

# Université Cheikh Anta Diop de Dakar

\*\* \*\* \*\*

## Faculté des Sciences et Techniques

\*\* \*\* \*\*

### Département de Physique



### Mémoire de Diplôme d'Études Approfondies

Présenté par :

**Saïdou DIALLO**

et soutenue publiquement le 05 Décembre 2003

**Option :** PHYSIQUE

**Spécialité :** PHYSIQUE ATOMIQUE ET NUCLÉAIRE

*Contribution à l'Étude des Sections Efficaces Différentielle et Intégrale des Électrons et Atomes dans l'Approximation de Born : application à l'atome d'hélium et à l'atome d'hydrogène*

#### JURY

<b>Président :</b>	M. Chérif BADJI	Professeur
<b>Membres :</b>	MM. Christian Sina DIATTA	Professeur
	Ismaila DIEDHIU	Maître-assistant
	Benjamin MAMPASSI	Maître-assistant

**Année universitaire : 2002 - 2003**

# Université Cheikh Anta Diop de Dakar

\*\* \*\* \*\*

## Faculté des Sciences et Techniques

\*\* \*\* \*\*

### Département de Physique



Nom et Prénom : **DIALLO saïdou**

Sujet :

Contribution à l'Étude des Sections Efficaces Différentielle et Intégrale des Électrons et Atomes dans l'Approximation de Born : *application à l'atome d'hélium et à l'atome d'hydrogène*

Date de soutenance : Le 05 Décembre 2003

---

#### JURY

---

<b>Président :</b>	M.	Chérif BADJI	Professeur
<b>Membres :</b>	MM.	Christian Sina DIATTA	Professeur
		Ismaila DIEDHIOU	Maître-assistant
		Benjamin MAMPASSI	Maître-assistant

**Résumé :** Dans ce présent mémoire, nous présentons un calcul théorique de la section efficace différentielle et intégrale lors des collisions d'électrons avec les atomes. À titre d'exemple nous avons considéré deux atomes: l'atome d'hydrogène et l'atome d'hélium. Nous utilisons deux théories pour le calcul de l'amplitude de diffusion: la théorie de Born et la théorie de Faxen-Holtzmark. La théorie de Born est appliquée aux électrons possédant une grande énergie par rapport à celle des électrons atomiques. Dans la théorie de Faxen-Holtzmark les phases des ondes diffusées sont déterminées pour les valeurs faibles de l'énergie des électrons incidents. En fin nous avons confronté nos résultats à d'autres résultats théoriques et expérimentaux trouvés par d'autres auteurs.

**Mots-clés :** Section efficace, diffusion, déphasage, Approximation de Born

# Contents

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Théorie de Born</b>	<b>3</b>
2.1	Introduction . . . . .	3
2.2	Section efficace de diffusion . . . . .	3
2.3	Développement de Born . . . . .	8
2.4	Diffusion d'électrons rapides . . . . .	11
2.5	Section efficace de Rutherford . . . . .	16
2.6	Critère de validité de l'approximation de Born . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Théorie de Faxen-Holtzmark</b>	<b>21</b>
3.1	Introduction . . . . .	21
3.2	Amplitude de diffusion . . . . .	21
3.3	Détermination des phases . . . . .	24
3.4	Portée effective . . . . .	32
3.5	Théorème optique . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Collisions Inélastiques</b>	<b>39</b>
4.1	Introduction . . . . .	39
4.2	Amplitude de diffusion . . . . .	39
4.3	Conclusion . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>51</b>

<b>A Code Fortran pour les calculs</b>	<b>53</b>
A.1 Codes pour le chapitre premier . . . . .	53
A.2 Codes pour le chapitre deuxième . . . . .	56
A.3 Codes pour le chapitre troisième . . . . .	60
 <b>Bibliographie</b>	 <b>63</b>

# List of Figures

2.1	Diffusion d'un faisceau de particules B par une cible atomique A . . . . .	5
2.2	Représentation des vecteurs d'onde . . . . .	10
2.3	Étude de la section efficace différentielle . . . . .	13
2.4	Étude comparative de la section efficace différentielle aux faibles angles	15
2.5	Étude comparative de la section efficace différentielle . . . . .	17
2.6	Variation de la section efficace différentielle en fonction . . . . .	18
2.7	Étude de la section efficace intégrale en fonction de l'énergie . . . . .	20
3.1	Variation de la section efficace différentielle à 5 eV. . . . .	29
3.2	Variation de la section efficace différentielle à 18 eV. . . . .	30
3.3	Variation de la section efficace différentielle 30 à eV . . . . .	31
3.4	Variation de la section efficace intégrale dans l'approche de Faxen . . . . .	32
4.1	Variation de la section efficace différentielle d'excitation (H) . . . . .	46
4.2	Variation de la section efficace différentielle d'excitation ( $H_e^+$ ) . . . . .	47
4.3	Variation de la section efficace d'excitation de l'atome d'hydrogène . . . . .	48
4.4	Variation de la section efficace d'excitation de l'atome d'hélium . . . . .	49



# List of Tables

2.1	Comparaison de la section efficace différentielle . . . . .	14
2.2	Tableau comparative des valeurs théoriques et expérimentales . . . . .	16
2.3	Comparaison de la section efficace intégrale théorique . . . . .	19
3.1	Quelques valeurs comparatifs de la section efficace différentielle . . . . .	37
3.2	Valeurs comparatives de la section efficace différentielle . . . . .	38

## Introduction

En mécanique classique, la collision entre deux particules est complètement déterminée par leur vitesse et leur paramètre d'impact. La collision entre particules en mécanique quantique, est liée au calcul de la probabilité qu'à l'issue de la collision les particules dévient de tel ou tel angle. Le problème de la collision de deux corps se ramène au problème de la diffusion d'une particule de masse  $m$  dans le champs d'un centre de force. Nous négligeons l'interaction spin-orbitre si les particules sont douées de spin. Nous étudions le comportement asymptotique des particules, c'est-à-dire l'état dans lequel seront ces particules aux grandes distances. Toutes les grandeurs qui seront déterminées ne sont que des approximations de leurs valeurs exactes. Pour déterminer l'expression littérale de la section efficace différentielle, nous supposons que la fonction d'onde du faisceau d'électrons incidents est une fonction propre de l'énergie. A partir de la forme asymptotique de cette fonction d'onde, nous calculons le flux de particules diffusées. La section efficace de diffusion sera égale au rapport du flux diffusé par unité d'angle solide, par le flux incident par unité de surface.

Dans le premier chapitre, nous établissons le développement de Born de la fonction d'onde du système pour déduire l'expression de l'amplitude de diffusion. L'énergie des électrons incidents est comprise entre 100 et 800 électron-volts. Nous supposons que cette énergie se conserve pendant toute la durée de la collision. Dans le deuxième chapitre, nous calculons la section efficace différentielle aux faibles énergies des particules incidentes, comprises entre 5 et 30 électron-volts. Les résultats graphiques et numériques seront confrontés aux données expérimentales dans chaque cas. Nous étudions dans le troisième chapitre les collisions inélastiques. Nous nous intéressons



uniquement à la variation d'énergie des particules entrant en collision. Nous supposons qu'il n'y a pas d'échange entre l'électron incident et l'électron atomique, ni de capture. Nous représentons la variation de la section efficace intégrale d'excitation en fonction de l'énergie de l'électron incident. Nous prenons comme exemple de collisions inélastique l'excitation des atomes d'hydrogène et d'hélium ionisé.

# Chapter 2

## Théorie de Born

### 2.1 Introduction

La section efficace de diffusion peut être calculée sous la forme générale dans le cas où le champ diffusant peut être considéré comme une perturbation. Cette approximation correspond au cas où toutes les phases sont faibles. La fonction d'onde du système est la superposition d'une onde incidente et d'une onde divergente. L'idée à la base de la première approximation de Born est de considérer que lorsque l'énergie d'interaction est faible, alors la fonction de l'onde divergente l'est aussi par continuité [1]. Pour calculer la section efficace différentielle il nous faut trouver une expression explicite de la fonction d'onde divergente décrivant l'état des particules diffusées.

### 2.2 Section efficace de diffusion

On considère un faisceau monocinétique de particules avec lequel on bombarde une cible donnée (voir figure 2.1). Soient  $J$  la densité de flux incident,  $\rho$  la densité de particules par unité de volume dans le faisceau incident et  $v$  la vitesse d'ensemble des particules incidentes relativement à la cible. On négligera l'interaction entre les particules, ce qui impose de prendre une densité de particules relativement faible. Soit  $dn$  le nombre de particules diffusées dans l'unité de temps. Ce nombre est proportionnel au courant incident et à l'angle solide.

$$dn = \sigma(\Omega) J d\Omega \quad (2.1)$$

La grandeur  $\sigma(\Omega)$ , est la section efficace de diffusion de la particule par le centre diffuseur dans l'angle solide  $\Omega$ . On appelle plus précisément, section efficace différentielle de diffusion. Dans la plupart des cas pratiques, la cible est constituée d'un grand nombre  $N$  de diffuseurs atomiques ou nucléaires et les distances mutuelles de ces atomes ou de ces noyaux d'atomes sont suffisamment grandes par rapport à la longueur d'onde des particules incidentes par chacun d'eux. Chaque centre diffuseur agit alors comme s'il était seul. Cette circonstance n'est pas toujours réalisée. Les phénomènes de diffraction dans les cristaux sont des exceptions à cette règle : diffraction d'électrons, de neutrons thermiques ou de rayons X. Si, en outre, la cible est suffisamment mince pour qu'on puisse négliger la diffusion multiple,  $dn$  est alors proportionnel à  $N$ . On a

$$dn = N \sigma(\Omega) J d\Omega \quad (2.2)$$

En physique nucléaire où les centres diffuseurs ont des dimensions linéaires de  $10^{-12}$  cm, les sections efficaces se mesurent en barn ou en millibarn : 1 barn =  $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>, 1 mbarn =  $10^{-27}$  cm<sup>2</sup>.

L'intégration de la section efficace différentielle suivant toutes les directions donne la section efficace intégrale en fonction de la norme du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  des particules incidentes. Elle est notée  $\sigma(k)$ . On peut l'exprimer en fonction de l'énergie des particules incidentes  $E$ . La section efficace intégrale est égale au nombre total de particules diffusées par unité de temps [2]. Elle est donnée par :

$$\sigma = \int \sigma(\Omega) d\Omega \quad (2.3)$$

Le champ créé par une force centrale en un point donné ne dépend que de sa distance  $r$  au centre de force. L'hamiltonien de l'énergie totale du système électron - cible peut s'écrire alors :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \quad (2.4)$$

où  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$  est l'opérateur d'énergie cinétique de la particule incidente, celui de l'atome étant négligé du fait de la grande différence de masses.  $U(r)$  désigne l'énergie d'interaction, et  $\hbar$  est la constante réduite de Planck. Nous nous proposons de déterminer les états stationnaires d'une particule se déplaçant dans le champ  $U(r)$ . Soit  $\Psi$  la fonction d'onde décrivant l'état des particules en coordonnées sphériques. L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(r) \Psi = E \Psi \quad (2.5)$$

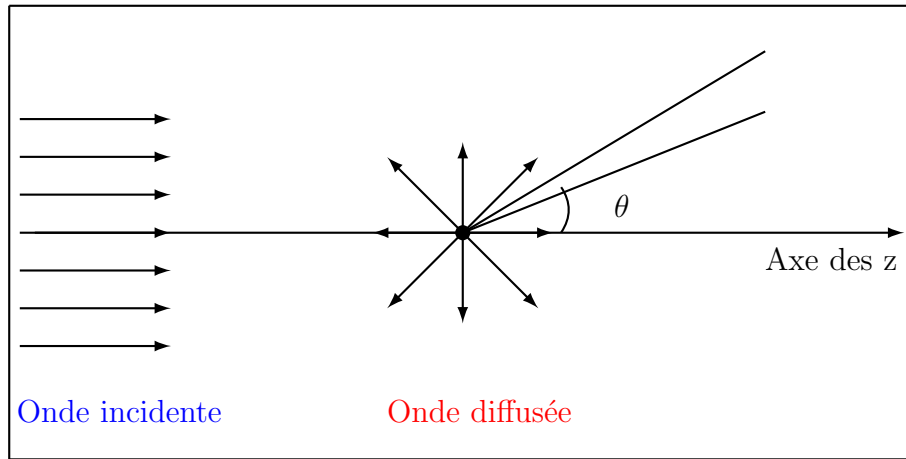


Figure 2.1: Diffusion d'un faisceau de particules B par une cible atomique A

où l'énergie cinétique des particules incidentes  $E$  peut s'écrire

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.6)$$

on posera par la suite

$$U(r) = \frac{\hbar^2}{2m} V(r) \quad (2.7)$$

On obtient finalement une équation de la forme :

$$\nabla^2 \Psi + k^2 \Psi = V \Psi \quad (2.8)$$

Par la suite, nous considérons partout dans cet exposé, sauf mention contraire, un système de coordonnées liées au centre d'inertie. Une particule libre se déplaçant dans le sens positif de l'axe des  $z$  est décrite par une onde plane. Les particules diffusées sont décrites loin du centre diffuseur par une onde sphérique divergente. Soit  $\Psi$  la superposition de l'onde incidente  $\Phi$  et de l'onde divergente  $\phi$ . On écrira alors :

$$\Psi(r, \theta) = \phi(r) + \Phi(r, \theta) \quad (2.9)$$

avec l'onde incidente définie par

$$\phi(r) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.10)$$

L'onde incidente étant dans le même sens que l'axe  $z$ , l'angle formé par le vecteur d'onde et le rayon vecteur est nul, ce qui implique qu'on a :  $\mathbf{k}\mathbf{r} = kz$ , donc  $\phi(r) = \phi(z)$ . L'équation (2.9) peut s'écrire comme suit :

$$\Psi(r, \theta) = e^{ikz} + \Phi(r, \theta) \quad (2.11)$$

Dans l'équation (2.10), nous avons choisi la normalisation de sorte que la densité de flux de l'onde incidente soit égale à la vitesse des particules incidente. On considère un faisceau monochromatique avant et après la collision pour pouvoir faire une caractérisation collectif des particules incidentes et diffusées. Les particules diffusées étant considérées comme divergentes, nous choisissons une fonction d'onde de la forme suivante qui décrit au mieux leur état réel [3]

$$\Phi(r, \theta) = f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (2.12)$$

La fonction  $f(\theta)$  représente l'amplitude de l'onde diffusée dans un angle  $\theta$  formé par l'axe des  $z$  et la direction des particules diffusées. Ainsi la fonction d'onde exacte, qui est solution de l'équation de Schrödinger (2.5) avec l'énergie potentielle  $U(r)$ , doit avoir aux grandes distance la forme asymptotique suivante :

$$\Psi(r, \theta) = e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (2.13)$$

Nous nous proposons à présent d'établir une analogie formelle entre l'équation de Schrödinger dépendant du temps et l'équation de continuité qui est utilisée en physique classique [4]. Pour calculer la densité de flux, nous allons considérer l'équation de Schrödinger non stationnaire de la formelle

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(r)\Psi \quad (2.14)$$

Soit  $\Psi^*$  le conjugué de  $\Psi$ , cette fonction d'onde vérifie également l'équation suivante :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + U(r)\Psi^* \quad (2.15)$$

Multiplions l'équation (2.14) par  $\Psi^*$  et l'équation (2.15) par  $\Psi$ . En faisant la soustraction membre à membre on trouve

$$\frac{\partial (\Psi \Psi^*)}{\partial t} = \nabla [\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi] \quad (2.16)$$

Cette dernière équation peut se mettre sous la forme condensée

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \mathbf{J} = 0 \quad (2.17)$$

En comparant les équations (2.16) et (2.17) on a  $w = \Psi \Psi^*$  qui représente la densité de probabilité et  $\mathbf{J}$  le vecteur densité de flux. La probabilité de présence d'une particule

est plus grande là où la densité est la plus importante. Dans cette approche la densité de probabilité peut être assimilée à la densité du nombre de particules. En établissant une analogie entre l'équation de continuité (2.17) et l'équation (2.16), on voit que l'équation de Schrödinger représente une certaine forme d'équation de continuité à condition d'introduire le vecteur densité de flux de probabilité [4]

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi] \quad (2.18)$$

En assimilant  $w$  à une densité du nombre de particules, le vecteur donné par l'équation (2.18) peut être considéré comme le flux de particules. En adoptant cette interprétation des vecteurs, l'équation de continuité quantique (2.16) exprime la condition de conservation du nombre de particules. Remarquons, pour conclure, que l'on ne doit pas attribuer au vecteur quantique  $\mathbf{J}$  la signification d'un flux proprement dit, puisque pour définir un flux réel on doit pouvoir déterminer en des points donnés de la surface des valeurs de la vitesse ou de l'impulsion. Ce qui est en contradiction avec la relation d'incertitude d'Heisenberg. A partir de la relation (2.18) on peut calculer les différentes densités de flux. Soient  $\mathbf{J}_z$  et  $\mathbf{J}_{r,\theta}$  respectivement le flux de particules incidentes et diffusées. On aura pour ces deux vecteurs :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_z &= \frac{i\hbar}{2m} [\phi(z) \nabla \phi^*(z) - \phi^*(z) \nabla \phi(z)] \\ &= \frac{\hbar k}{2m} (2 \|\phi(z)\|^2) = \frac{\hbar k}{m} = v, \end{aligned} \quad (2.19)$$

où  $v$  est la vitesse des particules incidentes.

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{r,\theta} &= \frac{i\hbar}{2m} [\Phi(r, \theta) \nabla \Phi^*(r, \theta) - \Phi^*(r, \theta) \nabla \Phi(r, \theta)] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \|f(\theta)\|^2 \left( -\frac{2ik}{r^2} \right) = \frac{v}{r^2} \|f(\theta)\|^2 \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dans l'expression (2.20) nous avons négligé les termes d'ordre supérieurs en  $r$ . Le nombre de particules qui traversent la surface élémentaire  $ds$ , doit être proportionnel au flux  $J_{r,\theta}$  et à  $ds$ , d'où on a :

$$dn = J_{r,\theta} ds = \frac{v}{r^2} \|f(\theta)\|^2 \quad (2.21)$$

Ce qui nous donne en utilisant l'équation (2.1), l'expression de la section efficace différentielle

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \|f(\theta)\|^2. \quad (2.22)$$

La section efficace différentielle est égale à la norme au carré de l'amplitude de diffusion. D'après l'équation (2.22) on se rend compte que la section efficace différentielle n'est rien d'autre que la probabilité pour qu'une particule soit diffusée dans l'unité de temps à travers  $ds$ .

## 2.3 Développement de Born

Jusqu'à présent, la fonction d'onde a été définie comme étant la solution de l'équation de Schrödinger. Nous allons montrer que c'est aussi une solution d'une certaine équation intégrale. Cette nouvelle définition va nous permettre d'écrire  $\Psi$  sous la forme d'un développement en puissance de  $V(r)$ , et d'évaluer les corrections à l'approximation de Born. A cet effet, introduisons l'identité suivante :

$$(\Delta + k^2) \frac{e^{ikr}}{r} = -4\pi \delta(r), \quad (2.23)$$

considérée comme une distribution au sens de Schwartz,  $e^{ikr}/r$  est dérivable à tous les ordres. Pour calculer son laplacien, on se sert de la relation suivante :

$$\Delta \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta(r), \quad (2.24)$$

et de la propriété d'application du laplacien à un produit de fonction à savoir :

$$\Delta(fg) = (\Delta f)g + 2(\nabla f)(\nabla g) + f(\Delta g) \quad (2.25)$$

Considérons la fonction définie par

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (2.26)$$

Cette fonction possède la propriété suivante :

$$(\Delta + k^2) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.27)$$

$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  est la fonction de Green de la particule libre d'énergie  $E$ .

$$G^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \quad (2.28)$$

est la fonction complexe conjuguée décrivant l'onde entrant et possède la même propriété que  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ . Soit  $\Phi(r)$  la solution de l'équation de Schrödinger de la particule

libre. Toute fonction  $\Psi(r)$  résultant de la superposition de l'onde incidente et de l'onde diffusée, peut être écrite sous la forme suivante :

$$\Psi(r) = \Phi(r) + \int d^3 r' G(r, r') V(r') \Psi(r') \quad (2.29)$$

avec  $d^3 r' = dx' dy' dz'$  l'élément de volume. La solution (2.29) vérifie l'équation de solution donnée par la relation (2.5). pour avoir le développement de Born, nous allons utiliser la méthode itérative dans l'équation (2.29), on obtient :

$$\begin{aligned} \Psi(r) = & \Phi(r) + \int d^3 r' G(r, r') V(r') \Psi(r') \\ & + \int d^3 r' \int d^3 r'' G(r, r') V(r') G(r', r'') V(r'') \Psi(r'') \end{aligned} \quad (2.30)$$

Pour écrire le n<sup>ième</sup> terme du développement de  $\Psi$  nous posons :

$$I_1(r, r') = G(r, r') V(r') \quad (2.31)$$

$$I_2(r, r') = \int d^3 r'' G(r, r') V(r') G(r', r'') V(r'') \quad (2.32)$$

On peut réécrire  $I_2(r, r')$  sous la forme suivante

$$I_2(r, r') = \int d^3 r'' I_1(r, r') G(r', r'') V(r'') \quad (2.33)$$

Or la quantité n'est rien d'autre que  $I_1(r', r'')$  d'où la relation de récurrence

$$I_n(r, r') = \int d^3 r'' I_1(r, r') I_{n-1}(r, r') \quad (2.34)$$

Ce qui nous permet d'écrire  $\Psi$  sous la forme condensée valable pour tous les ordres

$$\Psi(r) = \Phi(r) + \sum_{n=2}^{\infty} \int d^3 r' I_n(r, r') \Phi(r') \quad (2.35)$$

Cette relation est le développement de Born de l'onde stationnaire de la diffusion. A présent, cherchons la forme asymptotique de  $\Psi$  lorsque  $r \rightarrow \infty$

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cong r - \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{r}' + \frac{r'^2}{2r} \quad (2.36)$$

Puisque  $r$  est très grand de  $r'$  on peut écrire

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cong r - \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \mathbf{r}' \quad \text{et} \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \cong r \quad (2.37)$$



En portant ces expressions dans les équations (2.26) et (2.29) et en s'arrêtant au premier ordre du développement de la relation (2.29) l'expression de  $\Psi(r)$  devient :

$$\Psi(r) = \Phi(r) - \frac{1}{4\pi} \int d^3 r' \frac{e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}}{r} V(r') \Phi(r') \quad (2.38)$$

en remplaçant les expressions de  $\Phi(r)$  et  $\Phi(r')$  par des ondes planes dans l'équation précédente on aboutit à

$$\Psi(r) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3 r' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(r') \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}}{r'} \quad (2.39)$$

On remarquera que  $\mathbf{k} = k \frac{\mathbf{r}}{r}$  et où  $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ . Pour les collisions élastiques nous avons  $k = k'$ , la norme du vecteur est donnée par :

$$K = 2k \sin(\theta/2) \quad (2.40)$$

Dans la figure 2.2 nous représentons les différents vecteurs coplanaires avant et après la collision. En égalant les équations (2.39) et (2.35) on trouve pour l'amplitude de

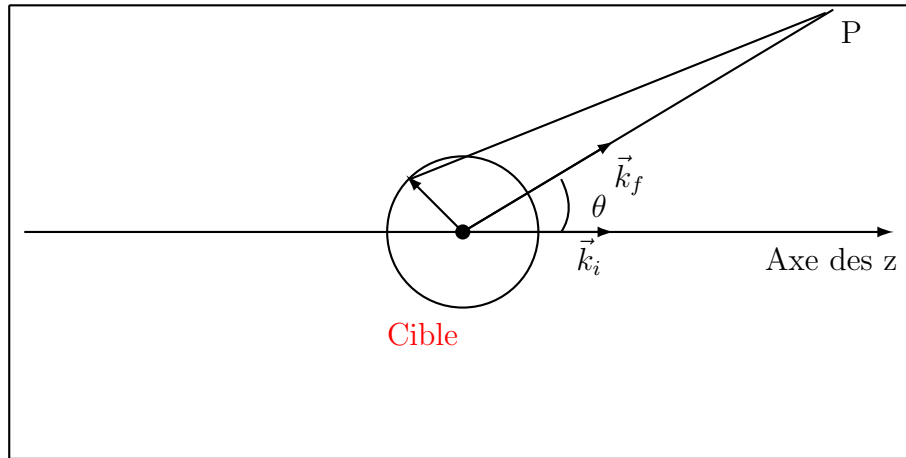


Figure 2.2: Représentation des vecteurs d'onde incident, diffusé et le moment transféré durant la collision par le projectile à la cible.

diffusion à l'approximation de Born " First Born Approximation " une expression de la forme :

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}'} V(r'). \quad (2.41)$$

En utilisant la notation de Dirac, cette relation devient

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \langle \Phi'(r) | V(r) | \Phi(r) \rangle \quad (2.42)$$

$$\Phi(r) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.43)$$

$$\Phi'(r) = e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} \quad (2.44)$$

Ces deux fonctions décrivent l'état du projectile avant et après la collision respectivement. En utilisant les unités atomiques et en se servant de l'équation (2.7), l'amplitude de Born devient

$$f(\theta) = -\frac{1}{2\pi} \langle \Phi'(r) | U(r) | \Phi(r) \rangle \quad (2.45)$$

Le potentiel d'interaction peut être modélisé selon la nature des particules entrant en interaction.

## 2.4 Diffusion d'électrons rapides

Les collisions élastiques d'électrons rapides peuvent être traités dans l'approximation de Born si la vitesse du projectile est assez grande par rapport aux vitesses des électrons de la cible. Etant donnée la grande différence entre la masse de l'électron et celle de l'atome, ce dernier peut être considéré comme statique durant la collision. On ne tient pas compte des effets d'échange possible entre l'électron diffusé et les électrons atomiques, c'est à dire que nous ne symétrisons pas la fonction d'onde du système [4]. Dans ce paragraphe, nous calculons les sections efficaces différentielles et intégrales en utilisant le potentiel de Yukawa appelé aussi potentiel "écrané" défini par :

$$U(r) = \frac{U_0}{r} e^{-\alpha r} \quad (2.46)$$

où  $U_0$  et  $\alpha$  sont des constantes réels.  $\alpha$  étant de plus positive. Ce potentiel sera attractif ou répulsif suivant que la profondeur  $U_0$  soit négative ou positive. La portée du potentiel est définie comme égale à l'inverse de  $\alpha$ . La relation (2.45) donnant l'expression de l'amplitude de diffusion devient après intégration en tenant compte du potentiel de Yukawa (2.46)

$$f(\theta) = -\frac{2U_0}{\alpha^2 + K^2} \quad (2.47)$$

D'où la section efficace différentielle

$$\sigma(k, \theta) = \frac{4U_0^2}{(\alpha^2 + K^2)^2} \quad (2.48)$$

On peut exprimer la section efficace différentielle en fonction de  $k$  en utilisant la relation (2.40) pour avoir

$$\sigma(k, \theta) = \frac{4 U_0^2}{(\alpha^2 + 4 k^2 \sin^2(\theta/2))^2} \quad (2.49)$$

avec  $U_0 = Z e^2$  où  $Z$  est le numéro atomique de l'atome. L'expression de la section efficace différentielle en fonction de l'énergie de la particule incidente sera en remplaçant la norme du vecteur d'onde  $k$  par l'énergie  $E$ :

$$\sigma(k, \theta) = \frac{4 Z^2}{(\alpha^2 + 8 E^2 \sin^2(\theta/2))^2} \quad (2.50)$$

Dans l'équation (2.50), la section efficace différentielle est exprimée en unités atomiques. La section efficace différentielle correspondante aux particules non déviées se déduit de l'équation (2.50) en posant  $\theta = 0$ ,

$$\sigma(k, \theta) = 4 \frac{Z^2}{\alpha^4} \quad (2.51)$$

On remarque qu'à partir de l'expression de la section efficace différentielle donnée par l'équation (2.50), la nature attractif ou répulsive du potentiel de Yukawa n'a aucune incidence sur la valeur de la section efficace différentielle, du moins dans la première approximation de Born.

Dans la figure 2.3, nous représentons la variation de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion des particules incidentes pour différentes valeurs du paramètre  $\alpha$ . La section efficace différentielle est exprimée en  $a_0^2$  par stéradian, où  $a_0$  est le rayon de Bohr. Pour tracer ces différentes graphes, nous avons utilisé l'expression de la section efficace différentielle de l'équation (2.50). Dans l'intervalle  $[0, 15]$  degrés, les courbes diffèrent pour chaque valeur l'inverse de la portée du potentiel  $\alpha$ . Néanmoins leur allure reste identique dans le domaine de définition. Au delà de 15 degrés les différentes courbes tendent vers les mêmes valeurs. Dans le premier domaine d'angles le potentiel écranté est largement dominant, tandis que pour les collisions fortes l'interaction est purement coulombienne.

Dans le tableau 2.1, nous donnons les valeurs calculées de la section efficace différentielle obtenue par l'équation (2.50). Les calculs sont faits avec la valeur de  $\alpha = 1.96$  u.a. Les résultats obtenus sont comparés aux valeurs théoriques de Bryon et al. [5] avec une moyenne d'erreurs de 14.48 %. Nous remarquons une meilleure concordance de

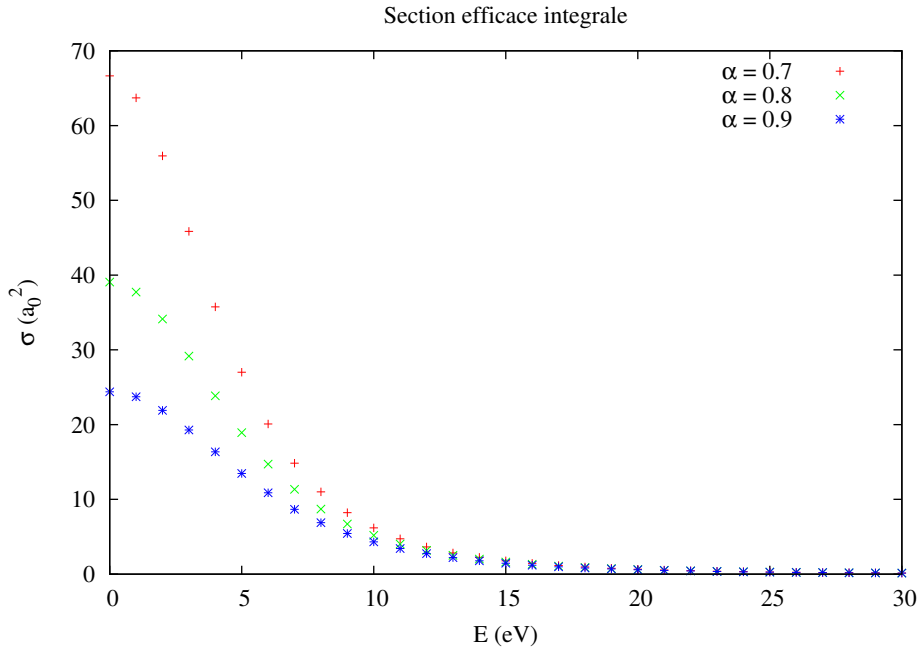


Figure 2.3: Étude de la section efficace différentielle  $\sigma(E, \theta)$  en fonction de l'angle de diffusion  $\theta$  pour différentes valeurs de la portée du potentiel de Yukawa et pour une énergie des électrons incidents égale à  $E = 500$  eV. Cette section efficace différentielle correspond à la diffusion des électrons par un atome d'hélium dans le champ de Yukawa.

nos résultats avec les données expérimentales de Jansen et al. [6] et de Bromberg [7], respectivement avec une moyenne d'erreurs de 7.5 % et de 5.79 %. La figure 2.4 représente la variation de la section efficace différentielle aux faibles angles de diffusion. Nous représentons également les valeurs expérimentales de Jansen et al., et de Bromberg. Nous avons considéré la diffusion d'un électron d'énergie égale à 500 eV par l'atome d'hélium. Pour tout angle supérieur ou égale à 20 degrés, l'approximation de Born aux grandes énergies donne des résultats satisfaisants. En effet nous avons une bonne concordance avec les résultats expérimentaux obtenus par Bromberg et al. d'une part et par Bryon et al. d'autre part.

Dans le tableau 2.2, nous avons consigné les sections efficaces différentielles en fonction de l'angle de diffusion. Les calculs sont faits pour la valeur de  $\alpha = 1.42$  en unités atomiques. Les résultats obtenus sont comparés avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux. La moyenne d'erreurs est d'environ de 8 % par rapport aux calculs

$\theta^\circ$	Présent Travail	Bryron et al.	Jansen et al.	Brombers
00	1.0842	1.9800		
05	0.9420	0.9340	0.9060	0.9470
10	0.6508	0.5630	0.5500	0.3630
15	0.3973	0.3560	0.3550	0.3630
20	0.2337	0.2230	0.2290	0.2260
25	0.1390	0.1400	0.1460	0.1430
30	0.0854	0.0890	0.0933	0.0915
40	0.0362	0.0339	0.0412	0.0410
	M. E (%)	14.480	07.540	05.790

Table 2.1: Comparaison des valeurs théoriques calculées dans ce présent travail et expérimentales de la section efficace différentielle en u.a. M. E (%) est la moyenne d'erreurs de nos résultats par rapport aux aux données.

théoriques de Bryon et al. et aux données expérimentales de Oda et al. [8]. Parcontre, elle est de 13.87 % par rapport aux résultats expérimentaux de Sethuraman et al. [9]. Dans la figure 2.5 nous représentons la variation de la section efficace différentielle aux grands angles de diffusion. Nous avons utilisé l'expression de la section efficace différentielle donnée par l'équation (2.50) pour tracer le graphe représentatif de la section efficace différentielle. Nous étudions la diffusion d'un électron d'énergie égale à 500 eV par l'atome d'hélium. Nous représentons également les valeurs théoriques de Bryon et al., et les valeurs expérimentales de Sethuraman et al. La figure 2.5 vient de confirmer ce que nous venons de dire concernant les données de la figure 2.4 à savoir la bonne précision de la théorie de Born que nous avons développée. On a des résultats conformes à ceux obtenus expérimentalement par Sethuraman et al., et à partir de la théorie utilisée par Bryon et al. connue sous le de *ab initio optical model*.

Dans la figure 2.6, nous représentons la variation de la section efficace différentielle en fonction de l'énergie de l'électron indent pour quelques valeurs de l'angle de diffusion. Ces graphes de la figure 2.6 montrent qu'aux grandes énergies la section efficace différentielle est une une fonction décroissante à la fois de l'énergie des particules incidentes et de l'angle de diffusion. En intégrant la section efficace différentielle donnée par l'équation (2.50) dans toutes les directions possibles on obtient la section efficace

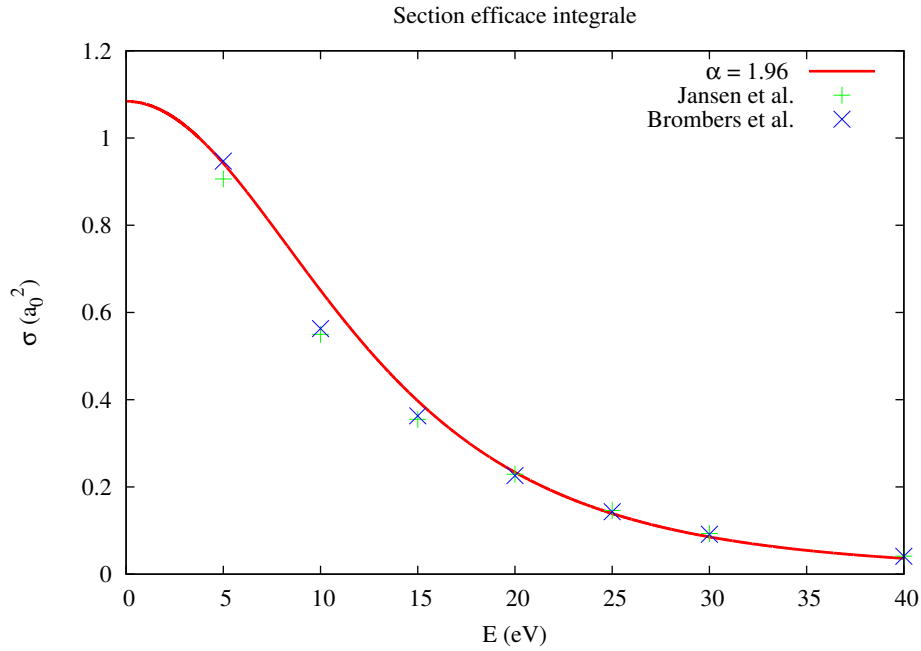


Figure 2.4: Étude comparative de la section efficace différentielle  $\sigma(E, \theta)$  aux faibles angles de diffusion

intégrale en fonction de l'énergie.

$$\sigma(E) = 4 Z^2 \int_0^\pi \frac{2 \pi \sin(\theta) d\theta}{(\alpha^2 + 8 E^2 \sin^2(\theta/2))^2} \quad (2.52)$$

Après intégration on obtient l'expression finale de la section efficace intégrale de la forme suivante :

$$\sigma(E) = \frac{16 \pi Z^2}{\alpha^2 (\alpha^2 + 8 E)} \quad (2.53)$$

La section efficace correspondante à une énergie nulle ( $E = 0$ ) est obtenue de (2.53)

$$\sigma(E) = \frac{16 \pi Z^2}{\alpha^4} \quad (2.54)$$

Dans le tableau 2.3, nous donnons les valeurs calculées de la section efficace intégrale obtenue par l'équation (2.53). Les calculs sont faits pour la valeur de  $\alpha$  égale à l'unité atomique. Le tableau comporte outre nos données, d'autres résultats théoriques et expérimentaux. Nous avons une moyenne d'erreurs d'environ 11.9 % par rapport aux valeurs théoriques de Bryronet al. et aux valeurs expérimentales de de Heer et Jansen [10]. Dans la figure 2.7, nous représentons la variation de la section efficace intégrale en fonction de l'énergie de l'électron incident. Nous avons également représenté les

$\theta^\circ$	Présent Travail	Bryron et al.	Oda et al.	Sethuraman et al.
40	4.33 (-2)	3.39 (-2)	4.28 (-2)	4.13 (-2)
50	2.00 (-2)	1.95 (-2)	2.05 (-2)	1.85 (-2)
60	1.06 (-3)	1.08 (-3)	1.16 (-3)	1.11 (-3)
70	6.30 (-3)	6.58 (-3)	7.20 (-3)	6.10 (-3)
80	4.10 (-3)	4.30 (-3)	4.75 (-3)	3.83 (-3)
90	2.80 (-3)	3.10 (-3)	3.15 (-3)	2.54 (-3)
100	2.10 (-3)	2.22 (-3)	2.10 (-3)	1.78 (-3)
110	1.60 (-3)	1.71 (-3)	1.51 (-3)	1.31 (-3)
120	1.30 (-3)	1.36 (-3)	1.15 (-3)	0.93 (-3)
130	1.10 (-3)	1.16 (-3)	0.95 (-3)	0.73 (-3)
140	0.90 (-3)	1.01 (-3)	0.95 (-3)	0.73 (-3)
150	0.80 (-3)	9.04 (-4)		0.67 (-3)
	M. E (%)	07.83	07.97	13.87

Table 2.2: Tableau comparative des valeurs théoriques et expérimentales de la section efficace différentielle. Les nombres entre parenthèses représentent les puissances de 10. L'énergie des électrons incidents est  $E = 500$  eV.

valeurs expérimentales de de Heer et Jansen, et les valeurs théoriques de Bryron et al. La section efficace intégrale décrit de manière progressive au fur et à mesure que l'énergie des électrons incidents augmente. La théorie s'écarte de l'expérience pour de faibles valeurs de l'énergie. Pour les électrons rapides la théorie reste conforme aux données expérimentales. Plus l'électron traîne au voisinage de la cible, c'est à dire plus le temps de collision est long, plus la cible est perturbée. Ce qui provoque une modification de son état interne. Or, nous avons supposé dès le départ que l'état interne de la cible reste inchangé durant la collision. Cette hypothèse reste valable que pour des perturbations faibles, donc pour un temps de collision relativement court.

## 2.5 Section efficace de Rutherford

Pour retrouver la formule de Rutherford établie en mécanique classique, nous considérons le cas extrême de collisions fortes pour lesquelles le facteur d'écran est néglige-

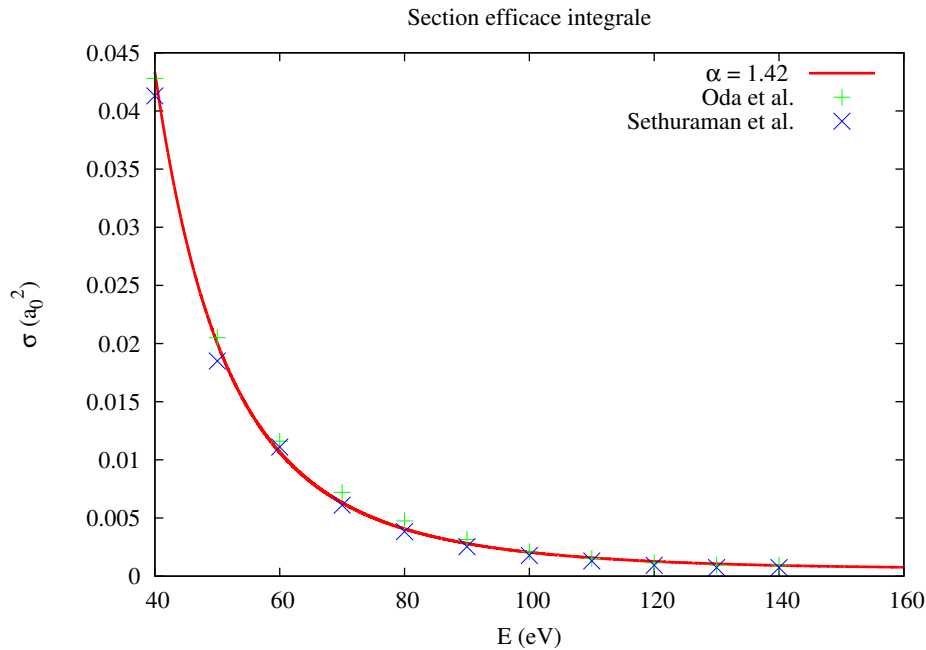


Figure 2.5: Étude comparative de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion.

able. Mathématiquement cela s'obtient tendre  $\alpha \rightarrow 0$ . On tire de l'expression donnant l'amplitude de diffusion; celle de Rutherford correspondante est égale à

$$f(\theta) = -\frac{2Z}{K^2} \quad (2.55)$$

L'amplitude est exprimée en unité atomique. Le carré de cette amplitude nous donne l'expression de la section efficace différentielle. En remplaçant  $K$  par sa valeur, on trouve :

$$\sigma_{\text{ruth}}(\theta) = \frac{Z^2}{2k^2} \sin^{-4}(\theta/2) \quad (2.56)$$

On note dans l'expression de la section efficace différentielle de Rutherford les propriétés remarquables de la diffusion coulombienne suivantes :

- ✓ elle dépend uniquement de la valeur absolue du potentiel et non de son signe,
- ✓ à angle donné, la section efficace différentielle décroît comme  $1/k^4$  lorsque l'énergie augmente
- ✓ la section efficace différentielle diverge aux petits angles c'est à dire qu'elle tend vers l'infini quand  $\theta \rightarrow 0$ . Cette divergence est caractéristique du champ coulombien pur. Dans la diffusion d'une particule chargée par un noyau atomique, le champ coulombien dû aux noyaux est progressivement neutralisé lorsque les distances augmentent,



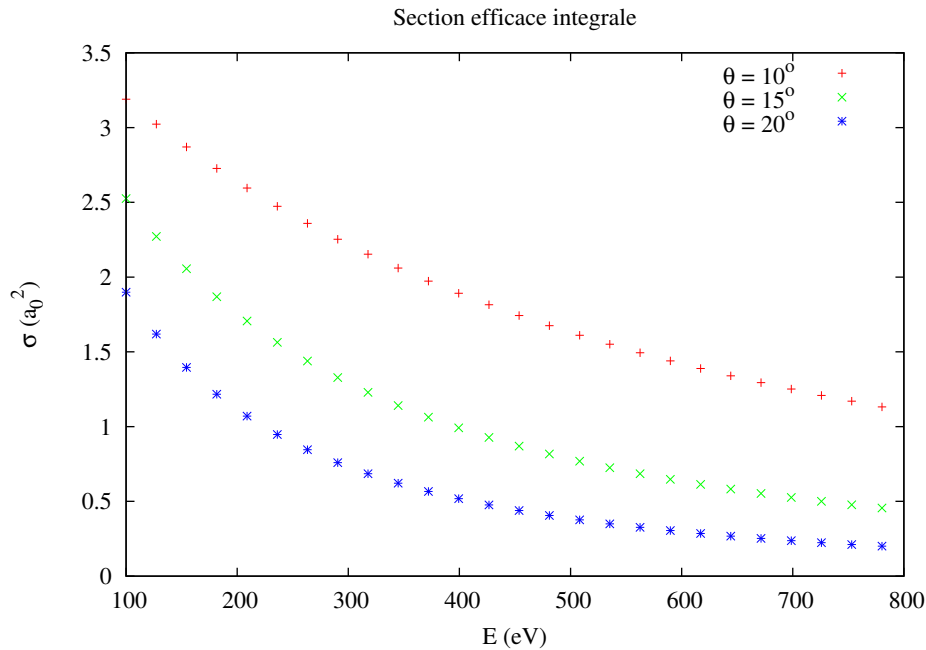


Figure 2.6: Variation de la section efficace différentielle en fonction de l'énergie des électrons incidents pour différentes valeurs de l'angle de diffusion.

par celui du cortège électronique. Le potentiel devient presque nul à des distances suffisamment grandes par rapport aux dimensions de l'atome. Cette effet d'écran se traduit par une modification de l'onde diffusée aux petits angles où la section efficace différentielle ne diverge plus [2].

## 2.6 Critère de validité de l'approximation de Born

Certaines conclusions d'ordre général peuvent être tirées des relations (2.51) et (2.56) pour ce qui concerne le comportement des sections efficaces différentielles aux hautes énergies. La section efficace différentielle n'est relativement importante que dans la région où  $K \ll 1/\alpha$ . D'après l'équation (2.40), cette région correspond aux angles de diffusion telles que :

$$\sin(\theta/2) \leq \frac{\alpha}{2k} \quad (2.57)$$

A hautes énergies c'est à dire ( $k \gg \alpha$ , cette zone se trouve essentiellement concentrée vers l'avant dans le domaine d'extension angulaire  $\alpha/k$ . A partir de l'équation (2.50) on remarque que la section efficace intégrale, tend vers zéro suivant une loi en  $1/E$ . Pour

E (eV)	Présent Travail	Bryron et al.	Normand et al.	de Heer et Jansen
100	5.9648	6.16	3.73	4.03
200	3.1738	3.37	2.14	2.68
300	2.1738	2.38	1.37	2.03
400	1.6395	1.86	0.93	1.66
500	1.3204	1.54		1.39
700	0.9504	1.16		1.06
	M. E (%)	11.94	38.74	11.97

Table 2.3: Comparaison de la section efficace intégrale théorique et expérimentale exprimée en u.a

que l'approximation de Born soit justifiée, il faut que l'erreur faite dans l'amplitude de diffusion soit négligeable, ce qui est possible que si l'amplitude de l'onde diffusée est très petite devant celle de l'onde incidente dans le domaine d'action du potentiel c'est à dire lorsque  $r\alpha < 1$ . La norme du rapport de l'amplitude de l'onde diffusée à celle de l'onde incidente doit être inférieur à l'unité.

$$\left| \frac{\Phi(r, \theta)}{\Phi(z)} \right| = \frac{1}{2\pi} \left| \int d^3r U(r) e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} \right| \ll 1 \quad (2.58)$$

Après intégration suivant les angles  $\theta$  et  $\phi$  on trouve :

$$\left| \frac{\Phi(r, \theta)}{\Phi(z)} \right| = \frac{1}{k} \left| \int_0^{1/\alpha} dr U(r) \sin(2kr) \right| \ll 1 \quad (2.59)$$

Lorsque  $k \rightarrow \infty$ , l'intégrale tend vers zéro. Aussi si l'énergie des particules est grande. la méthode de Born reste valable.

Lorsque  $r \rightarrow 0$ ,  $\left(\frac{\sin(2kr)}{2kr}\right) \rightarrow 1$  et  $U(r) \rightarrow U_0$ , profondeur du puits. On tire après intégration :

$$U_0 \ll \alpha^2 \quad (2.60)$$

Dans une collision, l'unité caractéristique de la section efficace géométrique qui est égale  $4\pi/\alpha^2$  et qui correspond à la portée effective des forces intervenant dans la collision.

Dans les conditions de validité de l'approximation de Born, la section efficace intégrale est petite par rapport à cette quantité :

$$\sigma(E) \ll \frac{4\pi}{\alpha^2} \quad (2.61)$$

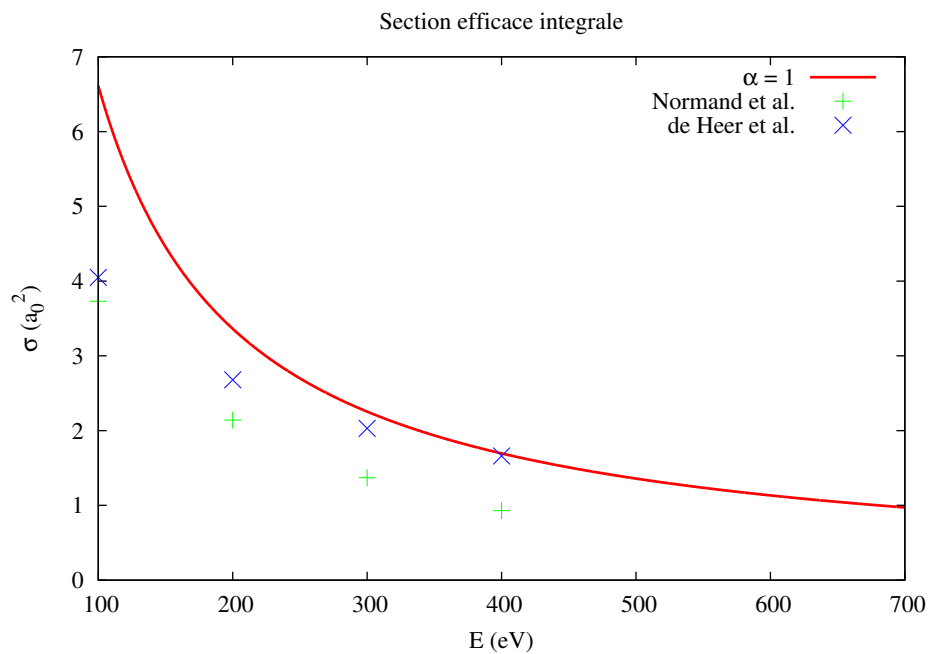


Figure 2.7: Étude de la section efficace intégrale en fonction de l'énergie de l'électron incident.

Cette inégalité constitue un critère extrêmement utile pour juger de la validité de l'approximation de Born. Toutefois elle reste nécessaire mais non suffisante car elle ne fait que majorer la section efficace.

## Théorie de Faxen-Holtzmark

### 3.1 Introduction

La solution de l'équation de Schrödinger qui décrit la diffusion dans un champ central  $U(r)$  doit être axiale autour de l'axe  $z$ , qui est la direction de propagation des particules incidentes. Toute solution de ce genre peut être représentée par la superposition de fonctions d'onde du spectre continu. Qui correspond au mouvement dans un champ donné les particules douées d'une certaine énergie  $E$  et de moments orbitaux de valeurs différentes et à projections nulles sur l'axe des  $z$ . Ces fonctions sont indépendantes de l'azimut autour de l'axe c'est à dire qu'elles sont à symétrie axiale. La fonction d'onde recherchée aura la forme donnée par la relation (2.13)

### 3.2 Amplitude de diffusion

La solution générale de l'équation (2.5) en coordonnées sphériques est de la forme:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{m=\ell} C_{\ell,m} R_{\ell}(r) y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (3.1)$$

où  $R_{\ell}(r)$  et  $y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$  sont respectivement la fonction d'onde radiale et l'harmonique sphériques. Les constantes  $C_{\ell,m}$  sont les coefficients de Clebesh-Gordon. La fonction d'onde et l'amplitude de diffusion sont indépendants de l'azimut puisque la projection suivant l'axe des  $z$  du moment magnétique  $m$  est égale à zéro. La relation (3.1) devient:

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell,0} R_{\ell}(r) y_{\ell,0}(\theta) \quad (3.2)$$

La solution de la partie angulaire est donnée par:

$$y_\ell(\theta) = P_\ell(\cos(\theta)) \quad (3.3)$$

La fonction radiale  $R_\ell(r)$  vérifie l'équation

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_\ell}{dr} \right) + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r) \right) R_\ell(r) = 0 \quad (3.4)$$

Pour déterminer la fonction radiale de l'onde on pose

$$R_\ell(r) = \frac{1}{r} y(r) \quad (3.5)$$

On tire de (3.4) l'équation différentielle de  $y(r)$  sous la forme:

$$\frac{d^2 y_\ell(r)}{dr^2} + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r) \right) y_\ell(r) = 0 \quad (3.6)$$

La solution asymptotique de (3.6) ( c'est à dire pour  $r \rightarrow \infty$ ) est donnée par:

$$y(r) = B e^{ikr} + B' e^{-ikr} \quad (3.7)$$

$y(r)$  est une superposition d'ondes divergentes et convergentes. Nous allons nous mettre dans le cas où le flux de particules qui arrivent est égal à celui des particules qui partent du centre de force; cela signifie que la norme de  $B$  doit être égale à celui de  $B'$ . Ceci est toujours vérifié puisqu'il n'y a pas d'absorption;

$$B = \frac{A}{2i} i g, \quad B' = \frac{A}{2i} -i g \quad (3.8)$$

$A$  et  $g$  étant des quantités réelles. Pour des raisons de commodité, nous normalisons  $y(r)$  de telle sorte que  $A$  soit égale à l'inverse de la norme du vecteur d'onde des particules incidentes.

$$g = -\frac{\pi}{2} \ell, \quad A = \frac{1}{k} \quad (3.9)$$

La constante  $\delta_\ell$  est la phase ou le déphasage, le terme additionnel a été ajouté de façon que  $\delta_\ell$  soit nulle lorsque le potentiel est nul. En remplaçant respectivement ces quantités dans les relations (3.7) et (3.5) on obtient:

$$y_\ell(r) = \frac{1}{k} \sin(kr - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_\ell) \quad (3.10)$$

$$R_\ell(r) = \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_\ell) \quad (3.11)$$

L'expression de  $R_\ell(r)$  donnée (3.11) est acceptable comme solution propre quelque soit la valeur positive de  $E$ . Elle représente un état propre non lié. La phase  $\delta_\ell$  est une quantité très importante, elle caractérise le comportement asymptotique de la solution régulière. La relation (3.2) devient en tenant compte de (3.11) et (3.3)

$$\Psi(r, \theta) = \frac{1}{kr} \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell,0} P_\ell(\cos(\theta)) \sin(kr - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_\ell) \quad (3.12)$$

Considérons à présent la relation (3.11). Le terme  $e^{ikz}$  peut être développé suivant les polynômes de Legendre.

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos(\theta)} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^\ell \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr) P_\ell(\cos(\theta)) \quad (3.13)$$

où  $J_{\ell+\frac{1}{2}}$  est la fonction de Bessel d'ordre  $\ell + \frac{1}{2}$ . Physiquement ce développement consiste à représenter l'onde plane sous la forme d'une superposition d'ondes stationnaires sphériques. Ce qui revient à effectuer un développement suivant des états caractérisés par différentes valeurs du moment cinétique par rapport à l'origine des coordonnées. Chaque terme de cette somme est aussi une solution de l'équation du mouvement de l'onde libre répondant à une valeur donnée du moment cinétique donc pour un nombre  $\ell$  donné. La forme asymptotique de la fonction de Bessel à l'ordre  $\ell + \frac{1}{2}$  est [11, 12]

$$J_{\ell+\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} \sin(kr - \frac{\pi}{2} \ell) \quad (3.14)$$

Posons

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) f_\ell P_\ell(\cos(\theta)). \quad (3.15)$$

Les  $f_\ell$  étant des constantes, elles doivent être prises de telle sorte que la fonction d'onde... ait aux grandes distances la forme asymptotique donnée par la relation (3.12) [11, 12]. En tenant compte de (3.13) et (3.15), la relation (3.12) devient :

$$\Psi(r, \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\cos(\theta)) \frac{(2\ell + 1)}{2ikr} \left[ 2i^{\ell+1} \sin(kr - \frac{\pi}{2} \ell) + 2ik f_\ell e^{ikr} \right] \quad (3.16)$$

En comparant les expressions données par les relations (3.12) et (3.16), on obtient au système d'équation suivant

$$C_{\ell,0} e^{-i(-\frac{\pi}{2} \ell + \delta_\ell)} = (2\ell + 1) e^{i\frac{\pi}{2} \ell} \quad (3.17)$$

$$C_{\ell,0} e^{i(-\frac{\pi}{2} \ell + \delta_\ell)} = (2\ell + 1) (1 + 2ik f_\ell) \quad (3.18)$$

On tire aisément les expressions de  $C_{\ell,0}$  et de  $f_\ell$  suivantes:

$$C_{\ell,0} = (2\ell + 1) e^{i(\frac{\pi}{2}\ell + \delta_\ell)} \quad (3.19)$$

$$f_\ell = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_\ell} - 1) \quad (3.20)$$

En substituant la relation (3.20) dans (3.15), on obtient l'expression de l'amplitude de diffusion

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos(\theta)) \quad (3.21)$$

L'expression de l'amplitude de diffusion donnée par la formule (3.21) a été suggérée pour la première fois par Faxen-Holtzmark [13]. Elle résout le problème de l'expression de l'amplitude de diffusion en fonction des phases  $\delta_\ell$ . Posons  $S_\ell = e^{(2i\delta_\ell)}$ , on tire d'après (3.21) la relation suivante

$$S_\ell = 1 + 2ik f_\ell \quad (3.22)$$

$S_\ell$  caractérise le rapport de l'amplitude de l'onde divergente à celle des ondes primaires convergentes ayant un moment orbital  $\ell$  et une valeur d'énergie  $E$  donnée. Autrement dit cette quantité convertit les ondes venant de  $-\infty$  en ondes allant vers  $+\infty$ . C'est l'opérateur ou matrice de diffusion, ou simplement matrice  $S_\ell$ . Cet opérateur a été introduit par W. Heisenberg en 1943. La conservation du nombre de particules pendant la diffusion élastique s'exprime par l'égalité des flux totaux de particules dans les ondes convergentes et divergentes. Donc ces deux types d'onde doivent avoir la même normalisation. Il faut pour cela que l'opérateur de diffusion soit unitaire c'est à dire

$$S_\ell^* S_\ell = 1 \quad (3.23)$$

### 3.3 Détermination des phases

Pour déterminer les phases, il nous faut en principe intégrer l'équation radiale de Schrödinger en  $y(r)$  donnée par l'équation (3.6) que nous rappelons ici sous la forme suivante:

$$\frac{d^2 y(r)}{dr^2} + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r) \right) y(r) = 0 \quad (3.24)$$

Soit  $v(r)$  la solution de l'équation (3.24) pour  $V(r) = 0$

$$\frac{d^2 v(r)}{dr^2} + \left( k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) v(r) = 0 \quad (3.25)$$

En multipliant l'équation (3.24) par la solution  $v(r)$  et l'équation (3.25) par  $y(r)$  et en faisant la différence membre à membre, on tire

$$y''(r)v(r) - v''(r)y(r) = V(r)y(r)v(r) \quad (3.26)$$

Compte tenu des conditions aux limites  $y(0) = v(0) = 0$ ; on a en faisant une intégration par partie de 0 à  $R$  qui est une valeur arbitraire de la variable  $r$ , on a :

$$\int_0^R y''(r)v(r) dr = y'(r)v(r) - \int_0^R y'(r)v'(r) dr \quad (3.27)$$

$$\int_0^R v''(r)y(r) dr = v'(r)y(r) - \int_0^R y'(r)v'(r) dr \quad (3.28)$$

et on obtient finalement

$$y'v(r) - v'y(r) = \int_0^R v(r)V(r)y(r) dr \quad (3.29)$$

D'après la relation (3.10)

$$y_\ell(r) = \frac{1}{k} \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell + \delta_\ell) \quad (3.30)$$

$$v_\ell(r) = \frac{1}{kr} \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell) \quad (3.31)$$

Les expressions ci-dessus  $y(r)$  et  $v(r)$  permettent d'écrire (3.29) de la façon suivante

$$\frac{1}{k} \sin(\delta_\ell) = - \int_0^R v(r)V(r)y(r) dr \quad (3.32)$$

L'équation (3.32) permet de tirer certaines conclusions concernant le sens de variation des déphasages lorsqu'on modifie le potentiel. En effet, si  $\Delta V$  est infiniment petit,  $\Delta\delta_\ell$  est aussi un infiniment petit. L'écart des solutions  $y(r)$  et  $v(r)$  peut être aussi négligé dans l'intégrale du second membre de l'équation (3.32). On obtient alors

$$\Delta\delta_\ell = -k \int v^2(r) \Delta V(r) dr \quad (3.33)$$

Si la variation du potentiel  $\Delta V$  est du même signe sur tout l'intervalle  $[0, +\infty[$ , la variation du déphasage  $\Delta\delta_\ell$  est du signe opposé. Donc toute augmentation du potentiel (plus grande répulsion) entraîne une diminution du déphasage et toute diminution du potentiel (plus grande attraction) augmente le déphasage [2]. Le développement de la relation (3.30) donne

$$y(r) = \frac{1}{k} \left[ \sin(kr - \frac{\pi}{2}\ell) \cos(\delta_\ell) + \cos(kr - \frac{\pi}{2}\ell) \sin(\delta_\ell) \right] \quad (3.34)$$



Il nous faut à présent évaluer la solution  $y(r)$  sans le déphasage  $\delta_\ell$ , pour pouvoir calculer la valeur de l'intégrale dans l'équation (3.32). Ce faisant, nous exprimons (3.34) en fonction de  $v(r)$  comme suit :

$$y(r) = v(r) \cos(\delta_\ell) + \frac{1}{k} \cos(kr - \frac{\pi}{2} \ell) \sin(\delta_\ell) \quad (3.35)$$

Lorsque  $R \rightarrow +\infty$  dans l'intégrale de l'équation (3.32) et lorsqu'on assimile  $V(r)$  à une perturbation, on peut poser

$$y(r) = v(r) \cos(\delta_\ell) \quad (3.36)$$

puisqu'à l'infini les phases sont pratiquement nulles. On tire finalement de la relation (3.32) l'équation suivante :

$$\tan(\delta_\ell) = -2k \int_0^\infty U(r) v^2(r) dr \quad (3.37)$$

A partir de cette formule on peut faire certaines déductions sur le signe des phases considérées comme des fonctions continues de l'énergie. Pour déterminer ces fonctions de manière univoque à une constante additive près multiple de  $\pi$ , nous les normalisons par la condition  $\delta_\ell(\infty) = 0$  puisque l'interaction sera quasi - inexistante. En se basant sur les propriétés intégrales, on voit aisément que dans un champ répulsif c'est à dire  $U(r) > 0$ , toutes les phases seront négatives, et dans un champ attractif, les phases seront positives. Dans le premier cas l'onde diffusée est sera en avance sur l'onde incidente, et dans le second cas c'est l'onde incidente qui sera en avance sur l'onde diffusée. L'interaction d'une particule chargée avec un système neutre polarisable dans l'état fondamental à symétrie sphérique est de la forme d'une interaction de longue portée [14]

$$U(r) = -\frac{\alpha e^2}{2r^4} \quad (3.38)$$

où  $e$  la charge élémentaire et  $\alpha$  est la polarisabilité dipolaire de l'atome. Pour l'atome d'hélium  $\alpha = 1.38$  [15, 16] L'équation (3.37) devient en tenant compte du potentiel de polarisation (3.38) en unités atomiques

$$\tan(\delta_\ell) = -\alpha k \int_0^\infty r^{-4} v^2(r) dr \quad (3.39)$$

Remplaçons  $v(r)$  par la fonction de Bessel donnée par l'équation (3.14) on a

$$\tan(\delta_\ell) = \frac{\pi \alpha}{2} \int_0^\infty r^{-3} J_{\ell+1/2}^2(kr) dr \quad (3.40)$$

En faisant un changement de variable  $s = k r$  dans l'équation (3.40) on obtient

$$\tan(\delta_\ell) = \pi \alpha k^2 g(\ell), \quad (3.41)$$

avec

$$g(\ell) = \frac{1}{(2\ell + 3)(2\ell + 1)(2\ell - 1)} \quad (3.42)$$

Ces phases dépendent exclusivement de la valeur de la polarisabilité  $\alpha$  de l'atome donc du potentiel de longue portée et elles sont proportionnelles à  $k$ , sauf pour  $\ell = 0$  où le potentiel de courte portée est le plus important à basses énergies. Pour avoir la phase correspondante il nous faut calculer la phase due à ce potentiel. Nous verrons plus loin l'écart introduit par à l'omission de cette phase. Soit  $w(r)$  la solution correspondante à la diffusion " s " pour  $U(r) \rightarrow 0$ . Cette solution est obtenue en posant  $\ell = 0$  dans l'expression de  $v(r)$ . Ce qui donne [17]

$$w(r) = \frac{1}{k} \sin(k r) \quad (3.43)$$

cette solution doit elle aussi vérifier la condition aux limites  $w(a) = 0$ , nous avons dans ce cas

$$w(r) = \frac{1}{k} \sin(k r - a) \quad (3.44)$$

La phase recherchée est donnée par

$$\delta = -k a \quad (3.45)$$

où  $a$  est la longueur de diffusion. elle correspond au cas où  $k \rightarrow 0$  c'est à dire à la vitesse nulle de la particule incidente (particule immobile). Pour la déterminer nous allons porter dans l'équation (3.32) l'expression de la phase  $\delta$  donnée par la relation (3.45) en prenant soin de remplacer les fonctions  $y(r)$  et  $v(r)$  par  $w(r)$ ,  $V(r)$  par le potentiel de courte portée. On obtient l'équation suivante :

$$\frac{1}{k} \sin(k a) \cong \frac{1}{k} (k a) = - \int_0^R w(r) V(r) w(r) dr \quad (3.46)$$

et on tire l'équation suivante pour la longueur de diffusion :

$$a = - \int_0^R w^2(r) V(r) dr \quad (3.47)$$

si l'électron incident rebrousse chemin c'est parce qu'il y a une force répulsive qui lui est appliquée. Cette force est essentiellement due aux électrons atomiques. L'énergie potentielle correspondante sera :

$$U(r) = \frac{Z}{r} \quad (3.48)$$

Puisque la borne supérieure  $R$  de l'intégrale de l'équation (3.47) est arbitraire, on voit que la longueur de diffusion devient infinie si l'intégrale diverge, et son signe dépend de la nature du potentiel d'interaction. Pour des énergies faibles on peut faire un développement limité au voisinage de zéro de  $w(r)$  de la manière suivante

$$w(r) = \frac{1}{k} \left( k r - \frac{1}{3} (k r)^3 \dots \right) = r - \frac{1}{3} k_2 r^3 \dots \quad (3.49)$$

Pour  $k \rightarrow 0$  on a  $w(r) = r$  et la relation (3.47) devient après intégration  $a = Z a_0 R^2$  dans le système international (s.i). Prenons la valeur  $a_0/Z$  de  $R$ , on a  $a = a_0 2$ . Finalement nous aboutissons aux équations suivantes

$$\tan(\delta_0) = -\frac{1}{2} k - \frac{\pi}{3} \alpha k^2 \quad \text{si } \ell = 0, \quad (3.50)$$

$$\tan(\delta_\ell) = \frac{\pi \alpha k^2}{(2\ell + 3)(2\ell + 1)(2\ell - 1)} \quad \text{si } \ell \geq 1 \quad (3.51)$$

Dans ces équations  $k$  est en unités atomiques. Une fois les phases calculées on peut déterminer sans difficultés majeurs la section efficace différentielle. En effet, elle sera égale à la norme au carré de l'amplitude de diffusion donnée

$$\sigma(\theta) = \left| \frac{1}{2k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_\ell} - 1) P_\ell(\cos(\theta)) \right|^2 \quad (3.52)$$

Le programme que nous avons établi pour calculer la section efficace différentielle converge à partir de la valeur  $\ell = 10$ . Cela nous affranchit de faire la sommation jusqu'à l'infini (aux valeurs très grandes). D'ailleurs il est à signaler qu'à partir de  $\ell = 50$  le programme donne une valeur nulle de la section efficace différentielle. Cela s'explique par la présence au dénominateur du produit factoriel dans l'expression des polynômes de Legendre. Le calcul numérique de la section efficace différentielle à partir de l'équation (3.52) donne les valeurs consignées dans le tableau 3.1. Les autres valeurs sont extraites des références [18, 19]. La moyenne d'erreurs est calculée par rapport à chaque résultat comparatif.

Dans la figure 3.1, nous représentons la variation de la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion. Nous étudions la diffusion d'un électron d'énergie égale à 5 eV par un atome d'hélium. Nous représentons également les valeurs de D. F. Register et al. [18] et de M. J. Brunger et al. [19] pour une étude comparative entre les différents résultats. A partir de l'axe des abscisses la première courbe en noire

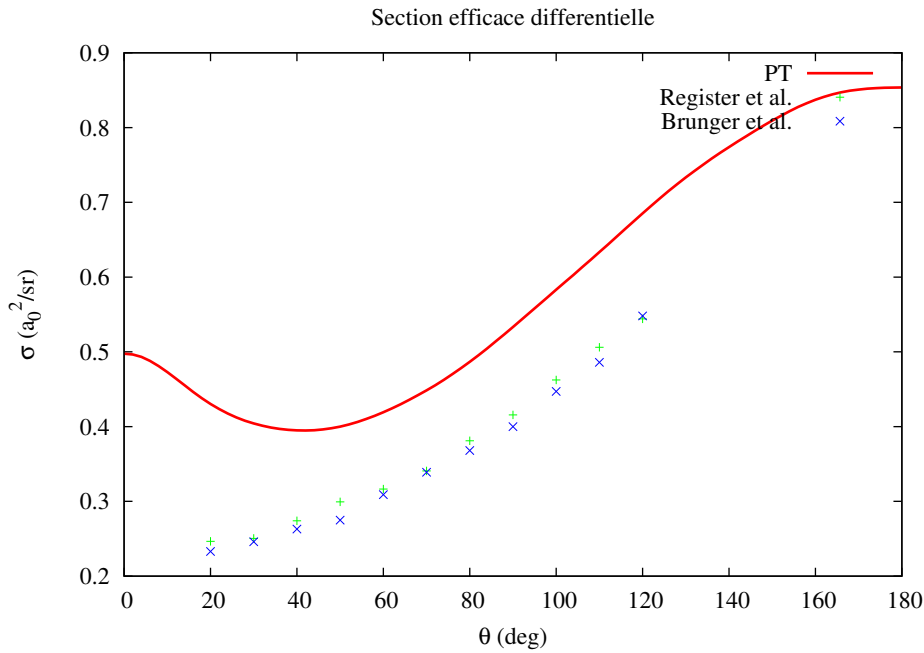


Figure 3.1: Variation de la section efficace différentielle à 5 eV. PT représente nos valeurs théoriques et les expérimentales de Register et al. d'une part et d'autre part celles de Brunger et al.

(trait plein) a été obtenu en négligeant les phases dues au potentiel de courte portée. Pour la deuxième courbe en blue (trait plein) a été obtenue en tenant compte de ces phases uniquement pour la diffusion " s ", En comparant ces deux résultats avec les données expérimentales, on se rend compte que pour ces types de diffusion, le potentiel de courte portée n'est pas négligeable devant le potentiel de longue portée, d'où la nécessité de tenir en compte ces effets. Malgré tout on voit que la théorie fournie des valeurs différentes de celles obtenues expérimentalement. Cela peut s'expliquer par le fait qu'on a assimilé la fonction d'onde de l'état perturbé à celle de l'état non perturbé à un facteur près. On aussi implicitement omis les termes d'ordre supérieurs en  $k$  de ces phases pour les grandes distances.

Le tableau 3.2 représente les valeurs de la section efficace différentielle pour l'énergie des électrons incidents égale à 18 eV. Les valeurs calculées sont comparées à d'autres valeurs théoriques et expérimentales extraites des références [18, 19]. Dans les figures 3.2 et 3.3 nous traçons à titre de comparaison la section efficace différentielle en fonction de l'angle de diffusion des électrons incidents pour différentes valeurs de leur

énergie. Nous avons calculé cette section efficace différentielle à partir de l'équation (3.52). Les résultats trouvés sont confrontés aux valeurs théoriques et expérimentales des références [18, 19]. Pour la figure 3.2 nos résultats sont très voisins de ceux de

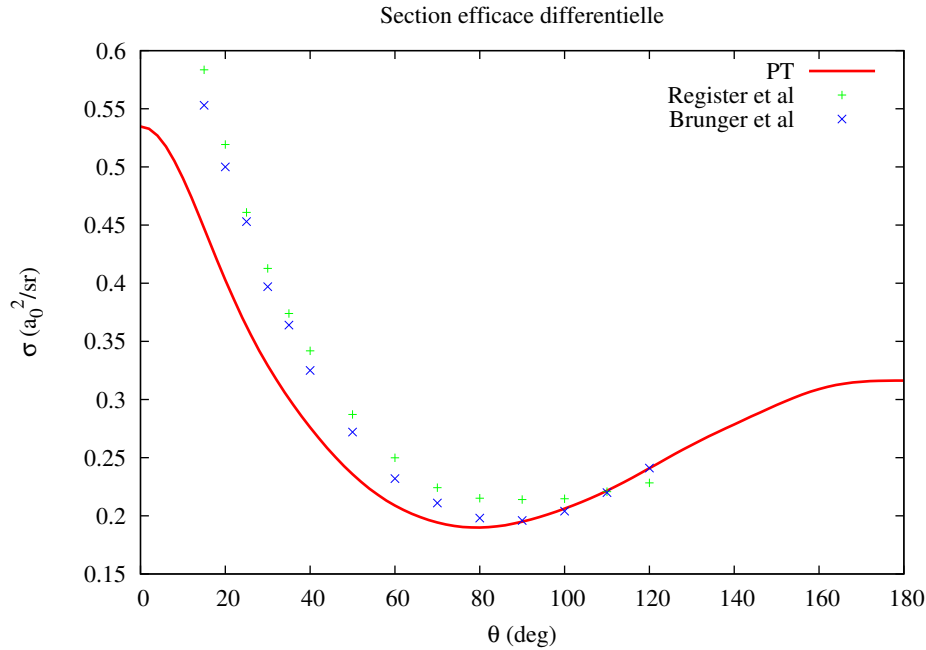


Figure 3.2: Variation de la section efficace différentielle à 18 eV. PT représente nos valeurs théoriques et les expérimentales de Register et al. d'une part et d'autre part celles de Brunger et al.

l'expérience de Brunger et al. à partir de zéro degré jusqu'à 110 degrés. Au delà de cette valeur on remarque un écart. L'écart remarqué entre nos données et celles de Register et al. peut avoir son explication dans l'omission des termes d'ordre supérieurs en  $k$  dans la détermination des phases. On constate que ce domaine d'angles correspond 3.2aux collisions fortes. L'approximation faite sur la fonction d'onde de l'état perturbé n'est plus justifiée. La figure 3.3 montre la limite de validité de l'approximation de Born sur la détermination des phases des ondes diffusées. Plus l'énergie des particules incidentes augmente et plus la courbe que nous obtenons se démarque de la courbe expérimentale. La formule (3.21) donnant l'expression de l'amplitude de diffusion étant rigoureusement exacte, il reste à incriminer les valeurs que l'on peut attribuer aux phases qu'elle contient. Par conséquent pour travailler aux énergies supérieures à 20 eV il est recommandé d'utiliser d'autres méthodes de calcul pour la détermination

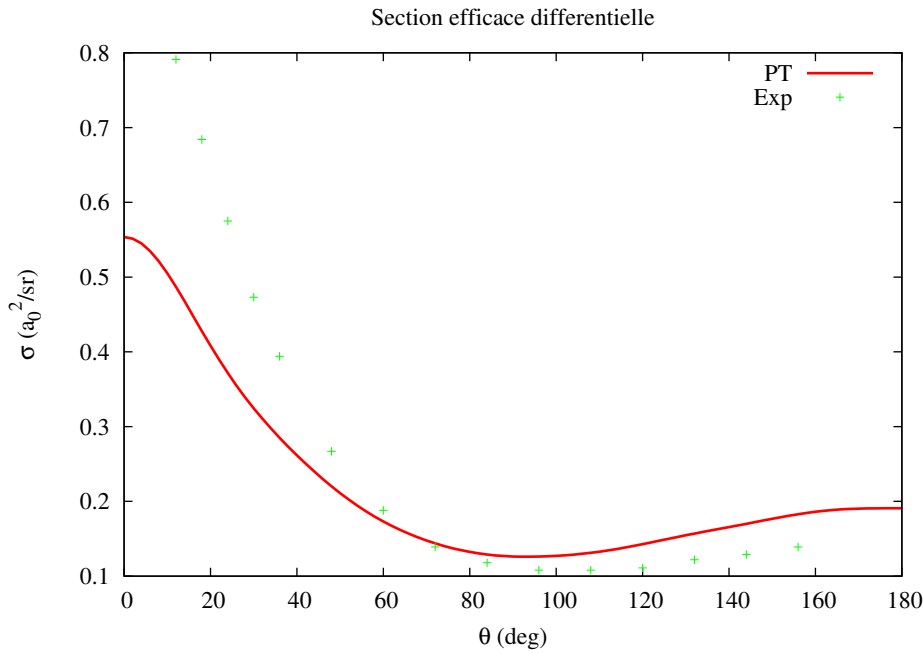


Figure 3.3: Variation de la section efficace différentielle 30 à eV. PT représente nos valeurs théoriques et Exp celles de l'expérience de T. W. Shyn [20]

de ces phases. Nous avons au minimum des courbes, une parfaite concordance avec les particules incidentes. Ce minimum correspond aux angles de diffusion compris entre 80 et 100 degrés et pour les énergies entre 18 et 30 eV. La section efficace différentielle décroît en fonction de l'angle de diffusion dans l'intervalle  $[0, 90]$  degrés. Ensuite elle croît faiblement de sa valeur minimale jusqu'à une valeur moyenne de près de  $0.1 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ .

Pour déterminer la section efficace intégrale nous allons nous servir de la relation d'orthogonalité des polynômes de Legendre

$$\int_{4\pi} P_{\ell'}(\cos(\theta)) P_{\ell}(\cos(\theta)) d\Omega = \frac{4\pi}{2\ell+1} \quad \text{si } \ell' = \ell \quad \text{et } 0 \quad \text{si } \ell' \neq \ell \quad (3.53)$$

En intégrant la section efficace différentielle  $\sigma(\theta)$  sur tous les angles, nous obtenons la section efficace intégrale

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2(\delta_{\ell}) \quad (3.54)$$

Nous voyons que les phases déterminent complètement la section efficace intégrale. Dans la pratique, à basses énergies seules les phases à moment orbital  $\ell$  petit sont

signifiantes. On peut tronquer la série (3.54) à partir d'une certaine valeur  $L$  de  $\ell$ . Chacun de ces termes de cette sommation est une section efficace partielle notée  $\sigma_\ell$  pour la diffusion de particules de moment orbital donné  $\ell$ . Notons que la plus grande valeur possible de cette section efficace est [12]

$$\sigma_{\ell,max} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \quad (3.55)$$

La méthode de Faxen - Holtzmark permet de relier l'amplitude de diffusion aux phases

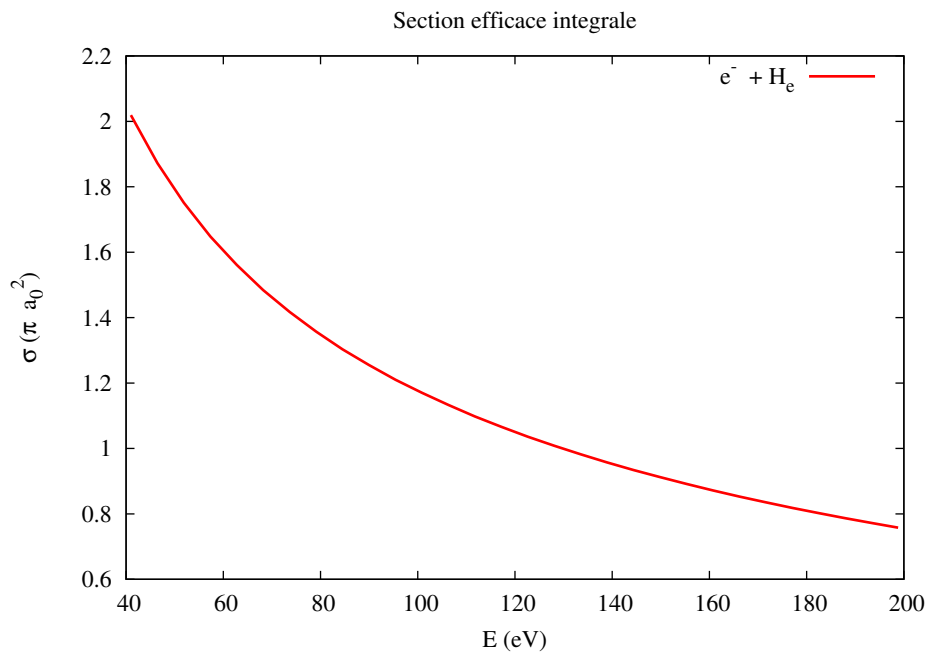


Figure 3.4: Variation de la section efficace intégrale dans l'approche de Faxen

de chaque onde donnée lors de la collision. On constate qu'aux faibles énergies, la diffusion " s " reste prépondérante à cause de la nature des phases qui sont proportionnelles au carré de la norme du vecteur d'onde pour tout  $\ell > 0$ .

### 3.4 Portée effective

Les équations (3.32) et (3.37) permettent d'étudier la variation subie par le déphasage lorsqu'on modifie le potentiel en maintenant l'énergie constante. La formule que nous établissons dans ce paragraphe concerne la variation du déphasage en fonction de l'énergie des particules incidentes. Elle est particulièrement utile à la limite de basses

énergies lorsque le potentiel a un court rayon d'action.

Désignons par  $y(r)$  l'une des solutions régulières de l'équation (3.24). Nous ne spécifions pas sa normalisation pour le moment. Soit  $v(r)$  la solution (irrégulière) de l'équation (3.25) correspondant à la même valeur d'énergie et ayant même forme asymptotique que  $y(r)$ , normalisation comprise. Considérons maintenant deux énergies différentes  $E_1, E_2$ . Nous affectons de l'indice 1 les fonctions et les diverses quantités relatives à l'énergie  $E_1$ , et l'indice 2 celles relatives à  $E_2$ . La relation (3.24) donne, en introduisant les indices le système d'équations suivantes :

$$\frac{d^2 y_1(r)}{dr^2} + \left( k_1^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r) \right) y_1(r) = 0 \quad (3.56)$$

$$\frac{d^2 y_2(r)}{dr^2} + \left( k_2^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - V(r) \right) y_2(r) = 0 \quad (3.57)$$

Multiplions la première équation (3.56) par  $y_2(r)$  et la deuxième équation (3.57) par  $y_1(r)$ . En faisant la soustraction membre à membre, puis en intégrant de  $a$  à  $R$  on tire :

$$\left[ y_1'(r) y_2(r) - y_2'(r) y_1(r) \right]_a^R = \int_a^R (k_2^2 - k_1^2) y_1(r) y_2(r) dr \quad (3.58)$$

Posons

$$W(y_1, y_2) = y_1'(r) y_2(r) - y_2'(r) y_1(r) \quad (3.59)$$

$W(y_1, y_2)$  s'appelle le Wronskien. Nous avons une relation analogue pour les  $v(r)$ ,

$$W(v_1, v_2) = v_1'(r) v_2(r) - v_2'(r) v_1(r) \quad (3.60)$$

En faisant la différence des relations (3.60) et (3.59) on obtient :

$$W(v_1, v_2) - W(y_1, y_2)|_a^R = (k_2^2 - k_1^2) \int_a^R (v_1 v_2 - y_1 y_2) dr \quad (3.61)$$

Les  $y(r)$  et les  $v(r)$  ont même forme asymptotique, et lorsqu'on fait tendre  $R$  à l'infini, on a l'intégrale du second membre qui converge et la différence des wronskiens relatifs à  $R$  tend vers 0. Comme de plus  $\lim_{a \rightarrow 0} W(y_1, y_2) = 0$ , la relation précédente s'écrit

$$\lim_{a \rightarrow 0} \left[ W(v_1, v_2) - (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty (v_1 v_2 - y_1 y_2) dr \right] = 0 \quad (3.62)$$

En faisant la normalisation des  $y(r)$  de façon appropriée, on peut mettre cette relation fondamentale sous une forme dans laquelle la valeur aux énergies  $E_1$  et  $E_2$ , du déphasage intervient explicitement. Nous limiterons cette étude au cas de la diffusion



” s ” c’est à dire lorsque  $\ell = 0$ . Désignons par exemple  $w(r)$  la solution de l’équation (3.25) pour  $\ell = 0$ . Fixons la normalisation des  $w(r)$  par la condition  $w(0) = 1$ . posons également

$$w(r) = \cos(k r) + \cot(\delta) \sin(k r) \quad (3.63)$$

L’équation (3.60) s’écrit alors

$$W(w_1, w_2)|_{a=0} = k_2 \cot(\delta_2) - k_1 \cot(\delta_1) = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty (w_1 w_2 - y_1 y_2) dr \quad (3.64)$$

Sous réserve que le potentiel tend vers 0 suffisamment vite lorsque  $r$  tend vers l’infini pour que l’intégrale converge. La relation (3.62) reste valable à la limite  $k_1 \rightarrow 0$ . Désignons par  $w_0(r)$  et  $y_0(r)$  les fonctions de  $w(r)$  et  $y(r)$  correspondant à l’énergie nulle. On note que

$$w_0(r) = 1 - \frac{r}{a} \quad \text{et} \quad \lim_{k_1 \rightarrow 0} k \cot(\delta) = -\frac{1}{a} \quad (3.65)$$

où  $a$  est la longueur de diffusion définie par la relation (3.46). En faisant  $k_2 = k$  et  $k_1 = 0$  dans la relation (3.64), il vient

$$k \cot(\delta) = -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^\infty (w w_0 - y y_0) dr \quad (3.66)$$

Cette relation est connue sous le nom de formule de Bethe. Elle est utile lorsque l’intégration du second membre varie lentement en fonction de l’énergie. Cest ce qui se produit lorsque le potentiel de courte portée du type de ceux qu’on rencontre en physique nucléaire c’est à dire lorsqu’on peut scinder l’espace en une région interne  $r < r_0$ ,  $k r_0 \ll 1$  pour laquelle  $|U(r)| \gg E$  et une région externe  $r > r_0$ , où le potentiel  $U(r)$  est négligeable. La contribution de l’intégrale vient alors essentiellement de la région interne. On peut remplacer dans cette région sans grande erreur  $y(r)$  par  $y_0(r)$  et  $w(r)$  par  $w_0(r)$ , puisqu’on a rigoureusement  $y(0) = y_0(0) = 0$  et  $w(0) = w_0(0) = 1$ . Les fonctions  $y(r)$  et  $y_0(r)$  ont pratiquement la même courbure relative à l’énergie nulle c’est à dire

$$\frac{y''}{y_0} = V(r) \quad (3.67)$$

dans toute cette région. On a donc une très bonne approximation

$$k \cot(\delta) = -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^\infty (w_0^2 - y_0^2) dr \quad (3.68)$$

Posons

$$b = 2 \int_0^\infty (w_0^2 - y_0^2) dr \quad (3.69)$$

qui est paramètre caractéristique du potentiel couramment désigné sous le nom de portée effective. La relation (3.68) donne en tenant compte de l'équation (3.69) l'expression suivante

$$k \cot(\delta) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} b k^2 \quad (3.70)$$

Les termes du second membre de (3.70) sont les deux premiers termes du développement de  $k \cot(\delta)$  en série de puissance de l'énergie. pour écrire les termes d'ordre supérieurs de  $y(r)$  et de  $w(r)$  en série de puissance de l'énergie du second membre de (3.66). Ces développements sont rapidement convergents dans la région interne d'après l'argument selon lequel les fonctions d'onde radiales doivent être des solutions régulières. On a aussi une convergence du développement de  $k \cot(\delta)$  en fonction de l'énergie [2].

On a le développement de  $y(r)$

$$y(r) = y_0(r) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k^{2n}}{n!} y^{(n)}(r) \quad (3.71)$$

avec

$$y^{(n)}(r) = \frac{d^n y(r)}{d k^{2n}} \quad (3.72)$$

On obtient alors une relation analogue pour  $w(r)$

$$w(r) = w_0(r) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k^{2n}}{n!} w^{(n)}(r) \quad (3.73)$$

En substituant les équations (3.71) et (3.73) dans l'équation (3.66) il vient

$$k \cot(\delta) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} b k^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k^{2n+2}}{n!} \int_0^\infty (w^{(n)} w_0 - y^{(n)} y_0) dr \quad (3.74)$$

## 3.5 Théorème optique

A partir de la relation (3.21) donnant l'expression de l'amplitude de diffusion, on se rend compte qu'elle est essentiellement imaginaire. On peut donc écrire cette relation de la manière suivante :

$$f(\theta) = |f(\theta)| e^{i\eta(\theta)} \quad (3.75)$$

où  $\eta(\theta)$  est l'argument de l'amplitude, de diffusion, qui est aussi une fonction de l'angle de déviation des particules diffusées. On pourra encore réécrire la relation précédente (3.75) donnant l'amplitude de diffusion en introduisant la section efficace différentielle comme suit :

$$f(\theta) = \sqrt{\sigma(\theta)} e^{i\eta(\theta)} \quad (3.76)$$

Examinons le cas des particules incidentes non déviées par la cible en posant  $\theta = 0$  dans la relation (3.76). Dans ce cas on obtient à l'aide la (3.21)

$$f(0) = \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) \quad (3.77)$$

Nous allons réécrire l'équation (3.77) de la façon suivante :

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{2ik} \sum_{\ell=0}^{\infty} 2i(2\ell + 1) \sin(\delta_{\ell})(\cos(\delta_{\ell}) + i \sin(\delta_{\ell})) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin(\delta_{\ell}) \cos(\delta_{\ell}) + \frac{i}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2(\delta_{\ell}) \end{aligned} \quad (3.78)$$

On tire aisément de la relation précédente la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion pour  $\theta = 0$

$$Im f(0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sin^2(\delta_{\ell}) \quad (3.79)$$

En portant cette partie imaginaire de l'amplitude de diffusion pour les déviations nulles dans l'équation (3.54) donnant la section efficace intégrale, on tire la relation importante suivante [17]

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k^2} Im f(0) \quad (3.80)$$

Cette dernière relation est connue sous le nom de " théorème optique " .

$\theta^\circ$	Présent Travail	D. F. Register et al.	D. F. Register et al.	M. J. Brunger et al.
0	0.2294	0.2558		
5	0.2293	0.2515		
10	0.2303	0.2487		
15	0.2333	0.2475		0.2340
20	0.2378	0.2480	0.2465	0.2330
25	0.2441	0.2501		0.2410
30	0.2523	0.2540	0.2503	0.2460
35	0.2620	0.2596		0.2540
40	0.2730	0.2669	0.2740	0.2630
45	0.2857	0.2760		0.2670
50	0.2997	0.2867	0.2993	0.2750
55	0.3147	0.2991		0.2890
60	0.3309	0.3130	0.3164	0.3090
65	0.3482	0.3283		0.3260
70	0.3661	0.3450	0.3407	0.3390
75	0.3846	0.3629		0.3540
80	0.4039	0.3818	0.3810	0.3680
85	0.4234	0.4017		0.3820
90	0.4430	0.4222	0.4157	0.4000
95	0.4627	0.4433		0.4230
100	0.4825	0.4647	0.4624	0.4470
105	0.5018	0.4863		0.4720
110	0.5207	0.5077	0.5061	0.4860
115	0.5392	0.5289		0.5160
120	0.5569	0.5496	0.5442	0.5480
125	0.5735	0.5695		0.5630
	M. E (%)	3.70	2.96	5.59

Table 3.1: Quelques valeurs comparatifs de la section efficace différentielle en  $10^{-16}$   $\text{cm}^2/\text{sr}$ . M. E (%) est la moyenne d'erreurs de nos résultats avec les autres données. Les deux premières sont des résultats issus de calculs théoriques alors que les deux dernières colonnes sont des données expérimentales. L'énergie des électrons est 5 eV.

$\theta^\circ$	Présent Travail	D. F. Register et al.	D. F. Register et al.	M. J. Brunger et al.
0	0.7224	0.7800		
5	0.6919	0.7054		
10	0.6253	0.6366		0.6120
15	0.5599	0.5736	0.5835	0.5530
20	0.5051	0.5162	0.5193	0.5000
25	0.4548	0.4644	0.4609	0.4530
30	0.4080	0.4182	0.4127	0.3970
35	0.3672	0.3773	0.3740	0.3640
40	0.3317	0.3417	0.3419	0.3250
45	0.3003	0.3110		0.2980
50	0.2737	0.2851	0.2871	0.2720
55	0.2516	0.2637		0.2490
60	0.2336	0.2464	0.2499	0.2320
65	0.2195	0.2330		0.2210
70	0.2092	0.2230	0.2242	0.2110
75	0.2022	0.262		0.2040
80	0.1985	0.2120	0.2151	0.1980
85	0.1976	0.2103		0.1960
90	0.1992	0.2105	0.2140	0.1960
95	0.2031	0.2124		0.2000
100	0.2090	0.2155	0.2147	0.2040
105	0.2164	0.2197		0.2140
110	0.2251	0.2246	0.2207	0.2200
115	0.2350	0.2300		0.2290
120	0.2455	0.2412	0.2283	0.2410
125	0.2561	0.2412		0.2470
130	0.2672	0.2467	0.2417	
	M. E (%)	5.91	5.41	1.41

Table 3.2: Valeurs comparatives de la section efficace différentielle en  $10^{-16} \text{ cm}^2$ . M. E (%) est la moyenne d'erreurs de nos résultats. Les deux premières sont des résultats théoriques et les deux autres sont expérimentales. L'énergie des électrons est 18 eV.

# Collisions Inélastiques

## 4.1 Introduction

On appelle collision inélastique les collisions accompagnées de changement de l'état interne des particules. On a comme exemple de collisions inélastiques l'excitation, l'ionisation des atomes, la désintégration de certains noyaux, et même les réactions de réarrangement. L'étude de ces collisions inélastiques entre particules est l'une des applications de la théorie du mouvement de plusieurs corps. Nous admettons par la suite que l'électron qui entre en collision avec l'atome possède une énergie beaucoup plus grande que celle de l'électron appartenant à cet atome. Nous étudions dans ce chapitre les collisions inélastiques liées à l'excitation des atomes d'hélium et d'hydrogène.

## 4.2 Amplitude de diffusion

Dans l'approximation de Born, l'amplitude de diffusion d'un électron et d'un atome est donnée par la relation (2.45) que nous rappelons ici :

$$f_B = -\frac{1}{2\pi} \langle \Psi_f(R, r) | U(R, r) | \Psi_i(R, r) \rangle \quad (4.1)$$

où  $U(R, r)$  représente l'énergie d'interaction coulombienne de diffusion d'un électron incident et l'atome. Elle est donnée par la relation suivante :

$$U(R, r) = -\frac{Z}{R} + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|}. \quad (4.2)$$

Les fonctions d'onde initiale  $\Psi_i$  et finale  $\Psi_f$  du système sont données par :

$$\Psi_i = \Phi_i(\mathbf{R})\Phi_i(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

$$\Psi_f = \Phi_f(\mathbf{R})\Phi_f(\mathbf{r}) \quad (4.4)$$

où  $\mathbf{R}$  est le vecteur rayon de l'électron incident, et  $\mathbf{r}$  celui de l'électron atomique. L'origine du système de coordonnées est prise au centre de l'atome cible. Les fonctions d'onde initiale et finale de l'électron incident sont assimilées à des ondes planes de la forme :

$$\Phi_i(\mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{k}_i \mathbf{R}} \quad (4.5)$$

$$\Phi_f(\mathbf{R}) = e^{-i\mathbf{k}_f \mathbf{R}} \quad (4.6)$$

où  $\mathbf{k}_i$ ,  $\mathbf{k}_f$  sont respectivement les vecteurs d'onde avant et après la collision de l'électron incident.

Les termes du membre de droite représente respectivement l'interaction entre le noyau et l'électron incident, les électrons atomiques et l'électron incident. En injectant la relation 4.2 dans la formule 4.1 on obtient :

$$f_B = -\frac{1}{2\pi} \langle \Psi_f(R, r) | -\frac{Z}{R} + \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} | \Psi_i(R, r) \rangle \quad (4.7)$$

Nous allons d'abord intégrer le premier terme du membre de droite par rapport à la position de l'électron atomique  $r$  puis par rapport à celle de l'électron incident  $R$ . Le deuxième terme sera d'abord intégrer par rapport à  $R$  ce qui donne :

$$f_B = -\frac{1}{2\pi} \left\{ \left\langle \Phi_f(\mathbf{R}) | -\frac{Z}{R} \delta_{fi} | \Phi_i(\mathbf{R}) \right\rangle + \left\langle \Phi_f(\mathbf{r}) | \int d\mathbf{R} \frac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} | \Phi_i(\mathbf{r}) \right\rangle \right\} \quad (4.8)$$

où on a posé  $\mathbf{K} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$  représentant le moment transféré après la collision. Le symbole  $\delta$  est la fonction de Dirac définie par :

$$\delta_{fi} = \langle \Phi_f(\mathbf{r}) | \Phi_i(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.9)$$

Pour  $f \neq i$  c'est à dire dans le cas des transitions la fonction Dirac définie par (4.9) est nulle. D'autres part en considérant  $R \gg r$ , on trouve une amplitude de diffusion sous la forme suivante :

$$f_B = -\frac{2}{K^2} \langle \Phi_f(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} | \Phi_i(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.10)$$

L'équation (4.10) peut être réécrite en développant l'exponentielle sous la forme d'onde sphériques comme suit :

$$e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} = 4\pi \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} i^{\lambda} j_{\lambda}(K r) y_{\lambda,\mu}^*(\hat{K}) y_{\lambda,\mu}(\hat{r}) \quad (4.11)$$

où les grandeurs  $\hat{K}$  et  $\hat{r}$  déterminent respectivement la direction des vecteurs positions  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{r}$ .  $j_{\lambda}$  et  $y_{\lambda,\mu}$  sont respectivement les fonctions sphériques de Bessel d'ordre  $\lambda$  entier et des harmoniques sphériques;  $\lambda, \mu$  étant définis comme les moments orbital et magnétique de l'électron incident. Nous écrivons les fonctions d'onde initiale et finale de l'électron optique sous la forme suivante :

$$\Phi_i(r) = R_{n_i, \ell_i}(r) y_{\ell_i, m_i}(\hat{r}) \quad (4.12)$$

$$\Phi_f(r) = R_{n_f, \ell_f}(r) y_{\ell_f, m_f}(\hat{r}) \quad (4.13)$$

où  $R_{n_i, \ell_i}(r)$  et  $R_{n_f, \ell_f}(r)$  sont respectivement les fonctions d'onde radiales initiale et finale.  $n_i, \ell_i, m_i$  et  $n_f, \ell_f, m_f$  sont les nombres quantiques initiaux et finaux de l'électron optique respectivement. En portant les équations (4.11), (4.12) et (4.13) dans l'expression de l'amplitude (4.10) on obtient :

$$f_B = \frac{8\pi}{K^2} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} i^{\lambda} F_{\lambda}(K) C_{\lambda} y_{\lambda,\mu}^*(\hat{K}) \quad (4.14)$$

où nous avons posé :

$$F_{\lambda}(K) = \int_0^{\infty} r^2 j_{\lambda}(K r) R_{n_i, \ell_i}(r) R_{n_f, \ell_f}^*(r) dr \quad (4.15)$$

$$C_{\lambda} = \int y_{\ell_f, m_f}^*(\hat{r}) y_{\lambda, \mu}(\hat{r}) y_{\ell_i, m_i}(\hat{r}) \quad (4.16)$$

On peut réécrire l'amplitude de Born en fonction du facteur de forme défini par

$$FF = 4\pi \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} i^{\lambda} F_{\lambda}(K) C_{\lambda} y_{\lambda,\mu}^*(\hat{K}) \quad (4.17)$$

Le facteur de forme atomique est spécifique à chaque atome et à chaque type de collision. Le théorème de Wigner permet de'exprimer les  $C_{\lambda}$  en fonction des coefficients  $3j$ .

$$C_{\lambda} = (-1)^{m_f} \left[ \frac{(2\ell_f + 1)(2\ell_i + 1)(2\lambda + 1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \ell_f & \lambda & \ell_i \\ -m_f & \mu & m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_f & \lambda & \ell_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.18)$$



L'intégrale (4.16) est différente de zéro si  $m_f = \mu + m_i$  et si  $\ell_i + \ell_f + \lambda$  est pair. Dans le cas des transitions du niveau fondamental aux niveaux supérieurs on obtient l'expression suivante :

$$C_\lambda = (-1)^{m_f} \left[ \frac{(2\ell_f + 1)(2\lambda + 1)}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \ell_f & \lambda & 0 \\ -m_f & \mu & m_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_f & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Quelques cas particuliers des symboles  $3j$  sont données par les formule suivante :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^p \left[ \frac{(j_1 + j_2 - j_3)!(j_1 - j_2 + j_3)!(-j_1 + j_2 + j_3)!}{(2p + 1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{p!}{(p - j_1)!(p - j_2)!(p - j_3)!} \end{aligned} \quad (4.20)$$

où  $2p = j_1 + j_2 + j_3$  est un entier [4].

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{2j} \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} [(2j + 1)!]^{\frac{1}{2}} \quad (4.21)$$

En se servant de la relation (4.20) on obtient :

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^p \left[ \frac{(j_1 + j_2)!(j_1 - j_2)!(-j_1 + j_2)!}{(2p + 1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(p - j_1)!(p - j_2)!} \quad (4.22)$$

Avec  $2p = j_1 + j_2$ . Dans la formule (4.22) le produit  $(j_1 - j_2)!(-j_1 + j_2)!$  impose les égalités suivantes :  $j_1 = j_2$  et  $p = j_1$ . On a par conséquent :

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^j j! \frac{(2j)!}{(2j + 1)!} \quad (4.23)$$

En tenant compte des relations ci-dessus on trouve

$$C_\lambda = \frac{\lambda!}{\sqrt{4\pi}} \quad (4.24)$$

La signification du facteur de forme est donnée par la relation (4.17) à partir du carré de son module. Il détermine la probabilité de transition sous l'influence d'une perturbation externe.

$$|FF(K)|^2 = 16\pi^2 \left| \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} i^\lambda F_\lambda(K) C_\lambda y_{\lambda,\mu}^*(\hat{K}) \right|^2 \quad (4.25)$$

En tenant compte des propriétés des coefficients de Clebesh-Gordan la relation (4.25) devient

$$|FF(K)|^2 = [\ell_i, \ell_f] \sum_{\lambda=|\ell_i-\ell_f|}^{\ell_i+\ell_f} i^\lambda [F_\lambda(K)]^2 \begin{pmatrix} \ell_f & \lambda & \ell_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (4.26)$$

Finalement la section efficace différentielle pour les collisions inélastiques dans l'approximation de Born est donnée par :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} |f_B(\theta, \varphi)|^2, \quad (4.27)$$

où  $\theta$  et  $\varphi$  définissent la direction de la particule diffusée. En intégrant par rapport à tous les angles de diffusion, on obtient la valeur de la section efficace intégrale. Elle est valable pour toute collision, pendant laquelle l'énergie de l'électron varie d'une quantité égale à  $E_{n_f} - E_{n_i}$ . L'atome passera alors de l'état initial d'énergie  $E_{n_i}$  à l'état final d'énergie  $E_{n_f}$ .

$$\sigma_{fi} = \frac{k_f}{k_i} \int |f_B(\theta, \varphi)|^2 d\Omega \quad (4.28)$$

La conservation de l'énergie totale du système, qui, par ailleurs coïncide avec la condition de résonance dans le cas où la perturbation est indépendante du temps, s'écrit alors :

$$E_{n_f} - E_{n_i} = \frac{1}{2} k_f^2 - \frac{1}{2} k_i^2 \quad (4.29)$$

d'où on tire

$$k_f = \sqrt{k_i^2 + 2(E_{n_f} - E_{n_i})}. \quad (4.30)$$

Si  $E_{n_i}$  désigne l'énergie du niveau fondamental de l'atome, l'électron incident peut exciter l'atome si  $E_{n_f} > E_{n_i}$ . On appelle alors  $\sigma_{fi}$  section efficace d'excitation de l'atome.

Vu la complexité de l'expression donnant l'amplitude de diffusion, nous ferons une intégration numérique de l'équation (4.28). A titre d'exemple, nous allons évaluer les sections efficaces d'excitation de l'hydrogène et de l'hélium ionisé pour la transition du niveau  $n = 1$  au niveau  $n = 2$ . Les fonctions d'onde radiales de l'atome d'hydrogène étant parfaitement connues, on peut calculer numériquement la matrice de diffusion. Pour cela nous aurons besoin des fonctions radiales des états  $1s$  et  $2s$  données dans

la littérature par :

$$R_{1s}(r) = 2 Z^{3/2} e^{-Z/2r} \quad (4.31)$$

$$R_{2s}(r) = 2 Z^{3/2} \left(1 - \frac{Z}{2} r\right) e^{-Z/2r} \quad (4.32)$$

Pour l'hélium ionisé une fois  $H_e^+$ , la fonction d'onde est donnée par [21] pour l'état fondamental:

$$R_{1s}(r) = 2 Z^{3/2} e^{-Zr} \quad (4.33)$$

et pour la fonction d'onde de l'état du continuum (état de l'électron éjecté), il nous faut résoudre l'équation radiale radiale suivante :

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + 2\left(E + \frac{1}{r}\right) R = 0 \quad (4.34)$$

Introduisons au lieu des variables  $E$  et  $r$ , les nouvelles quantités  $n$  et  $\rho$  définies comme suit :

$$n = -\frac{i}{\sqrt{2E}} = \frac{i}{k}, \quad \rho = \frac{2r}{n} = 2ikr \quad (4.35)$$

où  $k$  est la norme du vecteur d'onde de l'électron éjecté hors du cortège atomique. Le spectre continu correspond aux énergies positives donc à  $n$  imaginaire pur. L'équation (4.34) devient en tenant compte des nouvelles variables

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] R = 0 \quad (4.36)$$

Pour résoudre cette équation, nous commençons par son comportement asymptotique c'est à dire pour les  $\rho$  assez grands. Dans ces conditions l'équation (4.36) devient en négligeant les termes en  $1/\rho$  et  $1/\rho^2$

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} = \frac{R}{4} \quad (4.37)$$

qui a pour solutions  $R_- = e^{-\rho/2}$  et  $R_+ = e^{\rho/2}$ . La solution évanescence à l'infini, qui seule nous intéresse se comporte donc pour les grands  $\rho$  comme  $R_-$ . Il est naturel de prendre la substitution

$$R(\rho) = \rho^\ell e^{-\rho/2} \omega(\rho) \quad (4.38)$$

où  $\omega(\rho)$  est une fonction de  $\rho$  à déterminer. En portant l'expression de  $R$  de (4.38) dans l'équation (4.36) on obtient :

$$\rho \frac{d^2 \omega}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{d\omega}{d\rho} + (n - \ell - 1)\omega = 0 \quad (4.39)$$

La solution de l'équation (4.39) satisfait à la condition de finitude pour  $\rho = 0$  est la fonction hypergéométrique dégénérée [3]

$$\omega(\rho) = F(-n + \ell + 1, 2\ell + 2, \rho) \quad (4.40)$$

Les fonctions propres radiales du spectre continu s'écrivent alors

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{C_{k,\ell}}{(2\ell + 1)!} (2kr)^\ell e^{-ikr} F(i/k + \ell + 1, 2\ell + 2, 2kr) \quad (4.41)$$

L'indice  $n$  est remplacé par  $k$  pour rappeler que se sont des fonctions radiales du continuum. Cela ne change en rien puis que ces deux grandeurs sont reliées par la relation univoque de l'équation (4.35). L'expression asymptotique de la fonction définie par (4.41) peut s'écrire [3] :

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{2}{r} \sin(kr + \frac{1}{k} \ln(2kr) - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_\ell) \quad (4.42)$$

avec

$$\delta_\ell = \arg \Gamma(\ell + 1 - i/k) \quad (4.43)$$

La relation (4.42) est le premier terme du développement de (4.41). Ce résultat est conforme à l'expression générale (3.11) des fonctions radiales normalisées du spectre continu ( $E > 0$ ). L'expression (4.42) présente le terme logarithmique sous le sinus. Mais comme  $\ln(r)$  décroît avec  $r$  plus lentement que  $r$  lui-même, sa présence n'affecte pas les calculs de normalisation des fonctions radiales du spectre continu [3]. Pour la transition  $1s \rightarrow 2s$ , nous calculons l'expression (4.15) donnant l'intégrale radiale en tenant compte des relations (4.31) et (4.32), on obtient

$$F_0 = -\frac{(2Z)^4 K^2}{(K^2 + \gamma)^3} \quad \gamma = \frac{9}{4} Z^2 \quad (4.44)$$

Cette expression nous permet de déterminer complètement la section efficace différentielle' pour la transition  $1s \rightarrow 2s$ . L'expression de la section efficace différentielle devient alors

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2^6 \frac{k_f}{k_i} \frac{Z_p^2 Z^4}{(K^2 + \gamma)^6} \quad (4.45)$$

Nous rappelons l'expression de la norme du moment transféré

$$K^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos(\theta) \quad (4.46)$$

où  $\theta$  est l'angle de diffusion. A partir de la formule (4.45), nous représentons la variation de la section efficace différentielle d'excitation pour l'atome d'hydrogène et l'atome d'hélium ionisé. Ces variations sont respectivement données par les figures 4.1 et 4.2 Pour calculer la section efficace intégrale d'excitation correspondante, nous

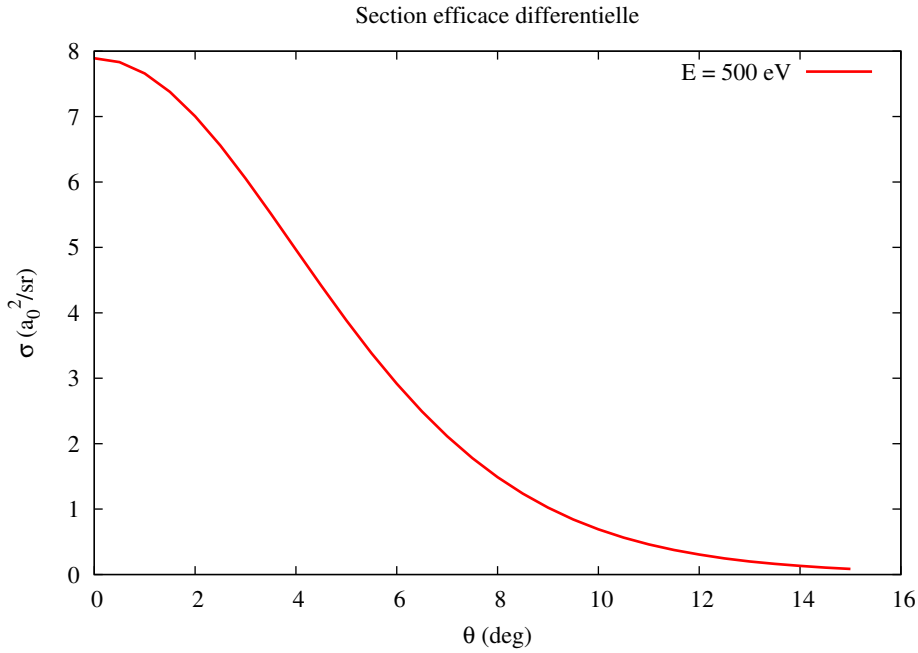


Figure 4.1: Variation de la section efficace différentielle d'excitation pour l'atome d'hydrogène.

allons effectuer changement de variable  $X = K^2$ . Ce qui nous permet de reformuler une nouvelle fonction

$$f(X) = -\frac{(2Z)^4}{(X + \gamma)^3} \quad (4.47)$$

alors la section efficace intégrale s'écrit

$$\sigma(E) = \frac{2Z_p^2}{E} \int_{X_{\min}}^{X_{\max}} [f(X)]^2 dX \quad (4.48)$$

avec  $X_{\min} = (k_i - k_f)^2$  et  $X_{\max} = (k_i + k_f)^2$ . Cette dernière intégrale se fait aisément en faisant un changement de variable de la façon suivante  $Y = X + \gamma$  et on trouve après intégration

$$\sigma(E) = \frac{2^9 Z^8}{5E} \left( \frac{1}{Y_{\min}^5} - \frac{1}{Y_{\max}^5} \right) \quad (4.49)$$

avec  $Y_{\min} = X_{\min} + \gamma$  et  $Y_{\max} = X_{\max} + \gamma$ . Dans le cas des énergies élevées les bornes d'intégration peuvent se ramener respectivement à :  $X_{\min} = 0$  et  $X_{\max} = 8E$ . Ce qui

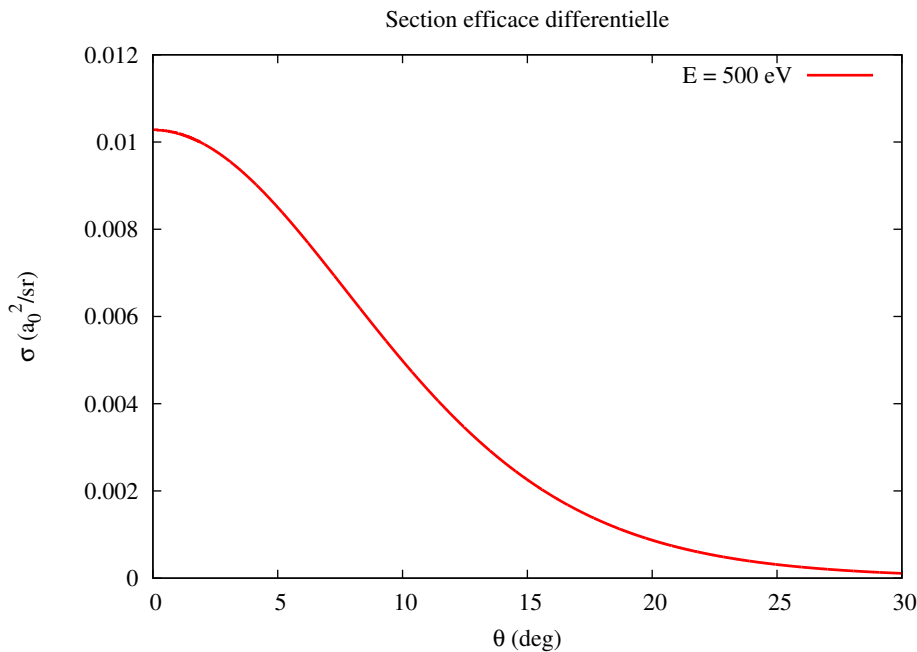


Figure 4.2: Variation de la section efficace différentielle d'excitation pour l'atome d'hélium ionisé.

donne la section efficace d'excitation des atomes par impact d'électrons sous la forme suivante :

$$\sigma(E) = \frac{2^{19}}{5 \cdot 3^{10} Z^2 E} \left( 1 - \frac{1}{(1 + 8 E/\gamma)^5} \right) \quad (4.50)$$

Nous avons représenté sur les graphes 4.3 et 4.4 à l'aide de l'équation (4.49), la section efficace d'excitation en fonction de l'énergie des électrons incidents, respectivement de l'atome d'hydrogène et de l'atome d'hélium ionisé pour la transition  $1s \rightarrow 2s$ . Les deux figures matérialisent la section efficace intégrale d'excitation respectivement de l'hydrogène et de l'hélium ionisé une fois. Les différentes courbes commencent par une certaine valeur de l'énergie de l'électron incident différente de la valeur nulle. Elles croient rapidement jusqu'à une valeur maximale. Il est important de souligner que les courbes ne peuvent en aucun cas rencontrer l'axe des ordonnées. Cela est prévisible à partir de l'équation (4.30), puis que la norme du vecteur d'onde ne peut pas être un imaginaire pur dans cette étude. Dans ce domaine d'énergie on peut affirmer que les processus inélastiques sont largement prédominants, car la différence d'énergie entre les niveaux  $1s$  et  $2s$  est comparable à l'énergie de l'électron incident. A partir de la valeur maximale, on a une décroissance progressive de la section efficace. Dans ce

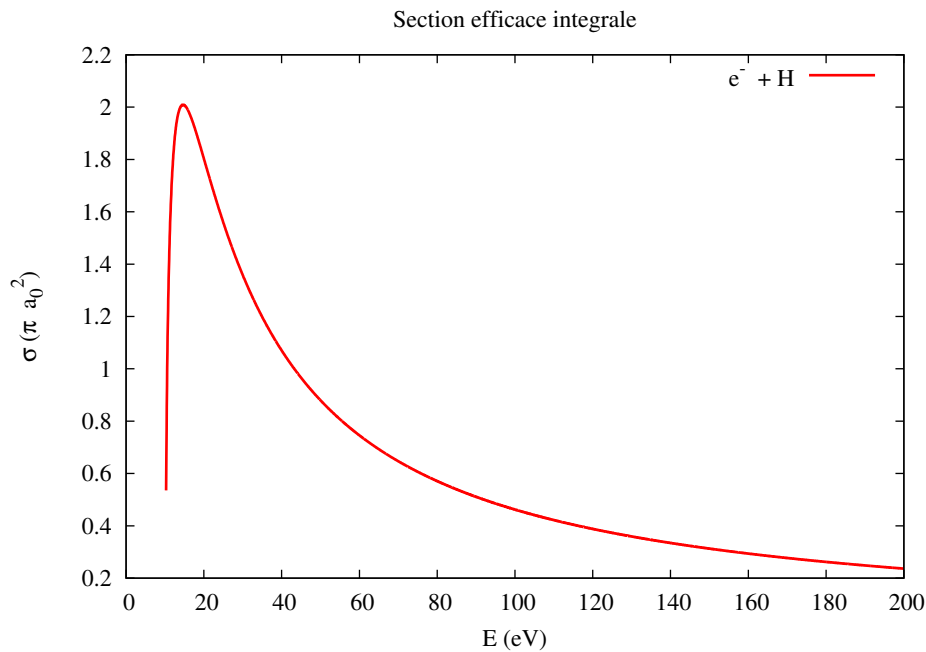


Figure 4.3: Variation de la section efficace d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact d'électrons en unités atomiques u.a en fonction de l'énergie incidente.

domaine d'énergie les processus élastiques dominant. L'énergie de l'électron incident devient largement supérieure au gap d'énergie entre les niveaux précités. Du côté la perte d'énergie par l'électron incident devient négligeable.

### 4.3 Conclusion

Nous avons exprimé la probabilité d'excitation et d'ionisation d'un atome en collision avec les électrons en fonction de leur énergie. Dans l'approximation de Born nous remarquons que la section efficace d'excitation et d'ionisation dépend étroitement de l'énergie des électrons incidents. On remarque que les courbes n'atteignent pas la valeur zéro. Cela montre que la transition d'un niveau à un autre n'est possible que pour une énergie limite de la particule incidente. Ce résultat était prévisible à partir de la relation (4.30) donnant la norme du vecteur d'onde diffusé.

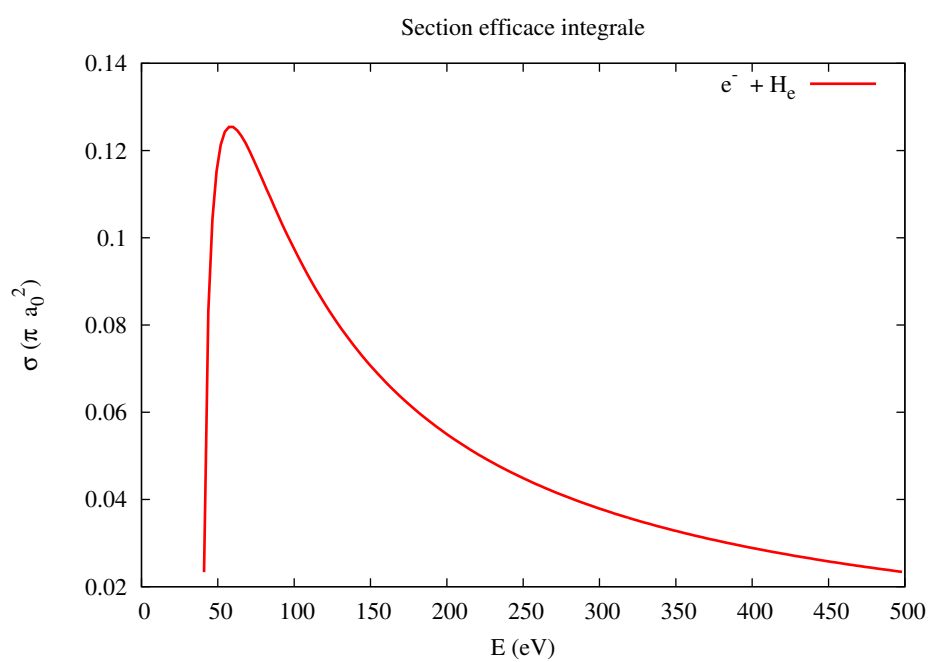


Figure 4.4: Variation de la section efficace d'excitation de l'atome d'hélium par impact d'électrons en unités atomiques u.a en fonction de l'énergie incidente.





## Conclusion

Nous nous sommes intéressés à l'étude de la collision élastique et inélastique entre les électrons et les atomes d'hydrogène et d'hélium.

Dans ce travail, nous avons utilisé la théorie de Born et la théorie de Faxen-Holtzmark, pour établir l'expression de l'amplitude de diffusion.

Le calcul théorique de l'amplitude de diffusion de l'électron par l'atome est effectué à partir de la forme asymptotique de la fonction d'onde du système et de l'énergie d'interaction. L'amplitude de diffusion dans l'approximation de Born, n'est rien d'autre que la transformée de Fourier du développement de l'énergie d'interaction suivant les ondes planes. La méthode utilisée à ces limites puisque nous avons considéré que le premier terme du développement de la fonction d'onde (forme asymptotique). En effet les termes d'ordre supérieurs du développement en puissance de l'énergie d'interaction sont supposés négligeable. Le calcul de l'amplitude de diffusion nous a permis de déterminer la section efficace différentielle. On note une nette dépendance de la section efficace différentielle à l'énergie de l'électrons incident.

L'approximation de Born donne des résultats satisfaisants du calcul des sections efficaces différentielles. La moyenne d'erreurs est dans l'ensemble de 10 %, ce qui reste acceptable. *Les données qu'on peut obtenir dans différentes conditions expérimentales ne se laissent pas disposer dans un seul tableau et doivent être considérées comme complémentaires les unes des autres* [4]



# Appendix **A**

## Code Fortran pour les calculs

### A.1 Codes pour le chapitre premier

```
1
2 ! CALCUL DE LA SECTION DIFFERENTIELLE POUR LE D.E.A
3 ! CREE PAR SAIDOU DIALLO LE 08 JUIN 2010
4 ! =====
5 !!           METHODE DE BORN
6 ! =====
7
8
9 PROGRAM DSIGMA
10    IMPLICIT NONE
11    INTEGER, PARAMETER :: Z = 2
12 ! REAL, PARAMETER :: DT = 0.01
13    REAL :: T, DT, E, RES1, RES2, RES3
14    REAL :: TMIN, TMAX, PI
15
16    OPEN(101, FILE='dsigma.dat')
17    WRITE(*,*) "DONNER L'ENERGIE E DE L'ELECTRON INCIDENT"
18 ! READ (*,*) E
19 ! WRITE(*,*) " DONNER L'ECRANTAGE "
20 ! READ(*,*) A
21    WRITE(*,*) "DONNER LES BORNES DE L'ANGLE DE DIFFUSION Tmin, Tmax ET DT"
22    READ(*,*) TMIN, TMAX, DT
23
24    PI = 4.*ATAN(1.0)
```

```

25 | E = E/27.2114                ! CONVERSION EN UNITE ATOMIQUE
26 | E = TMN/27.211
27 |
28 | DO WHILE (E <= TMAX/27.211)
29 |
30 |     CALL DSIG(1.42,Z,E,10.0,RES1)
31 |     CALL DSIG(1.42,Z,E,15.0,RES2)
32 |     CALL DSIG(1.42,Z,E,20.0,RES3)
33 |
34 |     WRITE(101,'(1X, F8.2, 2X, 3E14.4)') E*27.2114, RES1, RES2, RES3
35 |
36 |     E = E + DT
37 |
38 | ENDDO
39 | CLOSE(101)
40 |
41 | CONTAINS
42 |
43 |     SUBROUTINE DSIG(A,Z,E,T,RES)
44 |     IMPLICIT NONE
45 |     INTEGER      :: Z
46 |     REAL         :: A, E, T
47 |     REAL         :: RES
48 |
49 |     RES = 4.0*Z**2/(A*A + 8.0*E*SIN(PI*T/360.0)*SIN(PI*T/360.0))**2
50 |
51 |     END SUBROUTINE DSIG
52 |
53 | END PROGRAM DSIGMA

```

```

1 |
2 | ! CALCUL DE LA SECTION INTEGRALE POUR LE D.E.A
3 | ! CREE PAR SAIDOU DIALLO LE 08 JUIN 2010
4 | ! =====
5 | !!           METHODE DE BORN
6 | ! =====
7 |
8 |

```

```
9
10 PROGRAM SIGMA
11     IMPLICIT NONE
12     INTEGER, PARAMETER :: Z = 2
13     REAL, PARAMETER :: DE = 0.01
14     REAL :: A, E, RES
15     REAL :: EMIN, EMAX
16
17     OPEN(101, FILE='sigma.dat ')
18     WRITE(*,*) "DONNER L'ECRANTAGE "
19     READ (*,*) A
20     WRITE(*,*) "DONNER LES BORNES INF ET SUP DE E Emin ET Emax"
21     READ(*,*) EMIN, EMAX
22
23     EMIN = EMIN/27.2114           ! conversion en u.a
24     EMAX = EMAX/27.2114
25
26     E = EMIN
27
28     DO WHILE (E <= EMAX)
29
30         CALL SIG(Z,A,E,RES)
31
32         WRITE(101, '(1X, F8.2, 2X, E14.4) ') 27.2114*E, RES
33
34         E = E+ DE
35
36     ENDDO
37     CLOSE(101)
38
39
40     CONTAINS
41
42     SUBROUTINE SIG(Z,A,E,RES)
43     INTEGER :: Z
44     REAL :: A, E, PI
45     REAL :: RES
46
47     PI = 4.*ATAN(1.0)
```

```

48
49 RES = 16.0*PI*Z**2/(A**2 + 8.0*E)/A**2
50
51 END SUBROUTINE SIG
52
53 END PROGRAM SIGMA

```

## A.2 Codes pour le chapitre deuxième

```

1
2 ! CALCUL DE LA SECTION DIFFERENTIELLE POUR LE D.E.A
3 ! CREE PAR SAIDOU DIALLO LE 08 JUIN 2010
4 ! =====
5 !!           FAXEN – HOLZMARK
6 ! =====
7
8 PROGRAM FSIG
9
10 IMPLICIT NONE
11
12 REAL          :: PI, TMIN, TMAX, T, ALPHA, D0, D, E, DSIG
13 REAL, PARAMETER :: DT = 2.0
14 INTEGER       :: I, N
15 COMPLEX       :: W
16 REAL          :: LEGENDRE
17
18 OPEN(101, FILE='fdsigma.dat ')
19 WRITE(*,*) "DONNER L'ENERGIE E DE L'ELECTRON INCIDENT"
20 READ (*,*) E
21 ! WRITE(*,*) "DONNER LES BORNES DE L'ANGLE DE DIFFUSION Tmin ET Tmax"
22 ! READ(*,*) TMIN, TMAX
23 TMIN = 0.0
24 TMAX = 180.0
25 PI = 4.*ATAN(1.0)
26 T = TMIN
27 E = E/27.2114           ! CONVERSION EN UNITES ATOMIQUES

```

```

28
29 ALPHA = 1.38
30 N = 10      ! NOMBRE DE TERME SUR LA SOMMATION
31
32 DO WHILE (T <= TMAX)
33
34     D0 = ATAN(-1.0/SQRT(8.0*E) - PI*ALPHA*(2.0*E)/3.0)
35     W = EXP(2.*CMPLX(0.0,D0)) - 1.0
36
37     DO I = 1, N
38
39     D = ATAN(PI*ALPHA*SQRT(2.0*E)/(2.0*I + 3.0)/(2.0*I + 1.0)/(2.0*I -
40         1.0))
41     W = W + (2*I + 1.0)*(EXP(2.*CMPLX(0.0,D)) - 1.0)*LEGENDRE(I,COS(PI*T
42         /180.0))
43
44     END DO
45
46     DSIG = ABS(W/SQRT(8.0*E))*ABS(W/SQRT(8.0*E))*(0.529177249)**2
47
48     WRITE(101,'(1X,F8.2,2X,E14.4)') T, DSIG
49
50     T = T + DT
51
52 END DO
53
54 CLOSE(101)
55 END PROGRAM FSIG
56
57 ! CALCUL DES POLYNOMES DE LEGENDRE A PARTIR DE LA SOMMATION
58 !
59 ! =====
60 ! =
61 !  $P_N(X) = 1/2^N \sum_{K=0}^N (C_K^N)^2 (X-1)^{N-K} (X+1)^K$ 
62 ! =
63 ! =====
64 FUNCTION LEGENDRE(N,X)

```



```

65      IMPLICIT NONE
66
67      INTEGER      :: N, K, FACTORIEL
68      REAL         :: X, PN, LEGENDRE
69
70      IF (N == 0) LEGENDRE = 1.0
71
72      PN = (X - 1.0)**N
73
74      DO K =1, N
75
76          PN = PN + (REAL(FACTORIEL(N)) / REAL(FACTORIEL(K)*FACTORIEL(N - K)))
              **2 &
77              *(X - 1.0)**(N-K)*(X + 1.0)**K
78
79      ENDDO
80
81      LEGENDRE = PN/2.0**N
82
83  END FUNCTION LEGENDRE
84
85
86  FUNCTION FACTORIEL(N)
87      IMPLICIT NONE
88
89      INTEGER      :: N, I, S, FACTORIEL
90
91      IF (N == 0) FACTORIEL = 1
92
93      S = 1
94
95      DO I = 2, N
96
97          S = I*S
98
99      ENDDO
100
101      FACTORIEL = S
102

```

103 **END FUNCTION FACTORIEL**

```

1
2 ! CALCUL DE LA SECTION DIFFERENTIELLE POUR LE D.E.A
3 ! CREE PAR SAIDOU DIALLO LE 08 JUIN 2010
4 ! =====
5 !!           FAXEN – HOLZMARK
6 ! =====
7
8 PROGRAM FSIG
9
10     IMPLICIT NONE
11
12     REAL           :: PI, D0, D, EMIN, EMAX, E, ALPHA, SIG
13     REAL, PARAMETER :: DE = 0.2
14     INTEGER       :: I
15
16     OPEN(101, FILE= 'fsigma.dat ')
17
18     WRITE(*,*) "DONNER LES BORNES DE L'ENERGIE Emin ET Emax"
19     READ(*,*) EMIN, EMAX
20
21     EMIN = EMIN/27.2114
22     EMAX = EMAX/27.2114
23     PI = 4.*ATAN(1.0)
24     ALPHA = 1.38
25     E = EMIN
26
27     DO WHILE (E <= EMAX)
28
29         D0 = ATAN(-1.0/SQRT(8.0*E) - PI*ALPHA*SQRT(2.0*E)/3.0)
30         SIG = SIN(D0)*SIN(D0)
31
32         DO I = 1, 100
33
34         D = ATAN(PI*ALPHA*SQRT(2.0*E)/(2.0*I + 3.0)/(2.0*I + 1.0)/(2.0*I -
35             1.0))
36         SIG = SIG + (2*I + 1.0)*SIN(D)*SIN(D)

```

```

36
37     END DO
38
39     SIG = 2.0*SIG/(E)  ! EN UNITE  PI A_0^2
40
41     WRITE(101, '(1X, F8.2, 2X, E14.4) ') 27.2114*E, SIG
42
43     E = E + DE
44
45     END DO
46
47     CLOSE(101)
48
49 END PROGRAM FSIG

```

### A.3 Codes pour le chapitre troisième

```

1
2 ! CALCUL DE LA SECTION EFFICACE DIFFERENTIELLE D'EXCITATION
3 ! POUR LA TRANSITION 1S —> 2 S
4 ! POUR L'HYDROGENE ET L'HELIUM
5 ! ECRIT PAR SAIDOU DIALLO LE 27/ JUIN 2010
6
7 PROGRAM DSIG1S2S
8     IMPLICIT NONE
9     INTEGER, PARAMETER :: N = 1
10    REAL :: Z, E, EI, EF, KI, KF, K
11    REAL :: T, DT, TMIN, TMAX, PI, DSIG, RES
12    ! N LES NIVEAU ATOMIQUÉ
13
14    OPEN(101, FILE='dsig1s2s.dat')
15    WRITE(*,*) "DONNER L'ENERGIE E DE L'ELECTRON INCIDENT"
16    READ (*,*) E
17    ! WRITE(*,*) " DONNER L'ECRANTAGE "
18    ! READ(*,*) A

```

```

19  WRITE(*,*) "DONNER LES BORNES DE L'ANGLE DE DIFFUSION Tmin, Tmax ET DT
    "
20  READ(*,*) TMIN, TMAX, DT
21      Z = 1.0
22      E = E/27.2114          ! CONVERSION EN UNITE ATOMIQUE
23      EI = - Z**2/(2.0*N**2)
24      EF = - Z**2/(2.0*(N+1)**2)
25      KI = SQRT(2.0*E)
26      KF = SQRT(2.0*(E + EF - EI))
27
28      PI = 4.*ATAN(1.0)
29      T = TMIN
30  !   DT = 0.01
31  DO WHILE (T <= TMAX)
32
33      K = SQRT(KI**2 + KF**2 - 2.0*KI*KF*COS(PI*T/180.0))
34      CALL FF(Z, K, RES)
35      DSIG = 2.0**6*(KF/KI)*RES
36
37      WRITE(101, '(1X, F8.2, 2X, 3E14.4) ') T, DSIG
38
39      T = T + DT
40
41  ENDDO
42  CLOSE(101)
43
44
45  CONTAINS
46
47  SUBROUTINE FF(Z,K,S)
48  IMPLICIT NONE
49  REAL      :: Z, K, S
50
51      S = Z**4/(K**2 + 9.0/4.0*Z**2)**6
52
53  END SUBROUTINE FF
54
55  END PROGRAM DSIG1S2S

```

```

1
2 ! CALCUL DE LA SECTION EFFICACE INTEGRALE D'EXCITATION
3 ! POUR LA TRANSITION 1S —> 2 S
4 ! POUR L'HYDROGENE ET L'HELIUM
5 ! ECRIT PAR SAÏDOU DIALLO LE 27/ JUIN 2010
6 PROGRAM SIG1S2S
7 ! Programme de test des differentes methodes d'integration
8 ! des fonctions reelles.
9 !
10 ! Dominique Lefebvre janvier 2007
11
12
13     IMPLICIT NONE
14
15 ! Declaration des variables
16     INTEGER    :: Z, N
17     REAL       :: SIG, E, EMIN, EMAX, DE
18
19     OPEN(101, FILE='sig1s2s.dat')
20     WRITE(*,*) "DONNER LES BORNES DE L'ENERGIE ET LE PAS : Emin, Emax ET
21         DE et Z"
22
23     READ(*,*) EMIN, EMAX, DE, Z
24
25     N = 1
26     !     EMIN = 41.0 eV pour l'helium et 10.3 eV pour l'hydrogene
27     E = EMIN/27.2114
28     !     DE = 0.1
29     DO WHILE (E <= EMAX/27.2114)
30
31         CALL FF(Z,N,E, SIG)
32
33         WRITE(101, '(1X, F8.2, 2X, E14.4)') E*27.2114, SIG
34
35     E = E + DE
36
37 ENDDO

```

```

36  CLOSE(101)
37
38
39  END PROGRAM SIG1S2S
40
41  SUBROUTINE  FF(Z,N,E,RES)
42  IMPLICIT NONE
43  INTEGER      ::  Z, N
44  REAL, INTENT (IN)  ::  E
45  REAL          ::  A, D, YMIN, YMAX, RES
46  ! D GAP D'ENERGIE ENTRE LES NIVEAUX
47  ! E ENERGIE INCIDENTE
48      A = (9.0/4.0)*Z**2
49      D = Z**2/2.0*(1.0/N**2 - 1.0/(N + 1.0)**2)
50      YMIN = (SQRT(2.0*E) - SQRT(2.0*(E - D)))**2 + A
51      YMAX = (SQRT(2.0*E) +SQRT(2.0*(E - D)))**2 + A
52
53      RES = (2.0**9*Z**8)/(5.0*E)*(1.0/YMIN**5 - 1.0/YMAX**5)
54
55  END SUBROUTINE  FF

```



# Bibliography

- [1] Elie Belorizky Yves Ayant. *Cours de Mecanique Quantique*. Dunod, 1969.
- [2] Albert. Messiah. *Mecanique Quantique 2*, volume 2. Dunod, 2-ieme edition, 1995.
- [3] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique theorique: Mecanique quantique*, volume 3. Mir Moscou, troisieme edition, 1975.
- [4] L. Tarassov. *Physique quantique et operateurs lineaires*. Edition Mir. Moscou, 1980.
- [5] F. W. Byron and Charles J. Joachain. Elastic scattering of electrons and positrons by complex atoms at intermediate energies. *Phys. Rev. A*, 15(1):128–146, Jan 1977.
- [6] R H J Jansen et al. Absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons by helium, neon, argon and molecular nitrogen. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 9:185, 1976.
- [7] J. P. Bromberg. Elastic scattering of electrons by molecules at intermediate energies. i. general theory. *J. Chem. Phys.*, 61:963, 1974.
- [8] Oda et al. Energy and angular distributions of secondary electrons resulting from ionizing collisions of electrons with helium and krypton. *J. Phys. Soc. Jpn*, 33:462, 1972.
- [9] J. A. Rees Sethuraman and J. R. Gibson. Angular differential cross sections for elastically scattered electrons in helium. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 7(3):1741, 1974.



- [10] F J de Heer and R H J Jansen. Total cross sections for electron scattering by he. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 10:3741, 1977.
- [11] V. Ouvarov A. Nikiforov. *Fonctions Speciales de la Physique Mathematique*. Mir Moscou, 1983.
- [12] D. Blokhintsev. *Principes de Mecanique Quantique*. Mir Moscou, 1981.
- [13] Takashi Ta-You Wu. *Quantum theory of scattering*. Prentice Hall, 1962.
- [14] Otto Hinckelmann and Larry Spruch. Low-energy scattering by long-range potentials. *Phys. Rev. A*, 3(2):642–648, Feb 1971.
- [15] Mauro Masili and Anthony F. Starace. Static and dynamic dipole polarizability of the helium atom using wave functions involving logarithmic terms. *Phys. Rev. A*, 68(1):012508, Jul 2003.
- [16] C. Huiszoon and W.J. Briels. The static dipole polarizabilities of helium and molecular hydrogen by differential diffusion monte carlo. *Chemical Physics Letters*, 203(1):49–54, 1993.
- [17] Imad Ladadwa Sabre Kais. Critical behavior of electron impact ionization of atoms. *International Journal of Quantum Chemistry*, 80:575–581, 2000.
- [18] D. F. Register, S. Trajmar, and S. K. Srivastava. Absolute elastic differential electron scattering cross sections for he: A proposed calibration standard from 5 to 200 ev. *Phys. Rev. A*, 21(4):1134–1151, Apr 1980.
- [19] M. J. Brunger et al. Elastic scattering from helium, absolute experimental cross sections, theory and derived interaction potentials. *Journal of physique B*, 25:1826–1838, 1992.
- [20] T. W. Shyn. Angular distribution of electrons elastically scattered from gases: 2-400 ev on he. i. *Phys. Rev. A*, 22(3):916–922, Sep 1980.
- [21] Xingfu Jia, Qicun Shi, Zhangjin Chen, Ji Chen, and Kezun Xu. Triple differential cross sections for electron-impact ionization of  $he^+$ s. *Phys. Rev. A*, 55(3):1971–1975, Mar 1997.

