

## **Chapitre III :**

### **Calcul de la section efficace triplement différentielle de l'He**

## 1. Calcul de la SETD avec les modèles à deux électrons et à un électron actif:

Au premier lieu on vérifie les approximations du cœur gelé et à un électron actif. Le système des N électrons est réduit à un problème à un électron actif. Ce type d'approximation est valable dans le cas des fonctions d'onde de type Hartree-Fock c'est-à-dire :

$$\Psi(1,2) = \phi(1)\phi(2) \quad (3.1)$$

### 1.1. Modèle à deux particules :

L'amplitude de diffusion est donnée, dans ce cas par l'expression :

$$f = -\frac{1}{2\pi} \langle \phi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | V(r_0, r_1, r_2) | \phi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (3.2)$$

$\phi_i$  et  $\phi_f$  représentent respectivement l'état du système projectile-cible ( $e_i + \text{He}$ ) dans ses état final et initial, il s'écrivent respectivement :

$$\phi_i(r_0, r_1, r_2) = \varphi_i(\vec{k}_i) \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.3)$$

$$\phi_f(r_0, r_1, r_2) = \varphi_f(\vec{k}_s) \psi_f(\text{He}_2^+, \vec{k}_e) \quad (3.4)$$

$\varphi_i(\vec{k}_i)$  et  $\varphi_f(\vec{k}_s)$  sont les fonctions d'ondes des électrons incident et diffusé respectivement représentées dans l'approximation de Born par une onde plane.

Le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible (He) s'écrit en unité atomique :

$$V(r_0, r_1, r_2) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} - \frac{2}{r_0} \quad (3.5)$$

En remplaçant V, l'équation (3.2) devient:

$$\begin{aligned} f &= -\frac{1}{2\pi} \left\langle \phi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} - \frac{2}{r_0} \right| \phi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left\langle \psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \left| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} + \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} - \frac{2}{r_0} \right| \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{2\pi} \left\langle \psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| \int \frac{e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_s) \cdot \vec{r}_0}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 + \int \frac{e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_s) \cdot \vec{r}_0}}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 - 2 \int \frac{\exp[i(\vec{k}_i - \vec{k}_s) \cdot \vec{r}_0]}{r_0} d\vec{r}_0 \right| \psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \end{aligned}$$

On pose le moment de transfert  $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_s$  donc :

$$f = -\frac{1}{2\pi} \left\langle \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| \int \frac{e^{i\vec{K}\vec{r}_0}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 + \int \frac{e^{i\vec{K}\vec{r}_0}}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 - 2 \int \frac{e^{i\vec{K}\vec{r}_0}}{r_0} d\vec{r}_0 \right| \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle$$

En utilisant la relation de Bethe :

$$\int \frac{e^{i\vec{K}\vec{r}_0}}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 = \frac{4\pi}{K^2} e^{i\vec{K}\vec{r}} \quad (3.6)$$

On trouve :

$$f = \frac{-2}{K^2} \left\langle \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| e^{i\vec{K}\vec{r}_1} + e^{i\vec{K}\vec{r}_2} - 2 \right| \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.7)$$

L'expression (3.7) reste invariante lorsqu'on permute les coordonnées du premier avec celles du second électron, on peut écrire donc :

$$f = \frac{-2}{K^2} \left\langle \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| 2e^{i\vec{K}\vec{r}_1} - 2 \right| \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle = \frac{-4}{K^2} \left\langle \Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) \left| e^{i\vec{K}\vec{r}_1} - 1 \right| \Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (3.8)$$

La cible (He) dans ses états initial et final est dans son état fondamental, La fonction d'onde de la cible dans l'état initial  $\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  est donnée par la fonction de Clementi:

$$\Psi_i(1,2) = \Phi(1)\Phi(2) \quad (3.9)$$

La fonction symétrique  $\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e)$  décrit l'ion résiduel  $He^+$  et l'électron éjecté s'écrit :

$$\Psi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{k}_e) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{ion}(\vec{r}_1)\Phi_c(\vec{r}_2) + \Phi_{ion}(\vec{r}_2)\Phi_c(\vec{r}_1)] \quad (3.10)$$

où  $\varphi_c(\vec{k}_e, \vec{r}_1)$  est la fonction d'onde coulombienne, est donnée par :

$$\varphi_c(\vec{k}_e, \vec{r}_1) = c(\eta) \exp(i\vec{k}_e \cdot \vec{r}_1) F_1(-i\eta, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \cdot \vec{r})) \quad (3.11)$$

où  $c(\eta) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} \exp\left(\frac{\pi}{2}\eta\right) \Gamma(1 + i\eta)$

Les fonctions  $\Gamma(1 + i\eta)$  et  $F_1(-i\eta, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \vec{r}))$  désignent respectivement la fonction gamma et la fonction hypergéométrique confluyente.

$\eta = \frac{Z_e}{k_e}$  étant le paramètre de Sommerfeld.

La relation (3.8) devient :

$$\begin{aligned} f &= \frac{-4}{\sqrt{2}K^2} \left\langle \Phi_{ion}(\vec{r}_1) \Phi_c(\vec{r}_2) + \Phi_{ion}(\vec{r}_2) \Phi_c(\vec{r}_1) \middle| e^{i\vec{K}\vec{r}_1} - 1 \middle| \Phi(1) \Phi(2) \right\rangle \\ &= \frac{-4}{\sqrt{2}K^2} \left[ \left\langle \Phi_{ion}(\vec{r}_1) \middle| e^{i\vec{K}\vec{r}_1} \middle| \Phi(1) \right\rangle \langle \Phi_c(\vec{r}_2) | \Phi(2) \rangle + \langle \Phi_{ion}(\vec{r}_2) | \Phi(2) \rangle \left\langle \Phi_c(\vec{r}_1) \middle| e^{i\vec{K}\vec{r}_1} \middle| \Phi(1) \right\rangle - \right. \\ &\quad \left. 2 \langle \Phi_{ion}(\vec{r}_1) | \Phi(1) \rangle \langle \Phi_c(\vec{r}_2) | \Phi(2) \rangle \right] \end{aligned} \quad (3.11)$$

$\Phi_c$  est la fonction d'onde coulombienne représentant l'électron éjecté. On peut remarquer que cette onde coulombienne tend vers l'onde plane pour  $Z_e \rightarrow 0$ .

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

$$\sigma^{(3)} = \frac{k_s k_e}{k_i} |f_{B1}|^2 \quad (3.12)$$

## 1.2. Modèle à un électron actif :

En utilisant le modèle à un électron actif, on peut réduire le problème des deux électrons à un problème de un électron. 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.

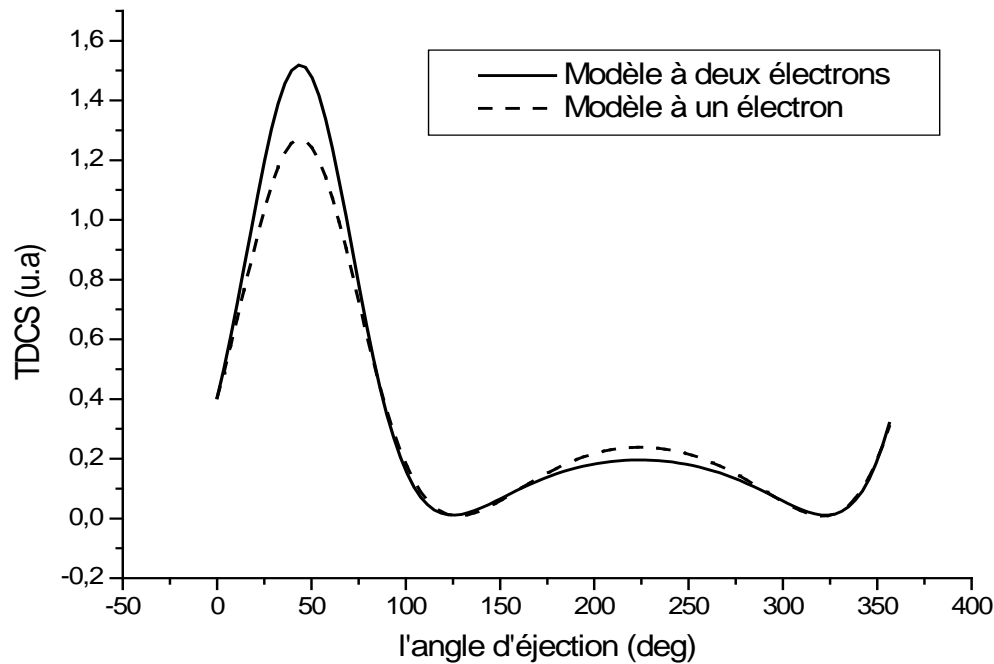
Alors, l'expression de l'amplitude de diffusion (3.2) devient :

$$f = -\frac{1}{2\pi} \left\langle e^{i\vec{k}_s \cdot \vec{r}_0} \Phi_c(\vec{k}_e, \vec{r}_1) \middle| \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} - \frac{1}{r_0} \middle| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_0} \Phi(\vec{r}_1) \right\rangle \quad (3.13)$$

Donc le nombre des éléments de matrice est réduit à deux :

$$f = \frac{-2}{K^2} \left[ \left\langle \Phi_c(\vec{r}_1) \middle| e^{i\vec{K}\vec{r}_1} \middle| \Phi(\vec{r}_1) \right\rangle - \langle \Phi_c(\vec{r}_1) | \Phi(\vec{r}_1) \rangle \right] \quad (3.14)$$

Nous allons maintenant étudier l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique. En utilisant les résultats de calcul (3.11) et (3.14) dans le calcul de la section efficace triplement différentielle SETD de He par impact électronique avec les énergies d'incidences et de diffusion respectivement  $E_e = 20$  et  $E_i = 250$  eV, l'angle de diffusion est pris  $\Theta_s = -6^\circ$ , on trouve les résultats schématisés dans la figure (3.1).



**Figure (3.1)** – Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium en fonction de l'angle d'éjection  $\Theta_e$  pour les deux modèles : à deux électrons et à un électrons actif.

Pour les deux modèles la SETD présente deux pics, le maximum est à l'angle  $50^\circ$  et le minimum à l'angle  $230^\circ$ , puisque le modèle à deux électrons prend en considération l'ensemble complet des électrons et de protons, il donne les résultats les plus exacts mais le modèle à 1 électron donne aussi des résultats assez proches, donc on utilise ce dernier modèle pour simplifier le calcul de la SETD des atomes et des molécules ayant plus de 2 électrons et réduire son temps de calcul.

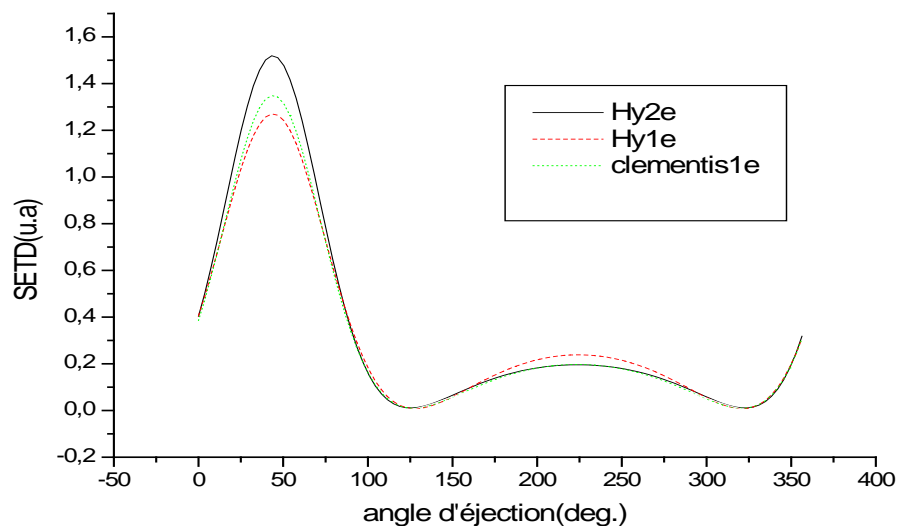
## 2. Calcul de la SETD avec les fonctions de Hylleras et Clementis:

Dans la deuxième étape de calcul, on va utiliser deux fonctions d'onde de la cible d'He : la fonction de Hylleras et la fonction de Clementis.

Et fonction de Clementis données par le développement:

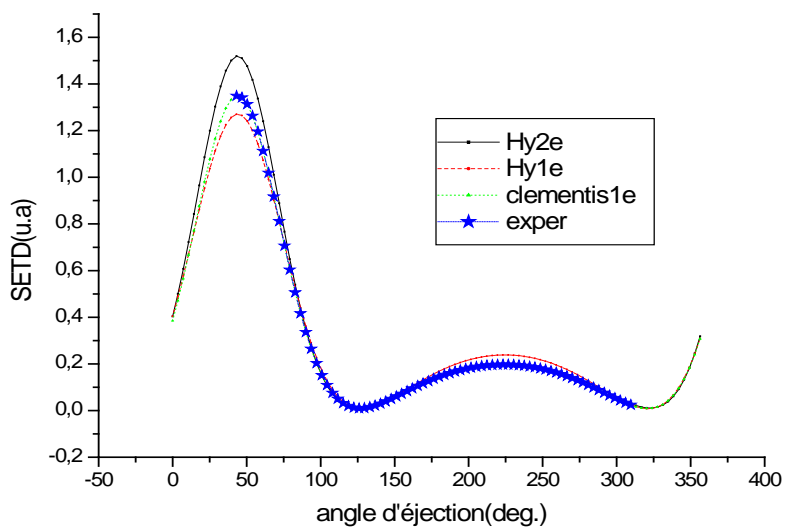
$$\Phi(1) = a_1 1s_1 + a_2 1s_2 + a_3 1s_3$$

Les résultats de calcul sont présentés dans la figure (3.2) :



**Figure (3.2)** – Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium en fonction de l'angle d'éjection  $\Theta_e$  en utilisant les fonctions de Hylleras et Clementis.

Pour les deux fonctions de Hylleras et de Clementis la SETD présente deux pic, le maximum est à l'angle  $50^\circ$  et le minimum à l'angle  $230^\circ$ , les courbes sont assez proche, la différence est dans les deux pic de recul, en comparant ces calculs avec les données expérimentales, on peut déterminer la fonction qui décrit mieux la cible. Les résultats sont présentés dans la figure (3.3).



**Figure (3.3)** – Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium en fonction de l'angle d'éjection  $\Theta_e$  obtenues dans les calculs et celle expérimentales.

On comparant les quatre calculs avec les données expérimentales, on trouve que la fonction de Clementis décrit mieux la cible d'He, pour la fonction de Hylleras est incapable de produire les pic de recul.