

Chapitre I:

Eléments de la théorie des collisions

1.1. Le processus de simple ionisation (e, 2e) des molécules:

La simple ionisation (e, 2e) c'est la collision entre un électron projectile et une cible atomique ou moléculaire ou un seul électron est éjecté de la cible. Pour l'étude de cette collision nous considérons dans le référentiel du laboratoire, la cible au repos et orientée de façon quelconque, bombardée par un faisceau monocinétique d'électrons d'énergie supérieure au premier potentiel d'ionisation (*figure 1.1*).

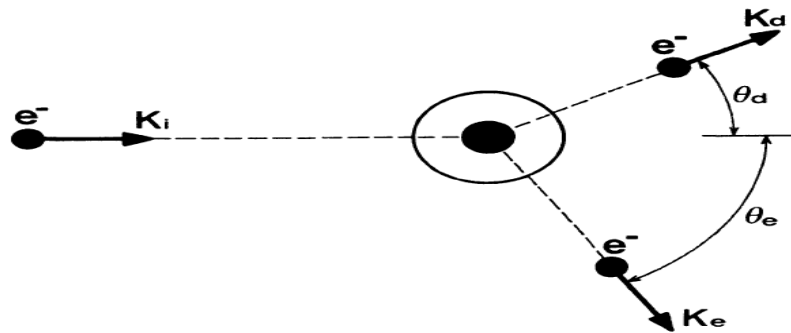


Figure (1.1):Représentation d'une collision (e ,2e)

D'une façon générale, le processus de simple par impact électronique peut être représenté comme suit :



Où A représente la cible atomique ou moléculaire, A^+ l'ion résiduel.

Les électrons incident, diffusé et éjecté(s) sont représentés respectivement par e_0 , e_a et e_b et ont chacun une énergie E_j ; $E_j = \frac{1}{2} k_j^2$ et une quantité de mouvement \vec{k}_j ($j = 0, a, b$).

Les électrons émergeant après la collision sont indiscernables, il est cependant d'usage de designer 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.

Les contraintes cinématiques de la réaction sont alors la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, qui s'écrivent :

$$E_0 = E_a + E_b + E_{\text{rec}} + E_I \quad (1.2)$$

$$\vec{K} = \vec{k}_0 - \vec{k}_a = \vec{k}_b + \vec{q} \quad (1.3)$$

E_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. L'énergie de recul de l'ion, E_{rec} , est très petite comparée aux énergies des autres particules. Le vecteur \vec{q} représente le moment de recul de l'ion et \vec{K} le transfert de moment du projectile à la cible.

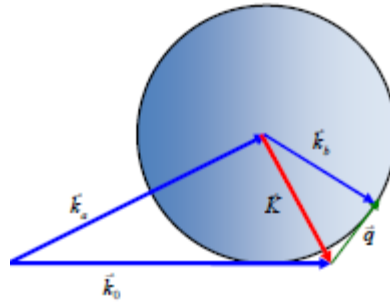


Figure1.2:Représentation schématique d'une distribution angulaire d'éjection dans le régime impulsif.

1.2. Notion de section efficace:

La distribution angulaire des particules diffusées peut apporter des informations sur l'interaction qui a eu lieu entre le faisceau et le noyau cible (par exemple sur la forme du potentiel d'interaction). De plus, en général, les détecteurs ont une certaine granularité et sont donc capables de mesurer le nombre de particules diffusées dans une direction définie par (θ, φ) dans un angle solide élémentaire $d\Omega$ (coordonnées sphériques)

La section efficace de diffusion est le taux de particules qui ont subi une diffusion déterminée dans l'espace sur le nombre de particules incidentes. On considère un flux F de particules incidentes, de direction parallèle à l'axe (OZ) (figure 1.2) qui entre en collision avec Ni particules

cibles. On suppose que la densité des cibles et le flux F sont relativement faibles pour permettre d'éviter les effets de collisions multiples. Hors de portée du faisceau incident et à grande distance de la cible, on dispose d'un détecteur D mesurant le nombre de particules diffusées N par unité de temps.

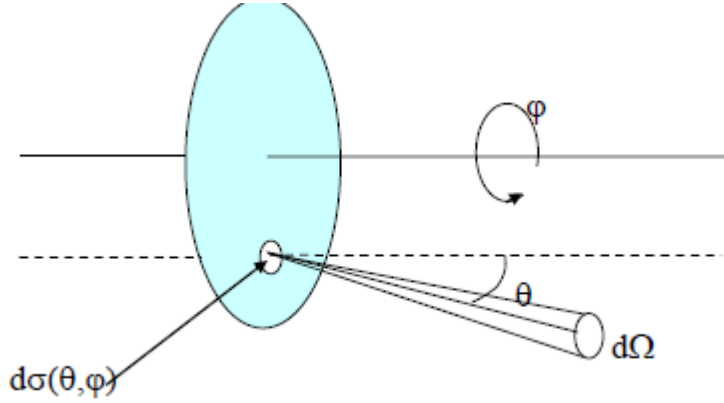


figure1.3.Representation du notion de la notion de section efficace.

Le nombre de particules N que l'on détecte est proportionnel au nombre de particules incidentes et au flux F et le coefficient de proportionnalité noté :

$$\sigma = \frac{N}{N_I F} \quad (1.4)$$

σ est appelé par définition la section efficace, elle est mesurée en m^2 , et reliée à la probabilité de transition de l'état initial vers l'état final, par unité de temps par la relation [1] :

$$\sigma = \frac{p_{if}}{F} \quad (1.5)$$

En exprimant la probabilité p_{if} en fonction de l'amplitude de transition, la relation devient :

$$\sigma = \frac{2\pi^4}{k_0} \delta(k_i - k_f) \delta(E_i - E_f) |T_{fi}|^2 \quad (1.6)$$

Dans le processus de simple ionisation par impact d'électrons, 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.

1.3. Sections efficaces d'ionisation:

Les résultats obtenus lors d'une expérience (e, 2e) sont représentés en termes de section efficace. Cette quantité donne une mesure de la probabilité qu'un certain type de réaction se produise. En réalité, lors d'une réaction, seule une fraction des particules émises est mesurée, la détection étant limitée à une fenêtre spatiale $\Delta\Omega$ et une fenêtre énergétique ΔE .

Les sections efficaces observées sont donc différentielles en énergie et/ou en angle pour les électrons incident et/ou émis. La section efficace totale décrit la réaction globale, elle tient compte de toutes les particules sortantes à travers un angle solide Ω , puis intégrées sur tout l'espace. Les sections efficaces différentielles donnent plus d'informations que celle totale puisque elles sont dépendantes de l'énergie des particules et/ou de la direction dans laquelle ces particules sont éjectées et/ou diffusées.

L'existence de trois particules libres en mouvement dans le cas de la simple ionisation permet de définir quatre types de sections efficaces : les sections efficaces totales et les sections efficaces simplement, doublement ou triplement différentielles.

1.3.1. Section efficace triplement différentielle SETD:

La section efficace est dite triplement différentielle (SETD) si les deux électrons de l'état final sont analysés aussi bien suivant leurs directions que leurs énergies respectives.

Dans un processus (e, 2e), c'est cette quantité, dite complètement différentielle, qui fournit le plus de détails sur la dynamique de l'interaction puisqu'elle fait intervenir tous les paramètres cinématique entrant en jeu, à savoir les énergies E_0, E_a et E_b ainsi que les angles solides Ω_a et Ω_b . On la note:

$$\sigma^3 = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_a} = \frac{k_a k_b}{k_0} |f_{B1}|^2 \quad (1.7)$$

La SETD représente la probabilité pour qu'un électron incident d'énergie E_0 et d'impulsion \vec{K}_0 produise, après une collision avec la cible, deux électrons dans la voie de sortie d'énergies E_s et E_b de quantité de mouvement \vec{K}_a et \vec{K}_b dans les directions Ω_a et Ω_b .

Dans l'expérience de simple ionisation (e, 2e), les électrons diffusé et éjecté sont détectés en coïncidence temporelle, ce qui permet d'assurer qu'ils proviennent du même événement ionisant. De par leur sensibilité, cette expériences, dite 'expériences complète', sont d'une importance considérable pour la compréhension des mécanismes d'ionisation. Elle permet de tester les

différents modèles théoriques proposés pour décrire l'interaction projectile-cible et ainsi de valider les approximations et/ou hypothèses.

1.3.2. Section efficace doublement différentielle SEDD:

Au moment de la détection, on peut avoir l'information sur l'angle d'émission et sur l'énergie de l'électron détecté, alors on parle de section efficace Doublement Différentielle (SEDD)

$$\frac{d^2 \sigma}{d\Omega_a dE_a} = \frac{k_a k_b}{k_0} \int d\Omega_e |T_{if}|^2 \quad (1.8)$$

Cette grandeur est plus significative que la SEDD puisqu'elle fournit la distribution en énergie et en angle des particules diffusées ou éjectées après la collision. Même si les particules sont indiscernables, on peut, dans certaines conditions cinématiques, affirmer si la particule détectée est diffusée ou éjectée.

Le 'problème' avec les mesures des SEDD est l'incertitude concernant les processus observés, d'une part, et les états ionisés pour une énergie donnée, d'autre part. Les théories utilisées pour décrire les SEDD doivent inclure tous les processus d'ionisation possibles et tous les états pouvant contribuer aux sections efficaces. Pour lever cette incertitude, l'énergie et le moment de transfert doivent être déterminés pour spécifier le processus particulier d'ionisation contribuant. La technique de mesure (e, 2e) fournit une telle information via les mesures des sections efficaces triplement différentielles.

1.3.3. Section efficace simplement différentielle SESD:

Lorsqu'une des particules dans la voie de sortie est détectée sélectivement dans une certaine direction, on parle de section efficace simplement différentielle (SESD) en angle, que l'on

Cette quantité contient évidemment une information plus détaillée sur le processus d'ionisation. Par exemple, elle présente un grand intérêt dans l'étude des structures moléculaires. En effet. Tavard [2] a établi pour la première fois en 1966 la relation entre l'énergie totale de la cible et la SESD dans le cas de collisions entre électrons rapides et cible atomique ou moléculaire.

Si on s'intéresse aux aspects spectroscopiques de la cible, on définit plutôt une section efficace simplement différentielle en énergie

$$\sigma_T = \frac{1}{k_0} \int d\vec{k}_a d\vec{k}_b d\vec{k}_q \sigma(E_i - E_i) \sigma(\vec{k}_i - \vec{k}_f) |T_{if}|^2 \quad (1.10)$$

Elle est fonction de l'énergie des électrons incident et éjecté, et caractérise, après collision, leur distribution énergétique intégrée sur tous les angles. Elle représente un outil majeur dans l'investigation de divers champs de la physique telle que l'étude de perte d'énergie des électrons produits dans l'ionosphère terrestre.

On ne peut pas mesurer directement la SEDS en énergie. Elle est obtenue en intégrant sur tous les angles d'émission les sections efficaces doublement différentielles [3]

1.3.4. Section efficace totale (SET):

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 Ω , puis intégrer sur tout l'espace. On la note :

$$\sigma_T = \frac{1}{k_0} \int d\vec{k}_a d\vec{k}_b d\vec{k}_q \sigma(E_i - E_i) \sigma(\vec{k}_i - \vec{k}_f) |T_{if}|^2 \quad (1.11)$$

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.

1.4. Cinématique de la réaction (e, 2 e):

La section efficace triplement différentielle dépend d'un grand nombre de paramètres cinématiques ($k_0, k_a, k_b, \theta_a, \theta_b$) qui détermine le type d'étude mené. Parmi les cinématiques utilisées pour mesurer la section efficace triplement différentielle : les géométries symétrique coplanaire, symétrique non coplanaire, asymétrique coplanaire et asymétrique non coplanaire.

1.4.1 Cinématique asymétrique coplanaire :

En cinématique asymétrique coplanaire, la section efficace triplement différentielle est habituellement mesurée en fonction de l'angle d'éjection θ_b , l'angle de diffusion θ_a est fixé et inférieur à 20° .

Dans ce cas, les deux électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le même plan de collision (\vec{k}_0, \vec{k}_a) , et sont détectés avec des énergies très différentes « E_a proche de E_0 et $E_b < E_a$ » (voir la figure 1.4.b)

Cette cinématique a été étudiée expérimentalement par Ehrhardt [4] dans le cas de l'ionisation de l'hélium et d'autres gaz rares et pour des énergies incidentes comprises entre 30 eV et 500 eV [5].

1.4.1 La cinématique symétrique :

Dans les expériences qui se déroulent dans une géométrie symétrique, les deux électrons dans la voie de sortie sont détectés en coïncidence suivant des angles $\theta_a = \theta_b = \theta$ et avec des énergies égales « $E_a = E_b = \frac{E_0 - E_I}{2}$ » (voir la figure 1.4.a, c). Cette cinématique a été étudiée en détail par [11], [12] et [13] et permet de recueillir une information sur la structure de la cible lorsque l'énergie incidente est élevée ($E_0 \sim 1\text{keV}$) [5]. Pour une cinématique symétrique, l'impulsion q est donnée par :

$$q = \left[(2k_a \cos \theta - k_0)^2 + 4k_a \sin^2(\theta) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.11)$$

Ou: $\phi = \pi - |\phi_a - \phi_b|$, $(\phi_a - \phi_b)$ étant l'angle azimutal relatif entre les deux électrons.

Expérimentalement, deux cas importants ont été étudiés : la géométrie symétrique coplanaire et non coplanaire.

1.4.3 La cinématique symétrique coplanaire:

Dans laquelle la section efficace triplement différentielle est mesurée en fonction de l'angle θ (voir la figure 1.4.a). Dans cette géométrie, l'impulsion \vec{q} est grande pour θ supérieur à 90° . Lorsque θ est inférieur à 60° , l'impulsion \vec{q} est faible et tend vers zéro pour $\theta = 45^\circ$. Ce régime cinématique a été étudié expérimentalement par [14] dans le cas d'ionisation de l'hélium à des basses énergies où les mesures montrent deux maxima : le premier situé à environ 45° est expliqué par un choc binaire,

et le second situé vers 135° , par un effet de pré-diffusion de l'électron incident par la cible suivi d'un choc vers l'arrière.

1.4.4 La cinématique symétrique non coplanaire:

Dans laquelle les quantités de mouvement des deux électrons sortants ne se trouvent pas dans le même plan, et la section efficace triplement différentielle est mesurée dans ce cas en fonction de l'angle Φ ou de q tandis que $\Phi_a=0$ et θ sont constants (la figure 1.4.c). Cette cinématique est caractérisée par de grands moments de transfert et les expériences représentent dans cette géométrie un test important des fonctions d'ondes décrivant la cible. Généralement, la cinématique symétrique non coplanaire est utilisée dans les mesures de densité de quantité de mouvement (EMS) [15].

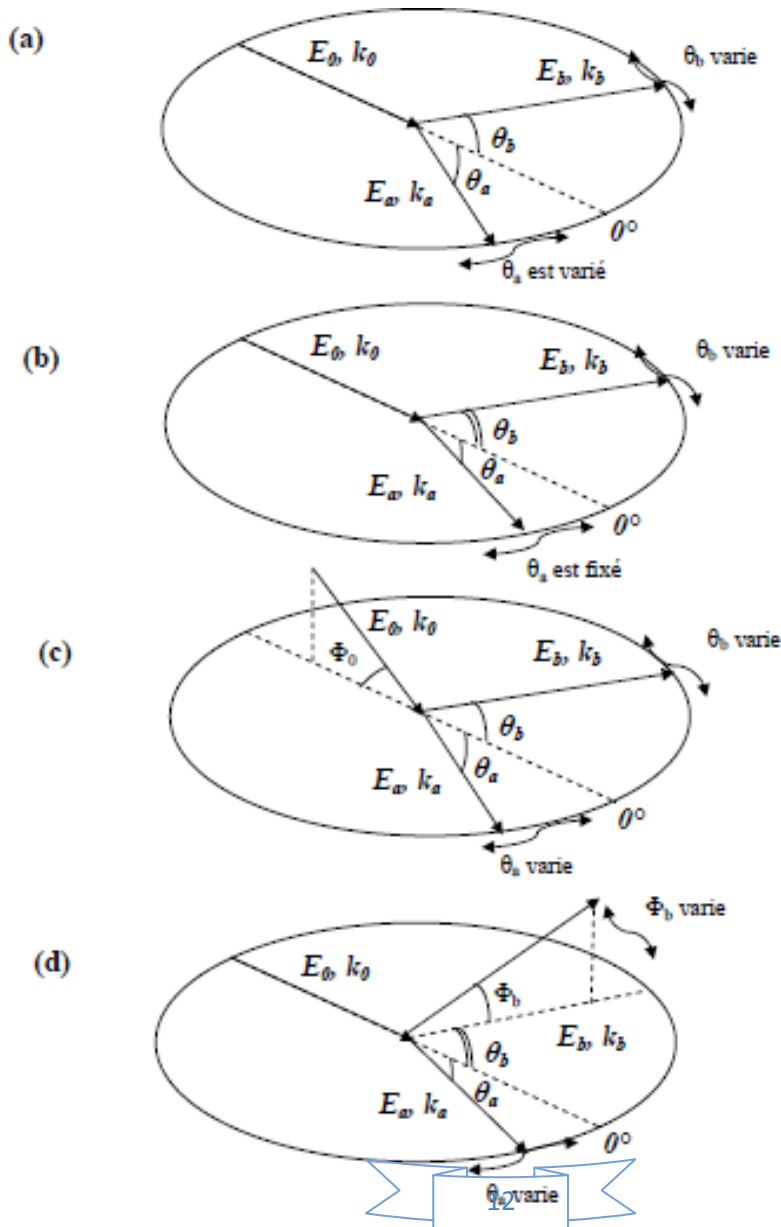


Figure 1.4 : Schéma représentant les cinématiques de la réaction (e, 2e). (a) la géométrie symétrique coplanaire où $E_a = E_b$ et $\theta_a = \theta_b$; θ_a et θ_b varient dans le plan de diffusion. (b) la géométrie asymétrique coplanaire où $E_a \gg E_b$, θ_a est fixé et θ_b varie dans le plan de diffusion. (c) la géométrie symétrique non coplanaire où Φ_0 est fixé et θ_a et θ_b varient. (d) la géométrie asymétrique non coplanaire où Φ_b varie.

1.6. La théorie de la diffusion:

Le but de l'étude théorique de la collision est de modéliser d'une façon aussi précise que possible la dynamique du système dans la région de l'interaction permettant de bien aboutir aux observations expérimentales.

Dans divers processus étudiés des paramètres clés sont utilisés, tels que les directions initiales l'angle de diffusion, la vitesse, la température, etc. Le but principal de tout ceci est d'établir une relation entre les états initial et final du système. Du point de vue de la mécanique quantique, cela est exprimés en termes de ce qu'on appelle l'amplitude de diffusion.

Dans un premier temps, on considère une collision entre une particule chargée et un centre diffuseur de masse supposé très grande devant celle du projectile de sorte que le centre de masse du système sera pris comme étant le centre de la cible. Le phénomène sera étudié dans le centre de masse, on notera la masse réduite du système et le vecteur position du projectile par rapport au centre diffuseur.

L'Hamiltonien du système est donné par:

$$H = k + v \quad (1.12)$$

Avec k l'Hamiltonien du système en l'absence de toute interaction v entre le projectile et la cible.

On va considérer les états stationnaires de l'équation de Schrödinger correspondante.

L'équation de Schrödinger décrivant l'évolution de la particule diffusée par le potentiel $V(r)$ admet des solutions d'énergie E bien définies:

$$\Psi(r, t) = \phi(r) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (1.13)$$

Où $\phi(r)$ est solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] \phi(r) = E\phi(r) \quad (1.14)$$

On pose que:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \quad V(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} u(r) \quad (1.15)$$

Donc L'équation de Schrödinger (1.14) devient:

$$[\Delta + k^2 - u(r)] \phi(r) = 0 \quad (1.16)$$

Cette équation admet une infinité de solutions pour K (c.-à-d. pour tout E). On va donc imposer certaines conditions pour limiter la gamme de solutions possibles. On définit alors les états stationnaires de diffusion comme étant les états propres de l'Hamiltonien qui vérifient ces conditions et on appelle $\phi_k(r)$ les fonctions d'ondes associées. Nous allons maintenant déterminer la forme asymptotique des états stationnaires de diffusion. Si on suppose que $V(r)$ tend vers zéro lorsque $|r|$ tend vers l'infini, la particule est sortie de la zone d'action de $V(r)$ et le paquet d'ondes décrivant notre système est composé du paquet d'ondes transmises et du paquet d'ondes diffusées.

Cette forme est déduite de l'optique ondulatoire, et doit s'écrire, dans une direction, en $\frac{\exp(ikr)}{r}$ pour de grandes distances loin du potentiel diffuseur. Comme la diffusion n'est pas en général isotrope l'amplitude de diffusion dépend de la direction considérée.

On peut donc écrire la fonction d'onde sous la forme:

$$\phi_{r \rightarrow \infty}(\vec{k}, \vec{r}) = A(\exp(ikz) + \frac{f_k(\theta, \varphi)}{r} \exp(ikr)) \quad (1.17)$$

Cette expression est dite fonction d'onde asymptotique, loin du centre de diffusion où le potentiel n'agit plus. $f_k(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion.

A est une constante de normalisation indépendante de r et de angles θ et φ .

1.6.1. L'expression de la section efficace de diffusion:

La probabilité de collision entre deux particules est caractérisée par une grandeur appelée section efficace, qui dépend généralement de la nature des deux particules.

La densité de particules est proportionnelle à la densité de probabilité $\rho = |\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$

Le nombre N de particules entrant dans un volume τ par unité de temps est :

$$N = \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{\tau} \rho d\tau \quad (1.18)$$

En remplaçant ρ par sa valeur, on obtient:

$$N = \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial \tau} \right) d\tau \quad (1.19)$$

L'équation de Schrödinger dépendante du temps pour la diffusion est donnée par:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = -\frac{\hbar}{2i\mu} \nabla^2 \Psi + \frac{1}{i\hbar} V \Psi \quad (1.20)$$

En utilisant cette équation (en supposant que $V(r)$ est réel), on trouve:

$$N = \int_{\tau} \frac{\hbar}{2i\mu} (\Psi \nabla^2 \Psi^* - \Psi^* \nabla^2 \Psi) d\tau \quad (1.21)$$

De l'expression entre parenthèse, nous pouvons extraire un opérateur vectoriel nabla:

$$\begin{aligned} \Psi \nabla^2 \Psi^* - \Psi^* \nabla^2 \Psi &= \Psi \nabla^2 \Psi^* + \nabla \Psi \nabla \Psi^* - \nabla \Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla^2 \Psi \\ &= \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \end{aligned} \quad (1.22)$$

D'où:

$$N = \int_{\tau} \frac{\hbar}{2i\mu} \nabla (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) d\tau$$

En appliquant le théorème d'Ostrogradsky, on obtient:

$$N = \int_S j \cdot n ds \quad (1.23)$$

Dans cette relation S représente la surface qui entoure le volume τ et n le vecteur unitaire normal à l'élément de surface ds .

J est le courant de particules et est donné par cette expression:

$$J = \frac{\hbar}{2i\mu} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (1.24)$$

Cette équation peut être réécrite comme suit:

$$J = \frac{\hbar}{2i\mu} (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) \quad (1.25)$$

Où ϕ représente la fonction d'onde de l'état stationnaire.

Ce courant doit satisfaire l'équation de continuité:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (1.26)$$

L'onde diffusée étant exprimée dans la formule (1.17) en coordonnées sphériques et les composantes de l'opérateur ∇ sont:

$$(\nabla)_r = \frac{\partial}{\partial r}, (\nabla)_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}, (\nabla)_\varphi = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

En utilisant l'expression (1.17), le flux \vec{J}_a sortant de l'interaction est donné par la relation suivante (en négligeant les termes en $\frac{1}{r^3}$, pour r grand):

$$|\vec{J}_a| = \frac{\hbar k_a}{r^2 \mu} |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (1.27)$$

Le nombre de particules entrant dans le détecteur sera noté " n " et dépend de l'angle de diffusion et de la surface de détecteur

$$n = j_a ds = j_0 \frac{k_a}{k_0} |f_k(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Où:

$$j_0 = \frac{\hbar k_0}{\mu} \text{ représente le flux de particules incidentes.}$$

Le rapport $\frac{n}{j_0}$ est une quantité infinitésimale, elle sera notée $d\sigma$ et représente la section efficace de diffusion, différentielle par rapport à $d\Omega$:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_a}{k_0} |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (1.28)$$

1.6.2. L'amplitude de diffusion :

Une description théorique détaillée du processus d'ionisation est très compliquée, voire même parfois impossible. Des méthodes approximatives sont alors nécessaires pour calculer l'amplitude de diffusion. Pour effectuer ce calcul, nous utiliserons la fonction de Green.

On commence par réécrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

$$[\Delta + k^2]\phi(r) = u(r)\phi(r) \quad (1.29)$$

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

$$[\Delta + k^2] G(\vec{r} - \vec{r}') = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.30)$$

La solution générale de l'équation (1.18) s'écrit comme:

$$\phi(\vec{r}) = \phi_K(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}') u(\vec{r}') \phi(\vec{r}') \quad (1.31)$$

$\phi_K(r)$ est solution de l'équation homogène:

$$[\Delta + k^2]\phi(r) = 0 \quad (1.32)$$

Et $G(\vec{r} - \vec{r}')$ est la fonction de Green de l'onde entrante (+) et celle sortante(-) définie comme suit:

$$G_{\pm}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{\exp(\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.33)$$

Nous nous intéressons à la fonction d'onde dans la région asymptotique $r \mapsto \infty$:

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \approx r - \vec{e}_r \cdot \vec{r}'$$

$$G_{\pm}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{-1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ik r)}{r} \quad (1.34)$$

En remplaçant par la fonction d'onde incidente $\exp(ik_i z)$ et $G(\vec{r} - \vec{r}')$ par la fonction de Green $G_+(\vec{r} - \vec{r}')$, l'expression (1.20) devient:

$$\phi_K(\vec{r}) = \exp(ik_i z) - \frac{\exp(ikr)}{r^{4\pi}} \int d\vec{r}' \exp(-i\vec{k}_a \cdot \vec{r}') u(\vec{r}') \phi_K(\vec{r}') \quad (1.35)$$

En utilisant les équations (1.17) et (1.35), l'amplitude de diffusion $F_K(\theta, \phi)$ est donnée par la formule:

$$F_K(\theta, \phi) = \frac{-\mu}{\hbar^2 2\pi} \int d\vec{r}' \exp(-i\vec{k}_a \cdot \vec{r}') V(\vec{r}') \phi_i(\vec{r}') \quad (1.36)$$

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

$$f = \frac{1}{2\pi} \langle \phi_{kf} | V | \phi_{ki} \rangle \quad (1.37)$$

ϕ_{kf} et ϕ_{ki} Représentent respectivement les fonctions d'onde finale et initiale.

V est le potentiel qui décrit l'interaction entre l'électron incident et la particule cible.

L'équation (1.26) peut être encore écrite en terme de matrice de collision. la matrice de collision relie la fonction d'onde qui décrit le système avant la collision à la fonction d'onde qui décrit le système après la collision [16]. Elle peut prendre plusieurs forme, On cite la matrice de diffusion (matrice-S), celle de transition (matrice-T), la matrice-R et la matrice-K [17]. Les éléments de la matrice de transition T_{if} représentent la transition entre la fonction et celle finale.

L'équation (1.37) peut être réécrite en termes de matrice-T comme suit:

$$f = -\frac{1}{2\pi} T_{if} = \frac{1}{2\pi} \langle \phi_{kf} | V | \phi_{ki} \rangle \quad (1.38)$$

Dans ce cas la section efficace totale et les sections efficaces différentielles sont données par les relations suivantes:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_s d\Omega_e d\Omega_s} = \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{if}|^2 \quad (1.39)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s} = \frac{1}{k_i} \int k_s^2 dk_s dk_e \delta(E_i - E_i) |T_{if}|^2 \quad (1.40)$$

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_s dE_s} = \frac{k_s k_e}{k_i} \int d\Omega_e |T_{if}|^2 \quad (1.41)$$

$$\sigma_T = \frac{1}{k_i} \int d\vec{k}_s d\vec{k}_e d\vec{k}_q \sigma(E_i - E_i) \sigma(\vec{k}_i - \vec{k}_f) |T_{if}|^2 \quad (1.42)$$

1.7. Modèles théoriques :

L'amplitude de diffusion est la quantité fondamentale pour la description du phénomène de collision mais on utilise des approximations pour calculer cette quantité. Parmi les approches les plus utilisées pour éviter ces difficultés l'approximation de Born, les modèles DWBA, CCC et BBK.

1.7.1. Approximation de Born:

Cette approche développée par Born [18] est l'une des approximations les plus utilisées pour le calcul des sections efficaces, elle joue un rôle dominant dans l'étude des collisions atomiques. Dans cette approximation, on suppose que le potentiel diffuseur décrivant l'interaction coulombienne du projectile avec la cible est petit devant l'énergie totale de la cible ainsi que celle de l'électron incident et peut par conséquent être considéré comme une perturbation. Dans cette approximation les particules incidentes et diffusées sont représentées ondes planes.

Cette formulation due à Born permet d'exprimer l'opérateur de transition T sous la forme d'un développement en terme de potentiel d'interaction V [19]:

$$T = V + V (E_i - k + i\eta)^{-1} V + (E_i - k + i\eta)^{-1} V (E_i - k + i\eta)^{-1} V + \dots [(E_i - k + i\eta)^{-1}]^n$$

L'amplitude de diffusion devient en vertu de ce développement [7]:

$$\widetilde{f}_{bn} = \sum_{j=i}^n \widetilde{f}_{bi}$$

Où:

$$\widetilde{f}_{bn} = -2\pi^2 \left\langle \phi_f \left| V G_0^{(+)} V \dots \dots G_0^{(+)} V \right| \phi_i \right\rangle$$

f_{bn} Représente la nième approximation de Born.

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

$$\widetilde{f}_{b1} = -\frac{I}{2\pi} \langle \phi_f | V | \phi_i \rangle$$

$$\widetilde{f}_{b2} = -\frac{I}{2\pi} \langle \phi_f | V G_0^{(+)} V | \phi_i \rangle$$

Donc:

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

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

f_{b1} et f_{b2} Sont respectivement les amplitudes de diffusion dans la première et seconde approximation de Born.

ϕ_i et ϕ_f Sont respectivement l'état du système projectile cible dans ses états final et initial.

Ces fonctions d'onde s'écrivent comme un produit de l'onde plane représentant l'électron incident et de la fonction d'onde décrivant la cible avant et après la diffusion

$$\phi_i = \phi_i(\vec{k}_i) \Psi_i(1,2,\dots,N) \quad (1.32)$$

$$\phi_f = \phi_f(\vec{k}_f) \Psi_f(1,2,\dots,N) \quad (1.33)$$

Où $\Psi_i(1,2,\dots,N)$ et $\Psi_f(1,2,\dots,N)$ représentent les fonctions d'ondes de la cible dans ses états initial et final tandis que $\phi_i(\vec{k}_i)$ et $\phi_f(\vec{k}_f)$ sont les fonctions d'ondes décrivant le projectile dans la voie d'entrée et de sortie, elles sont représentées dans l'approximation de Born par une onde plane:

$$\phi(\vec{k}, \vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.34)$$

$G_0^{(+)}$ La fonction de Green est donnée par:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm i k |\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.35)$$