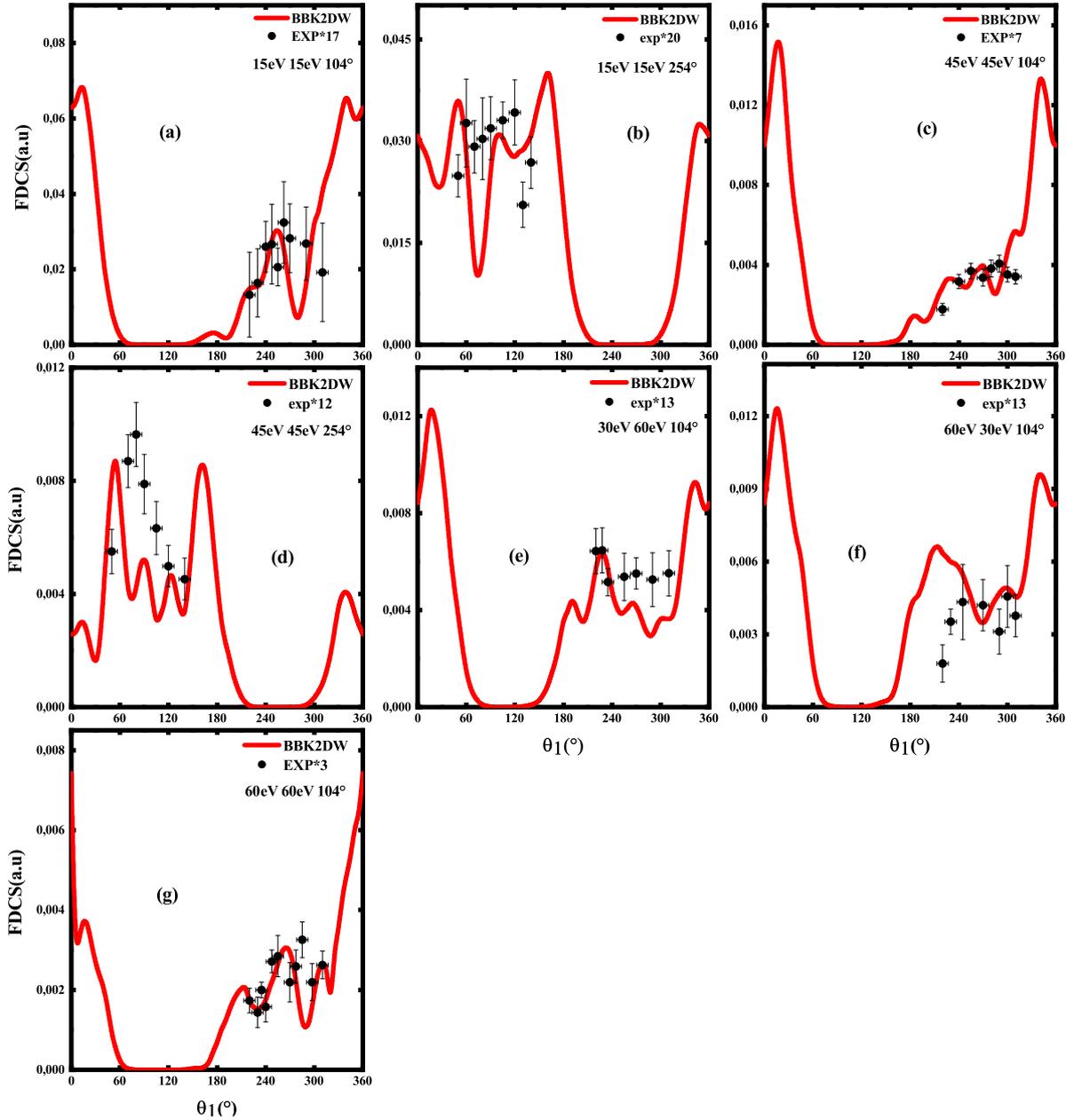
## 4.6 Résultats et discussion

### 4.6.1 Résultats du modèle *BBK2DW*

L'une des difficultés de l'étude de la double ionisation des gaz nobles réside dans la prise en compte des différents états spectroscopiques de l'ion. L'état fondamental de l'ion est l'état  $^3P$ , mais les deux autres états ( $^1D$  et  $^1S$ ) possèdent une énergie assez proche (avec une différence respectivement de 1,9eV et de 4,1eV). L'expérience a été réalisée avec une incertitude sur l'énergie de l'électron diffusé comprise entre 9eV et 15eV, et pour les électrons éjectés entre 5eV et 8eV [6]. Il est donc impossible de déterminer précisément

quel est l'état de l'ion. Dans ce travail, nous négligeons la contribution possible de l'état  $^1S$ , comme l'ont fait [9], car son apport reste de toute façon bien faible devant celui des deux autres états. Nous avons trouvé le meilleur accord possible pour une contribution de 10% de l'ion  $^3P$  et de 90% de l'ion  $^1D$ .

Dans les différents figures, on observe une correspondance variable entre les résultats théoriques et expérimentaux. Par exemple, dans les figures (4.5-a),(4.5-c) et (4.5-g), les prédictions théoriques semblent bien correspondre aux données expérimentales dans certaines régions angulaires, avec des pics qui coïncident globalement en position et en intensité. Cependant, dans les autres figures, des différences sont visibles. Les différences entre le modèle et les données pourraient être dues à des effets d'ordre supérieur non inclus dans le modèle  $BBK2DW$  ou les incertitudes expérimentales.



**Figure 4.5:** Section efficace différentielle (FDCS) de Krypton  $4p$  avec une énergie de diffusion  $E_s = 5500eV$  et  $\theta_s = 1^\circ$  en fonction de l'angle d'éjection de l'électron  $\theta_1$ , pour des angles d'éjection de l'électron 2 fixes de  $\theta_2 = 104^\circ$  et  $\theta_2 = 254^\circ$ . Les graphiques comparent le modèle théorique *BBK2DW* (ligne rouge pleine) aux données expérimentales (points noirs avec barres d'erreur).

Les angles des pics pour les différentes situations pour le modèle *BBK2DW* sont présentés dans le tableau (4.4)

Figure	Angles ( $^{\circ}$ )
<b>Figure 4.5-a</b>	12 $^{\circ}$ , 255 $^{\circ}$ , 339 $^{\circ}$
<b>Figure 4.5-b</b>	49 $^{\circ}$ , 99 $^{\circ}$ , 161 $^{\circ}$ , 347 $^{\circ}$
<b>Figure 4.5-c</b>	17 $^{\circ}$ , 184 $^{\circ}$ , 229 $^{\circ}$ , 269 $^{\circ}$ , 342 $^{\circ}$
<b>Figure 4.5-d</b>	54 $^{\circ}$ , 88 $^{\circ}$ , 121 $^{\circ}$ , 161 $^{\circ}$ , 338 $^{\circ}$
<b>Figure 4.5-e</b>	17 $^{\circ}$ , 192 $^{\circ}$ , 228 $^{\circ}$ , 342 $^{\circ}$
<b>Figure 4.5-f</b>	16 $^{\circ}$ , 212 $^{\circ}$ , 299 $^{\circ}$ , 341 $^{\circ}$
<b>Figure 4.5-g</b>	16 $^{\circ}$ , 213 $^{\circ}$ , 264 $^{\circ}$ , 311 $^{\circ}$

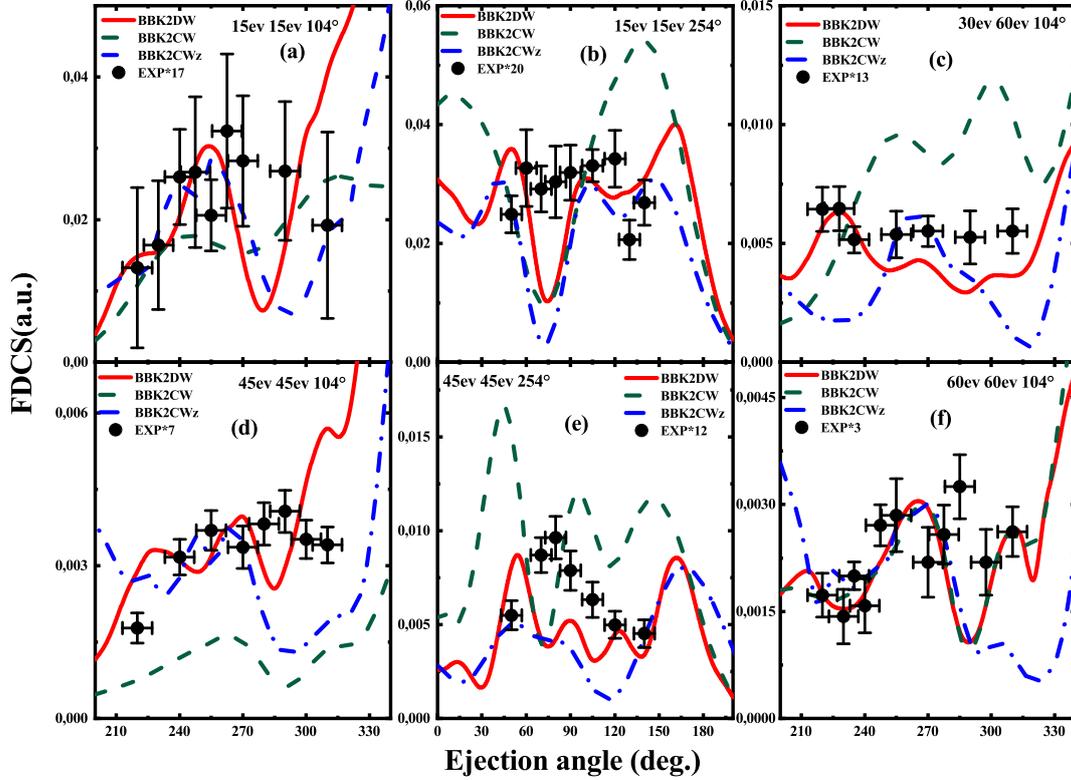
**Tableau 4.4:** Les angles des pics observés pour (figure 4.5)

Le processus Shake off ( $SO$ ) se déroule en deux étapes. Tout d'abord, un premier électron est éjecté de la cible dans une direction spécifique par le projectile, correspondant au point où la probabilité de diffusion est la plus élevée. Il est important de noter que cette direction ne correspond pas toujours à celle du moment de transfert [10]. Lorsqu'un électron est éjecté, cela perturbe le potentiel électrique local autour de la zone ionisée, ce qui entraîne des interactions entre les électrons. En raison de la répulsion électrostatique entre les électrons et la secousse de la cible, le deuxième électron est principalement éjecté dans une direction opposée au premier électron. Si les deux électrons ont la même énergie, ils ont tendance à être éjectés dos à dos, formant ainsi un angle de 180 $^{\circ}$  entre eux. Dans le processus  $TS1$ , les deux électrons éjectés idéalement forment un angle de 90 $^{\circ}$  entre eux. Cependant, si les énergies des électrons éjectés sont proches et faibles, cet angle est toujours supérieur à 90 $^{\circ}$ . Cela signifie que si les électrons éjectés ont des énergies similaires et faibles, ils peuvent se disperser dans des directions différentes, formant ainsi un angle supérieur à 90 $^{\circ}$  entre eux.

Dans la figure (4.5-a), le premier pic, à 12 $^{\circ}$ , donne une différence de 92 $^{\circ}$ , ce qui correspond au mécanisme  $TS1$ . Le deuxième pic, à 255 $^{\circ}$ , donne une différence de 151 $^{\circ}$ , classée dans le mécanisme  $SO$ . Enfin, le troisième pic, à 339 $^{\circ}$ , avec une différence de 235 $^{\circ}$ , appartient également au mécanisme  $SO$ . Passons maintenant à la figure (4.5-b). Ici, le premier pic, à 49 $^{\circ}$ , donne une différence de 205 $^{\circ}$ , classée en  $SO$ . Le deuxième pic, à 99 $^{\circ}$ , présente la même différence de 155 $^{\circ}$ , également classée en  $SO$ . Le troisième pic, à 161 $^{\circ}$ , donne une différence de 93 $^{\circ}$ , appartenant au mécanisme  $TS1$ , tandis que le quatrième pic, à 347 $^{\circ}$ , avec une différence similaire de 93 $^{\circ}$ , relève lui aussi du mécanisme  $TS1$ . Dans la figure (4.5-c), le premier pic, à 17 $^{\circ}$ , donne une différence de 87 $^{\circ}$ , classée dans le mécanisme  $SO$ . Le deuxième pic, à 184 $^{\circ}$ , donne une différence légèrement moindre de 80 $^{\circ}$ , également en  $SO$ . En revanche, le troisième pic, à 229 $^{\circ}$ , avec une différence de 125 $^{\circ}$ , appartient au mécanisme  $TS1$ . Le quatrième pic, à 269 $^{\circ}$ , avec une différence marquée de 165 $^{\circ}$ , est classé en  $SO$ . Enfin, le dernier pic à 342 $^{\circ}$ , donne une différence de 238 $^{\circ}$ , correspondant au mé-

canisme *SO*. La figure (4.5-d) montre également que le premier pic, à  $54^\circ$ , donne une différence de  $200^\circ$ , classée en *SO*, tandis que le pic, à  $88^\circ$ , présente une différence plus élevée de  $166^\circ$ , également en *SO*. Les pics, à  $121^\circ$  et  $161^\circ$ , donnent respectivement des différences de  $133^\circ$  et  $93^\circ$ , relevant des mécanismes *SO* et *TS1*. Enfin, le dernier pic, à  $338^\circ$ , avec une différence de  $84^\circ$ , est classé en *SO*. Pour la figure (4.5-e), le premier pic, à  $17^\circ$ , donne une différence de  $87^\circ$ , classée dans le mécanisme *SO*. Le deuxième pic, à  $192^\circ$ , présente une différence très proche de  $88^\circ$ , également classée en *SO*. Le troisième pic, à  $228^\circ$ , avec une différence de  $124^\circ$ , relève du mécanisme *TS1*, tandis que le dernier pic, à  $342^\circ$ , avec une différence de  $238^\circ$ , appartient également au mécanisme *SO*. Dans la figure (4.5-f), le premier pic, à  $16^\circ$ , donne une différence de  $88^\circ$ , appartenant au mécanisme *SO*. Le deuxième pic, à  $212^\circ$ , avec une différence de  $108^\circ$ , est associé au mécanisme *TS1*. Quant au troisième pic, à  $299^\circ$ , il donne une différence importante de  $195^\circ$ , classée en *SO*, tandis que le dernier pic, à  $341^\circ$ , avec une différence de  $237^\circ$ , appartient au mécanisme *SO*. Enfin, dans la figure (4.5-g), le premier pic, à  $16^\circ$ , donne une différence de  $88^\circ$ , appartenant au mécanisme *SO*. Le deuxième pic, à  $213^\circ$ , présente une différence de  $109^\circ$ , classée dans le mécanisme *TS1*. Le troisième pic, à  $266^\circ$ , avec une différence de  $162^\circ$ , est classé en *SO*, tandis que le dernier pic, à  $311^\circ$ , avec une différence de  $207^\circ$ , relève également du mécanisme *SO*.

### 4.6.2 Comparaison du modèle $BBK2DW$ avec $BBK2CW$ et $BBK2CWZ$



**Figure 4.6:** Section efficace différentielle (FDCS) de Krypton  $4p$  avec une énergie de diffusion  $E_s = 5500eV$  et  $\theta_s = 1^\circ$  en fonction de l'angle d'éjection de l'électron  $\theta_1$ , pour des angles d'éjection de l'électron 2 fixes de  $\theta_2 = 104^\circ$  et  $\theta_2 = 254^\circ$ . Les graphiques comparent les modèles théoriques ( $BBK2DW$ ,  $BBK2CW$  et  $BBK2CWZ$ ) aux données expérimentales (EXP) pour diverses énergies d'éjection pour électron 1. Les modèles présentent des prédictions différentes pour les distributions angulaires :  $BBK2DW$  (ligne rouge pleine),  $BBK2CW$  (ligne verte en pointillés) et  $BBK2CWZ$  (ligne bleue en tirets-pointillés) sont comparés aux mesures expérimentales (points noirs avec barres d'erreur).

Cette figure montre une comparaison entre les sections efficaces différentielles (FDCS) théoriques, calculées à l'aide de trois modèles ( $BBK2DW$ ,  $BBK2CW$  et  $BBK2CWZ$ ), et les données expérimentales (points noirs avec barres d'erreur) pour différentes configurations cinématiques. Les figures (4.6-a) à (4.6-f) représentent chacun la FDCS en fonction de l'angle d'éjection de l'électron, noté  $\theta_1$ , pour des énergies et des angles de diffusion spécifiques. Le modèle  $BBK2DW$  est représenté par la ligne rouge pleine, le modèle  $BBK2CW$  par la ligne verte en tirets, et le modèle  $BBK2CWZ$  par la ligne bleue en tirets-pointillés. Dans les figures (4.6-a), (4.6-d), et (4.6-e), on observe que les prédictions du modèle  $BBK2DW$  sont généralement plus proches des données expérimentales, en particulier dans les régions où les pics correspondent mieux en position et en intensité aux mesures. Le modèle  $BBK2CWZ$ , bien qu'il présente certains motifs similaires, a tendance à s'écarter

davantage des résultats expérimentaux dans la forme et l'amplitude des pics. Le modèle  $BBK2CW$ , quant à lui, présente des différences plus marquées, indiquant qu'il décrit moins bien la distribution angulaire.

Dans les figures (4.6-a), (4.6-b), et (4.6-d), nous remarquons que les prédictions du modèle  $BBK2CWZ$  sont assez proches de celles du modèle  $BBK2DW$ , avec des profils similaires en termes de position et de forme des pics avec quelques différences d'amplitude. Cela suggère que le modèle  $BBK2CWZ$  contient certains effets de distorsion et corrige le modèle descriptif mieux que  $BBK2CW$ .

Dans la figure (4.6-f), où l'énergie incidente est plus élevée ( $60eV$ ), les trois modèles théoriques  $BBK2DW$ ,  $BBK2CW$ , et  $BBK2CWZ$  prédisent les données expérimentales de la même façon, cela est probablement dû au fait qu'à haute énergie, les distorsions sont moins ressenties.

Les différences observées entre les trois modèles théoriques dans les autres figures peuvent être attribuées à des variations dans la prise en compte des effets de distorsion et des interactions post-collisionnelles dans chaque approche. Le modèle  $BBK2DW$ , qui inclut ces effets de manière plus détaillée, semble fournir une meilleure correspondance globale avec les données expérimentales, bien que certaines déviations subsistent. Les résultats soulignent l'importance de modélisations sophistiquées pour reproduire fidèlement les détails des distributions angulaires observées expérimentalement.

**REMARQUE** : il est essentiel de revenir sur les travaux pionniers réalisés par le groupe de Lahmam-Bennani d'Orsay. Les travaux du groupe ont été d'un apport inestimable aux processus des réactions d'ionisations, les différences rencontrées entre leurs travaux et les modèles théoriques sont parfois dues aux marges d'erreur expérimentales relativement larges observées dans leurs mesures.

Le besoin de reproduire ces mesures avec des techniques expérimentales avancées et une meilleure résolution est d'autant plus crucial que les nouveaux modèles nécessitent des données d'une grande finesse pour valider des prédictions subtiles, notamment dans les régimes où les effets de corrélation et d'interférence jouent un rôle central. Affiner les données expérimentales pourrait révéler des détails non observés précédemment et enrichir notre compréhension des mécanismes d'ionisation complexe, ouvrant la voie à des avancées significatives dans ce domaine.

### 4.6.3 Application du $BBK2CWZ$ pour l'Argon

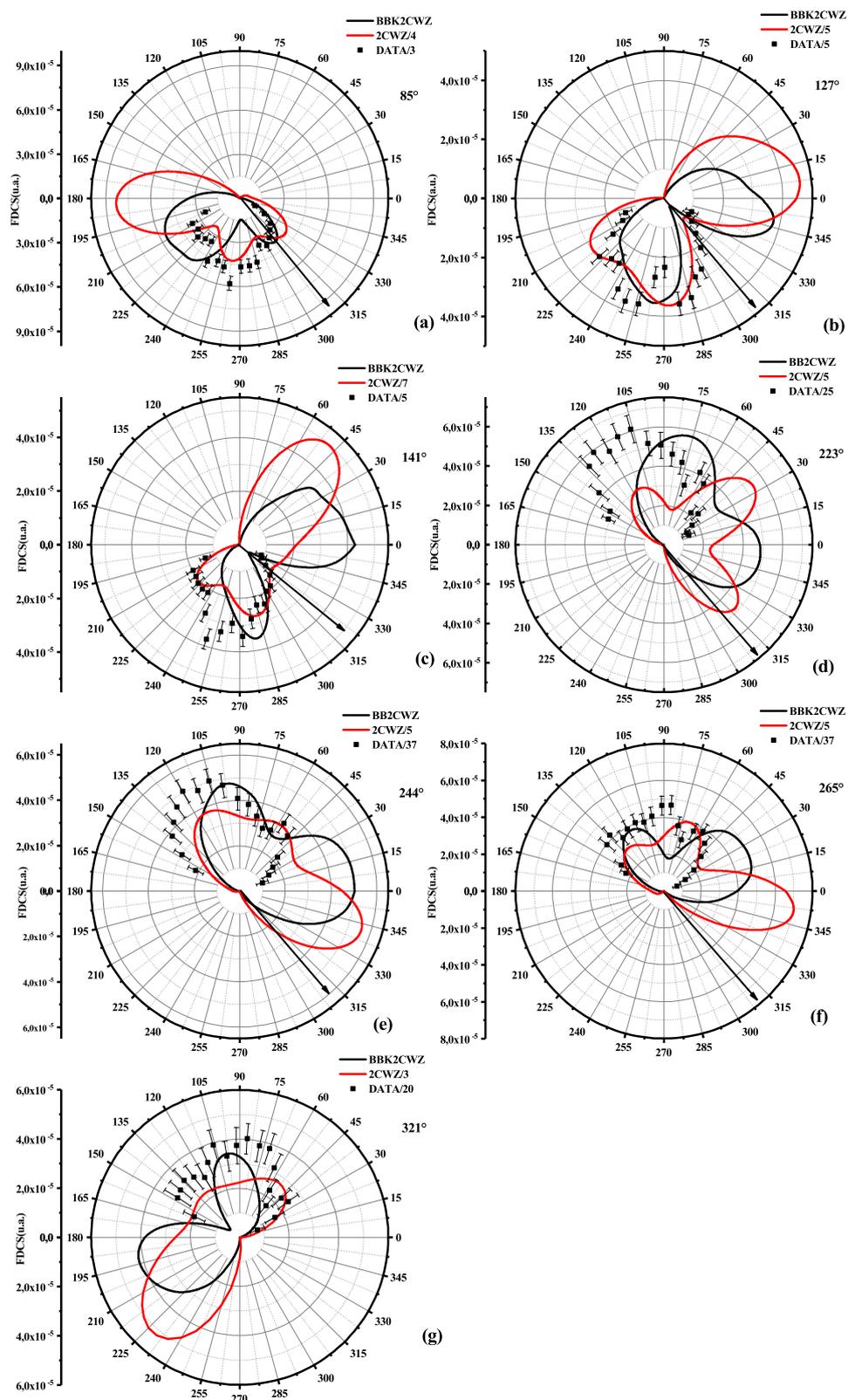
Nous calculons la FDCS pour la double ionisation de l'Argon avec une énergie incidente élevée ( $5563, 2eV$ ) et un faible angle de diffusion ( $0.45^\circ$ ) [11], les électrons éjectés

étant détectés à une énergie égale ( $10eV$ ). Comme dans le cas du Krypton, nous adoptons une contribution de 10% de l'ion  $^3P$  et de 90% de l'ion  $^1D$ . Par ailleurs, nous comparons nos résultats avec ceux du modèle théorique  $2CWZ$  présenté précédemment dans [9].

À  $85^\circ$  (figure 4.7-a), le modèle  $BBK2CWZ$  (ligne noire) et les données expérimentales (points) montrent un bon accord au niveau des pics centraux, tandis que le modèle  $2CWZ$  (ligne rouge) dévie davantage, en particulier dans les pics éloignés, suggérant des interactions post-collisionnelles significatives. À  $127^\circ$  (figure 4.7-b), les données expérimentales montrent une structure complexe de pics que  $BBK2CWZ$  décrit mieux l'expérience que  $2CWZ$ , reproduisant davantage l'asymétrie observée dans les données. À  $141^\circ$  (figure 4.7-c), bien que les deux modèles s'écartent quelque peu des données expérimentales,  $BBK2CWZ$  fournit une meilleure approche, notamment dans les régions entre  $90^\circ$  et  $180^\circ$ , indiquant un rôle notable des effets post-collisionnels pour cette situation.

Pour des angles plus grands, comme  $223^\circ$  (figure 4.7-d) et  $244^\circ$  (figure 4.7-e),  $BBK2CWZ$  se rapproche de manière plus étroite avec la forme des données expérimentales, montrant que les effets post-collisionnels deviennent significatifs. À  $265^\circ$  (figure 4.7-f) et  $321^\circ$  (figure 4.7-g), les points expérimentaux montrent une asymétrie importante et des schémas de pics complexes que  $BBK2CWZ$  reproduit mieux que  $2CWZ$ , qui présente des distributions plus lisses.

Cette propriété de bien décrire l'expérience du modèle  $BBK2CWZ$  pour les grands angles d'éjection confirme l'importance des interactions post-collisionnelles entre les électrons dans la voie de sortie. En comparant les différents modèles,  $BBK2CWZ$  est globalement plus cohérent avec les données expérimentales, il décrit bien des asymétries et des pics supplémentaires non détectés par  $2CWZ$ . Cela indique que les effets de corrélations entre les électrons dans la voie de sortie sont d'une importance capitale pour modéliser la réaction, en particulier pour les grands angles d'éjection, et que  $BBK2CWZ$  constitue un modèle théorique plus réaliste.



**Figure 4.7:** Sections efficaces différentielles (FDCS) de l'Argon  $3p$  pour différents angles d'éjection dans la réaction ( $e, 3e$ ). Les figures (a) à (g) montrent la comparaison entre les données expérimentales (DATA) et les prédictions des modèles théoriques  $BBK2CWZ$  (en noir) et  $2CWZ$  (en rouge)

Figure	Angles ( $^{\circ}$ )
Figure 4.6-a	225 $^{\circ}$ , 307 $^{\circ}$
Figure 4.6-b	263 $^{\circ}$ , 345 $^{\circ}$
Figure 4.6-c	280 $^{\circ}$
Figure 4.6-d	75 $^{\circ}$ , 345 $^{\circ}$
Figure 4.6-e	7 $^{\circ}$ , 97 $^{\circ}$
Figure 4.6-f	27 $^{\circ}$ , 120 $^{\circ}$
Figure 4.6-g	100 $^{\circ}$ , 195 $^{\circ}$

Tableau 4.5: Les angles des pics observés pour (figure 4.7)

Dans la figure (4.7-a) pour un angle d'éjection du premier électron de 85 $^{\circ}$ , le premier pic, situé autour de 225 $^{\circ}$ , donne une différence de 140 $^{\circ}$ , ce qui correspond au mécanisme  $SO$ . Le second pic, situé à 307 $^{\circ}$ , donne une différence de 222 $^{\circ}$ , également dans le mécanisme  $SO$ . Dans la figure (4.7-b) avec un angle de 127 $^{\circ}$ , le premier pic, à 263 $^{\circ}$ , donne une différence de 136 $^{\circ}$ , ce qui le classe dans le mécanisme  $SO$ . Le deuxième pic, à 345 $^{\circ}$ , a une différence de 218 $^{\circ}$ , également dans  $SO$ . Dans la figure (4.7-d) à 223 $^{\circ}$ , le premier pic, à 75 $^{\circ}$ , a une différence de 148 $^{\circ}$ , ce qui correspond à  $SO$ , et le deuxième pic, à 345 $^{\circ}$ , avec une différence de 122 $^{\circ}$ , est classé en  $TS1$ . Dans la figure (4.7-e) à 244 $^{\circ}$ , le premier pic, à 7 $^{\circ}$ , donne une différence de 237 $^{\circ}$ , classé en  $SO$ , et le deuxième pic, à 97 $^{\circ}$ , avec une différence de 147 $^{\circ}$ , est aussi dans  $SO$ , dans la figure (4.7-f) avec un angle de 265 $^{\circ}$ , le premier pic, à 27 $^{\circ}$ , donne une différence de 238 $^{\circ}$ , correspondant au mécanisme  $SO$ , tandis que le deuxième pic, à 120 $^{\circ}$ , avec une différence de 145 $^{\circ}$ , est dans le mécanisme  $SO$ . Enfin, dans la figure (4.7-g) à 321 $^{\circ}$ , le premier pic, à 100 $^{\circ}$ , donne une différence de 221 $^{\circ}$ , ce qui correspond à  $SO$ , et le deuxième pic, à 195 $^{\circ}$ , donne une différence de 126 $^{\circ}$ , également dans  $TS1$ .

## 4.7 Conclusion

En conclusion, l'analyse des modèles appliqués à la diffusion sur l'Argon montre que le modèle  $BBK2CWZ$ , qui inclut les interactions post-collisionnelles, offre un meilleur accord avec les données expérimentales par rapport au modèle  $2CWZ$ . Aux petits angles comme 85 $^{\circ}$ ,  $BBK2CWZ$  reproduit mieux les pics centraux et les asymétries, tandis que  $2CWZ$  s'écarte pour les pics éloignés, illustrant l'importance des effets post-collisionnels. Cet avantage de  $BBK2CWZ$  s'étend aux angles plus grands, où les schémas de pics complexes et asymétriques des données sont mieux décrits, soulignant que les interactions post-collisionnelles sont cruciales pour une modélisation fidèle des distributions angulaires de l'Argon. Pour le Krypton, le modèle  $BBK2DW$ , encore plus sophistiqué en termes de prise en compte des interactions post-collisionnelles et des effets de distorsion, offre également une meilleure correspondance globale avec les données expérimentales des expériences

$(e, 3e)$  par rapport aux modèles plus simples, surtout pour les faibles énergies éjectées. Comparé à l'Argon, le Krypton, avec sa structure électronique plus complexe et ses interactions de dispersion renforcées, nécessite l'intégration de ces effets dans les modèles pour bien reproduire les distributions angulaires expérimentales. Ainsi, pour l'Argon comme pour le Krypton, l'inclusion des effets post-collisionnels dans les modèles théoriques se révèle essentielle pour obtenir des prédictions précises. Le modèle *BBK2CWZ* pour l'Argon et *BBK2DW* pour le Krypton représentent les meilleures approximations actuelles, et cette étude démontre la nécessité d'une modélisation détaillée des interactions spécifiques de chaque élément pour décrire fidèlement les processus de diffusion dans les expériences  $(e, 3e)$ .

## Bibliographie

- [1] E. Clementi and C. Roetti. *At. Data Nucl. Data Tables*, **14** :177–478, 1974.
- [2] Xiaorui Xue, Deepthy Maria Mootheril, Esam Ali, Shaokui Gong, Maomaond Jia, Jiaqi Zhou, Enliang Wang, Jian-Xing Li, Xiangjun Chen, Don Madison, Alexander Dorn, and Xueguang Ren. *Phys. Rev. A*, **106** :042803, 2022.
- [3] M. Dhital, S. Bastola, A. Silvus, J. Davis, B. R. Lamichhane, E. Ali, M. F. Ciappina, R. Lomsadze, A. Hasan, D. H. Madison, and M. Schulz. *Phys. Rev. A*, **102** :032818, 2020.
- [4] Sadek Amami, Andrew J. Murray, Al Stauffer, and Kate Nixon. *Phys. Rev. A.*, **90** :062707, 2014.
- [5] YaQiu Liang, Zhangjin Chen, Don H. Madison, and C. D. Lin. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **44** :085201, 2011.
- [6] A. Lahmam-Bennani, A. Duguet, A. M. Grisogono, and M. Lecas. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **25** :2873, 1992.
- [7] F. Salvat and J. M. Fernández-Varea. *Comput. Phys. Commun.*, **240** :165–177, 2019.
- [8] M. A. Kornberg and J. E. Miraglia. *Phys. Rev. A*, **48** :3714–3719, 1993.
- [9] A. Herbadji, I. Kada, A. Mansouri, and C. Dal Cappello. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **54** :215201, 2021.
- [10] C. Tavard, C. Dal Cappello, and M. C. Dal Cappello. *Chem. Phys. Lett.*, **113** :541–545, 1985.
- [11] B. El Marji, C. Schröter, A. Duguet, A. Lahmam-Bennani, M. Lecas, and L. Spielberger. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*, **30** :3677, 1997.

# Conclusion Générale

Notre étude offre une analyse approfondie des mécanismes impliqués dans la simple et la double ionisation des cibles atomiques et moléculaires, en soulignant les avancées théoriques ainsi que les défis persistants pour modéliser avec plus de précision ces phénomènes complexes. La section efficace triplement différentielle (TDCS) et la section efficace quintuplement différentielle (FDCS) constituent des outils de la description la plus détaillée des processus d'ionisation (simple ou double), elles sont déterminées via les amplitudes de diffusion qui prennent en compte les éléments de transition entre les états initial et final de la collision. Cette mesure est inévitable pour explorer à la fois la dynamique de la réaction et les propriétés structurelles de la cible. La première partie de notre recherche a été consacrée à l'étude de la simple ionisation par impact d'électrons et de positrons sur des cibles atomiques dans l'état fondamental. Ce sujet revêt une importance particulière dans divers domaines scientifiques, notamment pour ses applications stratégiques dans l'étude de la matière vivante, comme en tomographie par émission de positons (TEP), une technique d'imagerie fonctionnelle largement utilisée en médecine.

La deuxième partie de l'étude est concentrée sur la double ionisation de certains gaz rares. Ce processus se distingue de la simple ionisation par sa complexité accrue, tant sur le plan théorique qu'expérimental, et représente un défi significatif pour la recherche. Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les principes fondamentaux de la simple ionisation et défini la grandeur la plus importante pour ce processus, la section efficace, en passant en revue différents modèles théoriques qui tentent de décrire le phénomène de manière aussi complète que possible.

Dans le chapitre 2, nous avons introduit le processus de double ionisation, en expliquant ses différents mécanismes et en comparant sa complexité avec celle de la simple ionisation. Le chapitre 3 présente nos résultats pour la simple ionisation de l'argon par impact d'électrons et de positrons, obtenus en utilisant le modèle  $3CWZ$ , qui s'avère particulièrement performant dans ce domaine de recherche. Ce modèle, basé sur un schéma de

charge variable et intégrant les effets post-collisionnels (PCI) de manière exacte, se montre capable de prédire avec une bonne précision les positions des pics dans les régions binaires et de recul. Nos calculs théoriques montrent de nombreuses structures intéressantes qui mettent en évidence les caractéristiques des effets de charge, mieux que d'autres modèles sophistiqués. Le dernier chapitre est dédié à l'étude de la double ionisation du krypton et de l'Argon, en utilisant une approche innovante basée sur les ondes distordues, où les électrons éjectés sont représentés par des ondes distordue et prenant en compte les effets post-collisionnels. Une autre approche, celle de la charge variable, a également été employée en tant qu'approximation des effets de distorsion, offrant une précieuse économie de temps de calcul dans les modèles complexes.

En conclusion, notre analyse met en évidence les puissances et les limites des différents modèles théoriques pour prédire les distributions angulaires de la section efficace différentielle dans les processus de collision impliquant les électrons. Le modèle *BBK2DW*, qui inclut de manière détaillée les effets de distorsion et d'interactions post-collisionnelles, démontre une meilleure correspondance globale avec les données expérimentales, en particulier dans la forme et l'intensité des pics angulaires. Cependant, certains écarts subsistent, soulignant la complexité du processus d'ionisation et la nécessité d'améliorer des approches existantes.

Le modèle *BBK2CWZ*, bien qu'il s'écarte davantage des données expérimentales dans certaines conditions, surtout pour les grands angles où les effets post-collisionnels se révèlent significatifs. Ces observations montrent la grande importance de la prise en compte de ces effets pour modéliser fidèlement la dynamique complexe observée expérimentalement. En somme, notre étude démontre que le modèle *BBK2CWZ*, grâce à son intégration efficace des effets post-collisionnels et de distorsion, constitue un cadre théorique plus réaliste. Toutefois, il faut noter qu'il y a des désaccords qui persistent entre la théorie et l'expérience, d'où la nécessité d'améliorer d'avantage les modèles existants.

# Annexe A

## Calcul de l'amplitude de diffusion pour le modèle de BBK dans le cas de la simple et double ionisation .

### A.1 Cas de la simple ionisation

Soit l'élément de matrice  $T_{if}$  qui s'écrit comme suit :

$$T_{if} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{A.1})$$

Avec  $V$  représentant le potentiel coulombien entre l'électron incident et l'électron actif de la cible :

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

où  $r_0$  et  $r_{01} = |\vec{r}_0 - \vec{r}_1|$  sont les positions de l'électron incident et de l'électron actif respectivement.

L'état initial  $\Psi_i$  et l'état final  $\Psi_f$  :

$$\Psi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0, \vec{r}_1) = \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) \quad (\text{A.3})$$

$$\Psi_f^*(\vec{k}_s, \vec{k}_1, \vec{r}_0, \vec{r}_1) = \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}_{01}) \quad (\text{A.4})$$

Avec  $\phi_c$  l'onde coulombienne et  $C$  le terme qui décrit l'interaction post-collisionnelle :

$$\phi_c = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{\pi\alpha/2} \Gamma(1-i\alpha) {}_1F_1(-i\alpha, 1, -i(k_{s1}r_{01} + \vec{k}_{s1} \cdot \vec{r}_{01})) \quad (\text{A.5})$$

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}_{01}) = e^{\pi\alpha_{01}} \Gamma(1 - i\alpha_{01}) {}_1F_1(1 - i\alpha_{01}, 1, -i(\vec{k}_{s1}r_{01} + \vec{k}_{s1} \cdot \vec{r}_{01})) \quad (\text{A.6})$$

Tel que :

$$\vec{k}_{s1} = \frac{1}{2}(\vec{k}_s - \vec{k}_1) \quad (\text{A.7})$$

Ainsi, l'élément de matrice devient :

$$T_{if} = \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}_{01}) \left( -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} \right) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \quad (\text{A.8})$$

qui peut être écrit comme :

$$\begin{aligned} T_{if} = & - \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \frac{1}{r_0} \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}_{01}) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \\ & + \int \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}_{01}) \frac{1}{r_{01}} \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Pour éliminer les termes contenant  $r_{01}$ , nous adoptons la méthode proposée par Kornberg et Miraglia. Cette approche repose sur l'application des transformées de Fourier, qui permettent de simplifier les intégrales en passant du domaine spatial au domaine des impulsions. Grâce à cette transformation, les dépendances complexes en  $r_{01}$  peuvent être traitées plus efficacement, rendant les calculs analytiques plus accessibles.

$$\begin{aligned} \phi(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \tilde{\phi}(\vec{p}) d\vec{p} \\ \tilde{\phi}(\vec{p}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

D'où :

$$\phi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'} \phi(\vec{r}') d\vec{r}' d\vec{p} \quad (\text{A.11})$$

Donc l'application sur le terme d'interaction donne :

$$C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}_{01}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_{01}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01}) d\vec{r}'_{01} d\vec{p} \quad (\text{A.12})$$

L'équation (A.9) devient :

$$T_{if} = \frac{1}{(2\pi)^3} \left[ \int \left( \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \frac{1}{r_0} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right. \right. \\ \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01}) d\vec{r}'_{01} - \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \\ \left. \left. \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} \frac{C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01})}{r'_{01}} d\vec{r}'_{01} \right) d\vec{p} \right] \quad (\text{A.13})$$

En remplaçant  $\vec{r}'_{01} = \vec{r}_0 - \vec{r}_1$  et  $\phi_p(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ , on trouve :

$$T_{if} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{9}{2}}} \left[ \int \left( \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \frac{1}{r_0} e^{i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right. \right. \\ \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01}) d\vec{r}'_{01} - \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) e^{i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0} d\vec{r}_0 \\ \left. \left. \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{01}} \frac{C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01})}{r'_{01}} d\vec{r}'_{01} \right) d\vec{p} \right] \quad (\text{A.14})$$

Finalemnt après l'introduction de deux paramètres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  qui sont des paramètres tendent vers 0

$$T_{if} = \frac{\sqrt{4\pi}}{(2\pi)^{\frac{9}{2}}} \lim_{\lambda_1 \rightarrow 0} \lim_{\lambda_2 \rightarrow 0} \int \left[ - \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \frac{e^{i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0}}{r_0} e^{-\lambda_1 r_0} d\vec{r}_0 \times \int \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right. \\ \times \int C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01}) e^{i(\vec{k}_{s1} - \vec{p})\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-i\vec{k}_{s1}\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-\lambda_2 r_0} d\vec{r}'_{01} \\ + \int \phi_c^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) e^{-i(\vec{k}_i + \vec{p})\cdot\vec{r}_0} e^{-\lambda_1 r_0} d\vec{r}_0 \times \int \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}_1} \psi_{nlm}(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \\ \left. \times \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} C^*(\alpha_{01}, \vec{k}_{s1}, \vec{r}'_{01}) \frac{e^{i(\vec{k}_{s1} - \vec{p})\cdot\vec{r}'_{01}}}{r'_{01}} e^{-i\vec{k}_{s1}\cdot\vec{r}'_{01}} e^{-\lambda_2 r_0} d\vec{r}'_{01} \right] d\vec{p} \quad (\text{A.15})$$

## A.2 Cas de la double ionisation

Similaire au cas de la simple ionisation, l'élément de matrice  $T_{if}$  qui s'écrit comme suit :

$$T_{if} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{A.16})$$

Avec  $V$  représentant le potentiel coulombien entre l'électron incident et l'électron actif de la cible :

$$V = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \quad (\text{A.17})$$

L'état initial  $\Psi_i$  et final  $\Psi_f$  :

$$\begin{aligned} \Psi_i(\vec{k}_i, \vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \phi_p(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \\ \Psi_f^*(\vec{k}_s, \vec{k}_1, \vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \phi_p^*(\vec{k}_s, \vec{r}_0) \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) C(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}). \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

$$\begin{aligned} T_{if} &= \iiint \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_p(\vec{k}_s, \vec{r}_0) C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \\ &\quad \times \left( -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{01}} + \frac{1}{r_{02}} \right) \phi_p(\vec{k}_0, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &= - \iiint \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_p(\vec{k}_s, \vec{r}_0) C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \\ &\quad \times \frac{2}{r_0} \phi_p(\vec{k}_0, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &\quad + \iiint \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_p(\vec{k}_s, \vec{r}_0) C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \\ &\quad \times \frac{1}{r_{01}} \phi_p(\vec{k}_0, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &\quad + \iiint \phi_c^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) \phi_p(\vec{k}_s, \vec{r}_0) C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \\ &\quad \times \frac{1}{r_{02}} \phi_p(\vec{k}_0, \vec{r}_0) \psi_{nlm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_0 d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \\ &= I_1 + I_2 + I_3 \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

On commence par  $I_1$  et après l'utilisation de la formule de BETH aussi remplacer les ondes planes par leur expression on trouve :

$$\int \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_0}}{|\vec{r}_0 - \vec{r}_1|} d\vec{r}_0 = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} \quad (\text{A.20})$$

$$I_1 = \frac{-8\pi}{(2\pi)^2 k^2} \iiint \phi_e^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_e^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) \psi_{nhm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (\text{A.21})$$

Le terme d'interaction après le double transformée de Fourier s'écrit :

$$C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}_{12}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_{12}} \times \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}'_{12}} C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}'_{12}) d\vec{r}'_{12} d\vec{p} \quad (\text{A.18})$$

L'équation (A.21) devient :

$$\begin{aligned}
 I_1 = \frac{-8\pi}{(2\pi)^6 k^2} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \iiint & \left[ \phi_e^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}_1} \phi(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right. \\
 & \phi_e^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_2} \phi(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \\
 & \left. \int e^{i(\vec{k}_{12} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'_{12}} e^{-i\vec{k}_{12} \cdot \vec{r}'_{12}} C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}'_{12}) e^{-\lambda \vec{r}'_{12}} d\vec{r}'_{12} \right] d\vec{p}
 \end{aligned} \tag{A.22}$$

Pour  $I_2$  et  $I_3$ , nous trouvons :

$$\begin{aligned}
 I_2 = \frac{-4\pi}{(2\pi)^6 k^2} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int & \left[ \int \phi_e^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{i(\vec{K} + \vec{p}) \cdot \vec{r}_1} \phi(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right. \\
 & \times \int \phi_e^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{r}_2} \phi(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \\
 & \left. \times \int e^{i(\vec{k}_{12} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'_{12}} e^{-i\vec{k}_{12} \cdot \vec{r}'_{12}} C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}'_{12}) e^{-\lambda \vec{r}'_{12}} d\vec{r}'_{12} \right] d\vec{p}
 \end{aligned} \tag{A.23}$$

$$\begin{aligned}
 I_3 = \frac{-4\pi}{(2\pi)^6 k^2} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \int & \left[ \phi_e^*(\vec{k}_1, \vec{r}_1) e^{i\vec{p} \cdot \vec{r}_1} \phi(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \right. \\
 & \times \int \phi_e^*(\vec{k}_2, \vec{r}_2) e^{-i(\vec{K} - \vec{p}) \cdot \vec{r}_2} \phi(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \\
 & \left. \times \int e^{i(\vec{k}_{12} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'_{12}} e^{-i\vec{k}_{12} \cdot \vec{r}'_{12}} C^*(\alpha_{12}, \vec{k}_{12}, \vec{r}'_{12}) e^{-\lambda \vec{r}'_{12}} d\vec{r}'_{12} \right] d\vec{p}
 \end{aligned}$$

## Annexe B

# DOUBLE IONISATION D'UN ATOME DE TYPE $np^6$ : section efficace différentielle.

### B.1 Les états d'un atome $np^6$

Les 15 états possibles sont présentés comme suit :

- états propre de  $^1D$  :

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_0 p_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |p_0 \bar{p}_0 p_1 \bar{p}_1 k_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_0 p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_4 = \frac{1}{2} \left\{ |\bar{p}_0 p_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| + |\bar{p}_1 p_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_0 p_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| - |\bar{p}_1 p_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_6 = \frac{1}{2} \left\{ |p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| + |p_{-1} p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_0 k_1 \bar{k}_2| - |p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| - |p_{-1} p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_0 \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_9 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2 (|p_1 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| + |p_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| + |p_0 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_0 k_1 \bar{k}_2|) \right. \\ \left. - 2 (|p_1 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| - |p_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| - |p_0 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_0 \bar{k}_1 k_2|) \right\}$$

- état propre de  $^1S$  :

$$A_7 = \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ \begin{aligned} & (|p_1\bar{p}_1p_{-1}\bar{p}_{-1}k_1\bar{k}_2| - |p_1\bar{p}_0p_0\bar{p}_{-1}k_1\bar{k}_2| - |p_0\bar{p}_1p_{-1}\bar{p}_0k_1\bar{k}_2|) \\ & - (|p_1\bar{p}_1p_{-1}\bar{p}_{-1}\bar{k}_1k_2| + |p_1\bar{p}_0p_0\bar{p}_{-1}\bar{k}_1k_2| + |p_0\bar{p}_1p_{-1}\bar{p}_0\bar{k}_1k_2|) \end{aligned} \right\}$$

- états propre de  ${}^3P$  :

$$A_3 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ |\bar{p}_0 p_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_1 p_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| + |\bar{p}_0 p_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right. \\ \left. - |\bar{p}_1 p_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| - 2|p_0 p_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| - 2|\bar{p}_0 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| \right\}$$

$$A_5 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ |p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |p_{-1} p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_0 k_1 \bar{k}_2| + |p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right. \\ \left. - |p_{-1} p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_0 \bar{k}_1 k_2| - 2|p_0 p_1 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| - 2|\bar{p}_0 \bar{p}_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} k_1 k_2| \right\}$$

$$A_8 = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ |p_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |p_0 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_0 k_1 \bar{k}_2| + |p_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right. \\ \left. - |p_0 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{p}_0 \bar{k}_1 k_2| - 2|\bar{p}_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{p}_{-1} k_1 k_2| - 2|p_1 \bar{p}_0 p_0 p_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| \right\}$$

$$A_{10} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2|p_0 p_1 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| + 2|\bar{p}_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} k_1 k_2| - |\bar{p}_0 p_1 \bar{p}_1 p_{-1} k_1 \bar{k}_2| \right. \\ \left. - |p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_0 p_1 \bar{p}_1 p_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |p_0 p_1 \bar{p}_1 \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_{11} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2|\bar{p}_0 \bar{p}_1 p_1 \bar{p}_{-1} k_1 k_2| + 2|p_0 \bar{p}_1 p_1 p_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |p_0 \bar{p}_1 p_1 \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| \right. \\ \left. - |\bar{p}_0 \bar{p}_1 p_1 p_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |p_0 \bar{p}_1 p_1 \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_0 \bar{p}_1 p_1 p_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_{12} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2|p_{-1} p_0 \bar{p}_{-1} p_1 \bar{k}_1 \bar{k}_2| + 2|p_{-1} \bar{p}_0 \bar{p}_{-1} \bar{p}_1 k_1 k_2| - |p_{-1} \bar{p}_0 \bar{p}_{-1} p_1 k_1 \bar{k}_2| \right. \\ \left. - |p_{-1} p_0 \bar{p}_{-1} \bar{p}_1 k_1 \bar{k}_2| - |p_{-1} \bar{p}_0 \bar{p}_{-1} p_1 \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |p_{-1} p_0 \bar{p}_{-1} \bar{p}_1 \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_{13} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2|\bar{p}_{-1} \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_1 k_1 k_2| + 2|\bar{p}_{-1} p_0 p_{-1} p_1 \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_{-1} p_0 p_{-1} \bar{p}_1 k_1 \bar{k}_2| \right. \\ \left. - |\bar{p}_{-1} \bar{p}_0 p_{-1} p_1 k_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_{-1} p_0 p_{-1} \bar{p}_1 \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |\bar{p}_{-1} \bar{p}_0 p_{-1} p_1 \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_{14} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2|p_{-1} p_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{k}_1 \bar{k}_2| + 2|\bar{p}_{-1} \bar{p}_1 \bar{p}_0 p_0 k_1 k_2| - |\bar{p}_{-1} p_1 \bar{p}_0 p_0 k_1 \bar{k}_2| \right. \\ \left. - |p_{-1} \bar{p}_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{k}_1 k_2| - |\bar{p}_{-1} p_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{k}_1 k_2| - |p_{-1} \bar{p}_1 \bar{p}_0 p_0 \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

$$A_{15} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left\{ 2|\bar{p}_{-1} \bar{p}_1 p_0 \bar{p}_0 k_1 k_2| + 2|p_{-1} p_1 p_0 \bar{p}_0 \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |p_{-1} \bar{p}_1 p_0 \bar{p}_0 k_1 \bar{k}_2| \right. \\ \left. - |\bar{p}_{-1} p_1 p_0 \bar{p}_0 \bar{k}_1 \bar{k}_2| - |p_{-1} \bar{p}_1 p_0 \bar{p}_0 \bar{k}_1 k_2| - |\bar{p}_{-1} p_1 p_0 \bar{p}_0 \bar{k}_1 k_2| \right\}$$

Exemple de calcul :

Soit le premier état  $D_1 = |p_{-1}\bar{p}_{-1}|$  avec  $M_L = -2$  et  $M_S = 0$ ,  $D_1$  est un déterminant de Slater où  $\bar{p}_{-1}$  signifie que l'on considère une fonction d'onde spatiale  $p_{-1}(\vec{r})$  associée à un spin down  $\downarrow$  (noté par la suite  $\beta$ ) et  $p_{-1}$  signifie que l'on considère une fonction d'onde spatiale  $p_{-1}(\vec{r})$  associée à un spin up  $\uparrow$  (noté par la suite  $\alpha$ ). Le déterminant  $D_1$  est associé à la matrice

$$M_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} p_{-1}(\vec{r}_1)\alpha(1) & p_{-1}(\vec{r}_1)\alpha(2) \\ p_{-1}(\vec{r}_2)\beta(1) & p_{-1}(\vec{r}_2)\beta(2) \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

et donne après calcul :  $D_1 = (p_{-1}(\vec{r}_1)p_{-1}(\vec{r}_2)) \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1))$ , la fonction de spin est antisymétrique quand on échange (1) en (2) et celle d'espace symétrique quand on échange  $\vec{r}_1$  en  $\vec{r}_2$ , donc la fonction d'espace et de spin est globalement **antisymétrique**.

On va faire opérer le moment cinétique orbital  $\hat{L}^2$  et celui de spin  $\hat{S}^2$  sur  $D_1$ .

On rappelle que  $\hat{L}^2 = \hat{L}_- \hat{L}_+ + \hat{L}_z + \hat{L}_z^2$  (en unités atomiques,  $\hbar = 1$ ),

$$\begin{cases} \hat{L}_z |Y_l^m\rangle = m |Y_l^m\rangle \\ \hat{L}_\pm |Y_l^m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |Y_l^{m \pm 1}\rangle \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

Ici  $\hat{L}_z D_1 = -2D_1$  ;  $\hat{L}_z^2 D_1 = 4D_1$  ;  $\hat{L}_+ D_1 = \sqrt{2} |p_0\bar{p}_{-1}| + \sqrt{2} |p_{-1}\bar{p}_0|$  ;  $\hat{L}_- \hat{L}_+ (D_1) = 4D_1$  et donc  $\hat{L}^2 D_1 = 6D_1$ .  $D_1$  est fonction propre de  $\hat{L}^2$  avec la valeur propre  $L = 2$ .

On fait ensuite opérer l'opérateur  $\hat{S}^2 = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_z + \hat{S}_z^2$ ,  $\hat{S}_z D_1 = 0$ ,  $\hat{S}_+ D_1 = 0$  d'où  $\hat{S}^2 D_1 = 0$  et donc  $S = 0$ .  $D_1$  est bien fonction propre de  $\hat{L}^2$  et de  $\hat{S}^2$  et est l'un des états propres de  $D$ .

On cherche maintenant le déterminant correspondant pour  $np^4$  :  $D_1^N = |p_0\bar{p}_0 p_{-1}\bar{p}_{-1}|$  avec  $M_L = -2$  et  $M_S = 0$ . Ici  $\hat{L}_z D_1^N = -2D_1^N$  ;  $\hat{L}_z^2 D_1^N = 4D_1^N$  ;

$$\hat{L}_+ D_1^N = \sqrt{2} |p_1\bar{p}_0 p_{-1}\bar{p}_{-1}| + \sqrt{2} |p_0\bar{p}_1 p_{-1}\bar{p}_{-1}|$$

$\hat{L}_- \hat{L}_+ D_1^N = 2 |p_0\bar{p}_0 p_{-1}\bar{p}_{-1}| + 2 |p_0\bar{p}_0 p_{-1}\bar{p}_{-1}| = 4D_1^N$  d'où  $\hat{L}^2 D_1^N = 6D_1^N$  donc  $D_1^N$  est fonction propre de  $\hat{L}^2$  avec la valeur propre  $L = 2$ .

$\hat{S}_z D_1^N = 0$ ,  $\hat{S}_+ D_1^N = 0$  d'où  $\hat{S}^2 D_1^N = 0$  et donc  $S = 0$ .  $D_1^N$  est bien fonction propre de  $\hat{L}^2$  et de  $\hat{S}^2$  et est l'un des états propres de  $D$ .

On va construire le déterminant de SLATER correspondant aux 4 électrons de l'ion ( $np^4$ ) et des deux électrons éjectés désignés par  $k_1$  ou  $(\bar{k}_1)$  et  $k_2$  ou  $(\bar{k}_2)$ .

On a au départ deux déterminants de Slater possibles :

$$D'_1 = |p_0 p_0 p_{-1} p_{-1} k_1 \bar{k}_2| \text{ et } D''_1 = |p_0 p_0 p_{-1} p_{-1} \bar{k}_1 k_2|$$

On applique uniquement l'opérateur  $S^2$  :

$$\hat{S}_z D'_1 = 0, \hat{S}_+ D'_1 = |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 k_2|$$

$$\text{et } \hat{S}_- \hat{S}_+ D'_1 = |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} p_{-1} k_1 \bar{k}_2| + |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \text{ d'où } \hat{S}^2 D'_1 = D'_1 + D''_1.$$

$$\text{De même : } \hat{S}_z D''_1 = 0, \hat{S}_+ D''_1 = |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 k_2|$$

$$\text{et } \hat{S}_- \hat{S}_+ D''_1 = |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| + |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} p_{-1} k_1 \bar{k}_2| \text{ d'où } \hat{S}^2 D''_1 = D''_1 + D'_1.$$

L'opérateur  $\hat{S}^2$ , dans la base formée par  $D'_1$  et  $D''_1$ , sera représenté par la matrice :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres sont  $\lambda = 0$  et  $\lambda = 2$ . Ici seul  $S = 0$  convient car on part d'un état initial  $^1S$ .

Le déterminant fonction propre de  $S^2$  sera :

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right\} \quad (\text{B.3})$$

## B.2 Section Efficace

Soit le premier état correspondant à la double ionisation de deux électrons dans la couche  $p_1 \bar{p}_1$ . On avait déterminé l'état final  $^1D$  tel que :

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (D_1 - D_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} k_1 \bar{k}_2| - |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} \bar{k}_1 k_2| \right\} \quad (\text{B.4})$$

L'état initial correspond à

$$\Psi_i = |p_0 \bar{p}_0 p_{-1} \bar{p}_{-1} p_1 \bar{p}_1| \quad (\text{B.5})$$

si on développe suivant  $p_1$  et  $\bar{p}_1$

$$\begin{aligned}
 \Psi_i = \frac{1}{\sqrt{720}} & \left( p_1(1)\bar{p}_1(2)A_{3456} - p_1(1)\bar{p}_1(3)A_{2456} \right. \\
 & + p_1(1)\bar{p}_1(4)A_{2356} - p_1(1)\bar{p}_1(5)A_{2346} + p_1(1)\bar{p}_1(6)A_{2345} \\
 & - p_1(2)\bar{p}_1(1)A_{3456} + p_1(2)\bar{p}_1(3)A_{1456} + p_1(2)\bar{p}_1(4)A_{1356} \\
 & + p_1(2)\bar{p}_1(5)A_{1346} - p_1(2)\bar{p}_1(6)A_{1345} + p_1(3)\bar{p}_1(1)A_{2456} \\
 & - p_1(3)\bar{p}_1(2)A_{1456} + p_1(3)\bar{p}_1(4)A_{1256} - p_1(3)\bar{p}_1(5)A_{1246} \\
 & + p_1(3)\bar{p}_1(6)A_{1245} - p_1(4)\bar{p}_1(1)A_{2356} + p_1(4)\bar{p}_1(2)A_{1356} \\
 & - p_1(4)\bar{p}_1(3)A_{1256} + p_1(4)\bar{p}_1(5)A_{1236} - p_1(4)\bar{p}_1(6)A_{1235} \\
 & + p_1(5)\bar{p}_1(1)A_{2346} - p_1(5)\bar{p}_1(2)A_{1346} + p_1(5)\bar{p}_1(3)A_{1246} \\
 & - p_1(5)\bar{p}_1(4)A_{1236} + p_1(5)\bar{p}_1(6)A_{1234} - p_1(6)\bar{p}_1(1)A_{2345} \\
 & + p_1(6)\bar{p}_1(2)A_{1345} - p_1(6)\bar{p}_1(3)A_{1245} + p_1(6)\bar{p}_1(4)A_{1235} \\
 & \left. - p_1(6)\bar{p}_1(5)A_{1234} \right) \tag{B.6}
 \end{aligned}$$

Le terme  $A_{3456}$  correspond au déterminant de la matrice

$$\begin{vmatrix}
 p_0(3) & p_0(4) & p_0(5) & p_0(6) \\
 \bar{p}_0(3) & \bar{p}_0(4) & \bar{p}_0(5) & \bar{p}_0(6) \\
 p_{-1}(3) & p_{-1}(4) & p_{-1}(5) & p_{-1}(6) \\
 \bar{p}_{-1}(3) & \bar{p}_{-1}(4) & \bar{p}_{-1}(5) & \bar{p}_{-1}(6)
 \end{vmatrix}$$

Et, par exemple, Le terme  $A_{1234}$  correspond au déterminant de la matrice

$$\begin{vmatrix}
 p_0(1) & p_0(2) & p_0(3) & p_0(4) \\
 \bar{p}_0(1) & \bar{p}_0(2) & \bar{p}_0(3) & \bar{p}_0(4) \\
 p_{-1}(1) & p_{-1}(2) & p_{-1}(3) & p_{-1}(4) \\
 \bar{p}_{-1}(1) & \bar{p}_{-1}(2) & \bar{p}_{-1}(3) & \bar{p}_{-1}(4)
 \end{vmatrix}$$

On obtient finalement après factorisation des termes de type  $A_{3456}$

$$\begin{aligned} \Psi_i = \frac{1}{\sqrt{720}} & \left( p_1(1)p_1(2) [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] A_{3456} - p_1(1)p_1(3) [\alpha(1)\beta(3) - \alpha(3)\beta(1)] A_{2456} \right. \\ & + p_1(1)p_1(4) [\alpha(1)\beta(4) - \alpha(4)\beta(1)] A_{2356} - p_1(1)p_1(5) [\alpha(1)\beta(5) - \alpha(5)\beta(1)] A_{2346} \\ & + p_1(1)p_1(6) [\alpha(1)\beta(6) - \alpha(6)\beta(1)] A_{2345} + p_1(2)p_1(3) [\alpha(2)\beta(3) - \alpha(3)\beta(2)] A_{1456} \\ & - p_1(2)p_1(4) [\alpha(2)\beta(4) - \alpha(4)\beta(2)] A_{1356} + p_1(2)p_1(5) [\alpha(2)\beta(5) - \alpha(5)\beta(2)] A_{1346} \\ & - p_1(2)p_1(6) [\alpha(2)\beta(6) - \alpha(6)\beta(2)] A_{1345} + p_1(3)p_1(4) [\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)] A_{1256} \\ & - p_1(3)p_1(5) [\alpha(3)\beta(5) - \alpha(5)\beta(3)] A_{1246} + p_1(3)p_1(6) [\alpha(3)\beta(6) - \alpha(6)\beta(3)] A_{1245} \\ & + p_1(4)p_1(5) [\alpha(4)\beta(5) - \alpha(5)\beta(4)] A_{1236} - p_1(4)p_1(6) [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)] A_{1235} \\ & \left. + p_1(5)p_1(6) [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] A_{1234} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

On développe  $D_1$  en fonction de  $k_1$  et  $k_2$  de ce qui permet de faire apparaître les mêmes quantités  $A_{3456} \dots A_{1234}$  :

$$\begin{aligned} D_1 = \frac{1}{\sqrt{720}} & \left( [k_1(1)\bar{k}_2(2) - k_1(2)\bar{k}_2(1)] A_{3456} - [k_1(1)\bar{k}_2(3) - k_1(3)\bar{k}_2(1)] A_{2456} \right. \\ & + [k_1(1)\bar{k}_2(4) - k_1(4)\bar{k}_2(1)] A_{2356} - [k_1(1)\bar{k}_2(5) - k_1(5)\bar{k}_2(1)] A_{2346} \\ & + [k_1(1)\bar{k}_2(6) - k_1(6)\bar{k}_2(1)] A_{2345} + [k_1(2)\bar{k}_2(3) - k_1(3)\bar{k}_2(2)] A_{1456} \\ & - [k_1(2)\bar{k}_2(4) - k_1(4)\bar{k}_2(2)] A_{1356} + [k_1(2)\bar{k}_2(5) - k_1(5)\bar{k}_2(2)] A_{1346} \\ & - [k_1(2)\bar{k}_2(6) - k_1(6)\bar{k}_2(2)] A_{1345} + [k_1(3)\bar{k}_2(4) - k_1(4)\bar{k}_2(3)] A_{1256} \\ & - [k_1(3)\bar{k}_2(5) - k_1(5)\bar{k}_2(3)] A_{1246} + [k_1(3)\bar{k}_2(6) - k_1(6)\bar{k}_2(3)] A_{1245} \\ & + [k_1(4)\bar{k}_2(5) - k_1(5)\bar{k}_2(4)] A_{1236} - [k_1(4)\bar{k}_2(6) - k_1(6)\bar{k}_2(4)] A_{1235} \\ & \left. + [k_1(5)\bar{k}_2(6) - k_1(6)\bar{k}_2(5)] A_{1234} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Et pour  $D_2$  :

$$\begin{aligned}
D_2 = \frac{1}{\sqrt{720}} & \left( [\bar{k}_1(1)k_2(2) - \bar{k}_1(2)k_2(1)] A_{3456} - [\bar{k}_1(1)k_2(3) - \bar{k}_1(3)k_2(1)] A_{2456} \right. \\
& + [\bar{k}_1(1)k_2(4) - \bar{k}_1(4)k_2(1)] A_{2356} - [\bar{k}_1(1)k_2(5) - \bar{k}_1(5)k_2(1)] A_{2346} \\
& + [\bar{k}_1(1)k_2(6) - \bar{k}_1(6)k_2(1)] A_{2345} + [\bar{k}_1(2)k_2(3) - \bar{k}_1(3)k_2(2)] A_{1456} \\
& - [\bar{k}_1(2)k_2(4) - \bar{k}_1(4)k_2(2)] A_{1356} + [\bar{k}_1(2)k_2(5) - \bar{k}_1(5)k_2(2)] A_{1346} \\
& - [\bar{k}_1(2)k_2(6) - \bar{k}_1(6)k_2(2)] A_{1345} + [\bar{k}_1(3)k_2(4) - \bar{k}_1(4)k_2(3)] A_{1256} \\
& - [\bar{k}_1(3)k_2(5) - \bar{k}_1(5)k_2(3)] A_{1246} + [\bar{k}_1(3)k_2(6) - \bar{k}_1(6)k_2(3)] A_{1245} \\
& + [\bar{k}_1(4)k_2(5) - \bar{k}_1(5)k_2(4)] A_{1236} - [\bar{k}_1(4)k_2(6) - \bar{k}_1(6)k_2(4)] A_{1235} \\
& \left. + [\bar{k}_1(5)k_2(6) - \bar{k}_1(6)k_2(5)] A_{1234} \right). \tag{B.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_1 = \frac{1}{\sqrt{1440}} & \left( [k_1(1)k_2(2) + k_1(2)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] A_{3456} \right. \\
& - [k_1(1)k_2(3) + k_1(3)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(3) - \alpha(3)\beta(1)] A_{2456} \\
& + [k_1(1)k_2(4) + k_1(4)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(4) - \alpha(4)\beta(1)] A_{2356} \\
& - [k_1(1)k_2(5) + k_1(5)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(5) - \alpha(5)\beta(1)] A_{2346} \\
& + [k_1(1)k_2(6) + k_1(6)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(6) - \alpha(6)\beta(1)] A_{2345} \\
& + [k_1(2)k_2(3) + k_1(3)k_2(2)] [\alpha(2)\beta(3) - \alpha(3)\beta(2)] A_{1456} \\
& - [k_1(2)k_2(4) + k_1(4)k_2(2)] [\alpha(2)\beta(4) - \alpha(4)\beta(2)] A_{1356} \\
& + [k_1(2)k_2(5) + k_1(5)k_2(2)] [\alpha(2)\beta(5) - \alpha(5)\beta(2)] A_{1346} \\
& - [k_1(2)k_2(6) + k_1(6)k_2(2)] [\alpha(2)\beta(6) - \alpha(6)\beta(2)] A_{1345} \\
& + [k_1(3)k_2(4) + k_1(4)k_2(3)] [\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)] A_{1256} \\
& - [k_1(3)k_2(5) + k_1(5)k_2(3)] [\alpha(3)\beta(5) - \alpha(5)\beta(3)] A_{1246} \\
& + [k_1(3)k_2(6) + k_1(6)k_2(3)] [\alpha(3)\beta(6) - \alpha(6)\beta(3)] A_{1245} \\
& + [k_1(4)k_2(5) + k_1(5)k_2(4)] [\alpha(4)\beta(5) - \alpha(5)\beta(4)] A_{1236} \\
& - [k_1(4)k_2(6) + k_1(6)k_2(4)] [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)] A_{1235} \\
& \left. + [k_1(5)k_2(6) + k_1(6)k_2(5)] [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] A_{1234} \right) \tag{B.10}
\end{aligned}$$

on peut aussi déterminer  $A_{3456}$

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} p_0(3) & p_0(4) & p_0(5) & p_0(6) \\ \bar{p}_0(3) & \bar{p}_0(4) & \bar{p}_0(5) & \bar{p}_0(6) \\ p_{-1}(3) & p_{-1}(4) & p_{-1}(5) & p_{-1}(6) \\ \bar{p}_{-1}(3) & \bar{p}_{-1}(4) & \bar{p}_{-1}(5) & \bar{p}_{-1}(6) \end{pmatrix} &= p_0(3)\bar{p}_0(4) \begin{pmatrix} p_{-1}(5) & p_{-1}(6) \\ \bar{p}_{-1}(5) & \bar{p}_{-1}(6) \end{pmatrix} - p_0(3)\bar{p}_0(5) \begin{pmatrix} p_{-1}(4) & p_{-1}(6) \\ \bar{p}_{-1}(4) & \bar{p}_{-1}(6) \end{pmatrix} \\
&+ p_0(3)\bar{p}_0(6) \begin{pmatrix} p_{-1}(4) & p_{-1}(5) \\ \bar{p}_{-1}(4) & \bar{p}_{-1}(5) \end{pmatrix} - p_0(3)\bar{p}_{-1}(4) \begin{pmatrix} p_{-1}(5) & p_{-1}(6) \\ \bar{p}_{-1}(5) & \bar{p}_{-1}(6) \end{pmatrix} \\
&+ p_0(3)\bar{p}_{-1}(5) \begin{pmatrix} p_{-1}(4) & p_{-1}(6) \\ \bar{p}_{-1}(4) & \bar{p}_{-1}(6) \end{pmatrix} - p_0(3)\bar{p}_{-1}(6) \begin{pmatrix} p_{-1}(4) & p_{-1}(5) \\ \bar{p}_{-1}(4) & \bar{p}_{-1}(5) \end{pmatrix} \\
&+ p_{-1}(3)\bar{p}_{-1}(4) \begin{pmatrix} p_0(5) & p_0(6) \\ \bar{p}_0(5) & \bar{p}_0(6) \end{pmatrix} - p_{-1}(3)\bar{p}_{-1}(5) \begin{pmatrix} p_0(4) & p_0(6) \\ \bar{p}_0(4) & \bar{p}_0(6) \end{pmatrix} \\
&+ p_{-1}(3)\bar{p}_{-1}(6) \begin{pmatrix} p_0(4) & p_0(5) \\ \bar{p}_0(4) & \bar{p}_0(5) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

on peut remarquer que  $p_0(3)\bar{p}_0(4) - \bar{p}_0(3)p_0(4) = p_0(3)p_0(4) [\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)]$   
et on écrit

$$\begin{aligned}
A_{3456} &= p_0(3)p_0(4) [\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)] p_{-1}(5)p_{-1}(6) [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] \\
&- p_0(3)p_0(5) [\alpha(3)\beta(5) - \alpha(5)\beta(3)] p_{-1}(4)p_{-1}(6) [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)] \\
&+ p_0(3)p_0(6) [\alpha(3)\beta(6) - \alpha(6)\beta(3)] p_{-1}(4)p_{-1}(5) [\alpha(4)\beta(5) - \alpha(5)\beta(4)] \\
&+ p_0(5)p_0(6) [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] p_{-1}(3)p_{-1}(4) [\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)] \\
&- p_0(4)p_0(6) [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)] p_{-1}(3)p_{-1}(5) [\alpha(3)\beta(5) - \alpha(5)\beta(3)] \\
&+ p_0(4)p_0(5) [\alpha(4)\beta(5) - \alpha(5)\beta(4)] p_{-1}(3)p_{-1}(6) [\alpha(3)\beta(6) - \alpha(6)\beta(3)]
\end{aligned} \tag{B.11}$$

$$\begin{aligned}
A_{2456} &= p_0(2)p_0(4) [\alpha(2)\beta(4) - \alpha(4)\beta(2)] p_{-1}(5)p_{-1}(6) [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] \\
&- p_0(2)p_0(5) [\alpha(2)\beta(5) - \alpha(5)\beta(2)] p_{-1}(4)p_{-1}(6) [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)] \\
&+ p_0(2)p_0(6) [\alpha(2)\beta(6) - \alpha(6)\beta(2)] p_{-1}(4)p_{-1}(5) [\alpha(4)\beta(5) - \alpha(5)\beta(4)] \\
&+ p_0(5)p_0(6) [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] p_{-1}(2)p_{-1}(4) [\alpha(2)\beta(4) - \alpha(4)\beta(2)] \\
&- p_0(4)p_0(6) [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)] p_{-1}(2)p_{-1}(5) [\alpha(2)\beta(5) - \alpha(5)\beta(2)] \\
&+ p_0(4)p_0(5) [\alpha(4)\beta(5) - \alpha(5)\beta(4)] p_{-1}(2)p_{-1}(6) [\alpha(2)\beta(6) - \alpha(6)\beta(2)]
\end{aligned}$$

On peut maintenant déterminer l'élément de matrice :

$$\mathfrak{M} = \frac{1}{720\sqrt{2}} \langle A_1 | U | \Psi_i \rangle \tag{B.12}$$

L'interaction électron incident-krypton s'écrit ici :

$$U = \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_3) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_4) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_5) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_6) - 6 \quad (\text{B.13})$$

On calcule l'élément de matrice comprenant l'élément commun  $A_{3456}$  :

$$\mathfrak{M} = \frac{1}{720\sqrt{2}} \langle A_{3456} [k_1(1)k_2(2) + k_1(2)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] |U| \quad (\text{B.14}) \\ A_{3456} p_1(1)p_1(2) [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \rangle$$

Le premier terme s'écrit :

$$A_{3456}^1 = p_0(3)p_0(4) [\alpha(3)\beta(4) - \alpha(4)\beta(3)] p_{-1}(5)p_{-1}(6) [\alpha(5)\beta(6) - \alpha(6)\beta(5)] \quad (\text{B.15})$$

$$\mathfrak{M}_{1,1} = \frac{1}{720\sqrt{2}} \langle A_{3456}^1 [k_1(1)k_2(2) + k_1(2)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] |U| \quad (\text{B.16}) \\ A_{3456}^1 p_1(1)p_1(2) [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \rangle$$

L'intégration sur tous les spins donne un facteur 8 et on obtient :

$$\mathfrak{M}_{1,1} = \frac{1}{90\sqrt{2}} \left( \langle k_1|K|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle + \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|K|p_1\rangle + \langle k_2|K|p_1\rangle \langle k_1|p_1\rangle + \langle k_2|p_1\rangle \langle k_1|K|p_1\rangle \quad (\text{B.17}) \\ + 2\langle p_0|K|p_0\rangle \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle + 2\langle p_{-1}|K|p_{-1}\rangle \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle + 2\langle p_{-1}|K|p_{-1}\rangle \langle k_2|p_1\rangle \langle k_1|p_1\rangle \right. \\ \left. - 6\langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle - 6\langle k_2|p_1\rangle \langle k_1|p_1\rangle \right)$$

Après regroupement des termes on obtient :

$$\mathfrak{M}_{1,1} = \frac{\sqrt{2}}{90} \left( \langle k_1|K|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle + \langle k_2|K|p_1\rangle \langle k_1|p_1\rangle + \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle (-6 + 2\langle p_0|K|p_0\rangle + 2\langle p_{-1}|K|p_{-1}\rangle) \right) \quad (\text{B.18})$$

Les autres contributions de  $A_{3456}^2, A_{3456}^3, \dots, A_{3456}^6$  donnent le même résultat :  $\mathfrak{M}_{1,1} = \mathfrak{M}_{2,2} = \dots \mathfrak{M}_{6,6}$

$$\mathfrak{M}(A_{3456}) = \frac{\sqrt{2}}{15} \left( \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle + \langle k_2|K|p_1\rangle \langle k_1|p_1\rangle + \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle (-6 + 2\langle p_0|K|p_0\rangle + 2\langle p_{-1}|K|p_{-1}\rangle) \right) \quad (\text{B.19})$$

Si on examine les termes croisés tels que  $\mathfrak{M}_{1,2}$  :

$$\mathfrak{M}_{1,2} = \frac{1}{720\sqrt{2}} \langle A_{3456}^1 [k_1(1)k_2(2) + k_1(2)k_2(1)] [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] |U| A_{3456}^2 p_1(1)p_1(2) [\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)] \rangle \quad (\text{B.20})$$

Avec  $A_{3456}^2 = -p_0(3)p_0(5) [\alpha(3)\beta(5) - \alpha(5)\beta(3)] p_{-1}(4)p_{-1}(6) [\alpha(4)\beta(6) - \alpha(6)\beta(4)]$

On obtient une contribution nulle (on a le terme  $p_0(4)p_{-1}(5)$  dans l'état final avec le terme  $p_0(5)p_{-1}(4)$  dans l'état initial).

La contribution des 15 termes  $A_{3456}, A_{2456}, \dots, A_{1234}$  avec eux-mêmes (contribution 'directe') donnera finalement :

$$\mathfrak{M}_{\text{direct}} = \sqrt{2} \left( \langle k_1|K|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle + \langle k_2|K|p_1\rangle \langle k_1|p_1\rangle + \langle k_1|p_1\rangle \langle k_2|p_1\rangle (-6 + 2\langle p_0|K|p_0\rangle + 2\langle p_{-1}|K|p_{-1}\rangle) \right) \quad (\text{B.21})$$



# Ionization of argon atom by positron and electron impact

O. Zaidi<sup>1</sup>, A. Mansouri<sup>1</sup>, S. Houamer<sup>1,a</sup> , A. Tamin<sup>1</sup>, T. Khatir<sup>1,2</sup>, and C. Dal Cappello<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Faculty of Sciences, LPQSD, University Setif1, 19000 Setif, Algeria

<sup>2</sup> CRNA, 02, Boulevard Frantz Fanon, Boite Postale 399, Alger, RP, Algeria

<sup>3</sup> LPCT, UMR CNRS 7019, University of Lorraine, 57078 Metz Cedex 3, France

Received 8 August 2024 / Accepted 29 October 2024

© The Author(s), under exclusive licence to EDP Sciences, SIF and Springer-Verlag GmbH Germany, part of Springer Nature 2024

**Abstract.** The positron and electron impact ionization of argon 3p at 200 eV impact energy is investigated using a theoretical model called 3CWZ. Within this model all particles of the continuum are represented by Coulomb waves with variable charges  $Z(r)$ , the post-collision interaction and exchange effects are also included. The triple differential cross section is calculated and compared with recent measurements of Dubois and de Lucio (Atoms 9:78, 2021) and other theories when available, for several kinematics. Our numerical results are in overall good agreement with experiments and illustrate projectile charge effects, better than other available theories.

## 1 Introduction

Ionization of atoms and molecules by charged particles is a fundamental process in a wide number of areas, such as plasma physics and living biological systems [1, 2]. In the case of single ionization, it constitutes physically a collision process leading to two unbound particles in the final channel moving in the field of the residual ion. There have been over time many theoretical and experimental studies of atoms and molecules devoted to this process including electrons [3, 4], protons [5, 6] and ions [7, 8]. Coincidence techniques represent the most powerful tool to explore the details of the ionization reaction as they give physicists an in-depth examination of all particles included in the event, they are needed to guarantee that the outgoing particles originate from one interaction event. Novel experimental instrumentation allowing for a detailed analysis in the exit channel have been gradually developed over the time [9–11]. In this work, we are particularly interested in the single ionization process by electron and positron impact, which constitutes in reality a scattering problem between particle matter (for electron) and antiparticle matter (for positron). The triple differential cross section (TDCS) is the quantity measured in these experiments where all energies and directions of the particles involved in the collision process are determined, it represents the most rigorous test for theory as kinematics is fully determined. Ionization by electron impact, known as (e,2e) reaction, has been widely investigated experimentally while studies including positrons represent relatively a new field of investigation as very few experiments are available. From a practical point of view, electron

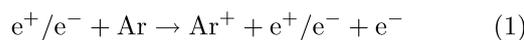
impact ionization has been the subject of various studies due to its interest in various fields, such as radiation damage in biomolecular systems [12, 13]. Positron collision with matter is on the other hand of particular interest in several applications like characterization of materials [14], or exploration of fundamental phenomena in atomic systems [15]. We should especially mention its strategic application in living matter through the positron emission tomography (PET), a well-known functional imaging technique in medicine [16]. Furthermore, a comparative study using positrons or electrons as projectile should inform us how the projectile charge influence the ionization process. Electron impact ionization, which is described as a hard ionization mechanism, has been for a long time the most commonly used ionization method among ionization techniques (see e.g., the review paper of Madison and Al-Hagan [17]). Measurements of positron-impact ionization were conducted since a few decades, to our knowledge the first experiment with positrons was performed by Roy and Etienne [18] by investigating the specific ionization of nitrogen and argon using a fully automatic Wilson Chamber. The first fully resolved ionization measurements yielded partial cross sections for helium atom [19], followed later by numerous experiments for a broad range of targets [20–22], they have even become a trending subject as additional information which was not available is now provided [23, 24]. At the theoretical level, extensive research has been undertaken into the study of electron impact ionization over the time, many theoretical models were then developed with the aim of achieving a comprehensive understanding of the ionization reaction, including perturbative and non-perturbative treatments. Non-perturbative models represent numerical intensive methods, developed initially

<sup>a</sup> e-mail: [s\\_houamer@univ-setif.dz](mailto:s_houamer@univ-setif.dz) (corresponding author)

for hydrogen and helium atoms [25, 26] and extended afterwards to more complex atomic targets [27, 28]. The convergent close coupling (CCC) was developed in response to the discrepancies observed between theory and experiment which were not understood, this model is known to reproduce benchmark results for light atoms [29] and quasi-one electron atomic systems [30]. Theory has made hereafter impressive progress in describing the ionization process using several non-perturbative modelings like ECS [31], TDCC [32] and BSR [33] models, which have proven to accurately predict experiments. In the meantime, numerous developed perturbative approaches have proved to be performer, as good agreement between theory and experiment was achieved, the mostly used currently are the DWBA [34], the DWB1-RM [35], the DWB2-RM [36] and the 3DW [37] models. Thanks to the availability of new valuable data, there has been more recent theoretical interest to study ionization by positron impact, numerous theoretical models have been thereby developed for atoms and molecules within different theoretical approaches [38–40]. This new field of investigation, which focuses on charge projectile effects has currently received much attention, as done very recently with argon 3p at the singly differential cross section level [41]. Note that on the theoretical side, the charge sign of the projectile simply reverses the direction of the electric field applied on the target. TDCS calculations by electron and positron impact show many interesting structures that highlight competing effects, requiring more theoretical and experimental investigations to exhaustively understand the charge effect in this few body process. In this work, we investigate the triply differential cross section for electron and positron impact ionization of argon 3p in asymmetric coplanar kinematics with a model called 3CWZ, recently used for (e,2e) process in a wide range of kinematics [42]. Our results are compared with experiments recently performed at 200 eV and other theories when available. The paper is organized as follows. Section 2 presents an outline of the theory. In Sect. 3 we present and analyse our results along with experimental data. Finally, Sect. 4 summarises and concludes this work. Atomic units are used unless otherwise stated.

## 2 Theory

In the positron (electron) impact ionization of argon atom in its ground state, the reaction under investigation can be schematically written as:



The kinematics of the ionization reaction is fully determined, as a result, all emitted particles are detected in coincidence and analysed in direction and energy, so that the experiments belong to the (e,2e) process (for electron impact) and to the (e<sup>+</sup>,e<sup>+</sup>e<sup>-</sup>) process (for positron impact). The projectile with energy

$E_i$  and momentum  $\vec{k}_i$  is scattered with an energy  $E_1$  and momentum  $\vec{k}_1$  and is detected in coincidence with the emitted electron having an energy  $E_2$  and momentum  $\vec{k}_2$ . In case of electron impact ionization exchange effects should be accounted except for highly asymmetric kinematics, while for positron impact process exchange effects do not exist at all. We use here the frozen core approximation and the single active electron approximation. After summing over all final spins because of the indistinguishability of the two outgoing electrons and averaging over all initial spin states, the TDCS for electron impact is written as:

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

and for positron impact (by taking  $T_{\text{exc}} = 0$ ) the TDCS is given by:

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

$T_{\text{dir}}$  and  $T_{\text{exc}}$  are, respectively, given by:

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

$$T_{\text{exc}} = \langle \phi_c^{Z(-)}(\vec{k}_1, \vec{r}_1) \phi_c^{Z(-)}(\vec{k}_2, \vec{r}_0) C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) \left| \frac{1}{r_{01}} - \frac{1}{r_0} \right| \phi_c^{Z(+)}(\vec{k}_i, \vec{r}_0) \Phi_{\text{target}}(\vec{r}_1) \rangle \quad (5)$$

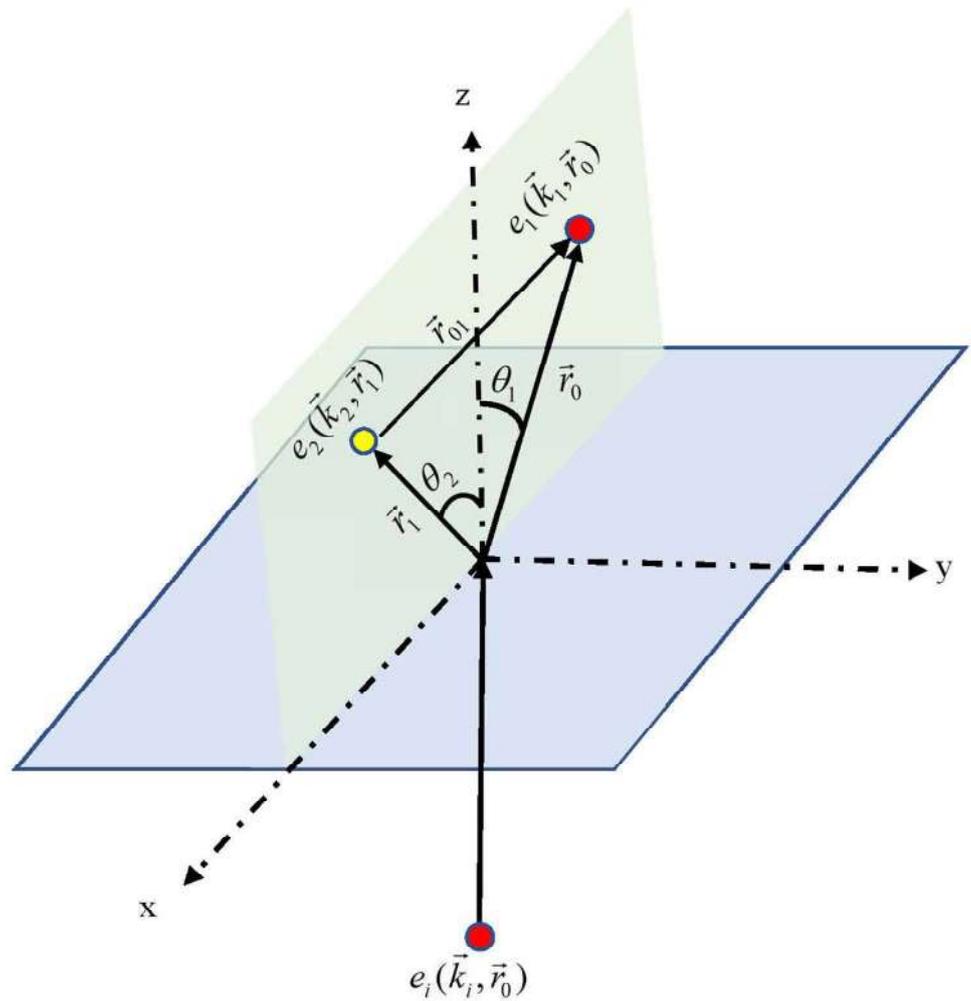
$\Phi_{\text{target}}(\vec{r}_1)$  is the initial bound wave function of the target, while  $\phi_c^{Z(+)}$  and  $\phi_c^{Z(-)}$  represent, respectively, the incoming and outgoing Coulomb waves and are given by [43]:

$$\begin{aligned} \phi_c^{Z(+)}(\vec{k}, \vec{r}) &= \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} {}_1F_1(i\alpha, i(kr - \vec{k} \cdot \vec{r})) \exp\left(\frac{\pi\alpha(r)}{2}\right) \Gamma(1 - i\alpha) \end{aligned} \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} \phi_c^{Z(-)}(\vec{k}, \vec{r}) &= \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})}{(2\pi)^{3/2}} {}_1F_1(-i\alpha, -i(\vec{k} \cdot \vec{r} + kr)) \exp\left(\frac{\pi\alpha(r)}{2}\right) \Gamma(1 + i\alpha) \end{aligned} \quad (6b)$$

As can be seen in Eqs. (4) and (5), only two coordinates  $\vec{r}_0$  and  $\vec{r}_1$  are used in the theory as we are using the single particle picture.  $r_0$  is the distance between the projectile and the target,  $r_1$  is the distance between the ejected electron and the target and  $r_{01} = |\vec{r}_0 - \vec{r}_1|$  represents the distance between the two particles in the continuum. In Fig. 1, we present the coplanar asymmetric geometry investigated in this work where the

**Fig. 1** Schematic of the ionization process in asymmetric coplanar geometry. The projectile (electron/positron) with initial momentum  $\vec{k}_i$  is scattered with momentum  $\vec{k}_1$  at an angle  $\theta_1$ , in coincidence with an electron with momentum  $\vec{k}_2$  at an angle  $\theta_2$ . The positions of the scattered (electron/positron) and the ejected electron are, respectively  $\vec{r}_0$  and  $\vec{r}_1$



two particles in the exit channel are detected in coincidence.

$\phi_c^{Z(+)}$  and  $\phi_c^{Z(-)}$  are the solutions of Schrödinger's equation for the continuum Coulombic spectrum solved in the parabolic coordinates with a constant charge  $Z$ . In the present work, we use an approximate model where the constant charge  $Z$  is replaced by variable charges  $Z(r)$  in Eq. (6). The Sommerfeld parameter  $\alpha_i$  is then replaced by  $\alpha(r)$ .  $C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01})$  is the final state projectile electron interaction or the so-called post-collision interaction (PCI), written as:

$$C(\alpha_{01}, \vec{k}_{01}, \vec{r}_{01}) = \exp\left(-\frac{\pi}{4k_{01}}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{01}}\right) {}_1F_1\left(-i\alpha_{01}, 1, -i\left(\vec{k}_{01} \cdot \vec{r}_{01} + k_{01}r_{01}\right)\right) \quad (7)$$

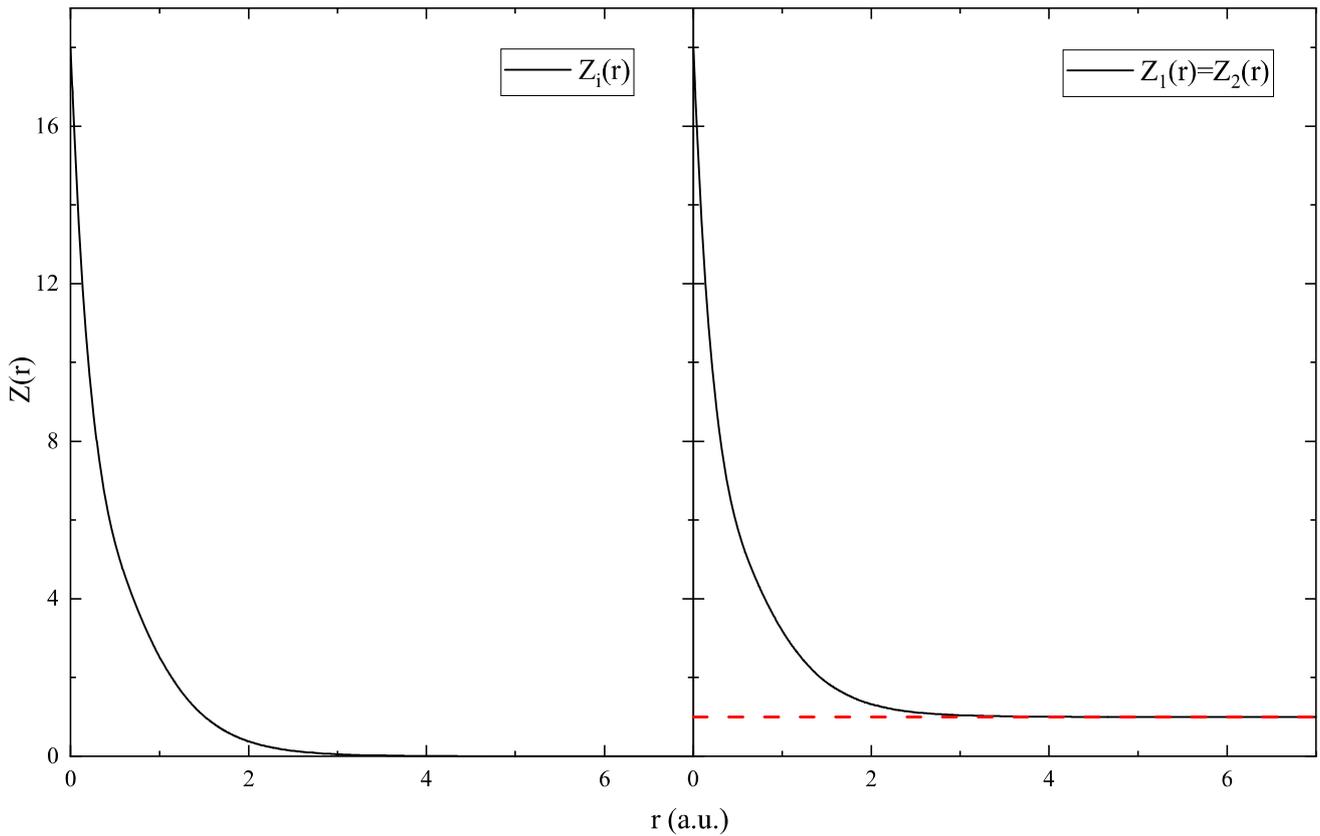
For electrons we have:  $\alpha(r) = \frac{Z(r)}{k}$  and  $\alpha_{01} = -\frac{1}{2k_{01}}$  where  $\vec{k}_{01} = \frac{1}{2}(\vec{k}_2 - \vec{k}_1)$

${}_1F_1$  is a confluent hypergeometric function and  $\Gamma\left(1 - \frac{i}{2k_{01}}\right)$  is the gamma function.

In case of positrons, we just change expressions of  $\alpha(r)$  and  $\alpha_{01}$  given above for electrons as follows:  $\alpha(r) \rightarrow -\alpha(r)$  and  $\alpha_{01} \rightarrow -\alpha_{01}$ .

For the atomic bound state of the target represented by  $\Phi_{\text{target}}(\vec{r})$ , we use the Hartree–Fock atomic orbitals of Clementi and Roetti, expanded as a linear combination of Slater type wave functions [44].  $\Phi_{\text{target}}(\vec{r})$  consists on a linear combination of 2p (2,1, m) and 4p (4,1, m) slater type atomic orbitals. To evaluate the TDCS, we take into account the contributions of all possible values of the quantum number  $m$ , say ( $m = 0, m = 1$  and  $m = -1$ ).

The variable charge  $Z(r)$  is calculated analytically by using the spherically averaged potential of the target viewed by the electron:



**Fig. 2** Variable charge  $Z(r)$  felt by the incident electron (a) and the outgoing electrons (b) during the ionization process for the 3p orbital of argon

$$U_i(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\vec{r}_1) d\Omega_1 \tag{8}$$

where  $V_i(\vec{r}_1)$  is the standard Hartree potential, defined for electron-atom interaction by:

$$V_i(\vec{r}_1) = -\frac{Z}{r_1} + \sum_{j=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \tag{9}$$

and for positron-atom interaction by:

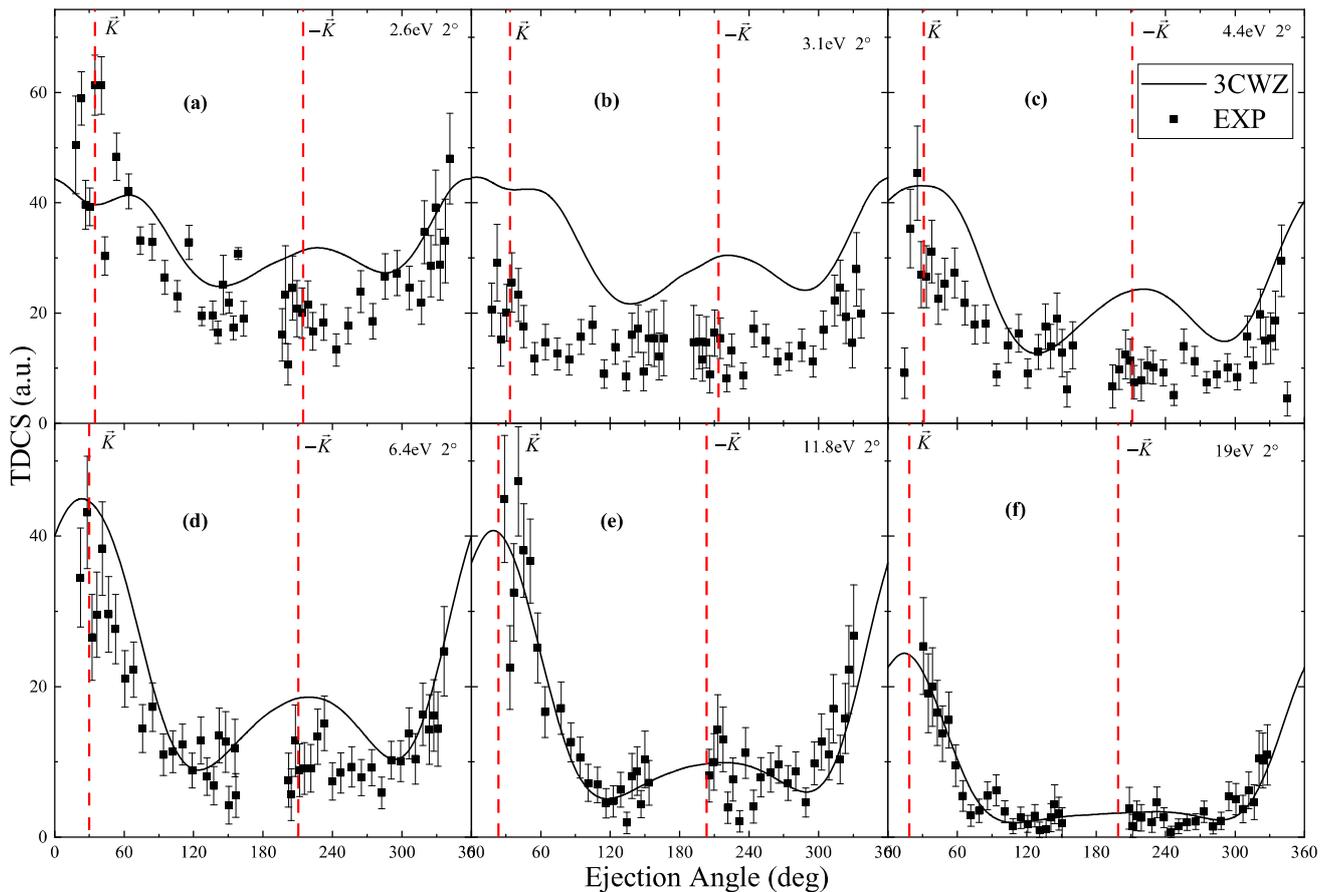
$$V_i(\vec{r}_1) = \frac{Z}{r_1} - \sum_{j=1}^{N_0} N_{ij} \int \frac{|\phi_j(\vec{r})|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} d\vec{r} \tag{10}$$

$N_0$  is the number of atomic orbitals and  $N_{ij}$  is the number of electrons in each orbital.

The variable charge is evaluated analytically by using the spherically averaged potential of the target viewed by the electron (positron) as indicated in the following:

$$U_i(r_1) = \frac{1}{4\pi} \int V_i(\vec{r}_1, \vec{R}_i) d\Omega_1 = \begin{cases} -\frac{Z(r_1)}{r_1} & \text{for electrons} \\ \frac{Z(r_1)}{r_1} & \text{for positrons} \end{cases} \tag{11}$$

The variable charges are denoted as follows:  $Z_i(r)$  is the charge that sees the incident projectile while  $Z_1(r)$  and  $Z_2(r)$  represent the charges felt by the scattered projectile and the emitted electron, respectively. For the two ionization processes (by electron or positron impact), the incoming projectile sees a variable charge  $Z = 18$  at the centre of argon atom and a charge  $Z = 0$  asymptotically. The outgoing particles see a charge  $Z = 18$  at the centre of the atom and  $Z = 1$  asymptotically. In Fig. 2, the variable charges are plotted for the ionization of argon 3p, the two panels display  $Z(r)$  corresponding to the continuum electrons, it is clearly observed 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 3CWZ model used in this work and based upon a full variable Coulomb wave modelling with variable charges, represents somewhat a full distorted wave approximation to treat the direct single ionization process by electron or positron impact. The use of this variable charge scheme has been widely discussed and justified in our previous works [42, 45]. The 3CWZ model has been actually inspired from the standard BBK model [46] in which the two outgoing electrons are represented by Coulomb waves with an effective charge  $Z$  while the incident electron is represented by a plane wave. In a first step BBK model has been improved by replacing just the effective charge  $Z$  for the two outgoing particles by a variable charge  $Z(r)$  to study the



**Fig. 3** TDCS for the ionization of argon 3p by positron as a function of the ejection angle at 200 eV impact energy. The projectile is scattered at angles  $\theta_1 = 2^\circ$  in coincidence with the ejected electron having energies between 2.6 and 19 eV. Absolute theoretical results are black solid line (3CWZ). The cross normalized (see text) experimental data are black squares taken from [47]. The dashed vertical lines indicate the direction of the momentum transfer  $\vec{K}$  and its opposite direction  $-\vec{K}$

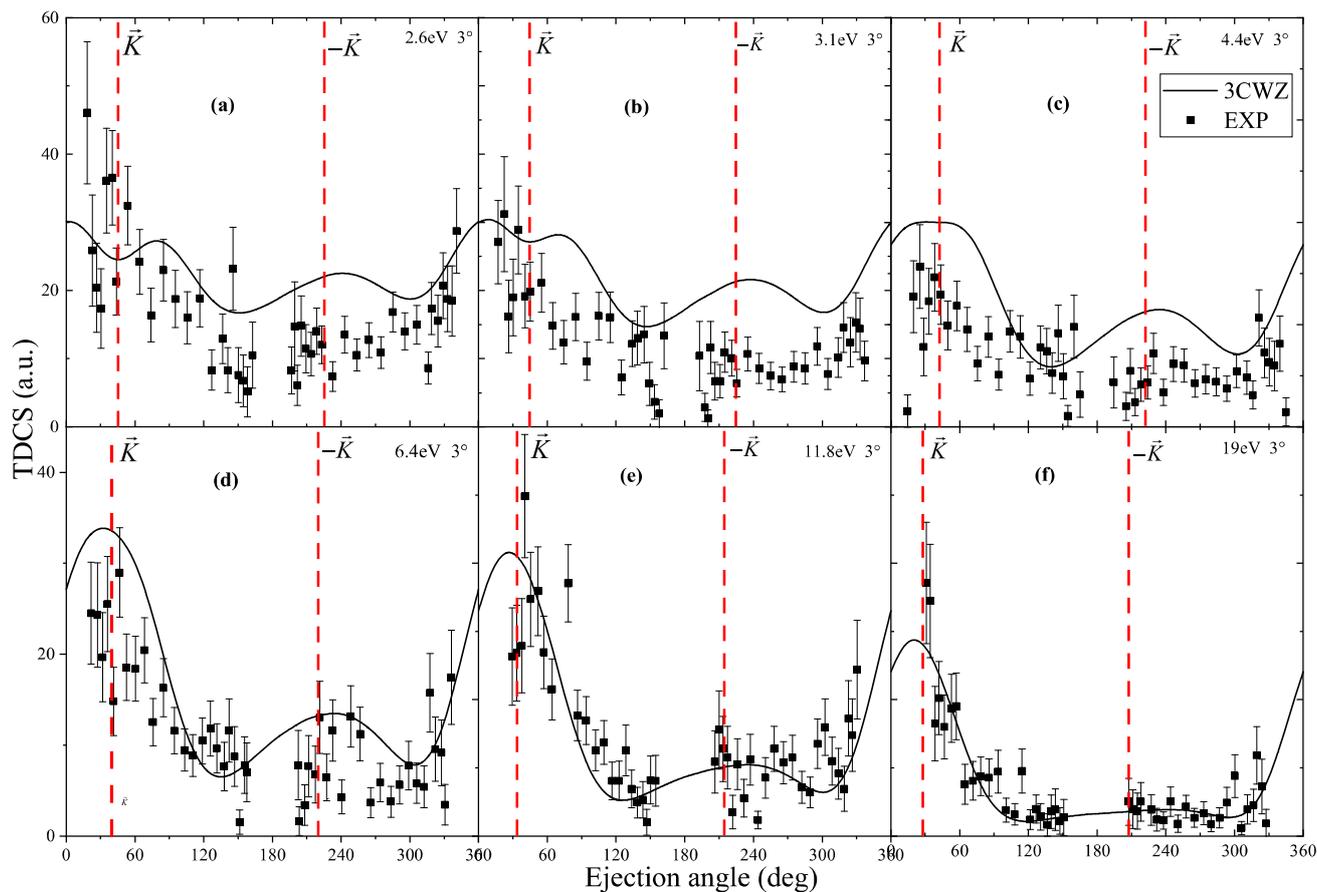
(e,2e) process for some atomic and molecular targets, the model was called BBK2CWZ [45]. In the 3CWZ approach, BBK2CWZ model has in turn been improved and applied to argon 3p by representing even the incident electron by a Coulomb wave with variable charge instead a plane wave [42].

The approach has the appealing advantage of treating exactly the PCI without any approximation, the other advantage is related to significant savings in computing time where a result is obtained in few hours instead of a much longer time with other models. This would allow us to extend our model for the ionization of molecules.

In this work, we present the TDCS spectra of the secondary ejected electrons due to the collision of electrons (positrons) with argon atom by using a theoretical approach based on the 3CWZ model. Theoretical results are then discussed and compared with experiments in a wide range of kinematics and with available theories.

### 3 Results and discussion

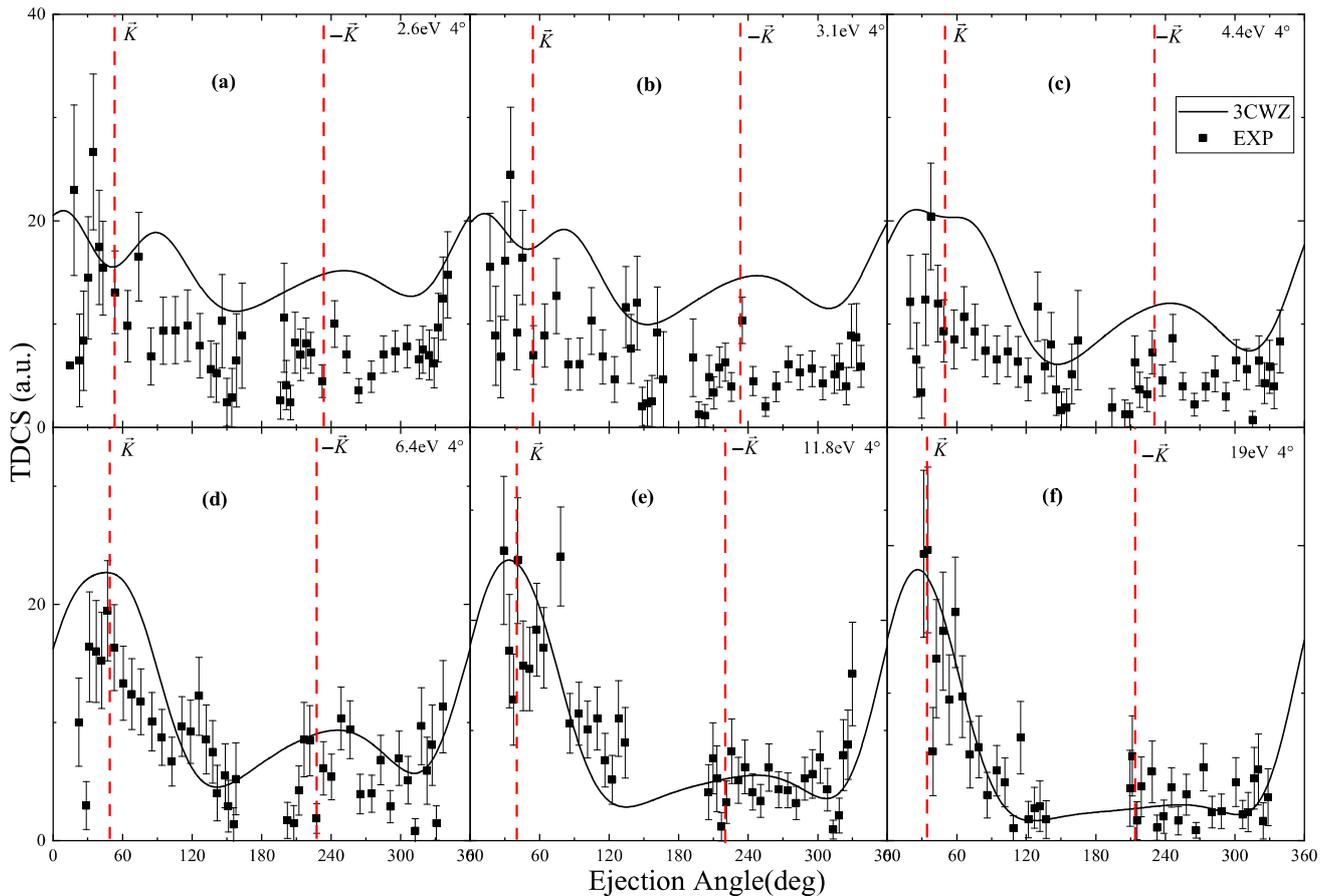
The single ionisation of argon 3p by electron and positron impact has been investigated in coplanar asymmetric kinematics, by using the 3CWZ model where the PCI and exchange effects are both included. The present theoretical results are compared with recent experiments [47] performed at 200 eV impact energy at three scattering angles  $\theta_1 = 2^\circ, 3^\circ$  and  $4^\circ$ , and six ejection energies ranging between 3.1 and 19 eV, the corresponding TDCSs are plotted as a function of the emission angle and discussed in Figs. 3, 4, 5, 6, 7, 8. As stated by Dubois and de Lucio [47], positron and electron data are normalized to each other since the same setup and techniques were used, all TDCSs were hence provided on a single relative scale. While comparing with theory a single common factor is then required to fix the relative magnitude of the experiments and theoretical results. In this work the global scaling factor is obtained by achieving the best visual fit of the data and



**Fig. 4** Same as Fig. 3 but for  $\theta_1 = 3^\circ$

the 3CWZ results for positron kinematics at  $\theta_1 = 2^\circ$  and  $E_2 = 2.6$  eV (Fig. 3a), this factor is found to be 0.26. We would like to note that no theoretical results are presented in [47], our theory will be confronted only to experiments. Our theoretical calculations are then compared with the data corresponding to the ionization processes by positron impact (Figs. 3, 4, 5) and electron impact (Figs. 6, 7, 8), in all cases the vertical dashed lines indicate the direction of  $\vec{K}$  and  $-\vec{K}$  respectively, where  $\vec{K}$  is the momentum transfer defined as  $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_1$ . In Figs. 3, 4, 5, TDCSs for positron impact or ( $e^+, e^+e^-$ ) reaction, are shown for fixed values of the scattering angle and various ejection energies, as a function of the ejection angle, our theoretical results are then compared with recent measurements [47]. The first observation that can already be made is that a recoil peak is exhibited in all cases in agreement with the data. This was in reality expected, as the investigated kinematics correspond to dipole regimes characterized by small momentum transfer (here ranging from 0.225 to 1.2 au). A double peak structure in the binary region is also observed for lower ejection energies ( $E_2 = 2.6$  and 3.1 eV) at all scattering angles. The double peaks are more pronounced in Fig. 4 (panels a and b) for  $\theta_1 = 3^\circ$  and Fig. 5 (panels a and b) for  $\theta_1 = 4^\circ$ . Note that the double peak structure in the binary

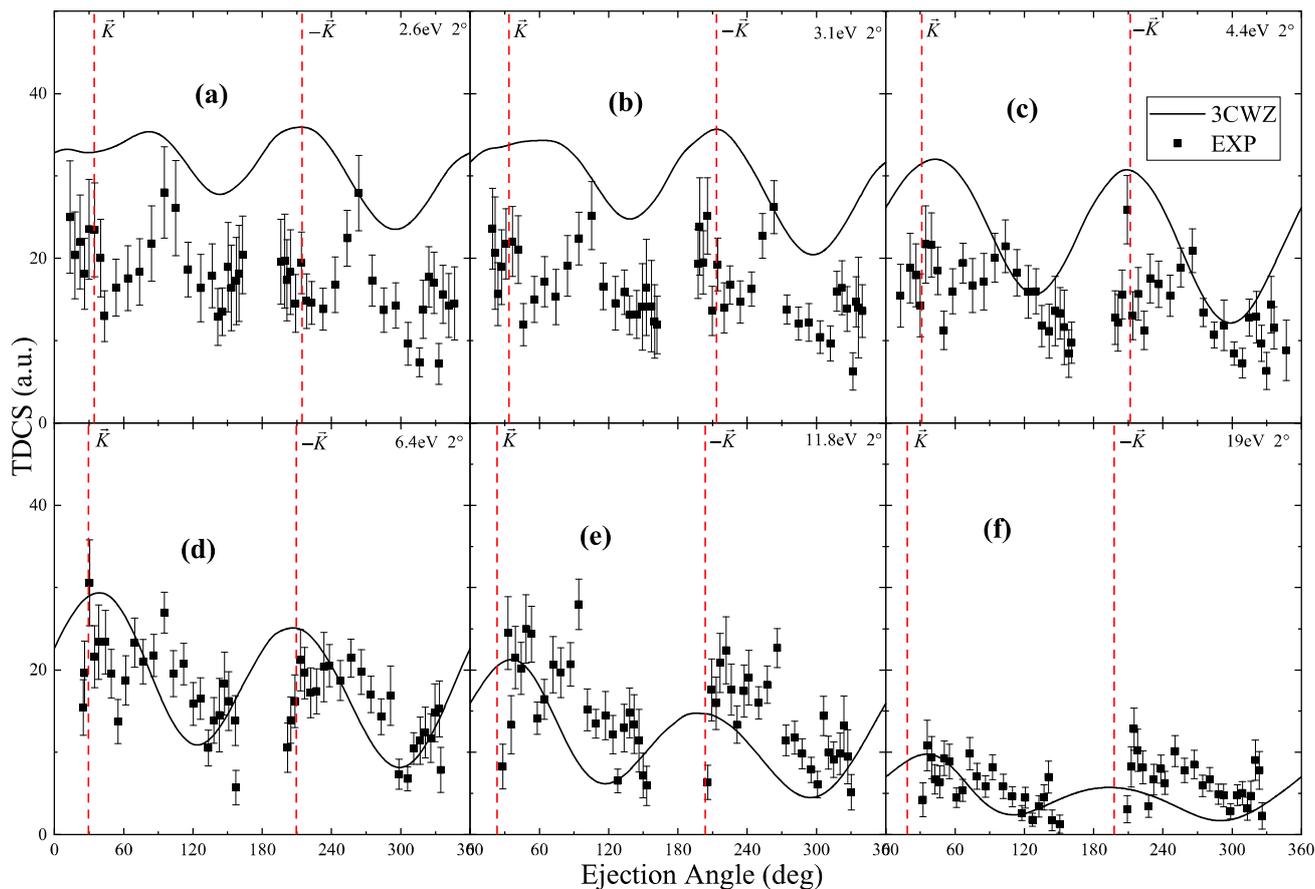
region in general is attributed to the predominance of the p-character of the atomic or molecular orbital for kinematics close to the Bethe-ridge regime ( $K \approx k_2$ ). As can be seen, for example in Fig. 4, kinematics are characterized by ( $K = 0.319$  and  $k_2 = 0.437$ ) for panel (a) and ( $K = 0.322$  and  $k_2 = 0.477$ ) for panel (b), these kinematics can be considered as quite close to the Bethe ridge regime. When we look to the amplitudes, the 3CWZ model predicts rather correctly the cross normalized experiments in almost cases. At a scattering angle  $\theta_1 = 2^\circ$ , the data are overall well reproduced by our theory except for an ejection energy  $E_2 = 3.1$  eV where the data are clearly overestimated. Moreover at scattering angles  $\theta_1 = 3^\circ$  and  $4^\circ$  the agreement is less good at lower ejection energies, it is indeed observed in Figs. 4 and 5 (panels a, b and c) that the data are overestimated for energies between 2.6 and 4.4 eV. For higher ejection energies, between 6.4 and 19 eV, the numerical results yield good prediction of the ionization process as they agree much better with the data. We can therefore state that calculated positron impact TDCSs within the 3CWZ model, in the different combinations of scattering angles and ejection energies, are overall in quite good agreement with experiments, except for lower ejection energies where the data are however overestimated. We consider now electron impact calculations where our theoretical results



**Fig. 5** Same as Fig. 3 but for  $\theta_1 = 4^\circ$

are displayed in Figs. 6, 7, 8 and compared with the data. Note that the normalization is still made by keeping the same multiplicative factor (0.26) as positron impact and electron impact measurements are normalized to each other. As seen, the TDCS exhibits a recoil peak in all kinematics which is a signature of dipole regimes, as it was stated above for positron impact reaction. In addition, the recoil peak is generally expected to be smaller than the binary peak in dipolar regime. In the present study we observe strong recoil peaks at lower ejection energies ( $E_2 = 2.6$ , 3.1 or 4.4 eV) for all scattering angles, while for higher ejection energies the recoil peaks become smaller and broader. When we compare our numerical results with the data in Figs. 6, 7, 8, it is seen that the experiments are overestimated at lower ejection energies ( $E_2 = 2.6$ , 3.1 or 4.4 eV) at all scattering angles (panels a, b and c). The situation is subsequently improved for higher ejection energies and our results exhibit much better agreement with the data (panels d, e and f). A double peak structure is also observed in the binary region in Fig. 7 (panels a and b) and Fig. 8 (panels a and b), both cases correspond to lower ejection energies ( $E_2 = 2.6$ , or 3.1 eV) as was observed for positrons. For comparative purpose between positron and electron impact, we investigate the ratio of the two binary peaks in both cases.

The first peak intensity (B1) is higher than the second peak (B2) in intensity for positrons, whereas for electrons the intensity of (B1) is smaller than that of (B2). Nevertheless, these ratios (B2/B1) are somewhat close, their values are practically constant and are  $\approx 0.9$  for positrons and  $\approx 1.1$  for electrons. In the recoil region, contrary to the experiments, no double structure is predicted by 3CWZ neither for positron impact nor for electron impact reactions. When we look in details to the TDCSs displayed in Figs. 3, 4, 5, 6, 7, 8, it is seen that the experiments exhibit practically the same magnitude for both the binary and the recoil peaks in all kinematics for electrons, whereas for positrons the magnitude of the recoil peaks tends to decrease with increasing ejection energies. Our results reproduce overall the same experimental features for positrons (Figs. 3, 4, 5) where the agreement is quite good when we compare with the data. Nevertheless, for electrons the data are not correctly reproduced in all kinematics. Indeed, it is seen in Figs. 6, 7, 8 (panels a, b and c) that the TDCSs exhibit nearly the same amplitudes for the binary and recoil peaks at all scattering angles for lower energies ( $E_2 = 2.6$ , 3.1 or 4.4 eV). This trend is not unfortunately observed for higher ejection energies ( $E_2 = 6.4$ , 11.8 or 19 eV) where the magnitude of the recoil peak decreases substantially (panels d, e



**Fig. 6** Same as Fig. 3 but for electron impact

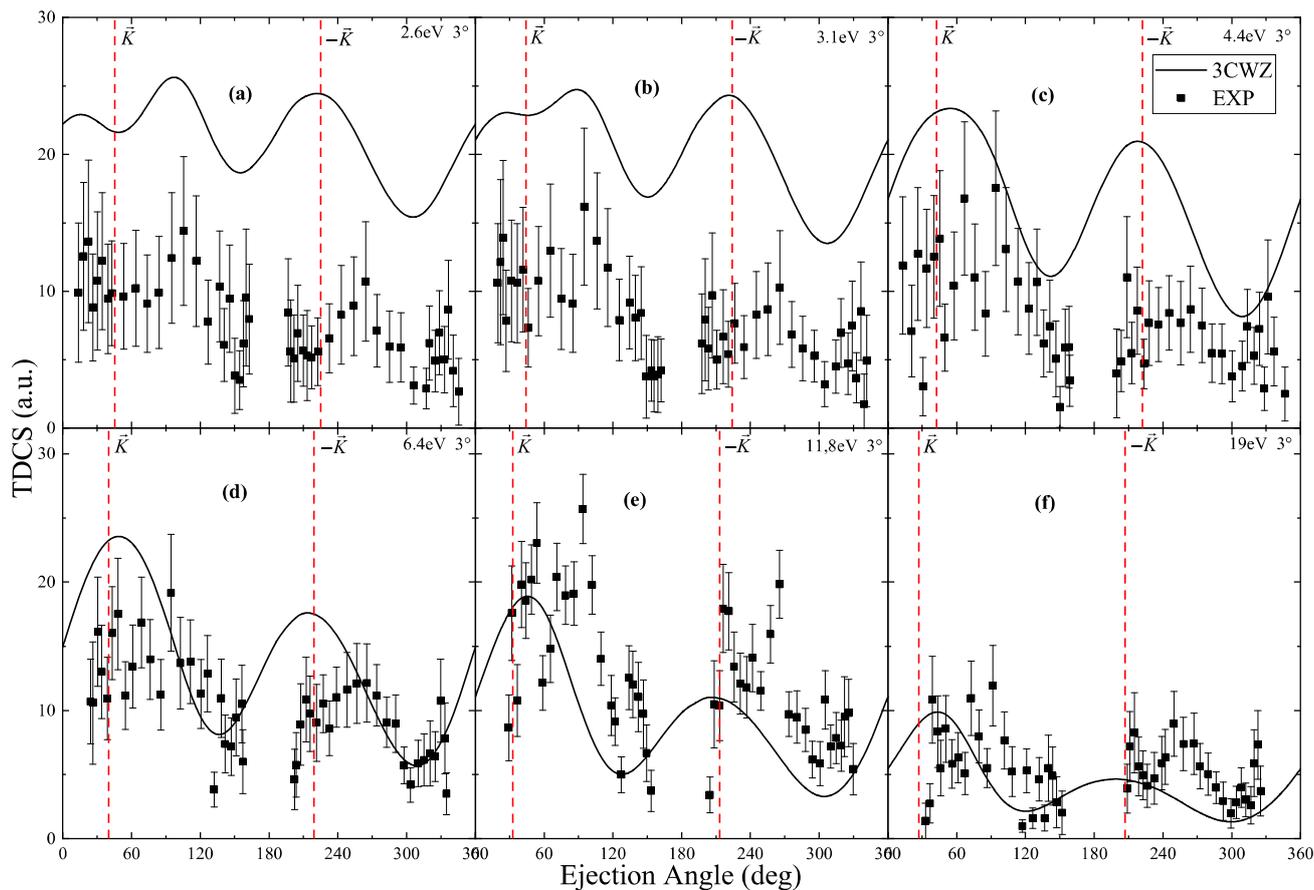
and f). When comparison is made between the binary and recoil peak intensities, it is seen that the recoil-to-binary ratio intensity for lower momentum transfer is about 75% for positrons and 100% for electrons. These ratios decrease with increasing momentum transfer to reach  $\approx 10\%$  for positrons and  $\approx 60\%$  for electrons.

Another investigation that can be made is a comparative study in peak magnitude between positron impact and electron impact TDCSs which are displayed in the absolute scales of 3CWZ model in Figs. 3, 4, 5, 6, 7, 8. It is overall seen that the binary peaks are higher in amplitude for positron impact whereas in the recoil region the peaks are higher for electron impact, our results confirm in fact the predictions of de Lucio et al. [47]. An interpretation for these findings, attributed to the post-collision interaction, is given in the following: when the projectile and the ejected electron are moving in the forward direction, the ejected electron is attracted for positron impact and repelled for electron impact. This will induce an enhancement of the binary peak for positron impact. In the recoil region, the opposite occurs, in this case the ejected electron will undergo a stronger backscattering by the residual ion for electron impact than for positron impact.

We focus now our interest on the positions of the peaks. When we look simultaneously to the position

of the binary and recoil peaks for positrons and electrons, it is observed that in the binary region the binary peaks are shifted in the backward direction with respect to the momentum transfer position (towards  $0^\circ$ ) for positrons while for electrons the shift takes place in the forward direction (towards  $90^\circ$ ). Also in the recoil region, we observe rather the opposite, where now the recoil peak is shifted towards higher angles for positrons (towards  $180^\circ$ ) and lower angles for electrons (towards  $90^\circ$ ). This reflects the predominance of the post-collision interaction effects which are included in 3CWZ, the ejected electron is either repelled by the scattered projectile in the forward direction (for electron impact) or is attracted and therefore slowed by the projectile (for positron impact) so that it finally moves at lower angles. In the recoil region, the ejected electron is attracted by the residual ion, the post-collision interaction induces then a shift in the forward direction for positron impact and in the backward direction for electron impact. These findings are generally predicted by sophisticated models like DWBA approach [39] where the PCI is accounted via Gamow factor.

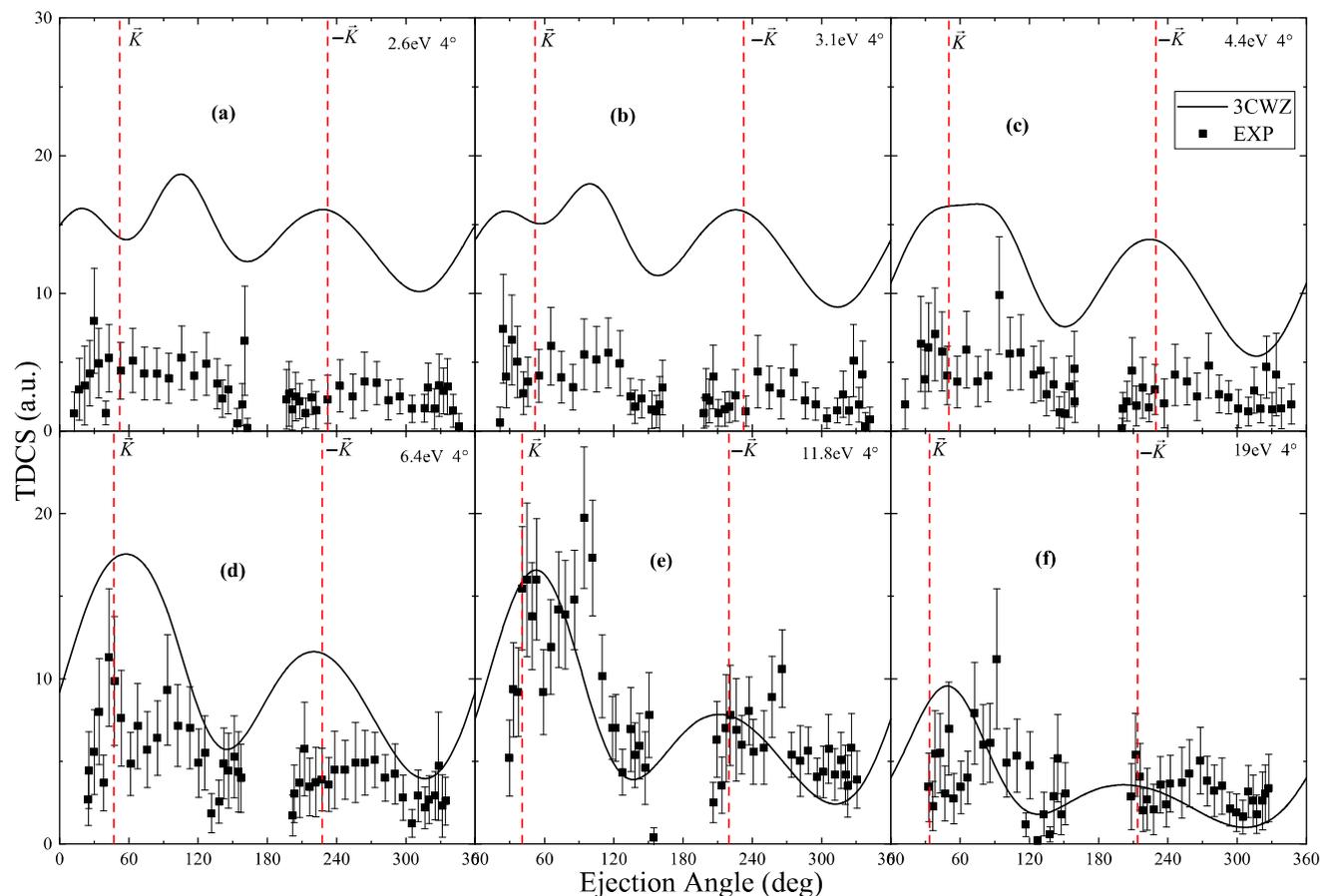
We conclude our present study by making a comparison with other available theoretical results. As stated by Dubois and de Lucio [47], the data have limited statistics because of the small beam current used in



**Fig. 7** Same as Fig. 4 but for electron impact

the experiment, so for a proper comparison with theory, a convolution of theoretical calculations for a range of energies should be made. Therefore, we present in Fig. 9 theoretical results performed at an ejection energy ( $E_2 = 5.4$  eV) and a scattering angle  $\theta_1 = 3^\circ$  which are compared with experiments for simultaneously ejection energies ( $E_2 = 4.4$  and  $6.4$  eV). As seen, our results are compared with the present data and theoretical results based on CDW-EIS [48] and DWBA [39, 49] models. Note that both models account for the PCI but in different ways, CDW-EIS is in addition a full distorted wave approach like DWBA but provides a better asymptotic description of the initial channel. In Fig. 9, the TDCS is displayed as a function of the emission angle for positron impact (panel a) and electron impact (panel b). All results have been normalized to unity in the binary region for the best visual fit of the peak positions. For positron impact, our calculated TDCS presents two lobes, the binary lobe being more intense than the recoil one in agreement with experiments. In addition, the positions of binary and recoil peaks are shifted to lower or higher emission angles, respectively, with respect to the direction of  $\vec{K}$  (or  $-\vec{K}$ ) in overall agreement with the data. Indeed, the binary peak is located at an angle  $\approx 34^\circ$  while the recoil peak is located at an angle  $\approx 232^\circ$ , the directions of  $\vec{K}$  and  $-\vec{K}$ ,

are, respectively,  $41.2^\circ$  and  $221.2^\circ$ . On the other hand, the two other theoretical models, namely DWBA and CDW-EIS, exhibit the binary and recoil peaks which do not predict correctly the positions showed by the data. Furthermore, DWBA and CDW-EIS calculations overestimate clearly the experiments in the recoil region while 3CWZ model turns out to be more efficient as it predicts better the magnitude as well as the position of the recoil peak. In the same way, a comparative study is made for electron impact process (panel b) where in this case only theoretical results for 3CWZ and CDW-EIS models are displayed. It is shown that in the binary region, the two models are able to predict quasi similarly the position of the binary peak which is shifted in the forward direction with respect to the momentum transfer  $\vec{K}$ . In the recoil region, the situation is different where 3CWZ results are now closer to the data in magnitude and location (the position of the peak is shifted in the backward direction) while CDW-EIS overestimates them clearly, the position of the recoil peak exhibited by CDW-EIS is clearly shifted towards higher angles in clear disagreement with the data. To summarize discussion of Fig. 9, we can state that for this specific situation, the 3CWZ model is able to reproduce results in better agreement with the data than the sophisticated DWBA and CDW-EIS models.



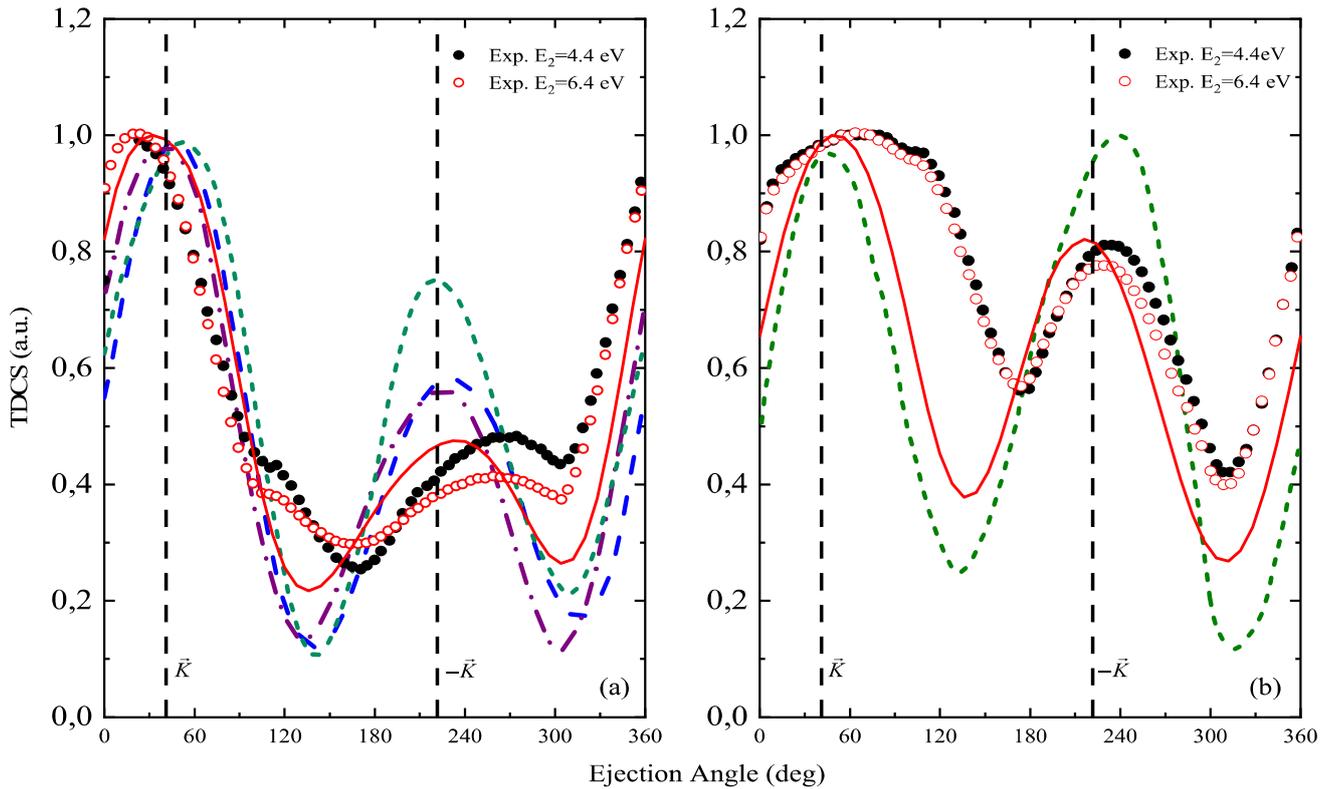
**Fig. 8** Same as Fig. 5 but for electron impact

The 3CWZ model is able to predict quite satisfactorily the positions of the binary and recoil peaks for positron and electron impact reactions, exhibiting actually signatures of charge effects.

## 4 Conclusion

In this work, charge effects related to the ionization of argon 3p by positron and electron impact have been investigated, by using a model called 3CWZ. This model is based upon a full variable charge scheme where the PCI is accounted and exactly treated. The model is overall able to predict quite correctly the positions of the peaks in the binary and the recoil regions. The peaks are shifted either in the forward direction with respect to the transfer (for electrons) or in the backward direction for positrons in the binary region, the opposite is observed in the recoil region, in overall agreement to the data. In addition, 3CWZ calculations exhibit binary peaks which are more intense for positron impact than for electron impact. In contrast the intensities of the recoil peaks are more important

for electron impact than for positron impact. We also note that comparison in magnitude with cross normalized data, has been made. For positron impact, an overall good agreement with the data has been noted in almost all cases in shape and magnitude. Nevertheless, for electron impact, the experiments have been overestimated by 3CWZ at all scattering angles for lower ejection energies, ( $E_2 = 2.6, 3.1$  or  $4.4$  eV). The results are substantially improved for higher ejection energies ( $E_2 = 6.4, 11.8$  or  $19$  eV) where the agreement becomes much better. Our theoretical calculations show many interesting structures that highlight charge effects features, better than other sophisticated models. The agreement with experiments is not perfect but turns out to be quite satisfactory for both positron and electron projectiles. Note that the 3CWZ has been used to study (e,2e) reactions for argon atom in various kinematics, obtained results were at least at the same level of agreement with experiments and even better for certain kinematics when compared to other sophisticated models [42]. This complementary study should be extended to other atomic or molecular targets which would contribute significantly to the theory of positron and electron impact ionization dynamics.



**Fig. 9** TDCS theoretical results for the ionization of argon 3p by positron (panel a) and electron (panel b), as a function of the ejection angle at 200 eV impact energy and scattering angle  $\theta_1 = 3^\circ$  in coincidence with the ejected electron with energy  $E_2$ . Experimental data are solid black circles (for  $E_2 = 4.4$  eV) and open red circles (for  $E_2 = 6.4$  eV) taken from [47]. Theoretical results, corresponding to  $E_2 = 5.4$  eV, are 3CWZ (red solid line), CDW-EIS (green short dashed line) [48], DWBA (blue dashed line) [39] and DWBA (purple dashed dotted line) [49]. Theory and experiments have been normalized to unity in the binary region for the best visual fit

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

## Author contributions

All authors contributed equally to the paper.

**Data Availability Statement** The data that support the findings of this study are available from the corresponding author.

## Declarations

**Conflict of interest** The authors have no conflicts to disclose.

## References

1. A. E. Davletov, F. Kurbanov, Ye. S. Mukhametkarimov, Phys. Rev. E **101**, 063203 (2020)
2. L. Sanche, Eur. Phys. J. D **35**, 367 (2005)
3. S. Nehaoua, S. Houamer, C. Dal Cappello, M. Chinoune, A. Galstyan, A.C. Roy, Eur. Phys. J. D **69**, 86 (2013)
4. M. Chinoune, S. Houamer, C. Dal Cappello, A. Galstyan, J. Phys. B **49**, 205201 (2016)
5. M.S. Schöffler, O. Chuluunbaatar, S. Houamer, A. Galstyan, J.N. Titze, LPh.H. Schmidt, T. Jahnke, H. Schmidt-Böcking, R. Dörner, Yu.V. Popov, A.A. Gusev, C. Dal Cappello, Phys. Rev. A **88**, 042710 (2013)
6. S. Houamer, Y.V. Popov, C. Dal Cappello, Phys. Lett. A **373**, 4447 (2009)
7. D. Ohsawa, Y. Sato, Y. Okada, V.P. Shevelko, F. Soga, Phys. Rev. A **72**, 062710 (2005)
8. C. Champion, O. Boudrioua, C. Dal Cappello, Y. Sato, D. Ohsawa, Phys. Rev. A **75**, 032724 (2007)
9. M.J. Ford, J.P. Doering, M.A. Coplan, J.W. Cooper, J.H. Moore, Phys. Rev. A **51**, 418 (1995)
10. J. Ullrich, R. Moshhammer, A. Dorn, R. Dörner, L. Schimdt, H. Schmidt-Böcking, Rep. Prog. Phys. Prog. Phys. **66**, 1463 (2003)
11. P. Bolognesi, M. Coreno, G. Alberti, R. Richter, R. Sankari, L. Avaldi, J. Elec. Spec. **141**, 105 (2004)

12. F. Martin, P.D. Burrow, Z. Cai, P. Cloutier, D. Hinting, L. Sanche, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 068101 (2004)
13. C. Dal Cappello, Z. Rezkallah, S. Houamer, I. Charpentier, A.C. Roy, P.A. Hervieux, M.F. Ruiz-Lopez, *Eur. Phys. J. D* **67**, 117 (2013)
14. P.J. Schultz, K.G. Lynn, *Rev. Mod. Phys.* **60**, 701 (1988)
15. H.H. Andersen, L.E. Rehn, M.H. Holzscheiter, *Nucl. Inst. Methods B* **192**, 1 (2002)
16. V. Sharma, G.D. Luker, D. Piwnica-Worms, *J. Magn. Reson. Imaging Magn. Reson. Imaging* **16**, 336 (2002)
17. D.H. Madison, O. Al-Hagan, *J. At. Mol. Opt. Phys.* **2010**, 367180 (2010)
18. R.R. Roy, M. Etienne, *Nature* **21**, 953 (1953)
19. D. Fromme, G. Kruse, W. Raith, G. Sinapius, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 3031 (1986)
20. G. Laricchia, P. Van Reeth, M. Szluinska, J. Moxom, *J. Phys. B* **35**, 2525 (2002)
21. A. Kover, K. Paludan, G. Laricchia, *J. Phys. B* **34**, L219 (2001)
22. J. Moxom, D.M. Schrader, G. Laricchia, J. Xu, L.D. Hulett, *Phys. Rev. A* **62**, 052708 (2000)
23. J. Gavin, O.G. de Lucio, R.D. DuBois, *Phys. Rev. A* **95**, 062703 (2017)
24. R.D. DuBois, J. Gavin, O.G. de Lucio, *J. Phys. Conf. Series* **488**, 072004 (2014)
25. M. Dürr, C. Dimopoulou, A. Dorn, B. Najjari, I. Bray, D.V. Fursa, Z. Chen, D.H. Madison, K. Bartschat, J. Ullrich, *J. Phys. B* **39**, 4097 (2006)
26. I. Bray, A.T. Stelbovics, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 746 (1993)
27. S.D. Loch, C.J. Favreau, M.S. Pindzola, *J. Phys. B* **52**, 055205 (2019)
28. M.S. Pindzola, S.D. Loch, *J. Phys. B* **52**, 245205 (2019)
29. V. Karaganov, I. Bray, P.J.O. Teubner, P. Farrell, *Phys. Rev. A* **54**, R9 (1996)
30. K.A. Stockman, V. Karaganov, I. Bray, P.J.O. Teubner, *J. Phys. B* **34**, 1105 (2001)
31. T.N. Rescigno, M. Baertschy, W.A. Isaacs, C.W. McCurdy, *Science* **286**, 2474 (1999)
32. J. Colgan, M.S. Pindzola, *Phys. Rev. A* **74**, 012713 (2006)
33. O. Zatsarinny, K. Bartschat, *J. Phys. B* **46**, 112001 (2013)
34. A. Kheifets, A. Naja, E.M. StaicuCasagrande, A. Lahmam-Bennani, *J. Phys. B* **41**, 145201 (2008)
35. K. Bartschat, P.G. Burke, *J. Phys. B* **21**, 2969 (1988)
36. R.H.G. Reid, K. Bartschat, A. Raeker, *J. Phys. B* **31**, 563 (1998)
37. X. Ren, S. Amami, O. Zatsarinny, T. Pfluger, M. Weyland, W.Y. Baek, H. Rabus, K. Bartschat, D.H. Madison, A. Dorn, *Phys. Rev. A* **91**, 032707 (2015)
38. R.I. Campeanu, *Nucl. Instr. Method B* **267**, 239 (2009)
39. G. Purohit, V. Patidar, K.K. Sud, *Nucl. Instr. Method B* **269**, 745 (2011)
40. E. Acebal, S. Otranto, *Eur. Phys. J. D* **73**, 91 (2019)
41. K. Tokesi, R.D. Dubois, *J. Phys. B* **57**, 035202 (2024)
42. K. Bechane, S. Houamer, T. Khatir, A. Tamin, C. Dal Cappello, *Phys. Rev. A* **109**, 012812 (2024)
43. L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics Non-Relativistic Theory* (Pergamon Press, Oxford, 1981), p.570
44. C. Clementi, C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables Nucl. Data Tables* **14**, 177 (1974)
45. M. Attia, S. Houamer, T. Khatir, K. Bechane, C. Dal Cappello, *J. Phys. B* **56**, 075201 (2023)
46. M. Brauner, J.S. Briggs, H. Klar, *J. Phys. B* **22**, 2265 (1989)
47. R.D. DuBois, O.G. de Lucio, *Atoms* **9**, 78 (2021)
48. O.G. De Lucio, S. Otranto, R.E. Olson, R.D. DuBois, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 163201 (2010)
49. R.I. Campeanu, C. Whelan, *Atoms* **9**, 33 (2021)

Springer Nature or its licensor (e.g. a society or other partner) holds exclusive rights to this article under a publishing agreement with the author(s) or other rightsholder(s); author self-archiving of the accepted manuscript version of this article is solely governed by the terms of such publishing agreement and applicable law.