

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

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE des sciences

DEPARTEMENT de physique

N° :



DOMAINE : science de la matière

FILIERE : physique

OPTION : physique des particules

à haute énergie

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Bennacer Hadjer

Intitulé

**Calcul de section efficace triplement
différentielle de la simple ionisation de l'Hélium
par un électron
-Fonction de Clémenti-**

Soutenu le:01/06/2017

Devant le jury composé de

Y.Sabri

Université de M'sila

Président

S.Nehaoua

Université de M'sila

Rapporteur

S.Beskri

Université de M'sila

Examineur

Année universitaire : 2016 /2017

Dédicace

Je dédie ce travail,

À ma famille : ma mère et mon père, ma sœur et mes frères

À mes amis et à tous ceux que j'aime et qui m'aiment.

Remerciements

En premier lieu je remercie DIEU pour m'avoir guidé et donner la force pour la finalisation de ce mémoire.

Je tiens à remercier Madame Nehaoua samra pour les conseils prodigués, pour son soutien et avec qui j'ai beaucoup appris.

Je tiens à remercier également Madame Beskri Saliha et monsieur Sabri Youcef d'accepter de juger travail.

Mes remerciements vont aussi à tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin à la réalisation de cet humble travail.

Mes remerciements les plus chaleureux vont à mes parents, à mes frères et ma sœur, à qui je dédie ce travail.

Enfin, je tiens aussi à remercier toutes mes amis pour leur encouragement, et tous collègues de promotion 2017.

Bennacer Hadjer

Table des Matières

Introduction général.....	06
Chapitre I : Eléments de la théorie de diffusion	
Introduction	08
I.1. Le processus de la simple ionisation (e, 2e)	08
I.2. Notion de section.....	09
I.3. Sections efficaces: d'ionisations	10
I.3.1. Section efficace simplement différentielle (SESD)	10
I.3.2. Section efficace doublement différentielle (SEDD)	11
I.3.3. Section efficace triplement différentielle (SETD)	11
I.3.4. Section efficace totale	11
I.4. Cinématiques de la réaction (e, 2e):.....	12
I.4.1. géométrie symétrique coplanaire:.....	12
I.4.2. La géométrie asymétrique coplanaire :.....	13
I.4.3. la géométrie symétrique non coplanaire:.....	13
I.4.4. la géométrie asymétrique non: coplanair.....	14
I.5. Amplitude de diffusion:.....	14
I.6. Modèles théoriques:.....	15
I.6.1. Approximation de Born	16
I.6.1.1. Première approximation de Born :.....	17
I.6.1.2. seconde approximation de Born :.....	17
Chapitre II: Fonction de Hylleras et de Clementi de l'atome d'Hélium	
Introduction:.....	20
II.1.1. Atome d'hydrogène	20
II.1.4. Orbitales atomiques :.....	22

II-1.2. Ions hydrogénoïdes :	24
II.1.3. Atomes polyélectroniques :	24
II.2. Section efficace triplement différentielle (SETD)	26
II.2.1. Approximation du cœur gelé :	27
II.2.1.1. Modèle du cœur gelé avec deux électrons actifs	27
II.2.1.2. Modèle à un électron actif :	29
II.3. Atome d'hélium :	30
II.4. Fonction d'onde de l'atome d'hélium :	31
II.4.1. Fonction de Hylleraas :	32
II.4.2. Fonction de Clementi :	33

Chapitre III : Calcul de la section efficace triplement différentielle de l'hélium

Introduction ::	36
III.1. Cinématique de la collision:	36
III.2. Première approximation de Born :	37
III.3. Représentation des électrons du continuum	37
III.3.1. Modèle de l'onde coulombienne : BA-OW :	37
III.4. calcul de la section efficace triplement différentielle de He	38
Conclusion :	44
Conclusion générale :	46
Références bibliographiques.	

Introduction générale

L'étude de l'ionisation simple ou multiple des atomes par impact de particules chargées, et plus particulièrement par impact électronique, représente un des domaines les plus importants de la physique des collisions. L'analyse des informations qu'apportent ces études joue un rôle essentiel aussi bien pour la compréhension de la structure de la matière que de la dynamique de la collision et présente un intérêt tant fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes naturels dans plusieurs domaines de la physique, tels que la biophysique, la physique des plasmas et l'astrophysique (rôle essentiel des mécanismes élémentaires d'interaction – ionisation, excitation, capture – qui interviennent lors de la formation d'objets cosmologiques).

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. Ce dernier est l'atome multiélectronique le plus simple.

Ce travail se compose de trois chapitres :

Dans le premier chapitre nous avons présenté la théorie de la réaction $(e,2e)$ 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 et en l'emportant avec lui dans son mouvement de diffusion. Nous avons donc défini l'amplitude de diffusion et les différentes sections efficaces triplement, doublement et simplement différentielles et totales. Puis on présente les conditions cinématiques et géométriques possibles pour, l'ionisation d'une cible atomiques, nous avons donné le modèle le plus utilisée pour calculer l'amplitude de diffusion qui est l'approximation de Born utilisé en mécanique quantique. En présentant aussi la première et la deuxième approximation de Born.

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 à un ou deux électrons actifs, cela est fait pour alléger le calcul de l'amplitude de diffusion. Ensuite en fait le calcul pour deux fonction d'onde de l'atome d'He : la fonction de Hylleraas et celle de Clementi.

Dans le chapitre 3, les résultats obtenus pour la simple ionisation d'He sont présentés et discutés. Nous effectuons une comparaison aussi avec les données expérimentales.

Chapitre I:
Eléments de la théorie de diffusion

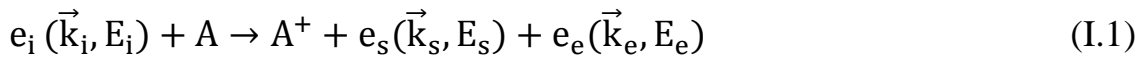
I. Introduction

Dans ce chapitre, on présente quelques brèves généralités sur la théorie de collision nous allons en premier lieu définir l'amplitude de diffusion, les sections efficaces différentielles et totale de ces processus collisionnels et ainsi leurs diverses conditions cinématiques et géométriques possibles. Nous allons ensuite présenter l'approximation de Born pour la détermination de la matrice de transition qui sera utilisée dans notre étude.

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

L'étude du processus de la simple ionisation consiste à déterminer les différentes grandeurs de la collision entre un électron projectile et une cible atomique ou moléculaire desquelles sort un électron. 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 du cible (figure I.1).

Le processus d'ionisation simple d'une cible A par impact électronique noté par (e, 2e) peut être résumé dans l'équation suivante [1,2] :



A^+ représente l'ion résiduel, e_e et e_s sont respectivement les électrons éjecté et diffusé. \vec{k}_i , \vec{k}_e et \vec{k}_s présentent les vecteurs d'ondes associés aux électrons incidents, diffusé et éjecté respectivement. Les angles θ_e , φ_e , θ_s et φ_s déterminent les directions de diffusion et d'éjection respectivement. A cause l'indiscernabilité des électrons sortants on considère l'électron le plus rapide comme étant celui diffusé, et l'électron le plus lent comme étant l'éjecté, La condition de conservation de l'énergie donne $(E = \frac{1}{2} k^2)$ [3] :

$$E_i = E_s + E_e + I + E_r^{A^+} \quad (\text{I.2})$$

Avec : $E_r^{A^+} = \frac{q^2}{2M}$ l'énergie de recul de l'ion, elle est très petite comparée aux énergies cinétiques des autres particules, elle peut être donc négligée dans le bilan énergétique.

I représente l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale donnée de la cible.

Considérons \vec{q} comme le moment de recul de l'ion, la conservation des moments exige que :

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

\vec{K} est le moment de transfert

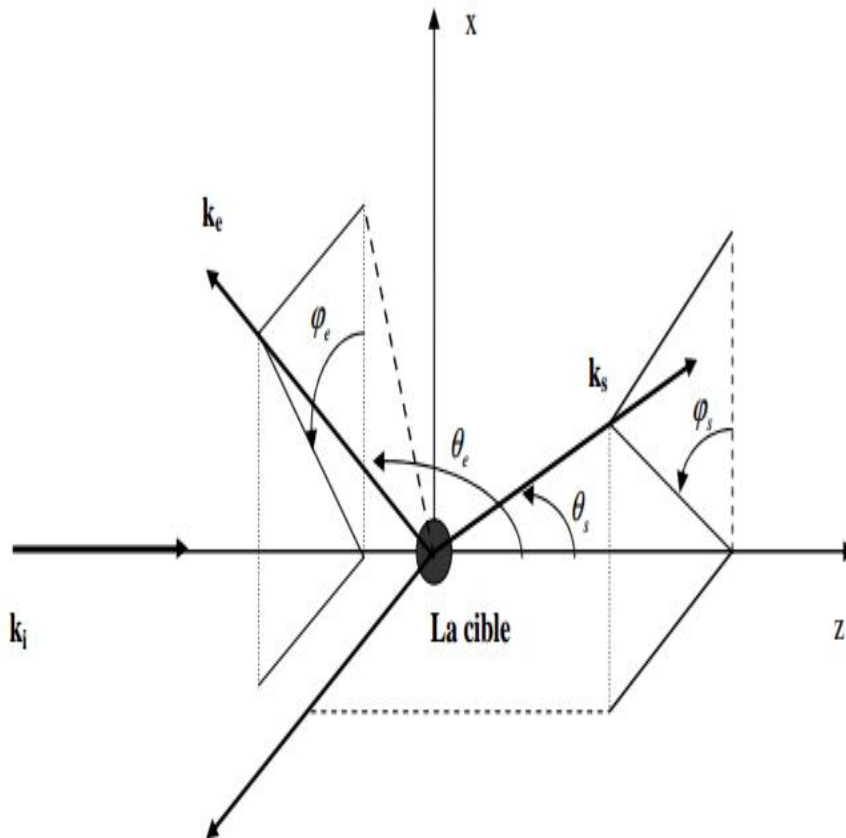


Figure I.1 – Schéma de la réaction (e,2e)

I.2. Notion de section efficace

On considère dans la direction parallèle à l'axe (oz) un flux F_i de particules incident (fig I .2) qui rentrent en collision avec N_i Particule cibles. On suppose que la densité des cibles et le flux F_i sont relativement faible pour 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 par unité de temps , le nombre de particule N que l'on détecte par unité de temps est proportionnel aux nombre de particules cibles et flux F_i ,le coefficient de portionnalité noté σ est donné par [1,4]:

$$\sigma = \frac{N}{N_i F_i} \quad (\text{I.4})$$

Cette grandeur définie comme la section efficace.

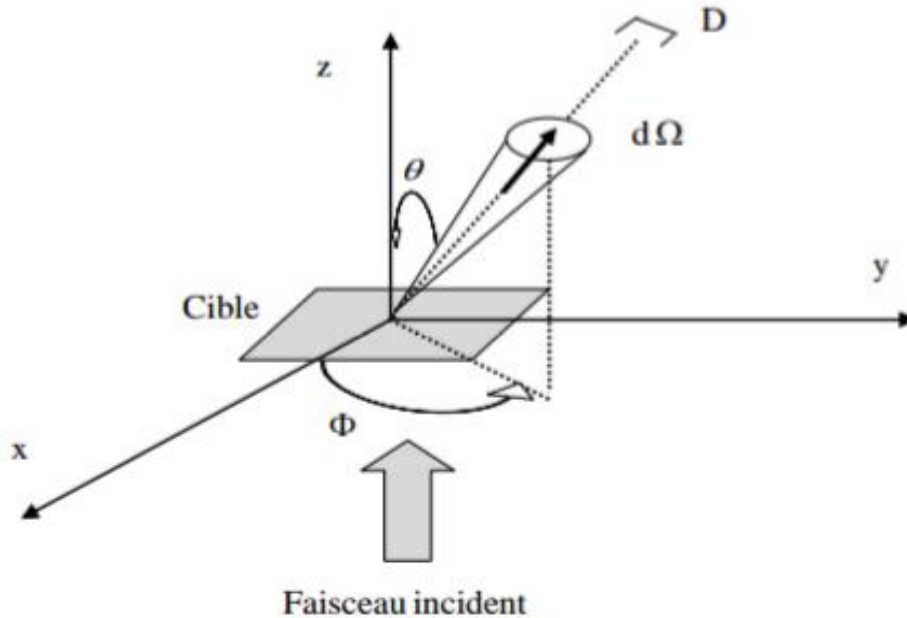


Figure I.2 : schéma simplifié relatif à la notion de section efficace

I.3. Sections efficaces d'ionisations

La probabilité pour qu'un processus particulier de collision s'effectue est représentée par la section efficace de diffusion correspondante. Elle caractérise le processus d'ionisation simple (e, 2e). L'interaction entre l'électron et la cible dépend fortement la nature du processus, de l'énergie de l'électron incident et de l'angle de diffusion.

I.3.1. Section efficace simplement différentielle (SESD)

Dans une expérience de collision, l'état final est composé de deux électrons libres et d'un ion résiduel. Lorsqu'une des particules dans cet état est détectée sélectivement dans une certaine direction, on parle de section efficace simplement différentielle en angle (SESD). On obtient [5,6] :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int k_s^2 dk_s d\vec{k}_e \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2 \quad (\text{I.5})$$

T_{if} : La matrice de transition relie la fonction d'onde qui décrit le système avant la collision à la fonction d'onde qui décrit le système après la collision.

$$T_{if} = \langle \Psi_f | v | \Psi_i \rangle$$

Elle est proportionnelle à la probabilité de détecter un électron dans une direction Ω_s . Ici, on tient compte de [4].

$$d\vec{k}_s = k_s^2 dk_s d\Omega_s$$

I.3.2. Section efficace doublement différentielle SEDD

La section efficace doublement différentielle est donnée par [5]:

$$SEDD = \frac{d^2\sigma}{d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_e \int d\Omega_s |T_{if}|^2 \quad (I.6)$$

I.3.3. La section efficace triplement différentielle SETD

La section efficace triplement différentielle (*SETD*) mesure la probabilité pour qu'un électron incident d'énergie E_i et d'impulsion \vec{k}_i Produise après la collision avec la cible deux électrons dans l'état final d'énergies E_e et E_s et de quantités de mouvement \vec{k}_s et \vec{k}_e dans la direction Ω_s et Ω_e . On la note [5] :

$$SETD = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_e |T_{if}|^2 \quad (I.7)$$

Cette quantité décrit 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, c'est-à-dire : E_i, E_s et E_e ainsi que les angle θ_s, θ_e et φ_s, φ_e .

I.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 $d\Omega$, puis intégrer sur tout l'espace. On la note [3] :

$$SET = \sigma_T$$

$$\sigma_T = \int_0^{E_{max}} \frac{d\sigma^{(1)}}{dE_e} dE_e \quad (I.8)$$

Où : $E_{max} = (E_i - I)/2$

I l'énergie d'ionisation correspondant à l'extraction d'un électron d'une orbitale donnée de la cible. Représente l'énergie maximale de l'électron éjecté 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. on définit également la SET par la formule [7]:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\varphi \quad (I.9)$$

I.4. Cinématiques de la réaction (e, 2e)

La cinématique la collision (e,2e) dépend d'un grand nombre de paramètres cinématiques : $k_i, k_s, k_e, \theta_s, \theta_e, \varphi_s, \varphi_e$. Ces cinématiques sont :

I.4.1. géométrie symétrique coplanaire

Dans cette géométrie les deux électrons dans la voie de sortie sont détectés avec des énergies égales $E_e = E_s$ et des angles polaires égaux $\theta_s = \theta_e = \theta$, les quantités de mouvement des électrons incidente, éjecté et diffusé se trouvent dans le même plan [8].

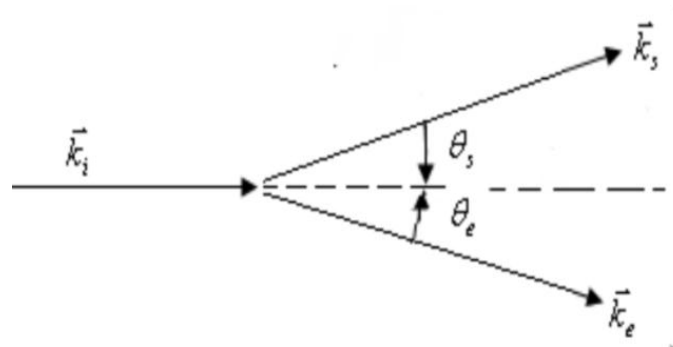


Figure I-3 : géométrie symétrique coplanaire

I.4.2. La géométrie asymétrique coplanaire

En cinématique asymétrique coplanaire, la section efficace triplement différentielle est habituellement mesurée en fonction de l'angle d'éjection θ_e (variable entre 0° et 360°), l'angle de diffusion θ_s 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, et sont détectés avec des énergies très différentes $E_e \ll E_s$ [9,10].

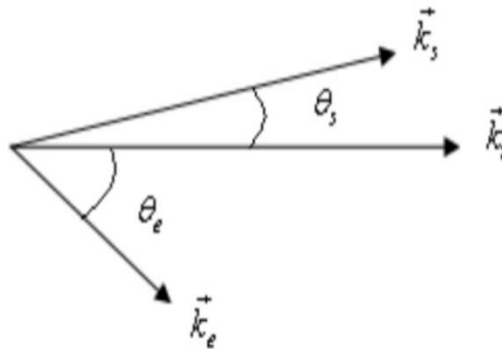


Figure I -4 : géométrie asymétrique coplanaire

I.4.3. la géométrie symétrique non coplanaire

Dans cette géométrie les 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_e [11].

$$\theta_s = \theta_e, \varphi_s = 0^\circ, \varphi_e \text{ Varie}$$

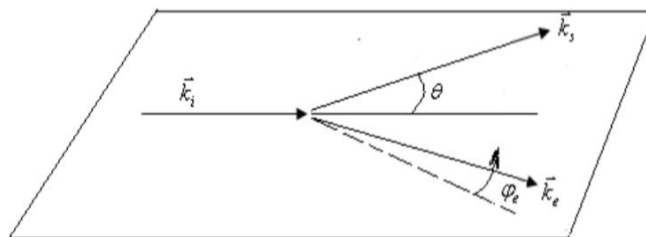


Figure I.5 : géométrie symétrique non coplanaire

I.4.4. la géométrie asymétrique non coplanaire

Les deux électrons émergents sont détectés avec des énergies très différentes et dans des directions différentes, et les quantités de mouvement des électrons incident, éjecté et diffusé ne se trouvent pas dans le même plan [12].

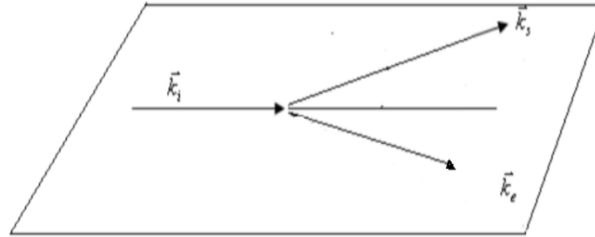


Figure I.6 : géométrie asymétrique non coplanaire

I.5. Amplitude de diffusion

Le calcul de section efficace revient à résoudre l'équation de Schrödinger du système avec la masse réduite ($\mu = \frac{m.M}{M+m}$) s'écrit :

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} + V(\vec{r})\right) \Psi(\vec{r}) = E_r \Psi(\vec{r}) \quad (\text{I.10})$$

En posant :

$$u(\vec{r}) = \frac{2\mu}{\hbar^2} v(\vec{r}) \quad , \quad k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} E_r$$

L'équation aux valeurs propre (I.10) est :

$$(\Delta_r + k^2) \Psi(\vec{r}) = u(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \quad (\text{I.11})$$

La solution de l'équation (I.11) sans second membre (donc la description de l'onde en absence du potentiel) est : $\Psi_0(\vec{r})$ la solution de l'équation homogène Alors :

$$\Psi_0(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (\text{I.12})$$

Avec : $\vec{k} = \vec{k}_i$

On peut toujours écrire la fonction d'onde stationnaire $\Psi(\vec{r})$, ayant un comportement Asymptotique($r \rightarrow \infty$), sous la forme [6] :

$$\Psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{f_k(\theta, \varphi)}{r} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{I.13})$$

$f_k(\theta, \varphi)$ est l'amplitude de diffusion qui dépend des angles de diffusion.

A est une constante de normalisation. L'amplitude de diffusion $f_k(\theta, \varphi)$ Joue un rôle central dans la théorie de diffusion, car il détermine la section efficace différentielle.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \varphi)|^2 \quad (\text{I.14})$$

En utilisant la fonction de Green on trouve la formule suivante de l'amplitude de diffusion :

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}_s\cdot\vec{r}'} u(\vec{r}') \Psi(\vec{k}, \vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.15})$$

Donc :

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_s\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi(\vec{k}, \vec{r}') d\vec{r}' \quad (\text{I.16})$$

Avec \vec{k}_s le vecteur d'onde du projectile diffusé.

La section efficace est définie comme étant le carré du module de l'amplitude de diffusion de la particule :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = f_k(\theta, \varphi) f_k^*(\theta, \varphi) \quad (\text{I.17})$$

On déduit :

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{k_s \mu^2}{2\pi k_i \hbar^2} \left| \int e^{-i\vec{k}_s\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \Psi(\vec{k}, \vec{r}') d\vec{r}' \right|^2 \quad (\text{I.18})$$

I.6. Modèles théoriques

L'étude théorique et expérimentale du processus d'ionisation simple d'une cible atomique a fait l'objet de nombreuses investigations. En effet, la section efficace triplement différentielle est une grandeur essentielle pour la compréhension des processus d'ionisation car elle contient l'information la plus détaillée sur ces processus. Depuis les premières mesures de cette grandeur diverses méthodes théoriques ont été élaborées pour comprendre les mécanismes de la réaction (e, 2e). Dans ce qui suit, nous présentons le modèle souvent utilisé pour calculer la section efficace de l'ionisation simple.

I.6.1. Approximation de Born

L'approche développée par Born pour le calcul des sections efficaces joue un rôle dominant dans l'étude des collisions atomiques et moléculaires. Le principe de cette approximation repose sur le fait que le potentiel d'interaction coulombienne entre projectile et les différentes particules chargées de la cible est petit devant l'énergie totale de la cible et celle de l'électron incident (rapide) ou, en d'autres termes, l'électron incident d'une part, et la atome cible d'autre part peuvent être considérés comme deux sous-systèmes indépendant avant et après la collision. En fait, cette séparation est justifiée à haute énergie où la vitesse de l'électron incident est supérieure par rapport à celles des électrons de la cible qui subissent le choc. Par conséquent, le potentiel diffuseur peut être traité comme une perturbation

La formulation de Born conduit alors à un développement de l'opérateur de transition T [13,14].

$$T = V + V \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon} V + V \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon} V \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon} V + \dots \quad (\text{I.19})$$

Où h représente l'hamiltonien du système en absence de toute interaction de l'opérateur de transition T peut alors être défini à l'aide de la fonction de Green G_0^+ [5] :

$$T = V + V G_0^{(+)} V + V G_0^{(+)} V G_0^{(+)} V + \dots \quad (\text{I.20})$$

Ou bien :

$$T = V + \left[\sum_{j=1}^{\infty} \left(V G_0^{(+)} \right)^j \right] V \quad (\text{I.21})$$

Avec :

$$G_0^{(+)} = \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon}$$

Le développement de Born permet d'exprimer l'amplitude de diffusion en termes d'interaction v entre l'électron incident et la cible ou les particules incidente et diffusée sont représentées par des fonctions d'ondes planes.

La série de Born basée sur cette approche perturbative s'écrit [15,16] :

$$f_{Bn} = \sum_{j=1}^n \tilde{f}_{Bj} \quad (\text{I.22})$$

$$\tilde{f}_{Bj} = \left\langle \varphi_f \left| V G_0^{(+)} V \dots G_0^{(+)} V \right| \varphi_i \right\rangle \quad (\text{I.23})$$

Où f_{Bn} représente le développement de la série de Born à l'ordre n.

I.6.1.1. Première approximation de Born

cette approximation consiste à retenir que le premier terme de ce développement, en négligeant les contributions des termes qui contiennent des puissances supérieures à celle de V donc :

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \quad (\text{I.24})$$

φ_i et φ_f sont respectivement les fonctions d'ondes des états initial et final.

V représente le potentiel d'interaction entre l'électron incident et la cible atomique[17].

$$V = -\frac{Z}{|\vec{r}|} + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} \quad (\text{I.25})$$

Où $|\vec{r} - \vec{r}_j|$ est la distance entre l'électron incident et l'électron j de la cible,

$|\vec{r}|$ La distance entre l'électron incident et noyaux et N_e désigne le nombre des électrons de la cible. Le terme du premier ordre représente l'interaction simple de l'électron incident avec chacune des particules composant la cible. La première approximation de Born (FBA) c'est en général le cas pour les collisions ionisantes de cibles atomiques et moléculaires par des électrons quand les vitesses de ces derniers sont très grandes par rapport à celles des électrons liés à la cible. L'expression de la section efficace triplement différentielle s'écrit dans ce cas[1] :

$$\sigma^{(3)} = \frac{k_e k_s}{k_i} |f_{b1}|^2 \quad (\text{I.26})$$

I.6.1.2. Seconde approximation de Born

La SETD est donnée dans la seconde approximation de Born par[1] :

$$\sigma^{(3)} = \frac{k_e k_s}{k_i} |f_{B1} + f_{B2}|^2 \quad (\text{I.27})$$

Le terme f_{B1} représente l'amplitude de diffusion dans la première approximation de Born

il reste à calculer le terme f_{B2} .

Pour écrire l'expression de f_{B2} , on utilise l'opérateur de Green.

$$f_{B2} = -\frac{1}{2\pi} \left\langle \varphi_f \left| V G_0^{(+)} V \right| \varphi_i \right\rangle \quad (\text{I.28})$$

Le second terme de Born f_{B2} joue un rôle très important dans la réaction (e, 2e) pour obtenir une valeur d'amplitude de diffusion proche de la valeur exacte.

Chapitre II:
Fonctions de Hylleraas et de Clementi de
l'atome d'Hélium

Introduction :

Dans ce chapitre on se focalise sur la description quantique des atomes qui est indispensable pour le calcul de l'amplitude de diffusion et de la section efficace triplement différentielle d'ionisation simple d'hélium. La résolution de l'équation de Schrödinger permet de déterminer les états liés des cibles atomiques, Les solutions exactes n'existent que pour l'atome l'hydrogène. On va utiliser deux fonctions d'onde pour décrire l'électron dans l'atome Hélium : la fonction de Clementi et de Hylleraas. Les calculs sont développés dans notre travail dans le cadre de la première approximation de Born FBA

II.1.1. Atome d'hydrogène :

En 1926, Erwin Schrödinger a écrit sa fameuse équation pour l'atome d'hydrogène. Il a montré que les solutions de cette équation permettaient de retrouver les valeurs des niveaux d'énergie obtenus par Bohr. L'équation de Schrödinger allait rapidement servir de fondement à la mécanique quantique en étant généralisée à tous les systèmes, elle s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}) \quad (\text{II.1})$$

L'équation de Schrödinger en coordonnées sphériques :

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left(-\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2} \right) + u(r) \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{II.2})$$

Cette équation est résolue analytiquement que pour l'atome d'hydrogène, les fonctions propres $\Psi(\vec{r})$ ou dit les orbitales atomiques sont mises sous la forme :

$$\Psi_{l,m}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II.3})$$

Où les fonctions $Y_l^m(\theta, \varphi)$ normalisées sont les harmoniques sphériques données par [18] :

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

n est le nombre quantique principal, l est le nombre quantique angulaire, et m est le nombre quantique magnétique.

$R(r)$ est l'équation radiale, elle est la solution de l'équation radiale suivante :

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) R = 0 \quad (\text{II.5})$$

L'expression générale des fonctions radiales $R_{n,l}(r)$ qui est la solution de l'équation précédente à la forme [18] :

$$R_{n,l}(r) = -\frac{2a_0^{\frac{3}{2}}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0} \right)^l \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (\text{II.6})$$

Où :

$$N_{n,l} = -\frac{2a_0^{\frac{3}{2}}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \text{ est le coefficient de normalisation.}$$

$L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$ est la polynômes de Laguerre généralisés.

Les énergies E_n des orbitales atomiques $\Psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi)$ sont données comme suit :

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2} \quad (\text{II.7})$$

$E_1 = -13,6 \text{ eV}$ est l'énergie d'ionisation de la première orbitale de l'hydrogène ($n=1$).

Quelques orbitales atomiques de l'atome d'hydrogène sont données dans le tableau (1.II)

Niveau 1S	$\Psi_{n=1,l=0,m=0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$
Niveau 2S	$\Psi_{n=2,l=0,m=0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
Niveau 2P	$\Psi_{n=2,l=1,m=1}(\vec{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta e^{i\varphi}$ $\Psi_{n=2,l=1,m=0}(\vec{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0} \cos \theta$ $\Psi_{n=2,l=1,m=-1}(\vec{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta e^{-i\varphi}$

Tableau II.1 : l'expression des fonctions d'onde des premier niveaux d'énergie.

II.1.4. Orbitales atomiques

Les fonctions d'onde des atomes sont également appelées des orbitales atomiques.

$$\Psi_{n,l,m}(r) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II.8})$$

Dans l'expression (II.8) la fonction radiale $R_{n,l}(r)$ est réelle, par contre $Y_l^m(\theta, \varphi)$ est sauf pour $m=0$ une fonction complexe de φ en effet :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = F_l^m(\theta) e^{im\varphi} \quad (\text{II.9})$$

Où :

$F_l^m(\theta)$ est une fonction réelle de θ

Les fonctions atomiques sont donc en général des fonctions complexes

Lorsque $l = m = 0$, la fonction d'onde $\Psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi)$ est une orbitale s . Puisque Y_0^0 est une constante, l'orbitale s est représentée, pour r fixé, par une sphère centrée sur l'origine et possède donc des valeurs identiques quelle que soit la direction considérée.

Lorsque $l = 1$, les fonctions $\Psi_{n1,0}, \Psi_{n1,\pm 1}$ $m = \pm 1$, sont des orbitales p (figl. 1); pour ces orbitales comportent une exponentielle imaginaire, selon (II.9) Afin d'obtenir des fonctions à valeurs réelles et normées, on effectue des combinaisons linéaires entre les orbitales

$\Psi_{n1,1}, \Psi_{n1,-1}$ soi [18] :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{n1,-1} - \Psi_{n1,1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta \cos \varphi \quad (\text{II.10})$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}}(\Psi_{n1,-1} + \Psi_{n1,1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta \sin \varphi$$

Les relations entre coordonnées cartésiennes et sphériques sont données par :

$$\frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi, \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi, \frac{z}{r} = \cos \theta \quad (\text{II.11})$$

Les orbitales p s'écrivent alors :

$$p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{x}{r}, p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{y}{r}, p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{z}{r} \quad (\text{II.12})$$

Pour r fixé, les orbitales p sont représentés par deux sphères tangentes l'origine

Ainsi que le montre la figure (II.1) Les orbitales p_x, p_y, p_z sont à symétrie axiale respectivement Par rapport aux axes Ox, Oy, Oz

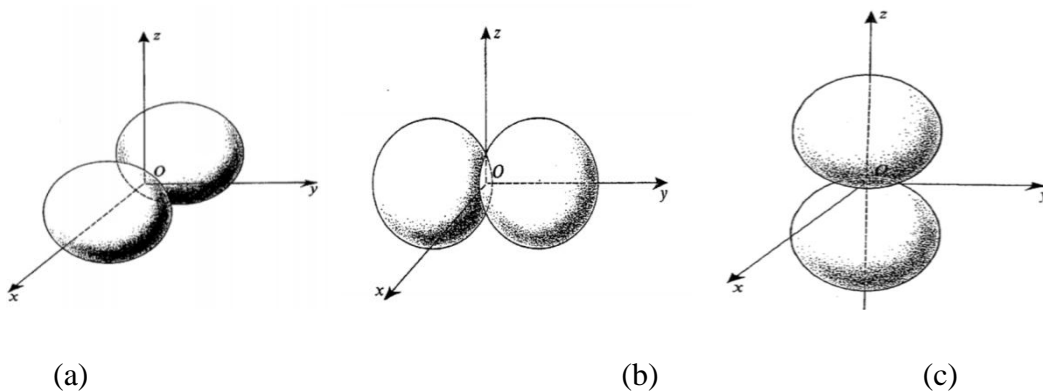


Fig (II .1) : (a ,b ,c)- dépendance angulaire des orbitales p_x, p_y, p_z

II-1.2. Ions hydrogéoïdes

Les Ions hydrogéoïdes ont plusieurs (z) protons et un seul électron. l'énergie potentielle coulombienne de l'électrons est :

$$V(r) = -\frac{ze^2}{r} \quad (\text{II.13})$$

La résolution de l'équation de Schrödinger est exactement la même que dans le cas de l'hydrogène à un facteur z près. l'énergie des orbitales est :

$$E_n = \frac{z^2 E_1}{n^2} \quad (\text{II.14})$$

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 .

II.1.3. Atomes polyélectroniques

Un atome à plusieurs électrons est constitué d'un noyau de charge positive autour duquel gravitent Z électrons de charge $-e_0$. Le centre de masse de l'atome coïncide pratiquement avec le noyau, que nous prendrons comme origine des coordonnées. L'hamiltonien décrivant le mouvement des électrons s'écrit, en négligeant les effets relativistes ainsi que ceux dus aux spins :

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta_{r_i} - \frac{z}{r_i} \right) + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II.15})$$

Où :

r_i la coordonnée de l'électron "i" , r_{ij} la distance entre l'électron "i" et l'électron "j". La fonction d'onde du système $\Psi(r_1, r_2 \dots r_N)$ est la solution de l'équation spatial de Schrödinger :

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta_{r_i} - \frac{z}{r_i} \right) + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi (r_1, \dots r_N) = E \Psi(r_1 \dots r_N) \quad (\text{II.16})$$

L'hamiltonien est évidemment trop complexe pour qu'il soit possible de résoudre son équation aux valeurs propres à cause de présence le terme $\frac{1}{r_{ij}}$. 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 et prenant en compte l'effet moyen de la répulsion des autres électrons (II.11). Les considérations précédentes conduisent alors à écrire L'hamiltonien sous la forme [18,19]:

$$H = H_C + W \quad (\text{II.17})$$

$$H_C = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta_{r_i} + V(r_i) \right), \quad (\text{II.18})$$

$$W = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II.19})$$

H_C hamiltonien de l'approximation de champs central, W peut être considéré comme une perturbation de H_C . L'équation aux valeur propre de H_C s'écrit [19,20]:

$$H_C \Psi_c = E \Psi_c \quad (\text{II.20})$$

C'est une équation séparable en N équation :

$$\Psi_c = u_{\alpha_1}(\vec{r}_1) u_{\alpha_2}(\vec{r}_2) \dots u_{\alpha_N}(\vec{r}_N) \quad (\text{II.21})$$

Avec :

$$\alpha_i = n_i l_i m_i$$

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} + v(r) \right] u_{n l m_l}(\vec{r}) = E u_{n l m_l}(\vec{r}) \quad (\text{II.22})$$

$u_{n l m_l}(\vec{r})$ est la solution de L'équation (II.21) :

nnv

$$u_{n l m_l}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II.23})$$

II.2. Section efficace triplement différentielle (SETD)

Dans l'ionisation simple d'une cible atomique avec N électrons, la section efficace triplement différentielle est définie par l'expression:

$$\text{SED T} = \frac{d^3 \sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_e |T_{if}|^2 \quad (\text{II.24})$$

T_{if} : est l'élément de matrice de transition de la cible atomique, de l'état initial $\Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1 \dots \dots \vec{r}_N)$ à l'état final $\Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1 \dots \dots \vec{r}_N)$ qui s'écrit dans la première approximation de Born :

$$T_{if} = \langle \Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1 \dots \dots \vec{r}_N) | V(r_0, r_1 \dots \dots, r_N) | \Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1 \dots \dots \vec{r}_N) \rangle \quad (\text{II.25})$$

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

$$V(r_0 \dots, r_N) = -\frac{Z}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_0|} \quad (\text{II.26})$$

Où

\vec{r}_0 est le vecteur position de l'électron incident par rapport au centre du noyau, Z est le nombre atomique.

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

$$\Psi_i(\vec{r}_0 \dots \vec{r}_N) = \varphi_i(\vec{k}_i) \varphi'_{i,cible}(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N) \quad (\text{II.27})$$

$$\Psi_f(\vec{r}_0, \dots \vec{r}_N) = \varphi_f(\vec{k}_s) \varphi'_{(ion+éjecte)}(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N)$$

Où :

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

$$\varphi_i(\vec{k}_i) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_i \vec{r}_0) \quad (\text{II.28})$$

$$\varphi_f(\vec{k}_s) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_s \vec{r}_0)$$

$\varphi'_{i,cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ et $\varphi'_{(ion+éjecte)}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ sont les fonctions d'ondes qui représentent les cibles avant et après l'ionisation respectivement. Il est difficile de traiter le problème à N électrons. Nous utiliserons l'approximation du cœur gelé, où on ne prend en considération que la couche ionisée avec un ou deux électrons et l'on considère le reste des électrons comme figés. Le problème est encore simplifié en utilisant le modèle à un seul électron actif.

II.2.1. Approximation du cœur gelé

Le modèle du cœur gelé est introduit pour simplifier les calculs en traitant uniquement les électrons de valence [21,22]. Dans un premier temps, on peut conserver tous les électrons mais on maintient constantes les orbitales du cœur pendant la détermination de la fonction d'onde. Seuls les électrons de valence sont pris en compte pour le calcul de la corrélation électronique.

II.2.1.1. 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. Dans l'expression (II.29) qui traduit l'interaction entre l'électron incident et la cible, la somme contient uniquement deux termes qui expriment l'interaction avec les deux électrons actifs

$$V(r_0, r_1, r_2) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{10}} + \frac{1}{r_{20}} \quad (\text{II.29})$$

La fonction d'onde de la cible dans l'état initial :

$$\varphi'_{i,cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{OA}(\vec{r}_1)\varphi_{OA}(\vec{r}_2) \quad (\text{II.30})$$

$\varphi_{OA}(\vec{r})$ Représente l'orbitale atomique ionisée de la cible. et pour la fonction d'onde de la cible dans l'état final $\varphi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ s'écrit dans ce cas comme un produit symétrisé de la fonction d'onde d'électron éjecté et de l'ion résiduel[23].

$$\varphi_f'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{ion}(\vec{r}_1)\varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2)\varphi_c(\vec{r}_1)] \quad (\text{II.31})$$

\vec{r}_1 et \vec{r}_2 désignent les vecteurs positions des électrons actifs de la cible, la fonction symétrique $\varphi_f'(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ donne l'état du système après l'ionisation .

$\varphi_{ion}(\vec{r})$ est la fonction d'onde de l'ion résiduel et $\varphi_c(\vec{r})$ la fonction d'onde coulombienne de l'électron éjecté donnée comme suit :

$$\varphi_c(\vec{k}_e, \vec{r}) = \frac{\exp(\frac{\pi}{2}\eta)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \Gamma(1 + \eta) \exp(i\vec{k}_e \vec{r}) {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \vec{r})) \quad (\text{II.32})$$

Avec

$\Gamma(1 + \eta)$ et ${}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\vec{r}))$ sont respectivement les fonctions gamma d'Euler complexe et la fonction hypergéométrique confluyente [24],

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

On peut remarquer que cette onde coulombienne tend vers l'onde plane pour $Z \rightarrow 0$

On trouve que l'amplitude de diffusion T est donnée par l'expression :

$$T_{2e} = \langle \Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | V(r_0, r_1, r_2) | \Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_1) \rangle \quad (\text{II.33})$$

$$T_{2e} = \frac{(2\pi)^{-3}}{\sqrt{2}} \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_c(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \left(\frac{-2}{\vec{r}_0} + \frac{1}{\vec{r}_{10}} + \frac{1}{\vec{r}_{20}} \right) \right| \varphi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II.34})$$

En utilisant la relation de Bethe[25]::

$$\int \frac{\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_0)}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} = \frac{4\pi}{k^2} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (\text{II.35})$$

$$T_{2e} = \frac{(2\pi)^{-3} 4\pi}{\sqrt{2} k^2} \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_c(\vec{r}_1) \left| -2 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II.36})$$

L'expression(II.36) reste invariante lorsqu'on permute les coordonnées du premier avec celles du second électron, on peut écrire donc :

$$T_{2e} = \frac{(2\pi)^{-3} 8\pi}{\sqrt{2} k^2} \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_c(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} - 1 \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \quad (\text{II.37})$$

La relation (II.38) devient :

$$T_{2e} = \frac{4}{\sqrt{2}k^2(2\pi)^2} \left\{ \begin{aligned} & \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1)\varphi_c(\vec{r}_2) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} - 1 \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1)\varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \\ & + \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2)\varphi_c(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} - 1 \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1)\varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.38})$$

$$T_{2e} = \frac{4}{\sqrt{2}k^2(2\pi)^2} \left\{ \begin{aligned} & \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \\ & + \left\langle \varphi_c(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \\ & - 2 \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \end{aligned} \right\} \quad (\text{II.39})$$

Dans ce cas, la section efficace triplement différentielle pour une cible atomique est donnée par :

$$\sigma^3 = \frac{k_s k_e (2\pi)^4}{k_i} |T_{2e}|^2 \quad (\text{II.40})$$

Donc :

$$\sigma^3 = \frac{8k_s k_e}{k_i k^4} \left| \begin{aligned} & \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \\ & + \left\langle \varphi_c(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \\ & - 2 \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_c(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \end{aligned} \right|^2 \quad (\text{II.41})$$

II.2.1.2. 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. Les états initial et final de la cible $\varphi_i'(\vec{r}_1)$, $\varphi_f'(\vec{r}_1)$ sont donnés par :

$$\varphi_i'(\vec{r}_1) = \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \quad (\text{II.42})$$

$$\varphi_f'(\vec{r}_1) = \varphi_c(\vec{r}_1)$$

Et le potentiel d'interaction entre l'électron incident et la cible .

$$V(r_0, r_1) = -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \quad (\text{II.43})$$

Alors, l'expression de l'amplitude de diffusion s'écrit :

$$T_{1e} = \frac{2}{(2\pi)^2 k^2} \left\{ \left\langle \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle - \langle \varphi_C(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \right\} \quad (\text{II.44})$$

Dans ce cas, la section efficace triplement différentielle pour une cible atomique est donnée par :

$$\sigma^{(3)} = \frac{8k_s k_e}{k^2 k_i} \left| \left\langle \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle - \langle \varphi_C(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \right|^2 \quad (\text{II.45})$$

II.3. Atome d'hélium

L'hélium est un élément chimique monoatomique incolore et inodore, de symbole **He** et de numéro atomique $Z=2$.

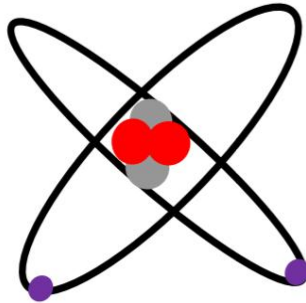


Figure II .2 : atome d'hélium

Par ailleurs, à des températures extrêmement basses, en dessous de 2.17 K, l'hélium liquide devient un « fluide quantique » dont la superfluidité est une propriété unique que seule la mécanique quantique peut expliquer. Environ trente pour cent de la matière cosmique créée peu après le Big Bang se trouve sous forme d'hélium, ce qui en fait, après l'hydrogène, le deuxième élément le plus abondant dans l'Univers. Sur la Terre, il est produit, sous forme de particules alpha, par la désintégration d'éléments radioactifs [18].

L'atome d'hélium est l'exemple type des systèmes quantiques à trois corps. Nous verrons que son étude fait ressortir toute la complexité des atomes, et plus généralement du problème à plusieurs corps qui n'admet pas de solution analytique exacte.

L'équation de Schrödinger stationnaire correspondante s'écrit dans le système d'unités atomiques :

$$\left[\frac{\nabla_1^2}{2} + \frac{\nabla_2^2}{2} + \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} + E \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (\text{II.46})$$

L'équation (II.46) ne peut être résolue de façon exacte à cause de la présence du terme de répulsion électrostatique « $1/r_{12}$ ».

En utilisant l'approximation de particules indépendantes (le terme $1/r_{12}$ est négligé), la solution de cette équation s'écrit sous forme d'un produit de deux fonctions d'ondes hydrogénoïdes.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1, \theta_1, \varphi_1) \Psi_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2, \theta_2, \varphi_2) \quad (\text{II.47})$$

Et l'énergie serait la somme des deux énergies hydrogénoïdes :

$$E_n = E_{n_1} + E_{n_2} = -4E_0 \left(\frac{1}{n_1^2 + n_2^2} \right) \quad (\text{II.48})$$

Le potentiel d'ionisation, I il est défini comme l'énergie nécessaire pour arracher un électron au système. Pour l'hélium : $I = 24,592$ eV.

II.4. Fonction d'onde de l'atome d'hélium

La fonction d'onde décrivant l'atome d'hélium a la configuration $1s^2$ dans son état fondamental est fonction propre de l'opérateur L^2 . Ce qui signifie que l'action de L^2 sur la fonction d'onde doit donner un résultat nul. De plus, cette fonction doit être solution de l'équation de Schrödinger. A ce jour, malgré les efforts des théoriciens dans ce domaine, il n'y a pas de fonction d'onde analytique pour décrire He. En revanche, il existe pléthore de fonctions d'onde appropriées qui ont des degrés de complexité plus ou moins importants. Les deux fonctions qu'on utilisera dans le modèle développé ici, sont les fonctions de Clementi [Clementi et Roetti 1974] et de Hylleraas.

II.4.1. Fonction de Hylleraas

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 [26]:

$$\sum c_{(l,m,n)} s^l t^m u^n \exp(-\alpha s), \quad (\text{II.49})$$

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

$$s=r_1 + r_2 \quad (\text{II.50})$$

$$t=r_1 - r_2$$

$$u=r_{12}$$

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

$$\Psi_0^{nor} = \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] = \exp(-\alpha s) \quad (\text{II.51})$$

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

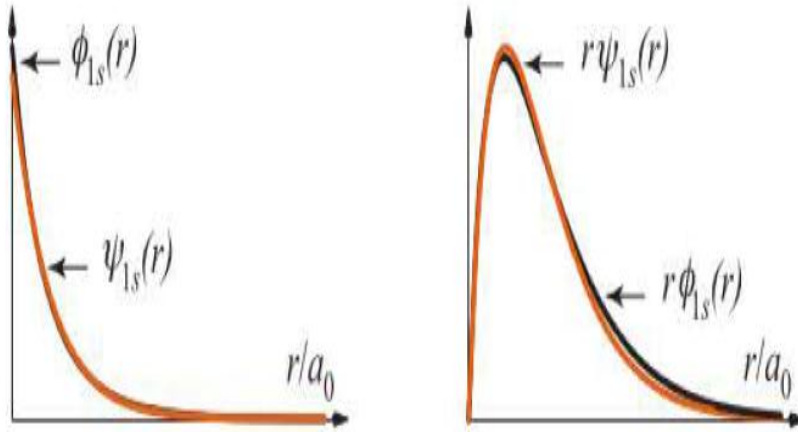


Figure II.3 : une comparaison des orbital que nous avons obtenu à partir d'un simple variationnelle calcul [en d'autres termes, $\Psi_{1s}(\xi = 27/16)$ avec Hartree-Fock orbital.

II.4.1. Fonction de Clementi

Dans le calcul de l'élément de transition qui correspond à l'ionisation ($e, 2e$) de l'atome hélium par impact électronique, nous avons utilisé des fonctions d'onde Hartree-Fock

de Clementi Roetti (1974) dans la description de la cible et de son ion résiduel. Elles sont données respectivement pour hélium He et He* par [28] :

$$\varphi_{He}(r_1, r_2) = \varphi_1(r_1)\varphi_2(r_2) \quad (\text{II.52})$$

$$\varphi_{He^+}(r_1) = \varphi_1(r_1) \quad (\text{II.53})$$

Où

$$\varphi_{He} = R(r)Y_m^l(\theta, \vartheta) \quad (\text{II.54})$$

Pour l'état fondamental ($l=0, m=0$) ces fonctions radiales sont données par le développement suivant [28] :

$$R(r) = \sum_{i=5}^6 c_i \xi_i^{3/2} e^{-\xi_i r} \quad (\text{II.55})$$

$$\text{et } Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (\text{II.56})$$

Les paramètres c_i et ξ_i sont donnés dans le tableau II .2 [29].

Valeur de i	c_i	ξ_i
1	0,78503	1,43000
2	0,20284	2,44150
3	0,03693	4,09960
4	-0,00293	6,48430
5	0,00325	0,79780

Tableau II .2 : Valeurs des coefficients de la table de Clementi pour décrire l'hélium.

Chapitre III:
Calcul de la section efficace triplement
différentielle de l'hélium

Introduction

Dans cette partie nous allons appliquer les deux formalismes présentés dans la section précédente à l'ionisation simple l'atome de d'hélium. Pour calculer la section efficace triplement différentielle, en rappelant qu'on utilise la première approximation de Born et le modèle à cœur gelé avec un seul électron ou avec deux électrons. Nous allons tracer la variation de la section efficace triplement différentielle en fonction de l'angle polaire d'éjection pour différents conditions énergétiques. Et les comparées aux résultats expérimentaux.

III.1. Cinématique de la collision

Dans notre travail, nous utilisons une géométrie coplanaire asymétrique, c.-à-d. que les deux électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision (\vec{k}_i, \vec{k}_s) et sont détectés avec des énergies très différentes, un électron diffusé d'énergie E_S proche de l'énergie incidente E_i et un éjecté d'énergie E_e plus faible.

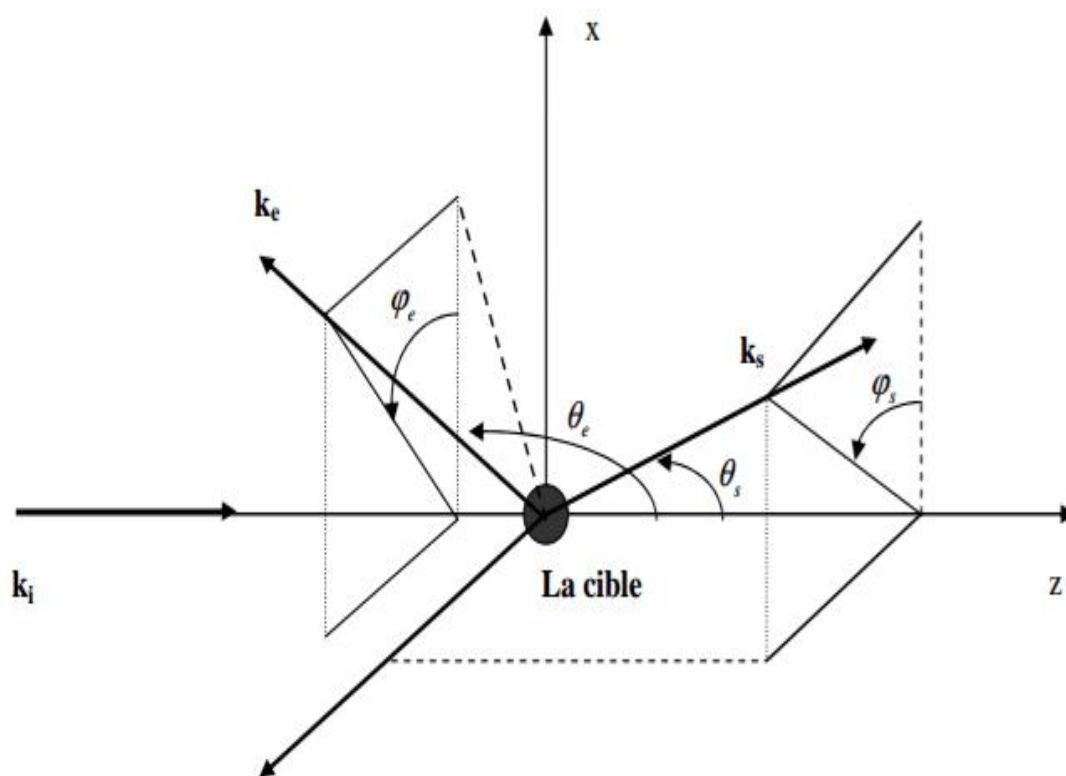


Figure III.1 : géométrie asymétrique coplanaire

III.2. Première approximation de Born AB

La première approximation de Born consiste à ne retenir que le premier terme du développement dans ce cas la SETD est donnée par :

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

f_{B1} L'amplitude de diffusion dans la première approximation de Born, elle s'écrit en unités atomiques ($\hbar = m_e = 1$) comme suit:

$$f_{B1} = \frac{-1}{2\pi} \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle$$

V représente le potentiel d'interaction entre l'électron incident et la cible moléculaire.

Ψ_i et Ψ_f sont respectivement les fonctions d'ondes des états initial et final.

III.3. Représentation des électrons du continuum

Le choix d'une bonne fonction d'onde décrivant les électrons du continuum joue un rôle important dans la description du processus étudié. Divers modèles ont été proposés dans le cadre des séries de Born pour décrire les états de continuum, parmi ces modèles :

III.3.1. Modèle de l'onde coulombienne : BA-10C

Dans le modèle de l'approximation de Born avec une onde coulombienne, l'électron éjecté sort de la collision avec une faible énergie (*cas de faible moment de transfert*). 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 confluyente.

$\eta = \frac{Z}{k_b}$ 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.4. Section efficace triplement différentielle de He

Nous étudions dans cette section l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique. Pour vérifier la méthode et le programme numérique. On trace la variation de la section efficace triplement différentielle de He pour des énergies d'incidente et de diffusion différentes.

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 $\theta_s = -6^\circ$.**

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° (lobe binaire) et le minimum à l'angle 230° (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.

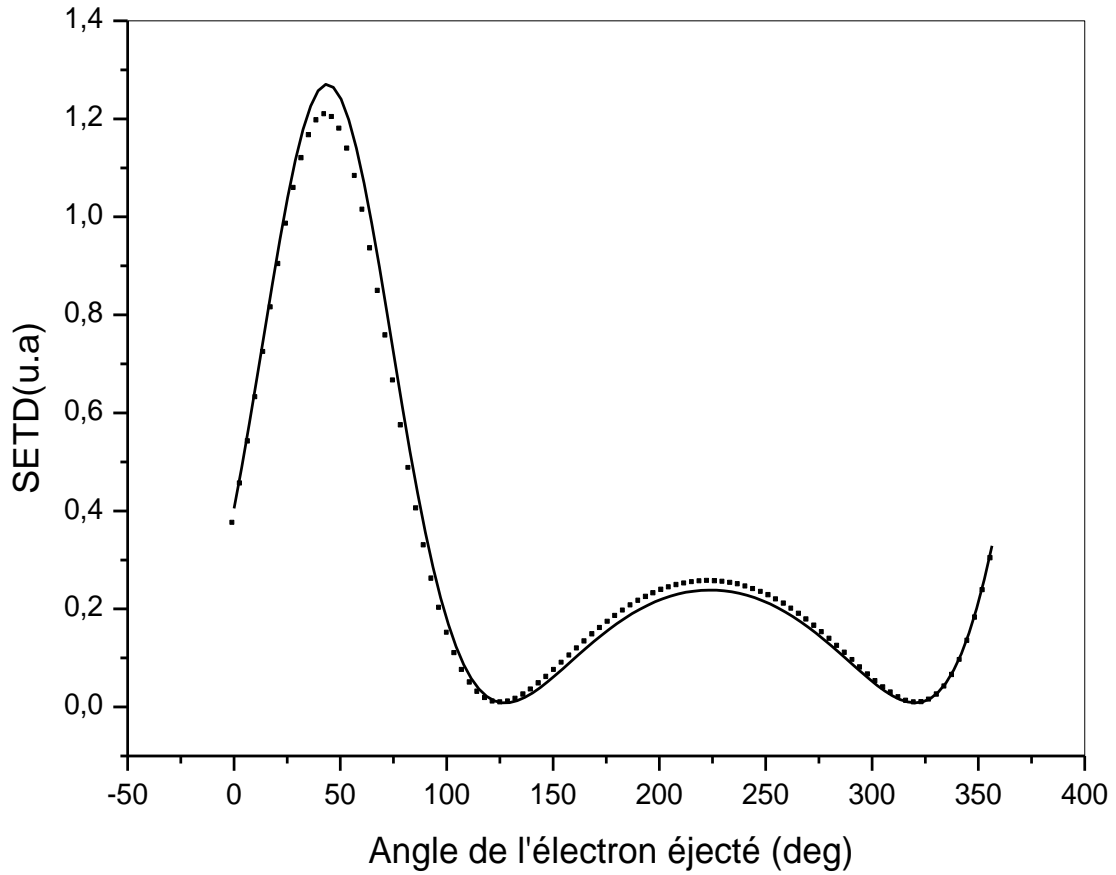


Figure III.2 : Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation simple de l'hélium en fonction de l'angle d'éjection θ_e , pour les deux modèles AB-OC (1e) et AB-OC(2e) : Ligne continue présente les résultats avec le modèle AB-OC(1e) et la ligne discontinue présente ceux du modèle AB-OC(2e) ($E_i = 250 \text{ eV}$, $E_e = 20 \text{ eV}$, $\theta_s = -6^\circ$).

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 en utilisant deux fonctions différentes pour décrire l'état lié de l'hélium qui sont :

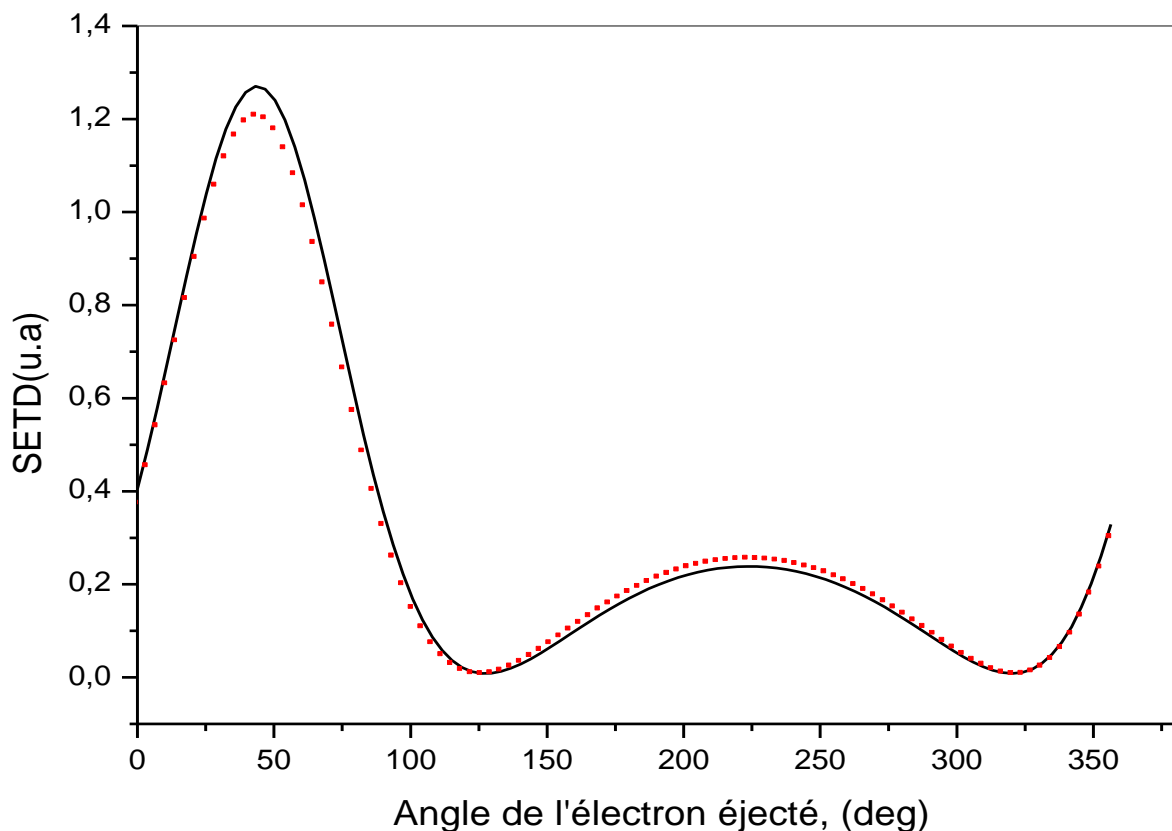
- **Fonctions de Hylleraas :** $\Psi_0^{nor} = \exp[-\alpha(r)]$
- **Fonction de Clémenti :** $\Phi(1) = a_1 1s_1 + a_2 1s_2 + a_3 1s_3 + a_4 1s_4 + a_5 1s_5$

Ce calcul 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 $\theta_s = -6^\circ$.**

Les résultats sont donnés dans la figure III.4, on remarque que le même comportement est obtenue avec les deux fonctions sauf dans le lobe binaire, donc on préfère d'utiliser la fonction de hylleraas qui réussit malgré sa forme simple de générer des bon résultats comme la fonction monocentrique de Clémenti.

Les résultats précédents nous permet de choisir la fonction simple de hylleraas pour décrire l'état d'un électron de l'hélium, ainsi de choisir le modelé AB-OC (1e) pour calculer la SETD d'ionisation simple de l'hélium dans un temps réduit.



- **Figure III.4 :** Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation simple de l'atome d'hélium par impact électronique tracée en fonction de l'angle d'éjection, ligne

continue présente la SETD avec la fonction de Clémenti et la ligne discontinue présente celui avec la fonction de Hylleraas ($E_i = 250 \text{ eV}$, $E_e = 20 \text{ eV}$, $\theta_s = -6^\circ$).

Le troisième calcul est réalisé pour trois conditions prises auparavant par naja [30], les résultats de calcul de la section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique est tracée en fonction de l'angle d'éjection 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 $E_i = 598.6 \text{ eV}$ est très élevée par rapport au potentiel d'ionisation, 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 des derniers trois figures, on remarque que le lobe de recul n'est 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 donc au faible transfert d'impulsion.

Les données de nos calculs sont comparées aux mesures expérimentales [30] dans la figure III.5, donc pour les conditions : $E_i = 598.6$, $E_e = 74 \text{ eV}$ et $\theta_s = -6^\circ$, on constate que le modèle AB-OC donne des résultats proches aux données expérimentales, sauf le lobe binaire est surestimé et mal localisé mais le lobe de recul est très bien reproduit.

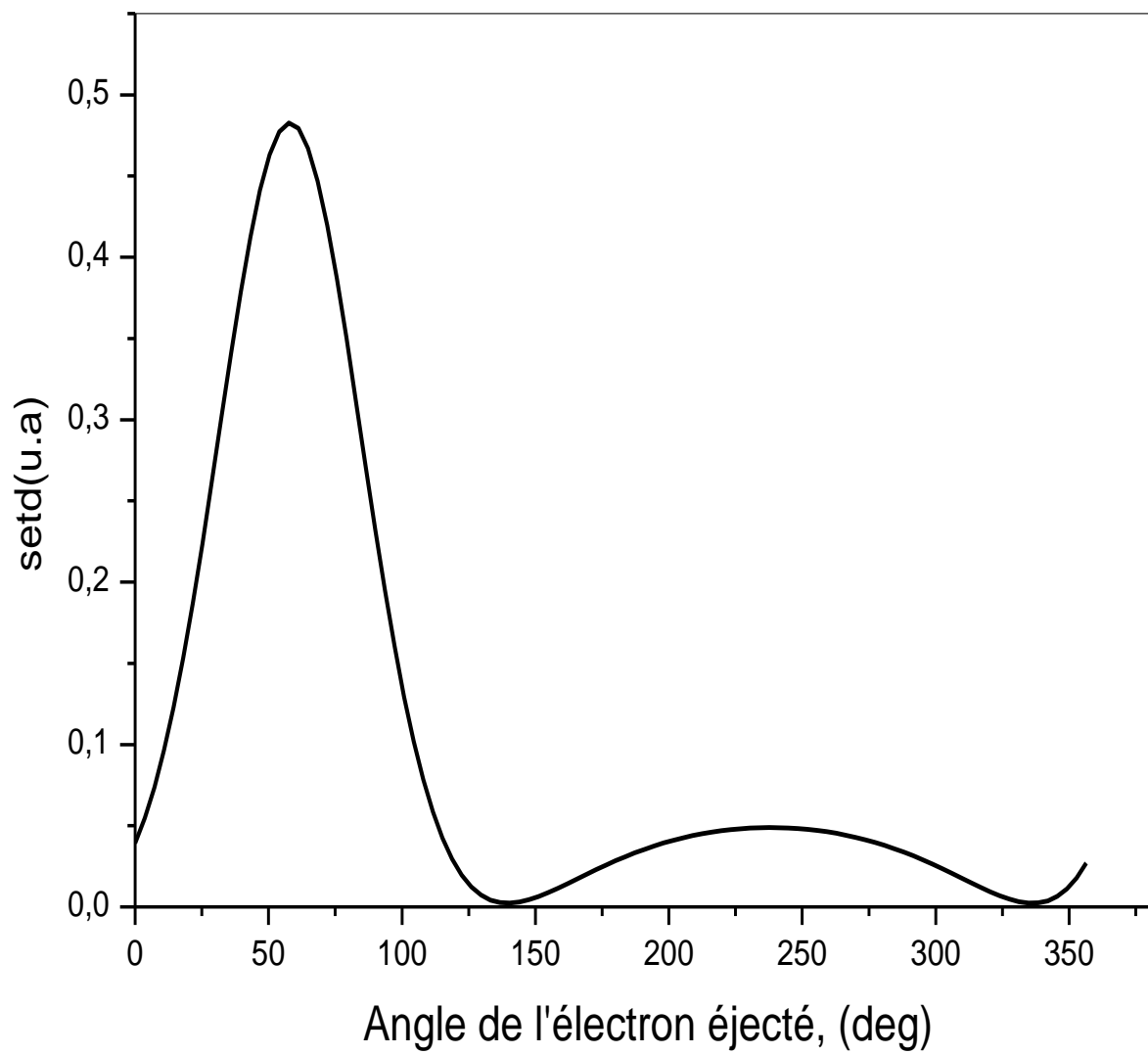


Figure III.3 : Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium, ($E_i = 561.5$, $E_s = 500 eV$, $E_e = 37 eV$, $\theta_s = -6^\circ$).

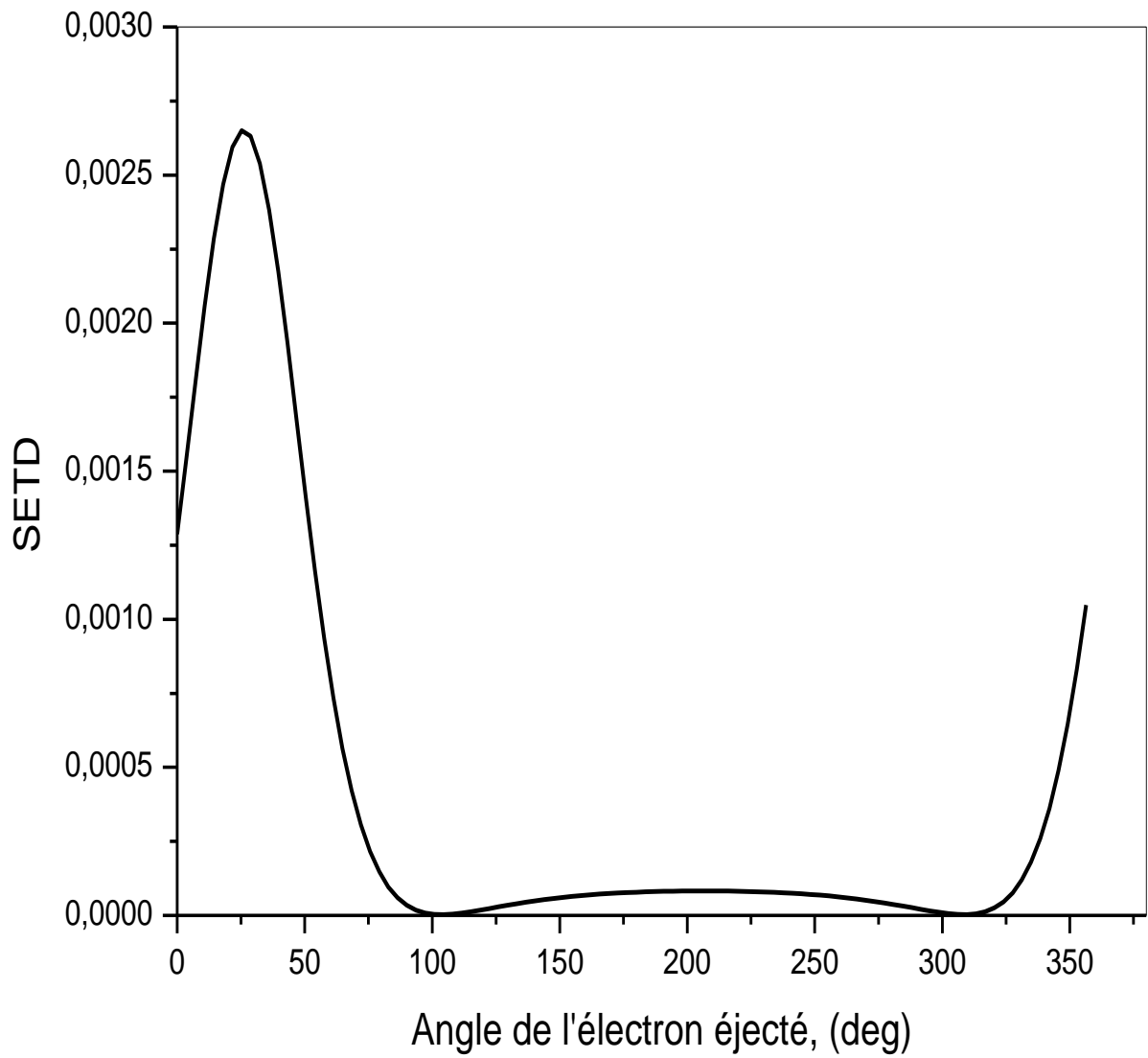


Figure III.4 : Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique tracée en fonction de l'angle d'éjection ($E_i = 729.6 \text{ eV}$, $E_s = 500 \text{ eV}$, $E_e = 205 \text{ eV}$ $\theta_s = -6^\circ$).

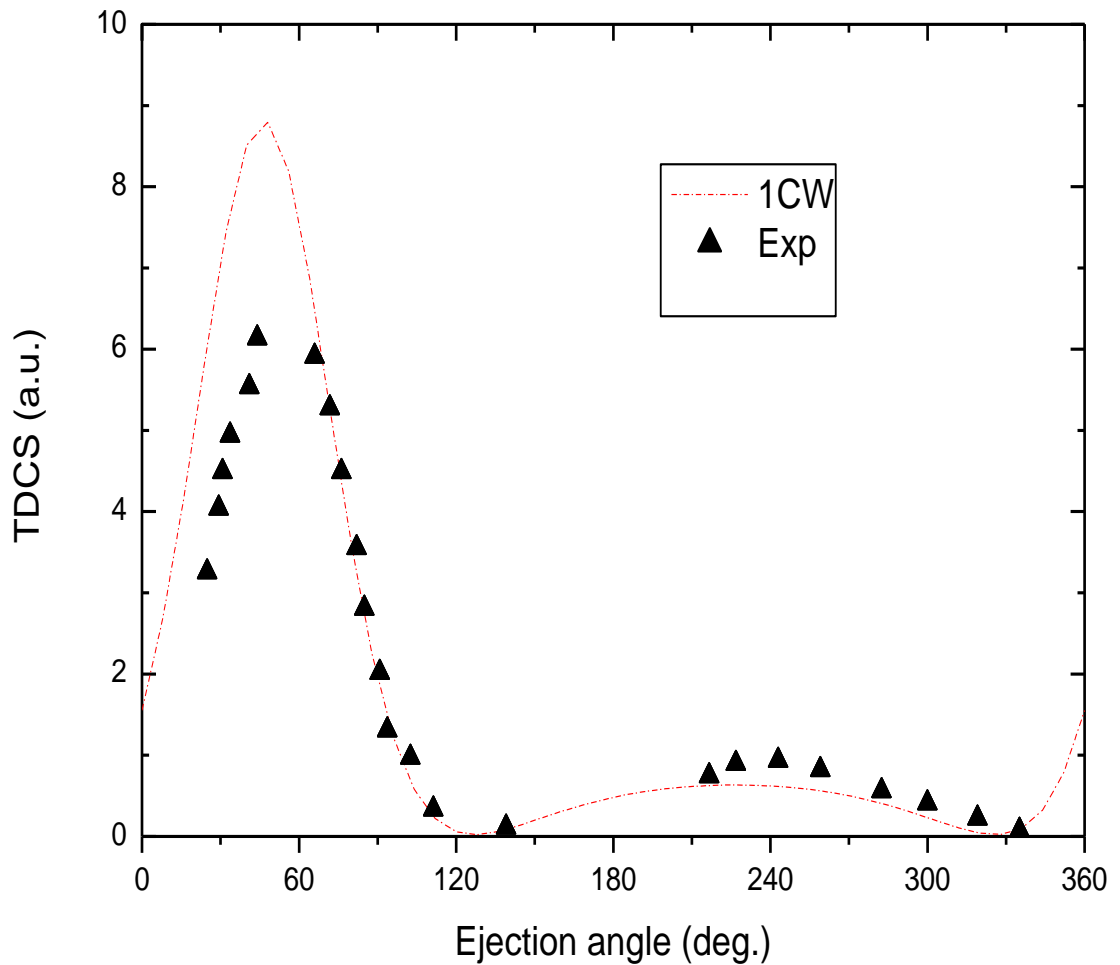


Figure III.5 :Section efficace triplement différentielle pour l'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique tracée en fonction de l'angle d'éjection ($E_i = 598.6$, $E_e = 74$ eV, $\theta_s = -6^\circ$)

Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons présenté les résultats de calcul de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation simple de He par impact électronique dans une cinématique asymétrie coplanaire et pour différentes situations géométriques et énergétiques, on a utilisé la première approximation de Born avec une seule onde coulombienne pour décrire l'électron éjecté, et les électrons rapides (incident et diffusé) sont présentés par une onde plane.

Dans la première partie en comparant entre les modèles AB-OC(1e) et AB-OC(2e), dans la deuxième partie on a pris deux fonctions pour décrire l'état S de l'hélium qui sont : fonctions de Hylleraas et de Clémenti. Dans la troisième partie trois situations énergétiques différentes sont prises avec une énergie d'incidence élevée et des énergies d'éjection différentes.

Pour le premier résultat nous avons trouvé que l'utilisation modèle d'un électron donne des résultats assez proche du modèle à deux électrons donc on peut utiliser ce modèle pour simplifier le calcul, ce dernier est aussi allégé avec la fonction de Hylleraas. Les courbes tracées dans la première approximation de Born pour les trois énergies décrivent bien l'expérience dans la région de recul mais ne décrivent pas correctement les données de l'expérience dans la région binaire. Nous avons trouvé un bon accord entre les mesures expérimentales et nos résultats théoriques précédents obtenus quand l'énergie d'incidence est grande et l'énergie d'éjection et l'angle de diffusion sont petits.

Conclusion générale

L'étude de l'ionisation simple ou multiple des cibles atomiques ou moléculaires par impact électronique, représente un des domaines les plus importants de la physique des collisions.

Les résultats de ces études sont importants pour la compréhension de la structure et la dynamique des réactions des particules. Les sections efficaces différentielles donnent plus de détail sur le processus d'ionisation 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.

Au second lieu on a utilisé deux fonctions pour décrire l'électron de l'hélium, la fonction monocentrique de Clémenti et la fonction de Hylleraas, cette dernière avec sa forme simple est suffisante pour mener le calcul de la section efficace triplement différentielle.

Au dernier lieu on a calculé la section efficace triplement différentielle pour différentes conditions énergétiques avec des énergies d'incidence élevées, et des énergies d'éjection différentes. En la comparant aux données expérimentales on a trouvé que notre modèle reproduit le lobe de recul mais reste incapable de reproduire le lobe binaire, ce qui nécessite l'utilisation de la deuxième approximation de Born.

Références

- [1] Rezallah Z I 2011 Thèse de doctorat en sciences, Université de Sétif.
- [2] Sahlaoui M 2012 Thèse de doctorat, Université de Abou-Bekr Belkaïd Tlemcen.
- [3] Nehaoua S 2016 Thèse de doctorat en sciences, Université de Sétif.
- [4] Goldberger M. L., and Watson K. M., (1967), < Collision Theory > (John Wiley & Sons, New York).
- [5] EL Boudali F 2001 Thèse de doctorat, Université de Metz.
- [6] Joachain J. C, Quantum Collision Theory, North-Holland publishing, (Amsterdam) (1983).
- [7] Nouredine Z, Quantum Mechanics concepts and applications (2009).
- [8] Mokrani S Thèse de doctorat en sciences, Université de Tizi-Ouzou.
- [9] Pochat A, Tweed R J, Peresse J, Joachain C J, Piraux B and Byron F W Jr 1983 J. Phys. B **16** L775.
- [10] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaas T and Willmann K 1969 Phys. Rev.Lett. **22** 89.
- [11] Brion C E 1986 Int. J. Quantum Chem. **2** 1397.
- [12] Beaty E C, Hesselbacher K H, Hong S P and Moore J H 1977 J. Phys. B **10** 611.
- [13] Messiah A, (1964), < Mécanique Quantique >, o me 2 edition (Dunod, Paris).
- [14] Najjari 8, (1997), Thèse d'université (Université de Metz).
- [15] M. Born, z. phys. 37, 863(1926).
- [16] Glauber R. J "lectures in theoretical physics" New-york interscience, 1,414(1959).
- [17] Bom M, Z. Phys. 37, 863, (1926).
- [18] Hladik J, Chrysos M, Hladik E P, Ancarani L u 'Mécanique quantique'. Dunod (2006).
- [19] C C Tannoudji, B Diu et F Laloë 'Mécanique quantique' TII Ed Hermann.
- [20] B H Bransden, C J Joachain 'physics atoms and molecules', longman Group limited 1983.
- [21] Mansouri A, Dal cappello C, kada I, champion C and, Roy A. C, phys. Lett. A 373, 3151(2009).
- [22] Champion C, Hanssen J, and Hervieux P. A, phys. Rev. A 72, 059906E (2005).
- [23] Byron F. W and Joachain C. J, Phys. Let. A. 24, 617(1967).
- [24] Abramowitz M and stegum I. Handbook mathematical function "New york : Dover" (1972).
- [25] Bethe H, Ann. Phys. (Leipzig) 5, 325(1930).

- [26] Hiroyuki N, Hiroshi N. THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS **127**, 224104 2007
- [27] Donald A, Mcquarrie 'Quantum chemistry' université de California, davis.
- [28] Clementi E and Roetti C 1974 At. Data Nucl. Data. Tables **14** 177.
- [29] Catoire F 2006 Thèse de doctorat, université Paris-Sud XI.
- [30] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 145201. (2008).

Résumé

Dans ce travail on fait l'étude de l'ionisation simple ($e, 2e$) de l'hélium atomique par impact électronique, qui présente un des domaines les plus importants de la physique des collisions. On a calculé la section efficace triplement différentielle (SETD) de la simple ionisation de He par la première approximation de Born, en utilisant le modèle du cœur gelé avec un électron actif ou deux pour réduire le nombre d'électron apparaissant de manière explicite dans les calculs. On a utilisé les fonctions de Hylleraas et de Clementi pour décrire les états liés de L'hélium.

Enfin, nous avons comparé les résultats obtenus par les deux modèles avec plusieurs résultats expérimentaux pour différentes conditions géométriques et énergétiques.

Abstract:

In this work we study the simple ionization ($e, 2e$) of atomic helium by electronic impact, which represents one of the most important domains of collision physics. The triple differential cross-section (SETD) of the simple He ionization was calculated by the first Born approximation, the core frozen model is used with one electron or two to reduce the electron number explicitly appearing in the calculations.

The functions of Hylleraas and Clementi have been used to describe the bound states of helium. Finally, we compared the results obtained by the two models with experimental results for different geometric and energetic conditions.

ملخص :

في ها العمل قمنا بدراسة التأين البسيط للهليوم الذري بواسطة تأثير الإلكترون، والتي تعد واحدة من أهم مجالات في فيزياء التصادم. المقطع العرضي التفاضلي الثلاثي لتأين البسيط للهليوم تم حسابه باستخدام التقريب الأول Born ونموذج القلب المتجمد مع الكترون النشط او اثنين للحد من عدد الالكترونات التي تظهر بشكل واضح في العمليات الحسابية .

استعمال دالتي hylleras و Clementis لوصف الهليوم.

وأخيرا، فإننا قمنا بمقارنة النتائج التي حصل عليها النموذجين مع العديد من النتائج التجريبية لمختلف الظروف الهندسية والحركية.