

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**  
**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA**  
**RECHERCHE SCIENTIFIQUE**  
**UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA**

**FACULTE DES SCIENCES**  
**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**  
N° :



**DOMAINE : SCIENCES DE LA MATIÈRE**  
**FILIERE : PHYSIQUE**  
**OPTION : PHYSIQUE DES PARTICULES A**  
**HAUTE ENERGIE**

**Mémoire présenté pour l'obtention**  
**Du diplôme de Master Académique**

**Par: SOUYAH SARA**

**Intitulé**

**Calcul de la section efficace triplement**  
**différentielle de simple ionisation du Néon par**  
**un électron**

**Soutenu le : 05/06/2017**

**Devant le jury composé de:**

<b>Y. Sabri</b>	Université de m'silla	Président
<b>S. Nehaoua</b>	Université de m'silla	Rapporteur
<b>A. Metatla</b>	Université de m'silla.	Examineur

**Année universitaire : 2016/2017**

## ***Dédicace***

*Je dédie ce travail :*

*À mes chers parents : Tahar et Nacira*

*À mes frères : Ali, Abed Al Rahim et Yousef,*

*À mes sœurs : Aldjia et son mari Salim*

*Et leurs enfants : Sawsan et Arwa.*

*Comme je ne l'oublierai pas ma tante : Djamila.*

*À la mémoire de tous mes collègues et mes amis Et mes*

*Professeurs qui m'ont soutenu à toutes*

*Les étapes de ma vie.*

## *Remerciements*

*Merci et louange à Dieu seul d'abord et avant tout pour sa générosité et réconcilier*

*Pour moi de compléter ce mémoire*

*Je tiens à remercier mon directeur de mémoire : **Madame Samer Nehaoua***

*Maitre de conférence à l'université de M'silla de m'avoir*

*Aidé à terminer ce travail.*

*Je remercie également monsieur **Metatla Aboud** , Maitre de conférence à l'université de*

*M'silla. d'accepter de juger ce travail.*

*Je tiens à exprimer mon profond respect à monsieur **Yousef sabri**, maitre de conférences*

*À l'université de M'silla. Je le remercie d'avoir accepter de*

*présider ce jury.*

*Je tiens aussi à remercier tous ceux qui nous ont apporté leur aide*

*De près ou de loin.*

**SOUYAH SARA**

# Table des Matières

<b>Introduction générale</b>	01
<b>Chapitre I : Eléments de la théorie de diffusion</b>	02
I.1. Le processus de la simple ionisation ( $e$ , $2e$ )	03
I.2. Notion de la section efficace	04
I.2.1. Section efficace total	06
I.2.2. Section efficace simplement différentielle	06
I.2.3. Section efficace doublement différentielle	07
I.2.4. Section efficace triplement différentielle	07
I.3. Conditions Cinématiques de la simple ionisation	07
I.4 L'amplitude de diffusion	08
I.5. Approximation de Born	10
<b>Chapitre II: Fonction de Clementi de l'atome de Néon</b>	13
II.1. l'équation de Schrödinger	14
II.1.2 L'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène	14
II.1.2. Orbitales atomiques de l'atome d'hydrogène	15
II.2. Les atomes hydrogénoïdes	16

II.3. Atomes Polyélectronique	16
II.4. Orbitale atomique	18
II.5. Section efficace triplement différentiable	21
II.6. Approximation du cœur-gelé	22
II.6.1. Modèle du cœur gelé avec deux électrons actifs	22
II.6.2 Modèle à un électron actif	24
II.7. Cible choisie – Néon	25
II.7.1 Fonction de Hylleraas de L'hélium	26
II.7.2. Fonction de Clémenti du Néon	27
<b>Chapitre III: Calcul de la section efficace triplement différentielle du Néon</b>	28
III.1. géométrie asymétrique coplanaire du (e, 2e)	29
III.3.1. Modèle de l'onde coulombienne : BA-1OC	30
III.3.1. Résultats et discussion	30
III.4. Section efficace triplement différentielle d'He	30
III.4. Section efficace triplement différentielle du Ne	34
Conclusion	40
<b>Conclusion générale</b>	42
<b>Référence</b>	43

## Introduction générale

L'étude de l'ionisation simple ou multiple des atomes par impact électronique, présente un des domaines les plus récents de la physique des collisions. L'analyse de ce type de collision est nécessaire pour la compréhension de la structure des atomes et des molécules ainsi du scénario de la collision, elle donne la section efficace de collision qui est une grandeur fondamentale dans nombreux applications comme par exemple : la radioprotection, la médecine nucléaire, la biophysique, la physique des plasmas et l'astrophysique.

Notons que durant très longtemps, l'étude expérimentale et théorique de la réaction  $(e,2e)$ , s'est largement limitée aux cas des atomes. Les cibles atomiques qui ont fait l'objet du plus grand nombre d'études sont les atomes d'hydrogène et d'hélium. Ils ont approuvé la capacité des modèles quantiques utilisés dans l'étude d'ionisation des cibles atomiques et moléculaires. Dans la présente étude on fait un calcul de la section efficace triplement différentielle du néon, en particulier des orbitales atomiques 1S, 2s et 2p, cela est réalisé dans le cadre de la première approximation de Born.

Ce travail se compose de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous allons donner quelques généralités sur la théorie de diffusion, avec la description en mécanique quantique des différents constituants du système (électron + atome) avant et après la collision  $(e, 2e)$ , dans laquelle un électron incident avec une grande énergie entre en réaction avec une cible atomique, et sort rapidement tout en arrachant un électron de la cible. Nous avons donc défini l'amplitude de diffusion qui est indispensable pour la détermination de la section efficace totale et les différentes sections différentielles. Puis on présente les conditions cinématiques et géométriques possibles pour, l'ionisation d'une cible atomiques, nous allons présenter le modèle le plus utilisé pour calculer l'amplitude de diffusion qui est l'approximation de Born. En présentant aussi son premier et son second ordre.

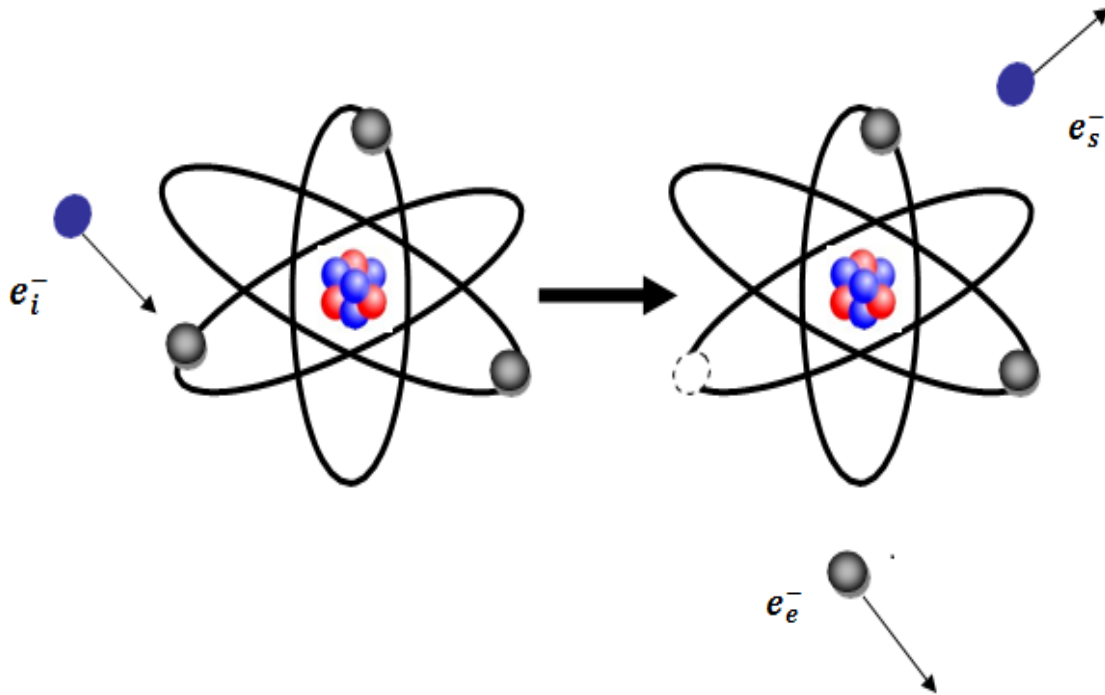
Dans le deuxième chapitre nous avons traité l'ionisation d'une cible atomique par impact d'électron. Le but de ce chapitre est d'établir deux formalismes théoriques généraux, dans le cadre de la première approximation de Born, dans laquelle on utilise l'approximation du cœur gelé avec un ou deux électrons actifs, cela est fait pour alléger le calcul de l'amplitude de diffusion. Ensuite on présente la cible choisie dans notre étude qui est le Néon, ensuite on présente la fonction de Hylleraas utilisé pour décrire les états de l'atome d'He et la fonction de Clémenti utilisé pour la description du Néon. Dans le troisième chapitre, les résultats obtenus pour la simple ionisation d'He et du Néon sont présentés et

analysés, ensuite comparés aux données expérimentales, ce qui nous permet d'évaluer la première approximation de Born

**Chapitre I:**  
**Eléments de la théorie de diffusion**

## I.1. Le processus de la simple ionisation (e, 2e)

Le processus d'ionisation simple consiste après la collision avec un électron projectile d'arracher un électron d'une cible atomique ou moléculaire. Pour son étude nous considérons dans le référentiel du laboratoire, la cible au repos bombardée par un faisceau monocinétique d'électrons d'énergie supérieure à la première énergie d'ionisation (*figure I.1*) [1].



*Figure I.1 : Le processus de simple ionisation.*

Le processus d'ionisation simple peut être représenté comme suit :



Où :

$x$  est la cible atomique ou moléculaire,  $x^+$  l'ion résiduel.  $e_i$ ,  $e_s$ ,  $e_e$  sont respectivement les électrons : incident, diffusé et éjecté et chacun a quantité de mouvement  $K_j$  et une énergie  $E_j = \frac{1}{2} K_j^2$  (en unités atomiques) ( $j = i, s, e$ ).

Du point de vue quantique, les électrons émergeant après la collision sont indiscernables, les termes diffusé et éjecté sont donc équivalents. Il est cependant d'usage de désigner le plus rapide comme étant le diffusé, et le plus lent comme éjecté. On parle d'expériences (e, 2e) lorsque les deux électrons de l'état final sont analysés en énergie et détectés en double coïncidence. Ces expériences sont alors dites complètes car tous les paramètres cinématiques sont déterminés (excepté le spin de l'électron).

La première contrainte cinématique de la réaction est la conservation de l'énergie :

$$E_i = E_s + E_e + I + E_{rec}^{X-} \quad (I.2)$$

Ainsi que la conservation de l'impulsion :

$$\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s = \vec{k}_e + \vec{q} \quad (I.3)$$

Où :

$I$  représente l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale donnée de la cible. Les énergies d'excitation de la cible dans les états initial et final sont supposées nulles, la cible étant considérée dans son état fondamental.

$E_{rec}^{X-}$  est l'énergie de recul de l'ion, elle est négligée à cause de la différence de masse entre le projectile et la cible ( $m_e \ll M_{cible}$ ).

Le vecteur  $\vec{q}$  représente le moment de recul de l'ion.

$\vec{k}$  est le moment de transfert.

## I.2. Notion de la section efficace

La section efficace est la grandeur physique la plus importante dans l'étude de diffusion, elle nous renseigne sur la réaction et sa probabilité d'être produite. Pour déduire son expression en fonction des différentes grandeurs de la réaction on considère un flux  $F$  de particules incidentes, de direction parallèle à l'axe (Oz) qui entre en collision avec  $N_i$  particules cibles (figure I.2). Si  $N$  est le nombre de particules diffusées par unité de temps, la section efficace de diffusion est définie comme le taux de particules qui ont subi une diffusion dans l'espace sur le nombre de particules incidentes ; elle s'exprime comme suit [2]:

$$\sigma = \frac{N}{N_i F}$$

$\sigma$  est appelé par définition la section efficace.

Cette quantité est mesurée en  $m^2$ , et reliée à la probabilité de transition  $P_{if}$  de l'état initial vers l'état final, par unité de temps par la relation [3] [4]:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{P_{if}}{F} \quad (I.4)$$

La probabilité de transition,  $P_{if}$  est reliée à l'élément de matrice de transition  $T_{fi}$ , par la relation :

$$P_{if} = \frac{(2\pi)^4}{K_i} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{K}_i - \vec{K}_f) |T_{fi}|^2 F \quad (I.5)$$

En tenant compte de l'expression de la probabilité de transition donnée par l'équation. (I.4), la section efficace donnée par l'équation. (I.5) devient :

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4}{K_i} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{K}_i - \vec{K}_f) |T_{fi}|^2. \quad (I.6)$$

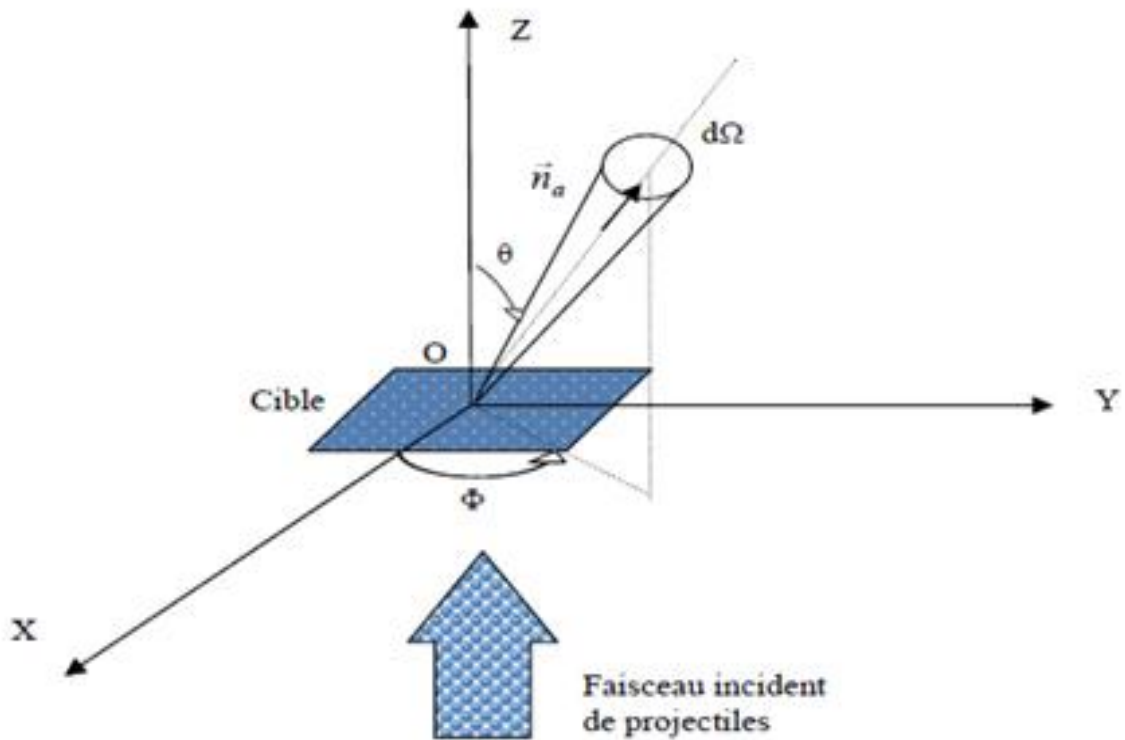


Figure I.2 : schéma simplifié à la notion de section efficace.

Dans le processus de simple ionisation, l'état final est composé de trois particules (l'électron éjecté, l'électron diffusé et l'ion résiduel). L'existence de ces trois particules permet de définir quatre types de sections efficaces : la section efficace totale, section efficace simplement différentielle, doublement et triplement différentielle.

### **I.2.1. Section efficace total**

La section efficace totale (*SET*) décrit la réaction globale. Elle est définie en fonction de tous les paramètres cinématiques qui caractérisent ce phénomène d'ionisation, puisqu'on doit intégrer sur toutes les énergies des particules sortantes à travers un angle solide  $\Omega$  puis sur tout l'espace. On la note :

$$SET = \sigma_T$$

Les sections efficaces différentielles donnent plus d'informations que celle qui est totale parce qu'elles sont dépendantes de l'énergie des particules et /ou de la direction dans laquelle ces particules sont éjectées et /ou diffusées.

### **I.2.2. Section efficace simplement différentielle**

Dans une expérience de collision, on peut obtenir aussi des informations supplémentaires sur l'état final du système, en plaçant un détecteur qui permet de déterminer la direction de l'un des électrons en coïncidence avec l'ion. Nous pouvons parler dans ce cas, d'une section efficace simplement différentielle, que nous présentons sous la forme :

$$\sigma^{(1)} = \frac{d\sigma}{d\Omega_s}. \quad (I.7)$$

Cette quantité, pour une énergie donnée  $E_i$ , mesure la probabilité de détecter un électron dans la direction  $\Omega_s$ .

La section efficace simplement différentielle en énergie fournit la distribution énergétique (intégrée sur tous les angles) des électrons émergents (diffusé et éjecté) [3].

### I.2.3. Section efficace doublement différentielle

Au moment de la détection, on peut obtenir plus d'informations sur l'état final du système, si on place un détecteur qui permet de déterminer la direction et l'énergie de l'un des électrons émergents. Alors on parle de la section Efficace doublement différentielle [5] :

$$\sigma^{(2)} = \frac{d^2\sigma}{d\Omega_s dE_s}. \quad (I.8)$$

Cette grandeur fournit une description cinématique des particules diffusées ou éjectées après la collision.

### I.2.4. Section efficace triplement différentielle

Le processus de simple ionisation par impact électronique, qu'on note (e, 2e), entraîne un électron éjecté et un électron diffusé dans la voie finale. Ces deux électrons seront détectés par deux détecteurs placés respectivement dans les angles solides  $d\Omega_s$  et  $d\Omega_e$  centrés sur les directions  $(\theta_s, \varphi_s)$  et  $(\theta_e, \varphi_e)$ . La détection en coïncidence de ces deux électrons émergents conduit à la mesure de la section efficace triplement différentielle SEDT donnée par l'expression suivante :

$$\sigma^{(3)} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s}. \quad (I.9)$$

Cette quantité donne pour une énergie donnée, la distribution angulaire de l'électron après diffusion, nous obtenons donc une fonction qui contient tous les paramètres inhérents à la collision.

## I.3. Conditions Cinématiques de la simple ionisation

La section efficace simplement, doublement et triplement différentielle dépend d'un grand nombre de paramètres cinématiques qui déterminent le type de la géométrie considérée. En général nous distinguons deux types de géométries, coplanaire ou non coplanaire, chacun d'elle peut être soit symétrique soit asymétrique (tableau (I.1))

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

Tableau I.1 : Géométries possibles de la collision( $e, 2e$ )

#### I.4 L'amplitude de diffusion

L'équation de Schrödinger indépendante du temps pour le système (électron + cible) s'écrit [7] :

$$[\Delta + k^2]\psi(\vec{r}) = u(\vec{r})\psi(\vec{r}) \quad (\text{I.10})$$

Avec  $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$  et  $u(\vec{r}) = \frac{2\mu V(r)}{\hbar^2}$

$\phi(\vec{r})$  est la solution de l'équation de Schrödinger homogène sans second membre « c'est à dire en absence du potentiel » :

$$[\Delta + k^2]\phi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{I.11})$$

$\phi(\vec{r})$  n'est autre qu'une onde plane incidente dans la direction de  $z$  car c'est une particule libre en l'absence du potentiel :

$$\phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i z} \quad (\text{I.12})$$

On cherche une solution asymptotique ; donc lorsque  $|r|$  tend vers l'infini  $V(r)$  tend vers zéro. Les états propres de diffusion ont la forme suivante :

$$\phi(\vec{k}, \vec{r})_{r \rightarrow \infty} \approx A e^{ikz} + \frac{f_k(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr} \quad (\text{I.13})$$

Le paquet d'ondes décrivant notre système est composé du paquet d'ondes *transmises*  $A e^{ikz}$  et du paquet d'ondes diffusées  $\frac{f_k(\theta, \varphi)}{r} e^{ikr}$ .

$f_k(\theta, \varphi)$  est l'amplitude de diffusion qui dépend des angles de diffusion, et  $A$  est une constante de normalisation indépendante de  $r$  et des angles  $\theta$  et  $\varphi$ .

La fonction de Green qui satisfait l'équation de Schrödinger et de l'onde entrante (+) et celle sortante (-) définie comme suit :

$$G_{\pm}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{-1 \exp(\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{I. 14})$$

Nous nous intéressons à la fonction d'onde dans la région asymptotique  $r \rightarrow \infty$   
 $|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \vec{e}_r \cdot \vec{r}'$

La fonction de Green sortante s'écrit :

$$G_+(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{-1 \exp(ik(r - \vec{e}_r \cdot \vec{r}'))}{4\pi r} \quad (\text{I. 15})$$

Donc La forme intégrale de l'équation permet d'écrire les solutions comme suivant:

$$\psi(\vec{r}) = A e^{ik_{iz}} - \frac{e^{ikr}}{4\pi} \int e^{-ik_s r'} u(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I. 16})$$

En utilisant les équations (I.13) et (I.16), l'amplitude de diffusion  $f_k(\theta, \varphi)$  est donnée par la

Formule :

$$f_k(\theta, \varphi) = \frac{-\mu}{\hbar^2 2\pi} \int e^{-ik_s r'} V(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I. 17})$$

En utilisant les notations de Dirac, l'amplitude de diffusion est donnée par :

$$f = -\frac{1}{2\pi} \langle \psi_{kf} | V | \psi_{ki} \rangle \quad (\text{I. 18})$$

$\psi_{kf}$  et  $\psi_{ki}$  représentent respectivement les fonctions d'ondes finale et initiale du système.

L'équation (I. 18) peut-être réécrite en termes de la matrice de transition-T comme suit :

$$\begin{aligned} f_{b1} &= -\frac{1}{2\pi} T_{if} \\ &= -\frac{1}{2\pi} \langle \psi_{kf} | V | \psi_{ki} \rangle \end{aligned} \quad (\text{I. 19})$$

## I.5. Approximation de Born

L'ionisation par impact électronique est un processus très complexe, son étude nécessite la détermination de la probabilité de transition d'un état initial à un état final qui peut être exprimée en terme de l'élément de transition, associé à l'opérateur de diffusion  $T$ . Il est donc nécessaire de faire appel à un certain nombre d'approximations. Parmi les approches les plus utilisées, citons l'approximation de Born proposée dès 1926 pour le calcul des sections efficaces d'ionisation de cibles atomiques et/ou moléculaires [5].

Le principe de cette approximation repose sur le fait que le potentiel d'interaction coulombien entre le projectile et les différentes particules de la cible est faible devant l'énergie totale de la cible ainsi que celle du projectile incident. Par conséquent, le potentiel diffuseur peut être traité comme une perturbation. L'opérateur de transition est défini dans ce cas à l'aide de la fonction de Green  $G_0^+$  et du potentiel d'interaction  $V$ , donc l'opérateur de transition peut être développé en fonction du potentiel  $V$  et aux différents ordres comme suit [9] [10]:

$$T = V + VG_0^+V + VG_0^+VG_0^+V + \dots$$

Où :  $G_0^+ = \frac{1}{E_i - K + i\eta}$  représente l'opérateur de Green.

L'ordre correspondant à la série de Born représente le nombre d'interactions de la particule incidente avec la cible. Une fois pour Born I, deux fois pour Born II...etc.

Le terme du premier ordre représente l'interaction simple de l'électron incident avec chacune des particules composant la cible. Les termes du  $n$ ème ordre décrivent les  $n$  interactions successives du projectile avec ces mêmes particules.

La première approximation de Born n'est valable que dans la mesure où l'on ne considère qu'une seule interaction du projectile avec la cible : c'est en général le cas pour des collisions ionisantes de cibles atomiques ou moléculaires par des électrons dont la vitesse est grande devant celle des électrons liés à la cible [11].

L'amplitude de diffusion s'écrit comme suite :

$$f_{bn} = \sum_{i=1}^n \tilde{f}_{bi} \quad (I.20)$$

Où :

$$\tilde{f}_{bi} = -2\pi^2 \langle \psi_f | V G_0^+ V \dots \dots \dots G_0^+ V | \psi_i \rangle \quad (I.21)$$

$f_{bn}$  représente la nième approximation de Born.

Pour les deux premières valeurs de  $i$  par exemple, on aura :

$$\tilde{f}_{b1} = -\frac{1}{2\pi} \langle \psi_{kf} | V | \psi_{ki} \rangle \quad (I.22)$$

$$f_{b2} = -\frac{1}{2\pi} \langle \varphi_f | V G_0^{(+)} V | \varphi_i \rangle$$

Donc :

$$f_{b1} = \tilde{f}_{b1}$$

$$f_{b2} = \tilde{f}_{b1} + \tilde{f}_{b2}$$

$f_{b1}$  et  $f_{b2}$  sont respectivement les amplitude de diffusion dans la première et la seconde approximation de Born.

$\psi_f$  et  $\psi_i$  sont respectivement l'état final et initial du système (projectile + cible), en représentant l'électron incident avant et après sa diffusion par une onde plane, ils sont donnés comme suit :

$$\psi_i = \varphi_i(\vec{k}_i) \phi_i(1.2 \dots \dots \dots N) \quad (I.23)$$

$$\psi_f = \varphi_f(\vec{k}_f) \phi_f(1.2 \dots \dots \dots N) \quad (I.24)$$

$\phi_i(1.2 \dots \dots \dots N)$  et  $\phi_f(1.2 \dots \dots \dots N)$  représentent les états initial et final de la cible

$\varphi_i(\vec{k}_i)$  et  $\varphi_f(\vec{k}_f)$  représentent respectivement le projectile avant et après la diffusion, dans l'approximation de Born, elles sont données par:

$$\varphi(\vec{k}_i, \vec{r}) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}} \quad (I.25)$$

$$\varphi(\vec{k}_s, \vec{r}) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{k}_s \vec{r}} \quad (I.26)$$

## **Chapitre II:**

# **Fonction de Clementi de l'atome de Néon**

### II.1.1. l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle mathématique reliant les propriétés de la particule et l'onde, à travers lequel on calcule la fonction d'onde  $\Psi$  qui décrit l'état quantique de particule avec une extrême précision, l'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{II.1})$$

Si la fonction de potentiel  $V(\vec{r}, t)$  est indépendante de la coordonnée de temps, et peut être écrite en  $V(\vec{r})$ , on peut montrer que la fonction d'onde comme le produit de deux fonctions : une dépendante du temps et une spatiale. La fonction temporelle est une fonction oscillatoire du temps. La partie spatiale de la fonction d'onde obéit alors à l'équation Schrödinger indépendante du temps qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) . \quad (\text{II.2})$$

### II.1.2. L'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène

Un atome d'hydrogène est le plus simple atome. L'atome électriquement neutre contient un seul proton chargé positivement et un seul électron à charge négative, lié au noyau par la force de Coulomb. Pour connaître les caractéristiques de l'électron (l'énergie , la vitesse , la probabilité de présence ...) Vous devez résoudre l'équation de Schrödinger indépendante de temps de l'atome d'hydrogène.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (\text{II.3})$$

Le potentiel entre le proton et l'électron est donné par le potentiel coulombien :

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} . \quad (\text{II.4})$$

Et :  $\nabla^2$  est l'opérateur de Laplacien en coordonnées sphériques donné par la relation suivante :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi^2}. \quad (\text{II.5})$$

Donc l'équation de Schrödinger devient comme suit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi^2} \right] - \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi). \quad (\text{II.6})$$

### II.1.3. Orbitales atomiques de l'atome d'hydrogène

Les solutions exactes  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$  de l'équation sont bien connues, elles s'écrivent sous la forme d'un produit de deux fonctions : la fonction radiale  $R_{n,l}(r)$  et la fonction angulaire  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  tel que :

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II.7})$$

$Y_l^m(\theta, \varphi)$  Sont les harmoniques sphériques normalisées qui sont donnée par :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\varphi} P_{l,m}(\cos \theta) \quad (\text{II.8})$$

Où :  $P_{l,m}(\cos \theta)$  sont les Polynômes de Legendre définis par :

$$P_{l,m}(\cos \theta) = \frac{(-1)^{l+m}}{2^l l!} (\sin \theta)^m \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (\sin \theta)^{2l} \quad (\text{II.9})$$

$R_{n,l}(r)$  est la fonction radiale qui exprime la solution de l'équation radiale de Schrödinger donnée par la forme suivant [12] :

$$R_{n,l}(r) = N_{n,l} \left( \frac{2r}{na_0} \right)^l \exp \left( -\frac{r}{na_0} \right) L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right) \quad (\text{II.10})$$

Avec :

$$N_{n,l} = \sqrt{\left( \frac{2}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \text{ est la constante de normalisation.}$$

$L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{na_0} \right)$  est les Polynômes de Laguerre généralisée.

## II.2. Les atomes hydrogéoïdes

Les atomes hydrogéoïdes se composent de plusieurs protons et un seul électron. L'énergie potentielle coulombienne de l'électron est :

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (\text{II.11})$$

La résolution de l'équation de Schrödinger est exactement la même que dans le cas de l'hydrogène, à nu facteur  $Z$  près. l'énergie des orbitales est donné par :

$$E_n = -\frac{m_e e^2 z^2}{8h^2 \epsilon_0^2 n^4} \quad (\text{II.12})$$

Seule la partie radiale des fonctions d'onde est affectée. Son expression est la même que pour l'atome l'hydrogène, mais en remplaçant  $a_0$  par  $a_0/z$  .les orbitales sont donc contractées d'un facteur  $Z$  [13].

## II.3. Atomes Polyélectronique

Les atomes polyélectronique est un système composé d'un noyau de charge positive  $\mathbf{Ze}$ , et de  $\mathbf{N}$  électrons avec  $\mathbf{N} > 1$ .

L'hamiltonien de l'atome Polyélectronique si l'on néglige les corrections relativistes et en particulier les termes dépendant du spin, est donné par :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \Delta_i + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \sum_{i=1}^N -\frac{z}{r_i} + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (\text{II. 13})$$

En unité atomique on a :

$$H = \sum_{i=1}^N -\frac{\Delta_i}{2} + \sum_{i=1}^N -\frac{z}{r_i} + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II. 14})$$

Où :

$r_i$  est la distance entre le noyau et le  $i^{\text{ème}}$  électron, et  $r_{ij}$  la distance entre le  $i^{\text{ème}}$  et  $j^{\text{ème}}$  électrons.

Bien qu'il soit facile d'écrire l'équation de Schrödinger pour l'atome à plusieurs électrons, la solution directe est impossible, même dans le cas simple de l'atome d'hélium. Les termes spécifiques qui rendent impossible la séparation des variables sont les termes de la répulsion électronique dans la partie d'énergie potentielle de l'opérateur hamiltonien. En raison de l'absence d'une solution formelle directe en termes finis, il faut recourir à des méthodes d'approximation pour les atomes complexes.

En utilisant l'approximation de champs central pour trouver une solution approchée dans le cadre de cette approximation on peut considérer que l'électron "i" se déplacé dans un potentiel ne dépende que de sa position  $r_i$  créé par le noyau et les autres électrons.

La considération précédente conduit alors à écrire L'hamiltonien sous la forme suivante [14]:

$$H = H_0 + W \quad (\text{II. 15})$$

Avec  $H_0$  est l'hamiltonien de l'approximation de champs central :

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \Delta_i + V(r_i) \right) \quad (\text{II. 16})$$

Et  $w$  est considéré comme une perturbation de  $H_0$  :

$$W = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N \left( \frac{z}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (\text{II. 17})$$

L'équation aux valeurs propres de  $H_C$  s'écrit :

$$H_0 \psi_0 = E_0 \psi_0$$

C'est une équation séparable en  $N$  équations, sa solution s'écrit :

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \psi_{\alpha_1}(\vec{r}_1) \psi_{\alpha_2}(\vec{r}_2) \dots \psi_{\alpha_N}(\vec{r}_N) \quad (\text{II. 18})$$

$\alpha_i$  de l'équation (II.18) se réfère aux trois nombres quantiques  $l$ ,  $m$  et  $n$  de l'électron «  $i$  ».

$$\left[ -\frac{1}{2} \Delta r + v(r) \right] \psi_{n l m_l}(\vec{r}) = E \psi_{n l m_l}(\vec{r}) \quad (\text{II. 19})$$

$\psi_{n l m_l}(\vec{r})$  est la solution de l'équation (II.19) :

$$\psi_{n l m_l}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II. 20})$$

Et l'énergie totale est la somme des énergies  $E_i$  :

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (\text{II. 21})$$

## II.4. Orbitale atomique

Les fonctions d'onde stationnaires solutions de l'équation de Schrödinger sont appelées orbitales atomiques  $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ . Elles dépendent de trois nombres quantiques  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{l}$  et  $\mathbf{m}$  [15]

- $n$  : est le nombre quantique principal ; c'est un entier positif.
- $l$  : est le nombre quantique secondaire ; c'est un entier positif ou nul.
- $m$  : est le nombre quantique magnétique ; c'est un entier relatif.

On va étudier quelle que l'orbitale atomique pour  $l = 0$  et  $1$ .

- $l=m=0$ , la fonction d'onde  $\Psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi)$  est l'orbitale S.

$$\Psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$$

L'orbitale S est représentée par une sphère centrée (figure II.1) :

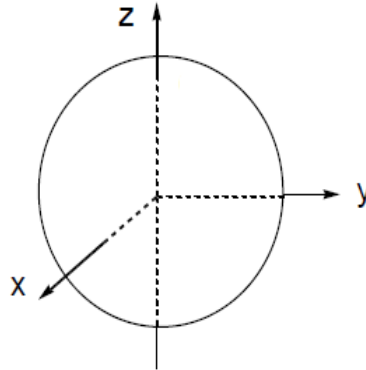


Figure II.1 : l'orbitale S

- Pour  $l=1$ , il y a trois valeurs possible de  $m$  : -1, 0 et +1, d'où trois fonctions 2p :

$$\Psi_{n,1,-1}(r, \theta, \varphi) = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta e^{-i\varphi}$$

$$\Psi_{n,1,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}} R_{n,1}(r) \cos \theta$$

$$\Psi_{n,1,1}(r, \theta, \varphi) = -\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta e^{i\varphi}$$

On effectue des combinaisons linéaires entre les orbitales  $\Psi_{n,1,1}$ ,  $\Psi_{n,1,-1}$  soit :

$$\Psi_{n1,-1} + \Psi_{n1,1} = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta \cos \varphi$$

$$\frac{1}{i}(\Psi_{n1,-1} - \Psi_{n1,1}) = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta \sin \varphi$$

D'après la normalisation de ces fonction et l'utilise les relations de transformation des coordonnées sphériques en coordonnées cartésiennes, on obtient :

$$P_X = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{X}{r}$$

$$P_Y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{Y}{r}$$

$$P_Z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{Z}{r}$$

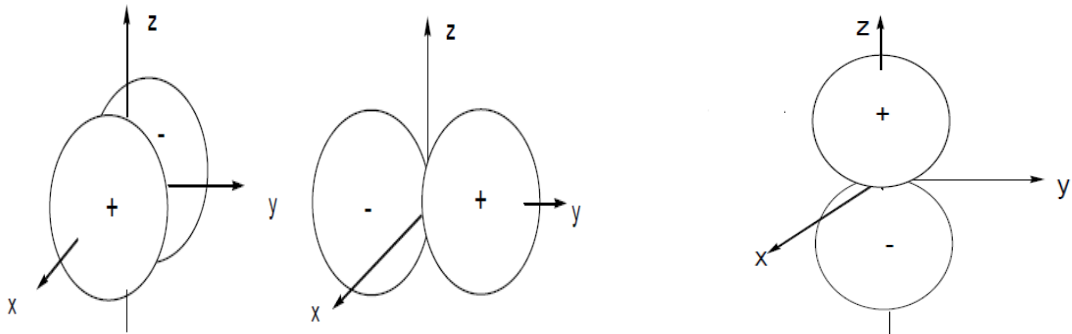


Figure II.2 représentation polaire de la partie angulaire des fonctions  $P_X$ ,  $P_Y$  et  $P_Z$ .

## II.5. Section efficace triplement différentiable

La section efficace triplement différentielle dans l'ionisation simple d'une cible atomique avec  $N$  électrons, est définie par l'expression suivant:

$$\sigma^{(3)} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{II. 22})$$

$T$  est l'élément de matrice de transition de la cible atomique de l'état initial  $\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  à l'état final  $\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$

$T$  est donné par la première approximation de Born au premier ordre :

$$T = \langle \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) | V(r_0, r_1, r_2, \dots, r_N) | \psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \rangle$$

$V(r_0, r_1, r_2, \dots, r_N)$  est le potentiel d'interaction coulombienne entre l'électron incident et la cible qui s'écrit en unités atomiques :

$$V(r_0, r_1, r_2, \dots, r_N) = -\frac{Z}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_0|} \quad (\text{II. 23})$$

$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  et  $\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  représentent respectivement les fonctions d'ondes de les états initial et final du système, elles sont données par :

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{II. 24})$$

$$\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{k}_s \vec{r}_0} \phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (\text{II. 25})$$

Où :

$\phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  et  $\phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$  sont les fonctions d'ondes qui représentent les cibles avant et après l'ionisation respectivement, et les fonctions d'ondes des électrons diffusé et incident, respectivement représentées dans l'approximation de Born par des ondes planes.

On considère que l'électron diffusé sort plus rapidement que l'électron éjecté, dans l'approximation de Born, donc ils sortent avec des énergies différentes.

Nous utiliserons l'approximation du cœur-gelé, parce qu'il est difficile de traiter le problème à N électrons, où on ne prend en considération que la couche ionisée et l'on considère le reste des électrons comme figés [16].

## II.6. Approximation du cœur-gelé

Une grande partie des propriétés physiques et chimiques des solides dépend beaucoup plus des électrons de valence que des électrons de cœur, fortement liés au noyau. Par exemple, la liaison covalente est essentiellement formée par des électrons de valence; L'approximation du cœur gelé est un modèle qui simplifie le calcul et réduit le temps de traitement des systèmes avec plusieurs électrons. Ceci est approprié pour des énergies d'incidence élevée. Ce modèle a été justifié dans le cas de l'ionisation de l'atome d'Hélium dans plusieurs travaux. On peut supposer que les électrons de cœur ne sont que peu affectés par l'environnement. En terme de densité, cela revient à supposer que [17] :

$$n(r) = n_{coeur}^{atomique}(r) + n^{valence}(r)$$

A noter que cette séparation entre électrons de cœur et électrons de valence n'est pas toujours claire : tout dépend de l'atome, de son environnement et du degré d'approximation considéré. On essaye dans la section suivante d'appliquer ce modèle dans le cas l'atome d'Hélium *He*.

### II.6.1. Modèle du cœur gelé avec deux électrons actifs

Dans ce modèle, le problème de la cible avec N électrons est réduit à un problème avec seulement deux électrons actifs

Le potentiel Dans l'expression (II.23) qui exprime l'interaction entre l'électron incident et la cible contient uniquement deux termes qui expriment l'interaction avec les deux électrons actifs écrire comme suite:[3] [1]

$$V(r_0, r_1, r_2) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} \quad (\text{II.26})$$

L'amplitude de diffusion est donne par :

$$T_{2e} = \langle \psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | V(r_0, r_1, r_2) | \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{II.27})$$

$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$  et  $\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$  Les états initial et final de la cible sont donnés par :

$$\psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{k}_i\vec{r}_0} \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \quad (\text{II. 28})$$

$$\psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{k}_s\vec{r}_0} \phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_c(\vec{r}_1)] \quad (\text{II.29})$$

$\varphi_{OA}(\vec{r})$  représente l'orbitale atomique de la cible, et  $\vec{r}_1, \vec{r}_2$  les vecteurs positions des électrons actifs de la cible.

$\varphi_c(\vec{r})$  est l'onde coulombienne de l'électron éjecté donnée comme suit :

$$\varphi_c(\vec{r}, \vec{k}_e) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} e^{i\vec{r}\cdot\vec{k}_e} e^{\frac{z\pi}{2k_e}} \Gamma\left(1 + \frac{z}{k_e}\right) {}_1F_1\left(-\frac{iz}{k_e}, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \cdot \vec{r})\right) \quad (\text{II. 30})$$

Les fonctions  $\Gamma\left(1 + \frac{z}{k_e}\right)$  et  ${}_1F_1\left(-\frac{iz}{k_e}, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \cdot \vec{r})\right)$  désignent respectivement la fonction gamma et la fonction hypergéométrique confluyente,  $\frac{z}{k_e}$  étant le paramètre de Sommerfeld

L'équation (II.27) devient donc:

$$T_{2e} = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle e^{i\vec{k}_s\vec{r}_0} \phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} \right| e^{i\vec{k}_i\vec{r}_0} \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II. 31})$$

Soit  $\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$  le moment de transfert.

En utilisant la relation de Bethe:

$$\int \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}_0}}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (\text{II. 32})$$

On trouve que :

$$T_{2e} = \frac{2}{(2\pi)^2 k^2} \left\langle \phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| -2 + e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} \right| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II. 33})$$

On permute les coordonnées du premier électron avec celles du second, donc on peut écrire :

$$T_{2e} = \frac{4}{(2\pi)^2 k^2} \left\langle \phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| -1 + e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II. 34})$$

On remplaçant (II.28) et (II.30) dans (II.34) puis obtienne :

$$\begin{aligned}
T_{2e} = \frac{4}{(2\pi)^2 k^2 \sqrt{2}} & \left\{ \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \right. \\
& + \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \\
& \left. - 2 \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \right\} \quad (\text{II.35})
\end{aligned}$$

Alor, l'expression de la section efficace triplement différentielle s'écrit dans ce cas :

$$\sigma^{(3)} = \frac{8k_s k_e}{k_i k^4} \left| \begin{aligned} & \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \\ & + \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \\ & - 2 \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \end{aligned} \right|^2 \quad (\text{II.36})$$

## II.6.2 Modèle à un électron actif

Dans ce modèle un seul électron est pris en compte, cet électron sera éjecté lors du processus de collision. L'état final dans ce cas est décrit par le produit d'une fonction d'onde plane décrivant l'électron diffusé et d'une onde coulombienne représentant l'électron éjecté.

Donc le potentiel Dans l'expression (II.23) qui exprime l'interaction entre l'électron incident et la cible contient uniquement deux termes qui expriment l'interaction avec les deux électrons actifs écrire comme suite :

$$V(r_0, r_1) = -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \quad (\text{II.37})$$

L'état final dans ce cas, décrit par un produit d'une onde plane décrivant l'électron diffusé et d'une onde coulombienne représentant l'électron éjecté. Alors, l'expression de l'amplitude de diffusion s'écrit :

$$\begin{aligned}
T_{1e} &= \left\langle \psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \left| -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \right| \psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1) \right\rangle \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle e^{i\vec{k}_s \vec{r}_0} \varphi_c(\vec{r}_1) \left| -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \right| e^{i\vec{k}_i \vec{r}_0} \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \quad (\text{II.38})
\end{aligned}$$

En appliquant la relation de Bethe (l'équation (II.32)) l'expression de l'amplitude de diffusion s'écrit comme suit:

$$T_{1e} = \frac{2}{(2\pi)^2 k^2} \{ \langle \varphi_c(\vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle - \langle \varphi_c(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \}$$

(II.39)

On remplace (II.39) dans l'équation (II.22),

Donc la section efficace triplement différentielle pour une cible atomique est donnée

Par :

$$\sigma^{(3)} = \frac{8k_s k_e}{k_i k^4} \left| \langle \varphi_c(\vec{r}_1) | e^{i\vec{k}\vec{r}_1} | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle - \langle \varphi_c(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \right|^2 \quad (\text{II.40})$$

## II.7. Cible choisie - Néon

Le néon est l'élément chimique de numéro atomique 10, de symbole Ne. C'est un gaz rare, presque inerte et sans couleur. Le néon donne une lueur rougeâtre distinctive lorsqu'il est utilisé dans les tubes à vide et les lampes néon. Sa structure cristalline est cubique à face Centrée [18].

La configuration électronique du néon est :  $1s^2 2s^2 2p^6$  ou [\[He\]](#)  $2s^2 2p^6$ .

L'orbitale atomique 2s est moins liée (énergie d'ionisation de 21,56 eV) que L'orbitale 1s (environ 890 eV).

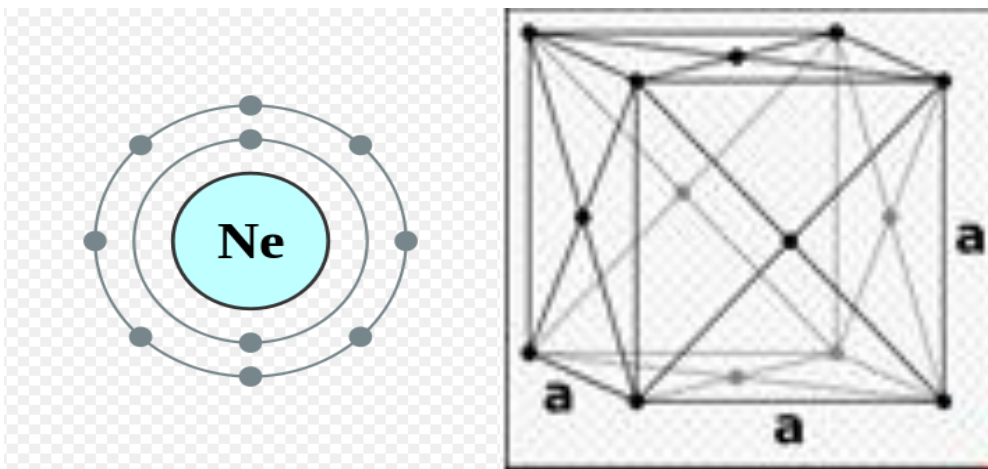


Figure II.3 structure atomique de néon et cristalline.

## II.7.1 Fonction de Hylleraas de L'hélium

Après l'apparition de l'équation de Schrödinger, hylleraas appliqué pour l'atome d'hélium il a obtenu des résultats très importants, qui ont été très précise, après ça plusieurs études ont été mené pour la détermination d'une la solution plus précise l'hélium.

Intuitivement hylleraas a considéré que la fonction d'onde de l'hélium est exprimée en fonction de l'approximation comme suivant en introduisant la distance inter nucléaire explicitement dans la fonction [19]:

$$\sum c_{(l,m,n)} s^l t^m u^n \exp(-\alpha s), \quad (\text{II.41})$$

Avec  $\{s, t, u\}$  on coordonné de system définie par :

$$s=r_1 + r_2 \quad (\text{II.42})$$

$$t=r_1 - r_2$$

$$u=r_{12}$$

Cette approximation est valide pour l'état S de l'Hélium, les coefficients C sont déterminés par le principe variationnel.  $\alpha$  est appelé l'expansion de hylleraas. L'état initial de la fonction d'onde est choisi comme le produit de deux fonctions des deux électrons, il a la 66forme :

$$\psi_0^{nor} = \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] = \exp(-\alpha s)$$

$\alpha$  est traité comme un paramètre variationnelle non linéaire [24]. L'énergie de l'état initial est connue égal -2.847656245a.u, donc  $\alpha$  optimale est  $27/16=1.6875$

## II.7.2. Fonction de Clémenti du Néon

On utilise dans notre travail la fonction de Clementi pour décrire les états liés du néon, elle s'exprime comme suivant [20]:

$$1s_{Ne} = \sum_{i=1}^2 c_i 1s_i + \sum_{i=3}^6 c_i 2s_i$$

$$2s_{Ne} = \sum_{i=1}^2 c'_i 1s_i + \sum_{i=3}^6 c'_i 2s_i$$

$$2p_{Ne} = \sum_{i=1}^4 c''_i 2p_i$$

Les paramètres  $c_i$  et  $\xi_i$  sont donnés dans le tableau II .1 [30].

$c_i$	$c'_i$	$c''_i$	$\xi_i$	$\xi'_i$	$\xi''_i$
0.93093	-0.23171	0.22430	9.57350	9.57350	1.47000
0.04610	-0.00442	0.51826	15.44960	15.44960	2.37170
-0.00085	0.18201	0.33902	1.95500	1.95500	4.45450
0.00321	0.66106	0.01769	2.84620	2.84620	9.45500
-0.00180	0.32372		4.77460	4.77460	
0.03537	-0.14244		7.71310	7.71310	

Table II.1 : Valeurs des coefficients de Clementi du Néon.

**Chapitre III:**  
**Calcul de la section efficace triplement**  
**différentielle du Néon**

Dans ce chapitre nous présentons les résultats de nos calculs de la section efficace triplement différentielle d'ionisation simple d'une cible atomique choisie qui est le néon la section efficace triplement différentielle d'une cible atomique choisie qui est le néon , l'étude concerne l'ionisation des orbitales atomiques 1s, 2s, et 2p du Néon.

On utilise le modèle (AB-OC) basé sur la première approximation de Born, dans lequel l'électron éjecté est décrit par une onde coulombienne, alors que les électrons rapides (incident et diffusé) sont présentés par des ondes planes. Rappelons qu'on utilise l'approximation à cœur gelé avec un électron ou deux électrons actifs. La section efficace triplement différentielle de l'hélium est également calculée pour approuver l'utilisation de la première approximation de Born avec Les résultats de nos calculs sont comparés aux données expérimentales.

### III.1. géométrie asymétrique coplanaire du (e, 2e)

L'ionisation simple du Néon est réalisé dans une géométrie asymétrique coplanaire, donc les électrons incident, diffusé et éjecté se trouvent dans le même plan, avec des énergies très différentes, un électron diffusé d'énergie  $E_s$  proche de l'énergie incidente  $E_i$ , et l'éjecté d'énergie  $E_e$  très faible, qui est le cas approprié pour appliquer l'approximation de Born (figure III.1) [21].

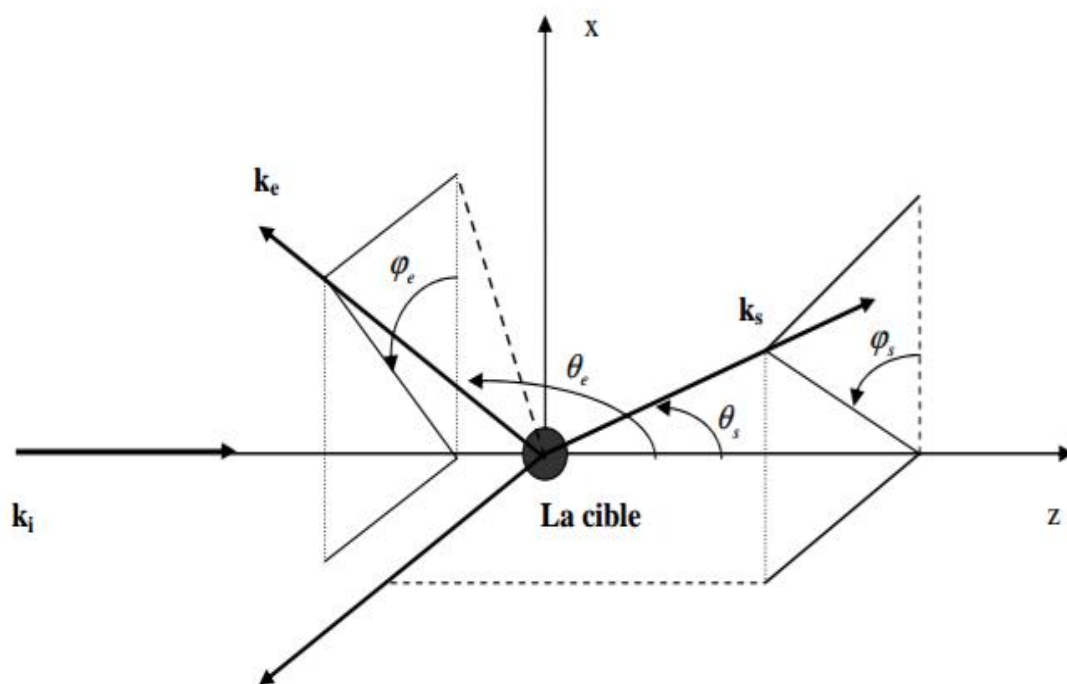


Figure III.1 : géométrie asymétrique coplanaire.

### III.3.1. Modèle de l'onde coulombienne : BA-1OC

Dans le modèle de l'approximation de Born avec une onde coulombienne, l'électron éjecté sort de la collision avec une faible énergie. On tient compte alors de l'interaction entre l'électron éjecté et le noyau de la cible et l'électron éjecté est représenté dans ce cas par une onde coulombienne de la forme :

$$\Phi_c(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{\exp(\frac{\pi}{2}\eta)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \Gamma(1+i\eta) \exp(i\vec{k}\vec{r}) {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\vec{r}))$$

Où :

$\Gamma(1+i\eta)$  et  ${}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\vec{r}))$  sont respectivement les fonctions gamma et hypergéométrique confluente.

$\eta = \frac{Z}{k_b}$  étant le paramètre de Sommerfeld.

On peut remarquer que cette onde coulombienne tend vers l'onde plane pour  $Z \rightarrow 0$ . Cette condition est réalisée pour  $k$  grand.

### III.3.1. Résultats et discussion

### III.4. Section efficace triplement différentielle d'He

Nous étudions dans cette section l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique. On trace la variation de la section efficace triplement différentielle de He pour différentes angles d'éjection.

La première courbe présente les calculs de SETD avec les deux modèles du cœur gelé avec un électron (AB-OC (1e)) ou deux électrons (AB-OC (2e)), cela est réalisé dans les conditions énergétiques et géométriques suivantes :

- **Energie d'incidence  $E_i = 250 \text{ eV}$ ,**
- **Energie d'éjection  $E_e = 20 \text{ eV}$ ,**

- Angle de diffusion est pris  $\theta_s = -6^\circ$ .

Cela est réalisé en utilisant la fonction simple de Hylleraas pour décrire l'état lié de l'hélium donnée par :

$$\psi_0^{nor} = \exp[-\alpha(r)]$$

On trouve les résultats de la SETD en unité atomique qui sont schématisées dans la figure (III.2), on remarque que la SETD présente deux pic le maximum est à l'angle  $50^\circ$  (lobe binaire) et le minimum à l'angle  $230^\circ$  (lobe de recul), les deux modèles **AB-OC(1e)** et **AB-OC(2e)** reproduisent les mêmes résultats, la différence réside que dans le lobe binaire qui est surestimé avec le modèle **AB-OC(1e)**, le modèle avec deux électrons **AB-OC(2e)** donne le résultat le plus exacte mais le modèle à un électron donne aussi un résultats assez proche donc on utilise ce dernier pour simplifier le calcul de SETD et réduire le temps de traitement.

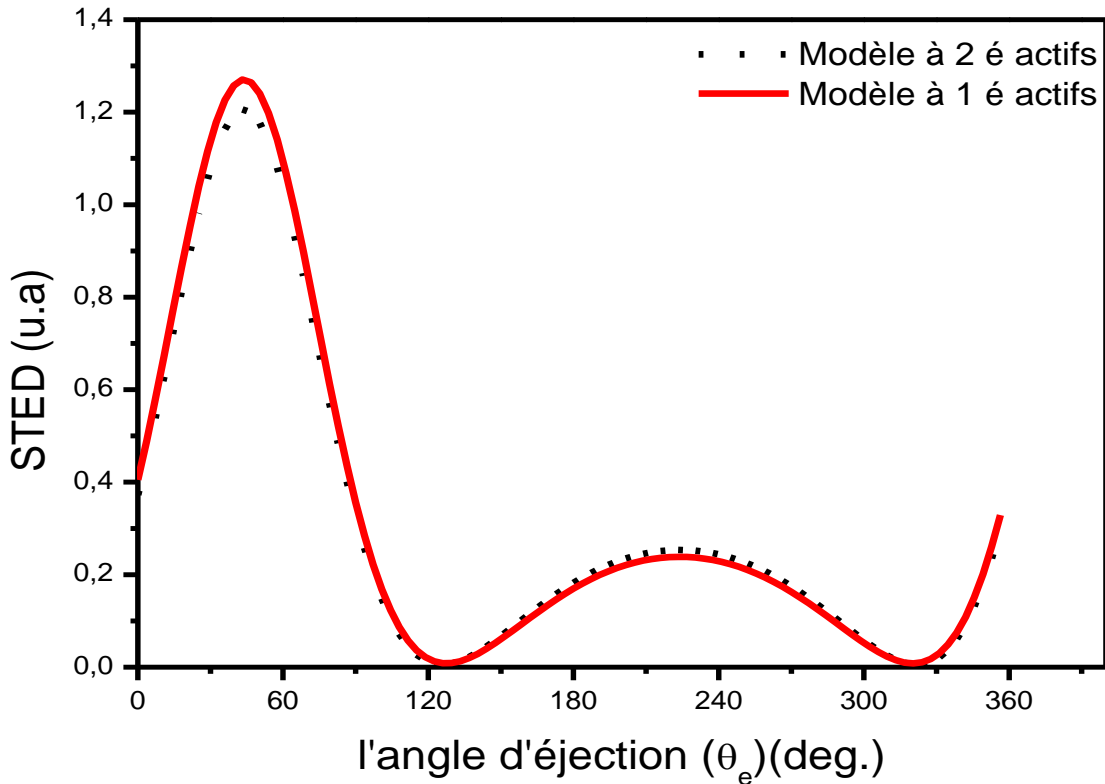


Figure III.2: Variation de la SETD d'ionisation de l'atome He en fonction de l'angle d'éjection avec d'énergie incidente  $E_i = 250$  eV, et de énergie éjection  $E_e = 20$  eV, l'angle

de diffusion étant  $\theta_s = -6^\circ$  pour les deux modèle AB-OC (1e) schématisé par une ligne continue et AB-OC(2e) schématisé par une discontinue.

Le second calcul est réalisé toujours dans le cadre de l'approximation de Born, et en appliquant le modèle avec un seul électron actif AB-OC (1e), mais

Cela est effectué pour trois conditions prises auparavant par naja [23], les résultats de calcul de la section efficace triplement différentielle sont en fonction de l'angle de l'électron éjecté pour l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique dans les figures III.3, III.4 et III.5.

Les conditions cinématiques et géométriques prises sont respectivement :

- Une énergie d'incidence  $E_i = 561.5 \text{ eV}$  et l'énergie de diffusion  $E_s = 500 \text{ eV}$  , l'énergie d'éjection  $E_e = 37 \text{ eV}$  et l'angle de diffusion  $\theta_s = -6^\circ$  (figure III.3).
- Une énergie d'incidence  $E_i = 729.6 \text{ eV}$  est très élevée par rapport au potentiel d'ionisation, l'énergie de diffusion  $E_s = 500 \text{ eV}$  , l'énergie d'éjection  $E_e = 205 \text{ eV}$  est un peu grande et l'angle de diffusion  $\theta_s = -6^\circ$  (figure III.4).
- Une énergie d'incidence  $E_i = 598.6$  , l'énergie d'éjection  $E_e = 74 \text{ eV}$  et l'angle de diffusion  $\theta_s = -6^\circ$  (figure III.5).

En comparant les résultats de la distribution linéaire de la SETD des derniers trois figures, on remarque que le lobe binaire (centré autour du transfert  $\vec{K}$ ) est reproduit dans les trois figures, alors que le lobe de recul (centré autour de  $-\vec{K}$ ) n'est pas reproduit pour la figure III.4, ou une énergie élevée d'éjection est considérée, ce qui approuve la limite de la première approximation de Born à une énergie faible d'éjection.

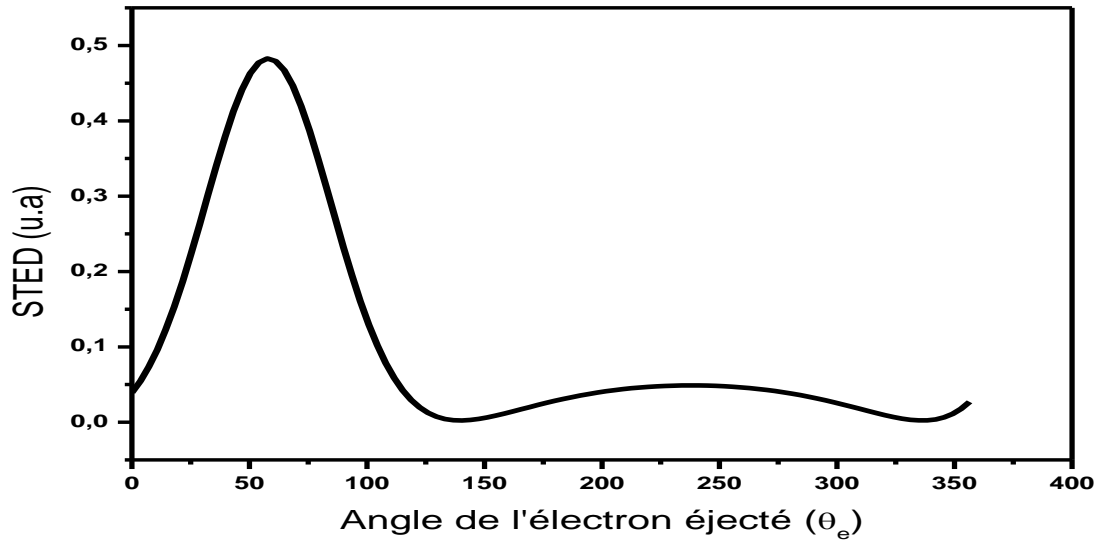


Figure III.3: Variation de la SETD d'ionisation de l'atome He en fonction de l'angle d'éjection avec d'énergie incidente  $E_i = 561.6 \text{ eV}$ , et de énergie éjection  $E_e = 37 \text{ eV}$ , l'angle de diffusion étant  $\theta_s = -6^\circ$ .

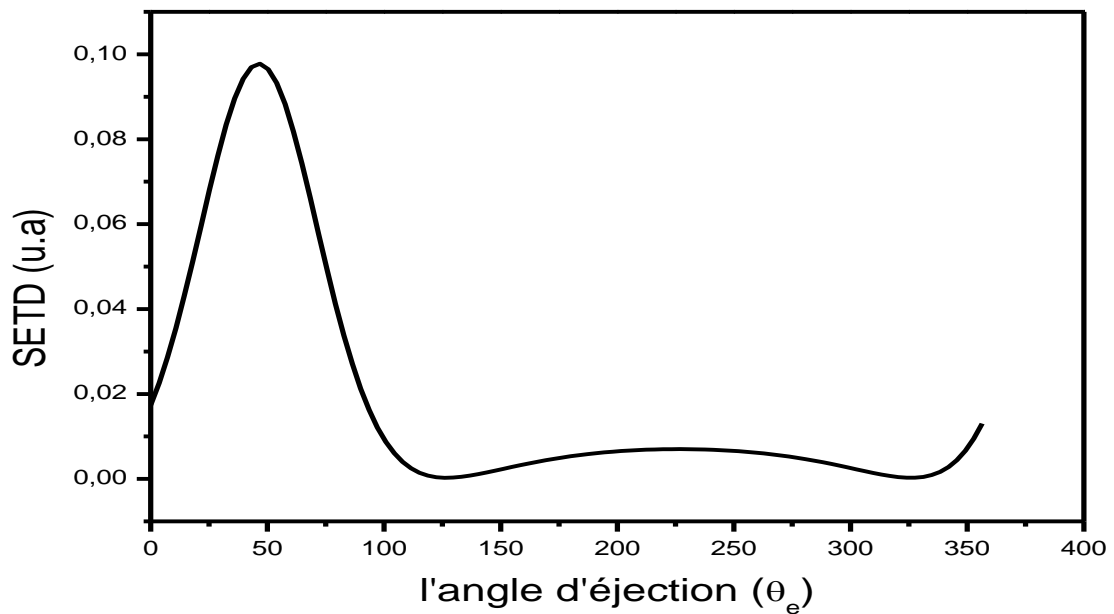


Figure III.4: Variation de la SETD d'ionisation de l'atome He en fonction de l'angle d'éjection avec d'énergie incidente  $E_i = 598.6 \text{ eV}$ , et de énergie éjection  $E_e = 74 \text{ eV}$ , l'angle de diffusion étant  $\theta_s = -6^\circ$ .

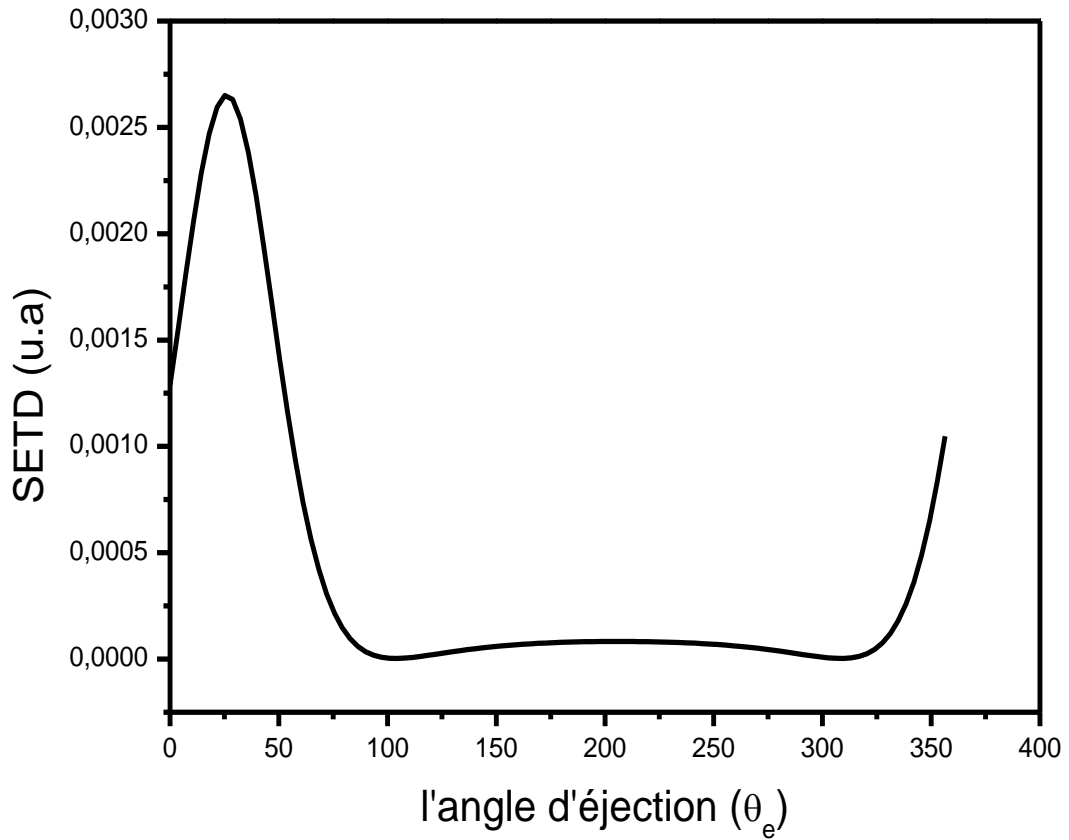


Figure III.5: Variation de la SETD d'ionisation de l'atome He en fonction de l'angle d'éjection avec d'énergie incidente  $E_i = 729.6$  eV, et de énergie éjection  $E_e = 205$ eV, l'angle de diffusion étant  $\theta_s = -6^\circ$ .

### III.4. Section efficace triplement différentielle du Ne

Dans nos calculs, on utilise les fonctions monocentriques de Clémenti pour désigner les orbitale atomiques : 1s, 2s et 2p de Ne, qui s'écrivent comme suit :

$$1s_{Ne} = \sum_{i=1}^2 c_i 1s_i + \sum_{i=3}^6 c_i 2s_i$$

$$2s_{Ne} = \sum_{i=1}^2 c'_i 1s_i + \sum_{i=3}^6 c'_i 2s_i$$

$$2p_{Ne} = \sum_{i=1}^4 c_i'' 2p_i$$

Nos calculs sont réalisés pour différentes énergies d'incidence et d'éjections, ainsi pour différentes angles d'éjection, ces conditions sont données dans le tableau III.2.

<i>L'orbitale</i>	<i>1s</i>	<i>2s</i>	<i>2p</i>		
<i>Les conductions</i>					
<i>I (eV)</i>	48.5	21.6	21.6		
<i>E<sub>i</sub> (eV)</i>	2700	8224.5	500	500	8221.6
<i>E<sub>e</sub> (eV)</i>	330	200	74	37	200
<i>θ<sub>s</sub></i>	15.9 <sup>0</sup>	9.4 <sup>0</sup>	6 <sup>0</sup>	6 <sup>0</sup>	9.4 <sup>0</sup>

Tableau III.2 :

*Conditions cinématiques et énergétiques utilisé dans le calcul de la SETD de (e, 2e) du Ne*

Nous pouvons comparer nos résultats théoriques avec le modèle AB-OC dans le cas d'ionisation d'une cible atomique dans des conditions expérimentales réalisées dans diverses situations énergétiques et géométriques (Tableau III.2). la SETD est tracée en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$ . Toutes ces expériences ont été effectuées en géométrie asymétrique coplanaire.

Dans le premier cas, nous considérons celui de la couche interne de néon (1s). Cette couche se caractérise par une énergie d'ionisation très élevée d'environ 870 eV et nécessite donc une attention particulière. La figure (III.6) représente la variations linéaire de la SETD en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$ , avec une énergie incidente  $E_i = 2700 \text{ eV}$  et une énergie d'éjection  $E_e = 330 \text{ eV}$ . Ces résultats sont schématisés avec les données expérimentales [22].

On remarque que le modèle AB-OC présente deux pic, le maximum est à l'angle 50° appelé lobe binaire et le minimum à l'angle 220° appelé lobe recul. Où dans le lobe binaire On n'observe pas bon accord entre ce modèle et les données expérimentales [22], mais elle est bon pour le lobe de recul.

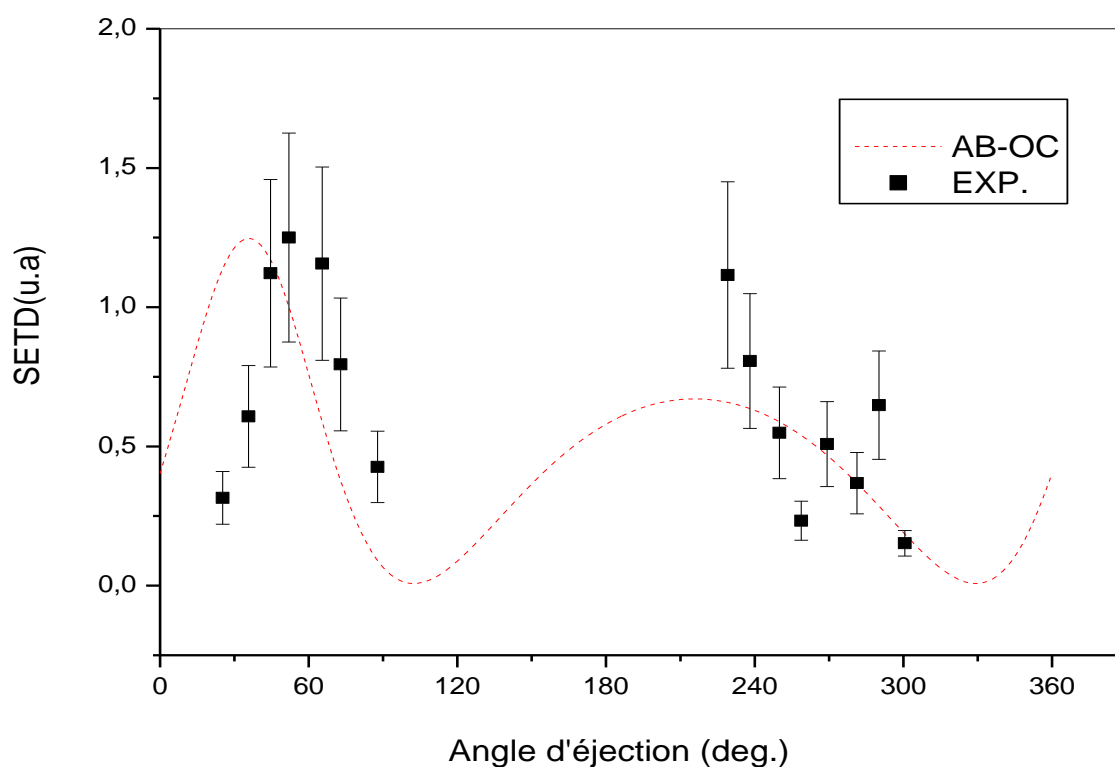


Figure III.6 : variation de la SETD d'ionisation de l'orbitale (1s) du Néon en fonction de l'angle d'éjection ( $\theta_e$ ), avec d'énergie incidente  $E_i = 2700$  eV , et de énergie éjection  $E_e = 330$ eV, l'angle de diffusion étant  $\theta_s = 15.9^\circ$ ).

Le second calcul correspond à l'ionisation de la couche Ne (2s) dans la *figure* (III.7) à une énergie incidente  $E_i = 8224.5$  eV , avec énergie d'éjection  $E_e = 200$ eV et un angle de diffusion étant  $\theta_s = 9.4^\circ$ . On voit dans ce cas que le modèle toujours échoue à générer le lobe binaire de l'expérience [22].

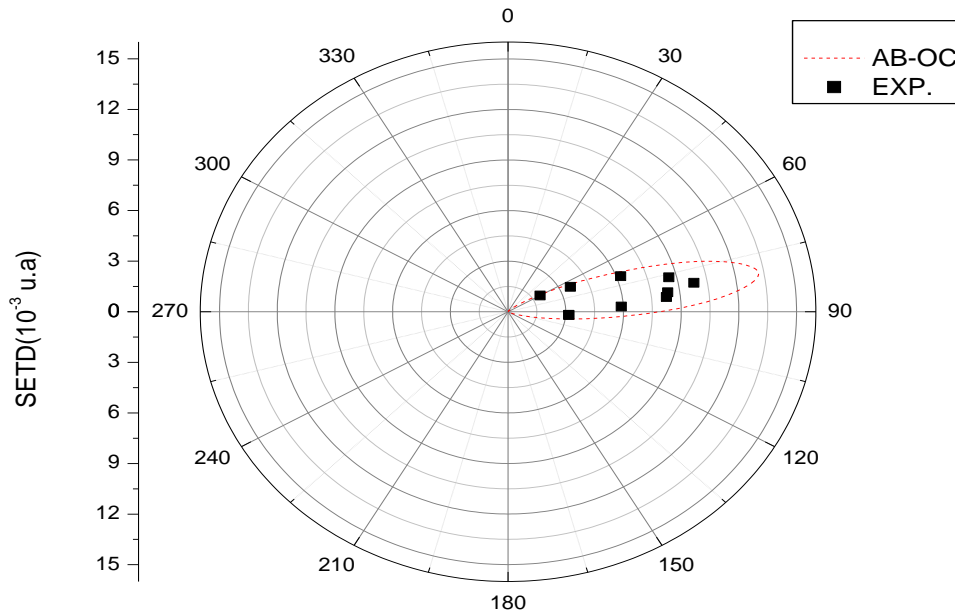


Figure III.7 : distribution polaire de la SETD d'ionisation de l'orbitale (2s) du Néon en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$  avec d'énergie incidente  $E_i = 8224.5$  eV et, et de énergie éjection  $E_e = 200$  eV, l'angle de diffusion étant  $\theta_s = 9.4^\circ$ .

On Considère maintenant le cas d'ionisation de la couche de valence externe Ne (2p) dans deux situations expérimentales différentes :

- La première situation est réalisée à une énergie de diffusion de 500 eV et deux énergies d'éjections de 37 eV (figure III.8).
- La deuxième situation est réalisée à une énergie de diffusion de 500 eV et deux énergies d'éjections de 74 eV (figure III.9).
- La troisième situation correspond à une énergie d'incidente  $E_i = 8221.6$  eV, avec une énergie d'éjection  $E_e = 200$  eV, et l'angle de diffusion étant  $\theta_s = 9.4^\circ$  (figure III.10).

On peut voir les variations de SETD du processus sur les figures (III.8), (III.9) et (III.10). Sur la figure (III.8), les résultats théoriques avec le modèle AB-OC fournissent pratiquement la même description que les données expérimentales [23], soit dans le comportement, soit dans les positions des lobes binaire et de recul.

Mais ce n'est pas le cas pour la deuxième situation (figure III.9), où l'électron éjecté sort avec une énergie de 74 eV, où on observe des lobes délocalisés pour les résultats théoriques en particulier pour le lobe de recul.

Pour la dernière situation (figure III.10), la deuxième situation expérimentale réalisée est à très haute énergie (8221.6 eV). La comparaison avec l'expérience montre que le modèle AB-OC échoue largement à reproduire les données expérimentales [23] soit dans la région binaire, soit dans la région de recul, un modèle et plus proche à la réalité est nécessaire AB-OD qu'utilise une onde distordue pour décrire l'électron éjecté.

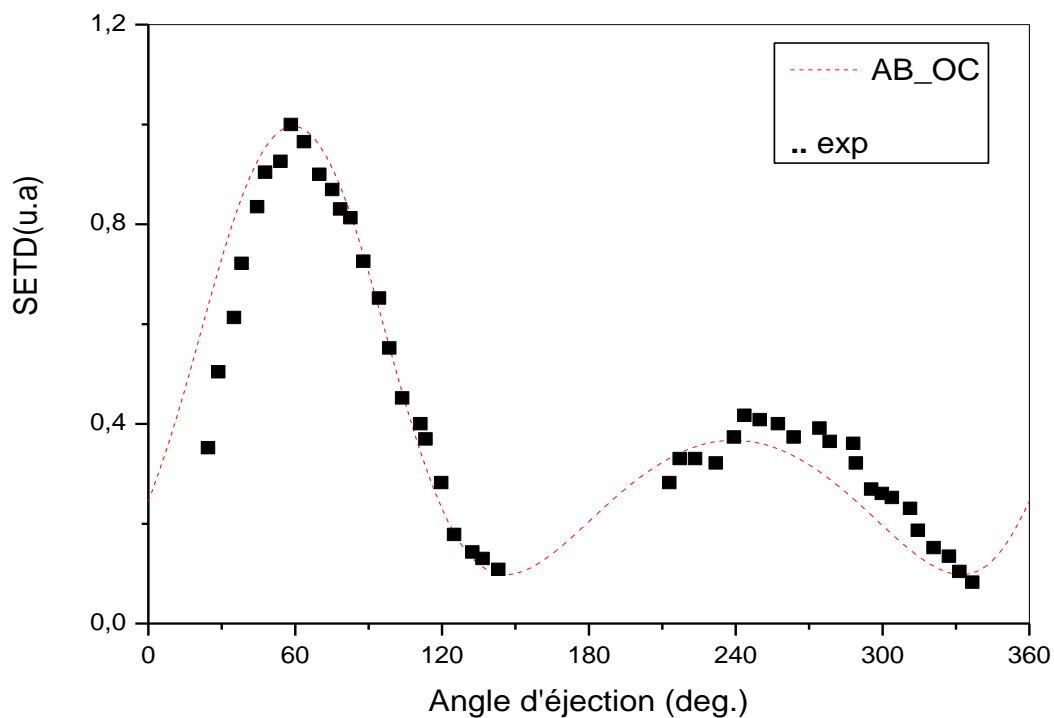


Figure III.8 : la SETD d'ionisation de l'orbitale (2p) du Néon en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$  avec d'énergie incidente  $E_i = 500 \text{ eV}$  et, et de énergie éjection  $E_e = 37 \text{ eV}$ , l'angle de diffusion étant  $\theta_s = 6^\circ$ .

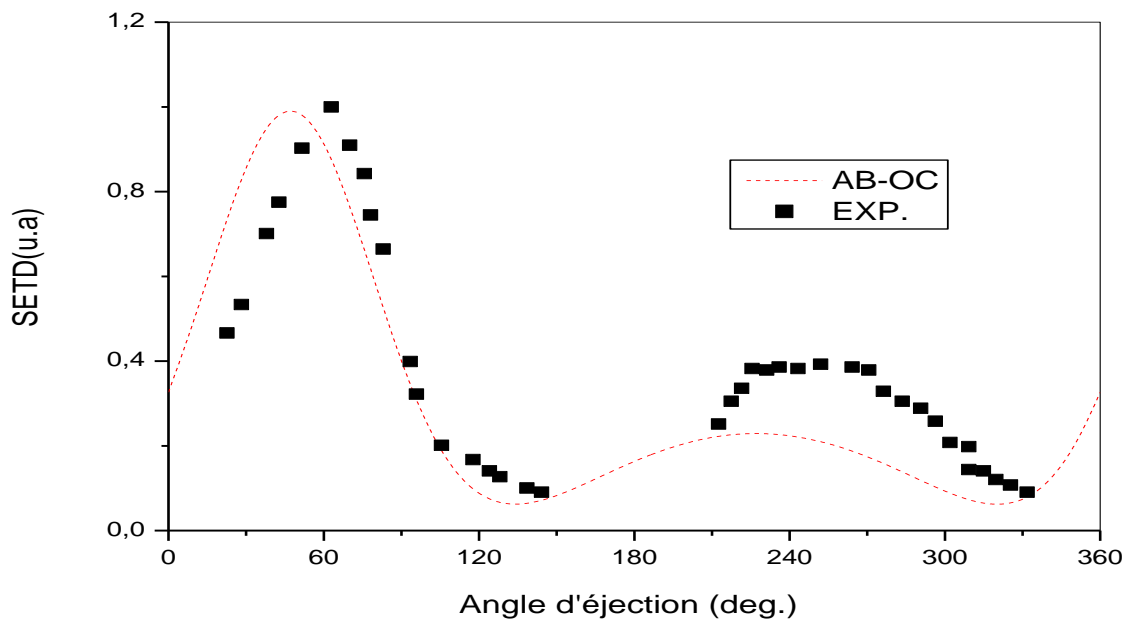


Figure III.9 : variation de la SETD d'ionisation de l'orbitale (2p) du Néon en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$  avec d'énergie incidente  $E_i = 500 \text{ eV}$  et, et de énergie éjection  $E_e = 74 \text{ eV}$ , l'angle de diffusion étant  $\theta_s = 6^\circ$ .

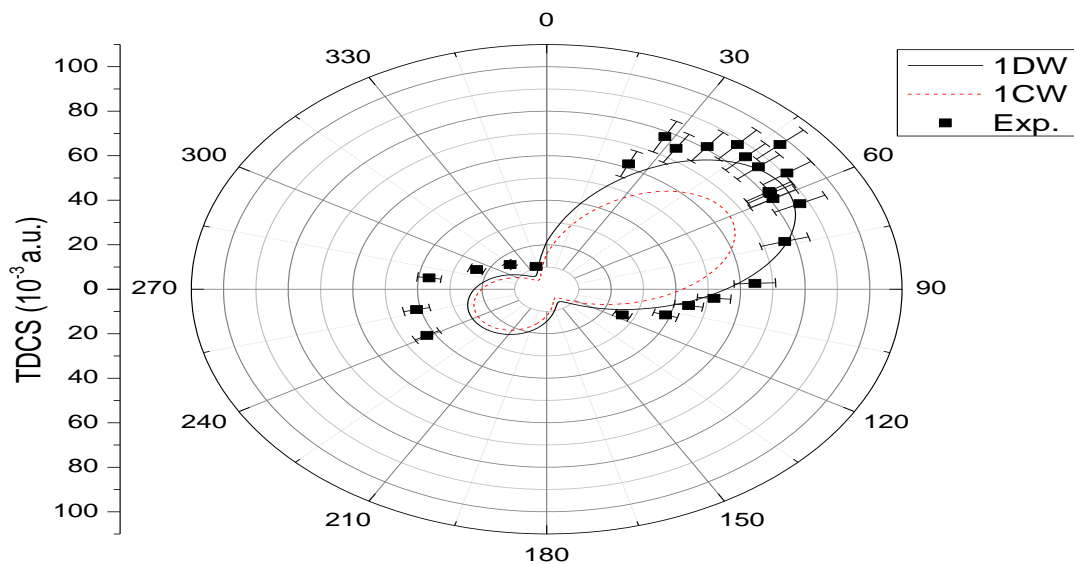


Figure III.10 : variation de la SETD d'ionisation de l'orbitale (2p) du Néon en fonction de l'angle d'éjection  $\theta_e$  avec d'énergie incidente  $E_i = 8221.6 \text{ eV}$  ?  $E_e = 200 \text{ eV}$ , et  $\theta_s = 9.4^\circ$ . Le courbe discontinue représente nos résultats dans le cas de modèle 1CW et sont comparées aux résultats expérimentaux [23], la ligne continue présente les données du modèle AB-OD.

## Conclusion

On peut conclure que :

- L'étude d'ionisation simple de l'hélium nous a aidé à valider la première approximation de Born avec un seul électron actif qui allégit les calculs avec deux électrons actifs.
- L'atome d'hélium a montré la simplicité de la fonction de Hylleraas, ainsi sa puissance de décrire les états liés de l'hélium.
- L'étude d'ionisation simple d'hélium avec des énergies d'éjection différentes a montré la limite de la première approximation de Born qui reste fidèle à l'expérience pour simultanément des énergies élevées d'incidence et de diffusion.
- L'étude d'ionisation simple du Néon a montré que le modèle AB-OC reproduit les données expérimentales de la SETD pour des énergies d'incidence élevée et des énergies d'éjection faible.
- le modèle AB-OC reproduit des données loin des résultats expérimentales de la SETD pour des énergies d'incidence élevée et des énergies d'éjection moyennes, et donne des lobes binaires et de recul délocalisé, ainsi il détruit dans des cas le lobe de recul
- des modèles plus sophistiqués sont nécessaires pour l'étude d'éjection d'un électron avec une énergie moyenne.

## Conclusion générale

L'étude de l'ionisation simple des cibles atomiques ou moléculaires par impact électronique cède des informations sur la réaction ( $e, 2e$ ) ainsi sur les particules participant à cette réaction.

Les sections efficaces différentielles donnent plus de détail sur le processus d'ionisation simple de la cible atomique ou moléculaire, mais la section efficace totale et la grandeur utilisée dans les domaines de médecine et de radioprotection. L'intégration sur les directions de diffusion et d'éjection, ainsi sur l'énergie d'éjection (de diffusion) nous permet d'obtenir la section efficace totale.

Dans cette étude on a calculé la section efficace triplement différentielle d'ionisation simple d'hélium dans géométrie coplanaire asymétrique en utilisant les modèles AB-OC (1e) et AB-OC (2e) qui se base sur la première approximation de Born en considérant un ou deux électrons actifs, on a constaté que le modèle AB-OC (1e) simplifie le calcul de la SETD. Ce calcul est réalisé avec l'utilisation de la fonction de Hylleraas, cette dernière malgré sa forme simple est suffisante pour mener le calcul de la section efficace triplement différentielle de l'hélium.

Au second lieu on a calculé la section efficace triplement différentielle du Néon, pour différentes conditions énergétiques avec des énergies d'incidence élevées, et des énergies d'éjection différentes, cela pour les couches externes et internes du Néon. L'étude d'ionisation simple du Néon a montré que le modèle AB-OC reproduit les données expérimentales de la SETD pour des énergies d'incidence élevée et des énergies d'éjection faible. Le modèle AB-OC reproduit des données loin des résultats expérimentales de la SETD pour des énergies d'incidence élevée et des énergies d'éjection moyennes, et donne des lobes binaires et de recul délocalisé, ainsi il détruit dans des cas le lobe de recul. Des modèles plus sophistiqués sont nécessaires pour l'étude d'éjection d'un électron avec une énergie moyenne.

## Références

- [1] Z .Rezkallah, Ionisation De Petites Molécules Par Impact D'électrons : Etudes Dynamique Et De Structure, Thèse doctorat, Université de Ferhat Abbas – Sétif (2011).
- [2] L. Landau and E. Lifchitz, Mécanique quantique, Editions Mir Moscou (1965)
- [3] F. EL Boudali, Ionisation (e, 2e) Du Lithium Atomique Et Diatomique, Influence Des Electrons Du Cœur Dans la Détermination, Par Ondes Distordues, De La Section Efficace Multiplement Différentielle, Thèse Doctorat, Université de Metz (2001).
- [4] H. Hda, Double Ionisation des Gaz Rares Par Impact Electronique, Thèse Doctorat, Université de Metz (1994)
- [5] P. Lamy, Double Ionisation De L'atome D'hélium Et L'ion De Hydrure Par Impact Electronique : étude Des Sections Efficaces Multiplement Différentielles, Thèse Doctorat, Université De Metz (1995)
- [6] A .Haddadou, Etude De L'approximation De Born Du Deuxième Ordre Pour Les Collisions D'atomes Et Molécules Par Impact Electronique, Thèse Doctorat, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou (2011).
- [7] C. Cohen- Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Mécanique quantique tom 2, Hermann, Paris 1985
- [8] M. Born, Z. Phys. 37, 863 (1926).
- [9] Dal Cappello .C, Thèse de Doctorat d'état, Université de Metz (1986)
- [10] J. J. Sakurai .Jim Napolitano, Modern Quantum Mechanics, Seconde Edition
- [11] D .Oubaziz, Double Ionisation De La Molécule D'eau Par Impact D'électrons, Thèse Doctorat, Université De Tizi-Ouzou (2011).
- [12] M. Satake , S. Taguchi , H. Yasuhisa , M. S. Sethi & S.A. Iqbal ,An Introduction To Quantum Chemistry , discovery publishing house , New Delhi-110 002(India),first edition (1991).
- [13] Louis Marchildon, Mécanique Quantique, De Boeck & Larcier .S .a .2000, Edition De Boeck Université, B-1000 Bruxelles.
- [14] B .H .Bransden and C. J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Longman. Scientific & Technical. Copublished In The United States with. John Wiley (1983)
- [15] C. Cohen- Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, Mécanique quantique tom 1, Hermann, Paris 1973

- [16] S .Nehaoua, Ionisation D'atomes Et de Molécules Par Impact D'électrons : Contribution De L'orthogonalisation Et Des Effets De Distorsion, Thèse Doctorat, Université de Ferhat Abbas – Sétif (2016).
- [17] C. Hajlaoui. Etude Des Propriétés Structurales Et Electroniques Des Nanofils Semi-Conducteurs, Thèse Doctorat, Université Européenne De Bretagne.(2014)
- [18] Coyle, Harold P. (2001). Project STAR: The Universe in Your Hand. Kendall Hunt.
- [19] P. Pluinage, Approximation systématiques dans la résolution de l'équation de Schrödinger des atomes à deux électrons. I Principe de la méthode. Etats S symétriques, faculté des sciences de Strasbourg, le journal de physique et radium. 1955
- [20] Clementi E and Roetti C 1974 At. Data. Tables 14 177.
- [21] -24 A. E. Messaoudi, Simple Ionisation De La Couche K Des Atomes Lourds Par Impact D'électrons Relativistes, Thèse Doctorat, Université De L'université de Metz, (1998).
- [22] Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Duguet A and Daoud A, 1984 *Phys.Rev.A* **30** 1511
- [23]Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A 2008 *J. Phys. B* **41** 145201

## **Résumé**

Dans cette mémoire, nous avons étudié le processus de simple ionisation ( $e, 2e$ ) de cible atomique (néon) à l'aide de l'approximation de Born au premier ordre. Et calculé l'amplitude de diffusion de ce processus et leur section efficace triplement différentielle (STED), Et nous avons aussi utilisé le modèle du cœur gelé avec un électron actif qui réduit le problème de la cible avec  $N$  électrons à un problème avec un seul électron, dans la conduction cinématique asymétrie coplanaire.

En fin, nous avons comparé les résultats expérimentaux avec les résultats de l'étude ouverte le calculé la section efficace triplement différentielle (STED) en fonction de l'angle d'éjection.

## **Abstract**

In this memory, we studied the process of simple ionization ( $e, 2e$ ) of atomic target (neon) using the first-order Born approximation. And calculated the scattering amplitude of this process and their triple differential cross-section (STED), and we have also used the model of the frozen core with an active electron that reduces the problem of the target with  $N$  electrons to a problem with a single one, in the cinematic conduction of coplanar asymmetry. At the end, we compared the experimental results with our calculated ones which are the calculated triple differential cross-section (STED) as a function of the ejection angle.