

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

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

Département de Physique



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique des rayonnements

Par

Mr. BOUAZZA Boumediene

Sur le thème

Spectre de l'ionisation simple de l'anti-Hydrogène par impact de Positron

Soutenu le /07/2019 devant le jury composé de :

M. BOUDRAA Kamel-Eddine	M.C.A	U. Saïda	Président
M. SAHLAOUI Mohammed	M.C.A	ESSAT-Tlemcen	Encadreur
M. LASRI Boumediene	Professeur	U. Saïda	Co-Encadreur
M. SAHABI TOUFIK	M.C.B	U. Saïda	Examineur

Année Universitaire 2018 – 2019

Bibliographie du chapitre III

- [1] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 41, 145201. (2008).
- [2] Bethe H A. Ann. Phys. 5, 325 (1930).
- [3] Sahlaoui M. Thèse Doctorat : *Application du Formalisme Variationnel à l'ionisation de la Molécule d'Eau*. Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen. Algérie. (2012) (on line <http://dspace.univ-tlemcen.dz/bitstream/112/3757/1/these-SAHLAOUI-Mohammed.pdf>)
- [4] Landau L et Lifchitz E. Mécanique Quantique vol III. Editions Mir. (1967).
- [5] Mc Dowell M R C and Coleman J P. Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions, North-Holland Publishing Company, Amsterdam. (1970).
- [6] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 88, 905–910 (2010)
- [7] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 89, 723–727(2011).
- [8] Sahlaoui M and Bouamoud M. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** 085201 (2012).
- [9] Sahlaoui M, Lasri B and Bouamoud M. Can. J. Phys. **92** 136–140 (2014)
- [10] Marchalant J P, Whelan C T and Walters H R J. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 31, 1141–1178 (1998).
- [11] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 18, 3203 (1985).
- [12] Lewis R R Jr. Phys. Rev. 102, 537–543 (1956).

Dédicace

*A mes chers parents, pour tous leurs sacrifices,
leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs
prières tout au long de mes études,*

*A mes chers frères, **Khatir** pour leur appui et
leur encouragement.*

*A la famille **bouazza** pour leur soutien tout au
long de mon parcours universitaire,*

A tous la promotion master physique rayonnement

Merci d'être toujours présent

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier le bon Dieu le tout Puissant de M'avoir donné la force et le courage de mener à bien ce modeste Travail, également je remercie infiniment mes parents, qui mon Encouragé et aidé à arriver à ce stade de ma formation.

Je tiens à remercier tous ceux et celle qui ont contribué à Finaliser ce modeste travail.

Mes remerciements vont à Docteur **SAHLAUI MOHAMED** mon Encadreur pour m'avoir guidé pour la réalisation de ce projet.

Mes plus grands remerciements vont à Professeur **LASRI BOUMEDIENE**, mon Co-Encadreur pour m'avoir guidé pour la réalisation de ce projet.

Je remercie vivement les étudiants Master physique Pour leur aide morale durant toute la période de préparation.

Je ne saurais oublier mes remerciements à tous mes professeurs et enseignants sans eux je n'en aurais pas pu réussir mes études.

.

Je remercie Dr **BOUDRAA Kemel Eddine**, Maitre de Conférences « A », et Dr. **SAHABI Toufik** maitre de conférence « B », à l'université Dr Tahar Moulay -Saida d'avoir accepté de participer au jury de ce mémoire.

Enfin, 'exprime mes sincères remerciements à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

<u>Introduction générale</u>	1
 <u>Chapitre I : La réaction (e, 2e)</u>	
I-1 Introduction	5
I-2 La réaction de la simple ionisation	7
I-3 Les expériences de la réaction (e,2e)	9
I-3-1 Les conditions cinématiques des expériences	10
I-3-1-1 Géométrie symétrique	12
I-3-1-1-1 Géométrie symétrique coplanaire	12
I-3-1-1-2 Géométrie symétrique non coplanaire	16
I-3-1-2 Géométrie asymétrique	18
I-3-1-2-1 Géométrie asymétrique coplanaire	19
I-3-1-2-2 Géométrie asymétrique non coplanaire	20
 <u>Chapitre II : Section Efficace d'Ionisation</u>	
II-1 Introduction	23
II-2 Notion de section efficace	24
II-3 Section efficace triplement différentielle	27
II-4 Section efficaces doublement différentielle	28
II-5 Section efficaces simplement différentielle	29
II-6 Théorie	30
II-6-1 L'approximation de Born	32
 <u>Chapitre III : Fonction d'onde de l'anti-hydrogène</u>	
III-1 Introduction	38
III-2 L'atome d'anti-hydrogène	39
III-3 Solution de l'équation angulaire	43
 <u>Chapitre IV : Section Efficace l'Ionisation de l'anti-hydrogène.</u>	
IV-1 Introduction	48
IV-2 Section efficace triplement différentielle	48
IV-3 Deuxième Approximation de Born	53
 <u>Chapitre V : Résultats et Discussions</u>	
V-1 Introduction	55
V-2 Résultats et discussions	56
 <u>Conclusion Générale</u>	66

Introduction Générale

En 1928, le physicien Paul Dirac découvre une version relativiste de l'équation de Schrödinger pour un électron [1]. De façon inattendue par ce physicien, sa formulation mathématique du problème non seulement elle fournit le moment cinétique intrinsèque d'un électron et son spin, mais aussi son moment magnétique. Mais le plus étonnant, pour Dirac et ses collègues c'est que son équation fournit aussi des solutions avec des énergies négatives. Ce qui conduit le physicien Paul Dirac à postuler l'existence d'un autre type de matière connue aujourd'hui par l'antimatière. L'existence de particules de l'antimatière a été confirmée par la découverte du positron (l'antiélectron) par Anderson en 1932 [2]. Cette découverte est l'une des plus belles preuves que jusqu'à un certain temps, la science était construite sur des bases qui ne permettent pas de bien comprendre notre univers.

L'équation de Dirac est devenue l'une des bases de la théorie quantique des champs qui a cependant mis les scientifiques en face d'une énigme de cosmologie. Cette équation postule qu'à toute particule chargée existe une image miroir qui est une autre particule ayant la même masse, le même spin mais une charge électrique de signe opposé. Nous savons actuellement qu'il existe des antiélectrons, et des anti-nucléons. L'existence de la matière et l'antimatière, a montré que notre univers est gouverné par une certaine asymétrie de la matière et l'antimatière. Cependant, ce qui reste encore inconnu c'est pourquoi il y a autant de matière que d'antimatière. Peut-être il existe des différences subtiles entre les particules et leurs antiparticules ce qui fait qu'il y a plus de matière que d'antimatière. Nous pouvons supposer aussi que l'antimatière ne se comporte pas comme la matière dans le champ gravitationnel. Peut-être qu'une répulsion existe entre la matière et l'antimatière à cause d'un champ antigravitationnel, ce qui aurait peut-être conduit, à une séparation de l'univers en régions de la matière et d'antimatière. Ainsi du fait des forces de répulsion, ces régions n'auraient donc que peu de contact. Ceci explique, peut-être, pourquoi nous ne observons pas dans le ciel de gigantesques sources de rayons gamma à cause de l'annihilation des particules de matière et d'antimatière.

Actuellement plusieurs recherches expérimentales sur l'antimatière sont en cours pour répondre à ces questions [3,4,5,6,7]. Incluant les tests des symétries fondamentales comme la parité de la charge et des recherches sur l'existence de l'antimatière primordiale, comme le noyau de l'anti-hélium qui sont prioritaires dans les recherches de la physique contemporaine.

Le rôle fondamental de l'atome d'hydrogène dans l'évolution de l'Univers et dans le développement historique de la physique quantique fait de son antimatière, l'atome d'anti-hydrogène, une importance particulière. Les model standard de la science physique actuel requièrent que les atomes d'hydrogène et d'anti-hydrogène ont les mêmes niveaux d'énergies ainsi les mêmes lignes spectrales. Les chercheurs ont réussi à explorer des transitions dites hyperfines, techniquement connues par des transitions 1S-2S pilotées par laser [8,9], similaire à celle donnant la fameuse raie à 21 cm. Aujourd'hui, une autre transition dite 1S-2P, entre les niveaux d'énergie de l'atome de Bohr connue par la raie Lyman- α (découverte en 1906 par Theodore Lyman, dans la région extrême-ultraviolette du spectre de l'hydrogène atomique) a été observée avec de l'antihydrogène [10]. Dans le cas de l'hydrogène, la transition se produit lorsqu'un électron passe du niveau 2P à son niveau fondamentale 1S en émettant un photon à une longueur d'onde de 121,6 nanomètres.

Il existe actuellement un projet connue par le projet GBAR (Gravitational Behaviour of Anti-hydrogen at Rest) au CERN (l'Organisation européenne pour la recherche nucléaire), qui a pour but de mesurer l'accélération de la chute libre des atomes neutres de l'anti-hydrogène dans le champ gravitationnelle terrestre. Les expériences consistent à préparer des ions d'anti-hydrogène (un antiproton et deux positrons), et les refroidir par les ions du béryllium Be^+ à une température moins que 10 μK . Les ions ultrafroids vont donc être photo-ioniser et le temps de chute libre sur une distance connue est mesurer. Les mesures effectuées sur différentes distances permettent de calculer avec une grande précision l'accélération de l'anti-hydrogène dans le champ gravitationnel terrestre [11]. Dans le cadre de l'expérience GBAR, des sections efficaces sont calculés en utilisant la théorie de perturbation afin de caractériser la production des ions d'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}^+$ lors de collisions entre les antiprotons $\bar{p}$ et les atomes du positronium excité Ps (atome constitué d'un électron e^- et un positrons e^+), avec une production intermédiaire

d'antihydrogène $\bar{\text{H}}$ [12]. Dans ce travail, des améliorations sur les réflexions quantiques sont prévus pour l'étude de l'anti-hydrogène afin d'utiliser des méthodes de mesure quantiques [13].

Il est donc très nécessaire actuellement de trouver un formalisme mathématique qui décrit avec précision la collision entre un antiproton $\bar{p}$ et un atome du positronium excité Ps. Cette réaction est équivalente à la collision d'un proton avec un atome d'hydrogène qui est une réaction compliquée à décrire pour des énergies d'incidence faibles, vu que plusieurs processus s'évaluent lorsque le proton s'approche de l'atome et différents types d'évolution de la réaction de collision sont possibles. Dans le travail actuel nous nous sommes d'abord intéressés à une réaction plus simple qui est l'ionisation simple de l'atome d'anti-hydrogène par impact de positron (réaction $(e^+, 2e^+)$) qui représente l'image de la réaction $(e, 2e)$ qui a été intensivement étudiée dans les dernières années et les années précédentes. Pour cette raison nous avons partagé le travail actuel en cinq chapitres. Dans le premier chapitre nous avons donné une description détaillée sur la réaction $(e, 2e)$. Dans le deuxième chapitre nous avons donné une description sur les différentes sections efficaces d'ionisation simple par impact de particules chargées, ainsi qu'une définition de la première et la deuxième approximation de Born. Le troisième chapitre est consacré à la définition de la fonction d'onde de l'atome d'anti-hydrogène. Dans le quatrième chapitre nous avons calculé la section efficace triplement différentielle de l'ionisation simple de l'anti-hydrogène par impact de positron dans le cadre de la première et la deuxième approximation de Born. Le cinquième chapitre est consacré aux résultats et aux discussions. Comme il coutume comme nous avons commencé ce travail par une introduction générale nous terminons par une conclusion générale.

Bibliographie de l'Introduction Générale

- [1] Dirac, P. A. M. *The quantum theory of the electron. Proc. R. Soc. Lond. A* **117**, 610--624 (1928).
- [2] Anderson, C. D. *The positive electron. Phys. Rev.* **43**, 491--494 (1933).
- [3] Bertsche, W. A., Butler, E., Charlton, M. & Madsen, N. Physics with antihydrogen. *J. Phys. B* **48**, 232001 (2015).
- [4] Hori, M. and Walz, J. Physics at CERN's Antiproton Decelerator. *Prog. Part. Nucl. Phys.* **72**, 206--253 (2013).
- [5] The LHCb Collaboration. Measurement of matter--antimatter differences in beauty baryon decays. *Nature Physics* **13**, 391--396 (2017).
- [6] The AMS Collaboration. Antiproton flux, antiproton-to-proton flux ratio, and properties of elementary particle fluxes in primary cosmic rays measured with the Alpha Magnetic Spectrometer on the International Space Station. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 091103 (2016).
- [7] Ahmadi, M. *et al.* Observation of the 1S--2S transition in antihydrogen. *Nature* **541**, 506--510 (2017).
- [8] Parthey, C. G. *et al.* Improved measurement of the hydrogen 1S-2S transition frequency. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 203001 (2011).
- [9] Ahmadi, M. *et al.* Characterization of the 1S--2S transition in antihydrogen. *Nature* **557**, 71--75 (2018).
- [10] Ahmadi, M. *et al.* Observation of the 1S--2P Lyman- α transition in antihydrogen. *Nature* **561**, 211--215 (2018).
- [11] Pérez P *et al.* The GBAR antimatter gravity experiment. *Hyperfine Interactions* **233**, 21--27 (2015).
- [12] Comini P, Hervieux P. A. and Biraben F. *Hyperfine Interactions* **228**, 159 (2014).
- [13] P. Indelicato *et al.* *Hyperfine Interactions* **228**, 141 (2014)

Chapitre I : La réaction (e,2e)

I-1 Introduction

La collision d'une particule chargée avec une cible atomique ou Moléculaire peut conduire à l'excitation ou l'ionisation de la cible. L'intérêt de ces processus est l'étude de la structure de la cible. Les études de ces processus trouvent actuellement de grandes importances, dans l'astrophysique, la physique des plasmas, ainsi qu'en radiobiologie où ils permettent de comprendre les effets radio-induits sur la matière vivante.

Dans ce travail nous allons nous intéresser plus particulièrement à la simple ionisation par impact d'électron. Lorsqu'un électron vient avec une grande vitesse et rentre en collision avec une cible atomique (ou moléculaire) il peut induire l'ionisation d'un ou plusieurs électrons de la cible. Si l'électron incident n'interagit qu'avec un électron de la cible permettant à celui-ci d'être éjecté par la cible, on parle donc de la simple ionisation. Ce processus important en physique atomique et moléculaire est connue par la réaction (e,2e). (**Figure I.1**)

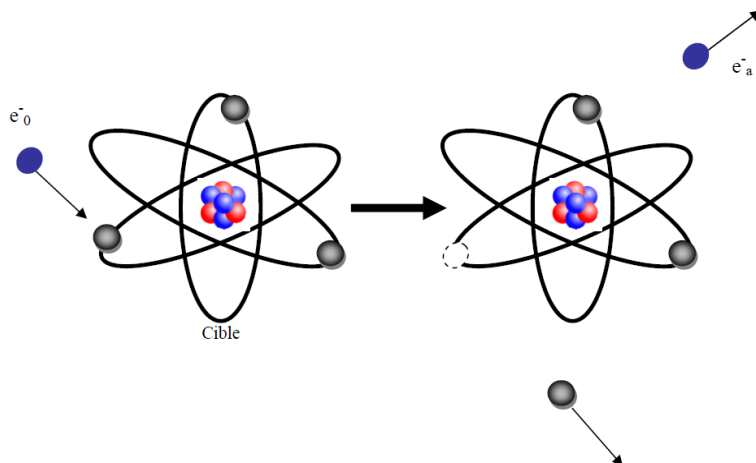


Figure I.1: Le processus de simple ionisation avec l'éjection d'un électron.

Le processus de la simple ionisation par impact électronique peut être représenté comme suit



où C représente la cible atomique ou moléculaire et C^+ l'ion résiduel. Les électrons incident, diffusé et éjecté sont représentés respectivement par, e_i^- , e_s^- et e_e^- . Chaque électron a une énergie E_x et un vecteur quantité de mouvement $\mathbf{k}_x$ ($x = i, s$ ou e).

Du point de vue de la mécanique quantique, les électrons émergeant après la collision sont indiscernables. Les termes diffusé et éjecté sont donc équivalents. Cependant, il d'usage de designer le plus rapide comme étant celui qui a est diffusé, et le plus lent celui qui a été éjecté par la cible.

On parle donc d'expériences (e,2e) lorsque les deux électrons diffusé et éjecté sont détectés en double coïncidence et analysés en fonction de leurs énergies. Ces types d'expériences sont dites complètes, puisque tous les paramètres cinématiques sont déterminés (excepté le spin de l'électron).

Les contraintes cinématiques de la réaction (e,2e) sont alors la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, qui s'écrivent :

$$E_i = E_s + E_e + E_r + \text{PI} \quad (\text{I-2})$$

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_e + \mathbf{Q} \quad (\text{I-3})$$

Dans ces deux équations PI représente l'énergie potentielle d'ionisation correspondant à la quantité d'énergie nécessaire pour arracher un électron de la cible. La cible est considérée dans son état fondamental avant la collision. L'énergie de recul de l'ion, E_r est très petite comparée aux énergies des électrons libres, elle peut donc être négligée dans le bilan énergétique :

$$E_i \approx E_s + E_e + \text{PI} \quad (\text{I-4})$$

Le vecteur $\mathbf{Q}$ qui figure dans l'équation (I-3) représente le moment de recul de l'ion. La grandeur vectorielle $\mathbf{q} = \mathbf{k}_t - \mathbf{k}_s$ est connue par le moment du transfert puisqu'elle représente la quantité du moment transféré du projectile à la cible.

I-2 La réaction de la simple ionisation

Dans ce type de réaction la plupart de l'énergie de l'électron incident est transférée à l'électron éjecté par la cible. Conformément aux conditions usuelles d'expérimentation, nous la réaction est considérer dans le référentiel du laboratoire, où la cible supposée au repos et avec une orientation quelconque, bombardée par un faisceau monocinétique d'électrons d'énergie supérieure au premier potentiel d'ionisation (cf Figure I.2).

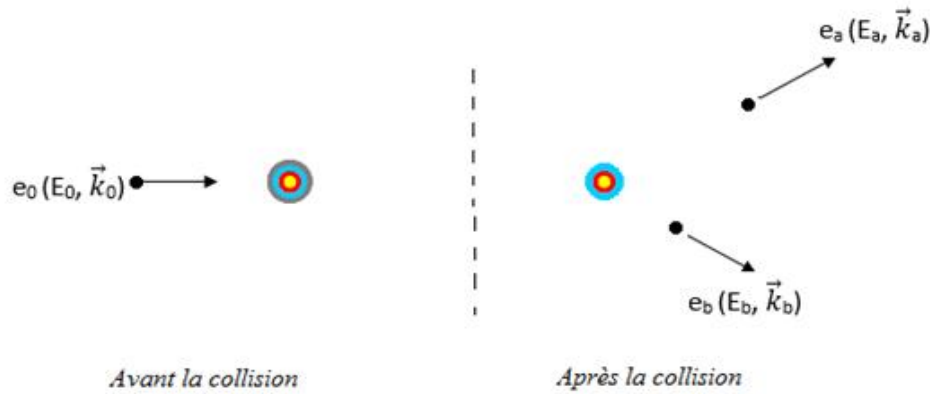
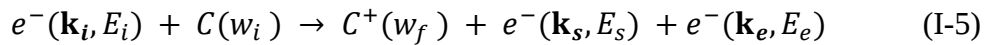


Figure I.2 : Schéma illustrant la réaction (e,2e)

Dans la théorie de la réaction (e,2e) l'électron le plus rapide est considéré comme étant celui qui est diffusé, et l'électron le plus lent est considéré comme étant celui qui est éjecté par la cible. La réaction de la simple ionisation par électronique, peut être résumée dans l'équation :



où $(\mathbf{k}_i, E_i)$, $(\mathbf{k}_s, E_s)$ et $(\mathbf{k}_e, E_e)$ sont les moments et les énergies $E = \frac{k^2}{2}$ (en unités atomiques (u.a)) des électrons incident, diffusé et éjecté, respectivement. $C(w_i)$ est la cible dans son état initial i d'énergie w_i et $C^+(w_f)$ est l'ion dans son état final f d'énergie finale w_f . Malgré l'indiscernabilité des deux électrons émergents (diffusé et éjecté), il est d'usage de représenter l'électron rapide par s (*scattered*) et l'électron lent par e (*ejected*).

Les mesures dans un processus de simple ionisation, sont basées sur la technique de coïncidence des deux charges sortantes. L'avantage de cette technique est la précision dans la détermination des paramètres cinématiques de la réaction (e,2e) puisqu'elle est capable de donner en même temps la mesure des énergies et des angles des deux électrons qui résultent de la même réaction. La conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement sont donc les contraintes cinématiques de ce processus.

Notons le moment de recul de l'ion par le vecteur $\mathbf{Q}$, la conservation des moments exige l'équation vectorielle suivante :

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_s + \mathbf{k}_e + \mathbf{Q} \quad (\text{I-6})$$

La condition de conservation d'énergie donne

$$E_i + w_i = E_s + E_e + w_f + E_r \quad (\text{I-7})$$

avec

$$E_r = Q^2 / (2M_c) \quad (\text{I-8})$$

Évidemment cette dernière représente l'énergie de recul de l'ion. Vu que la masse M_c de la cible est très grande devant la masse d'un électron ($M_c \gg m_e$), l'énergie de recul E_r est forcément très petite devant les énergies des électrons libres. Cette énergie peut donc être négligée dans le bilan énergétique :

$$E_i + w_i = E_s + E_e + w_f \quad (\text{I-9})$$

La réaction (e,2e) peut être schématisée dans la figure I.2, qui montre un électron incident avec un moment $\mathbf{k}_i$ et une énergie E_i qui rentre en collision avec la cible C .

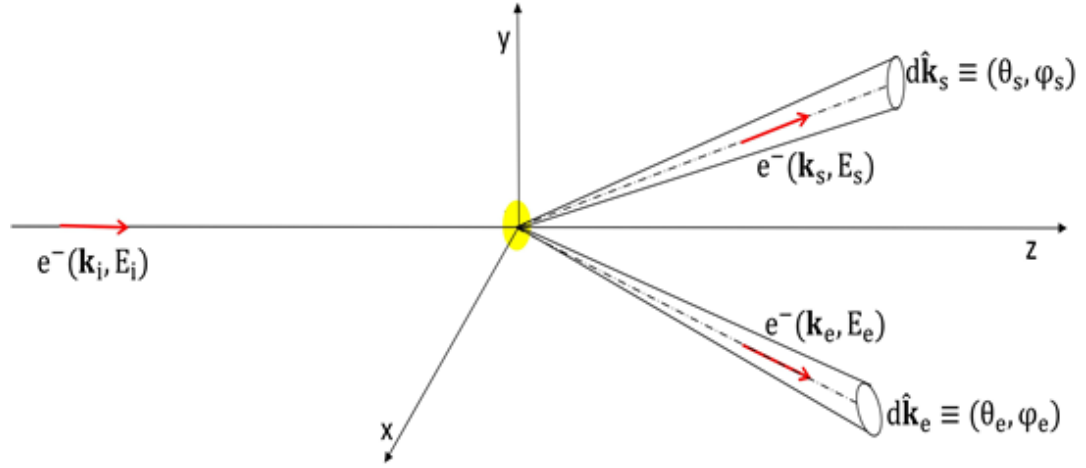


Figure I.2 – Schéma de la réaction (e,2e)

Au moment de la collision le projectile transfère une partie $\mathbf{q}$ du moment à la cible $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$. La quantité $\mathbf{q}$ est connue par le moment de transfert, qui n'est autre que le moment perdu par l'électron incident. Après cette réaction de collision la particule incidente diffuse avec une énergie E_s et un moment $\mathbf{k}_s$ dans la direction définie par les angles polaires θ_s et φ_s . Dans le cas où l'énergie transférée à la cible est supérieure que le potentiel d'ionisation $IP = w_i - w_f$, un électron souvent connue par l'électron actif, va s'éjecté avec une énergie E_e un moment $\mathbf{k}_e$ dans une direction définie par les angles polaires θ_e et φ_e . Notons ici que $d\hat{\mathbf{k}}_s = \sin(\theta_s) d\theta_s d\varphi_s$ et $d\hat{\mathbf{k}}_e = \sin(\theta_e) d\theta_e d\varphi_e$ représentent des éléments des angles solides centrés sur les directions (θ_s, φ_s) et (θ_e, φ_e) , respectivement.

I-3 Les expériences de la réaction (e,2e)

Les expériences de la simple ionisation part impact électronique sont réalisées à partir de 1969 par Armaldi *et col* [1] et Ehrhardt *et col* [2]. Dans ces expériences les deux électrons induits de la même réaction sont détectés en coïncidence. La plupart de ces expériences sont réalisées dans des conditions géométriques coplanaires, c'est-à-dire que

les trois électrons sortants sont détectés dans le même plan contenant les angles θ_s et θ_e par rapport à la direction d'incidence. Pour des conditions cinématiques particulières les expériences sur la réaction (e,2e) permettent d'obtenir des informations sur la densité de charges de la cible avant la collision.

I-3-1 Les conditions cinématiques des expériences

Dans une expérience sur une réaction (e,2e), la cible est généralement considérée dans son état fondamental. Après la collision il en résulte un ion résiduel et deux électrons dans la voie de sortie notés e_s et e_e . Le processus peut être schématisé comme le montre la figure suivante :

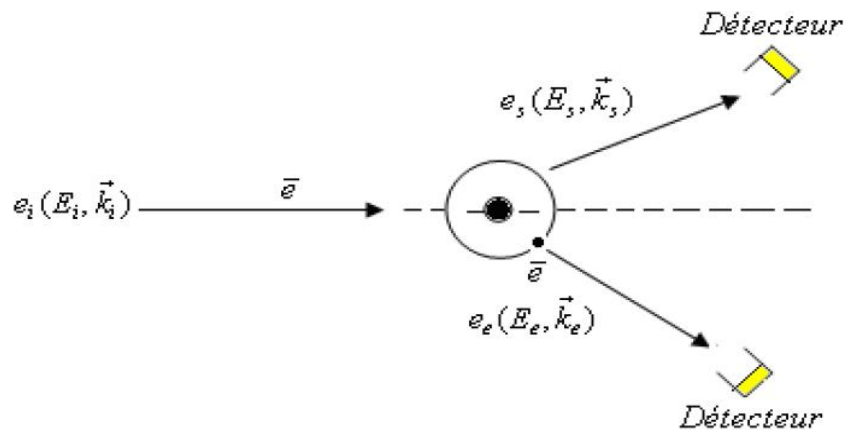


Figure I.3 : Schéma d'une collision (e,2e)

Une réaction de simple ionisation par impact électronique, dit spectroscopique, dépend généralement des énergies d'incidence, de diffusion et d'éjection. Ainsi la valeur du moment de transfert est importante dans ce type de réaction. Les expériences sur la réaction (e,2e) sont connues par leur capacité de fournir directement des informations sur la cible. Ces expériences peuvent être réalisées de deux façons différentes :

- les collisions (e,2e) sont dites symétriques (voir Weigold et Mc Carty (1978) [3]) dans la cas ou les deux électrons diffusé et éjecté sont émis avec la même énergie ($E_s = E_e$).
- les collisions (e,2e) sont dites asymétriques dans le cas ou l'électron diffusé est bien plus rapide que l'électron éjecté ($E_s > E_e$).

Ce type de collisions sont dites coplanaires si les vecteurs quantités de mouvement des électrons incident, diffusé et éjecté se trouvent dans le même plan. Si l'un des vecteurs de ces électrons se trouve à l'extérieur de ce plan, dite plan de collision, la collision est dite non coplaire.

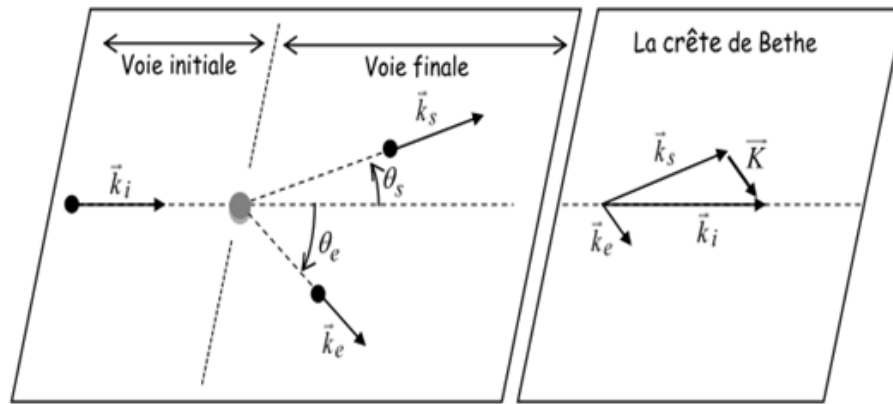


Figure I.4 : Schéma illustrant la collision (e,2e) en géométrie coplanaires.

Géométries	Coplaire	Non-coplaire
Symétrique	$\vec{k}_a$ et $\vec{k}_b$ dans le plan de collision $E_a = E_b$	$\vec{k}_a$ et $\vec{k}_b$ chacun dans un plan, $E_a = E_b$
Asymétrique	$\vec{k}_a$ et $\vec{k}_b$ dans le plan de collision $E_a \neq E_b$	$\vec{k}_a$ et $\vec{k}_b$ chacun dans un plan, $E_a \neq E_b$

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

I-3-1-1 Géométrie symétrique

Dans ce type de collision, les deux électrons diffusé et éjecté sont détectés avec des énergies égales $E_s = E_e$. En remarquant que l'énergie potentielle d'ionisation $PI = w_f - w_i$, nous pouvons déduire à partir de l'équation (I-9) que :

$$E_s = E_e = \frac{E_i - PI}{2} \quad (\text{I-10})$$

I-3-1-1-1 Géométrie symétrique coplanaire

Dans les expériences effectuées dans la géométrie symétrique coplanaire, les deux vecteurs moment $\mathbf{k}_s$ et $\mathbf{k}_e$ des particules diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision ($\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}_s$), tel que les angles azimutaux φ_s et φ_e des directions de diffusion et d'éjection sont fixés à $\varphi_s = 0^\circ$ et $\varphi_e = 180^\circ$. Dans la plupart de ces expériences, les deux électrons sont détectés dans des directions symétriques par rapport à la direction d'incidence (cf Figure I.4).

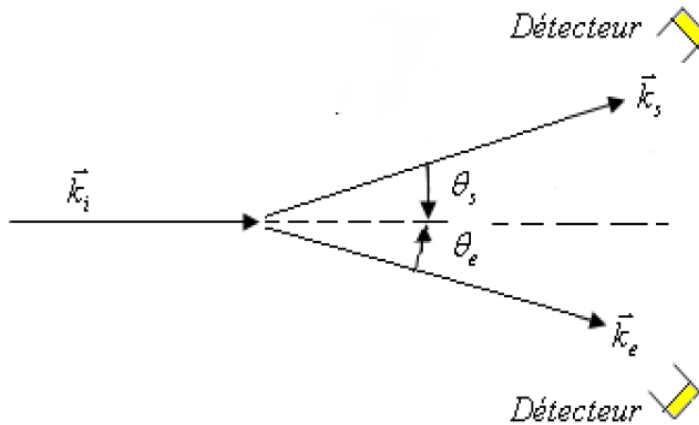


Figure I.5: géométrie coplanaire symétrique de la réaction (e,2e).

L'angle de diffusion θ_s varie alors simultanément avec celui de l'électron éjecté θ_e tel que : $\theta_s = \theta_e$. Les énergies des électrons émis après la collision sont égales $E_s = E_e$ et doivent être petites devant celle de l'électron incident. Dans ce cas il est évident que les normes k_s et k_e des quantités de mouvement des électrons diffusé et éjecté, respectivement, sont aussi égales ($k_e = k_s$).

A partir de l'équation (I-6) nous pouvons voir que le vecteur moment de recul de l'ion $\mathbf{Q}$ est égale à :

$$\mathbf{Q} = \mathbf{q} - \mathbf{k}_e \quad (\text{I-11})$$

Avec

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s \quad (\text{I-12})$$

qui représente le vecteur moment de transfert. Nous avons donc

$$Q^2 = q^2 + k_e^2 - 2\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}_e \quad (\text{I-13})$$

$$= q^2 + k_e^2 - 2\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}_e \quad (\text{I-14})$$

$$= q^2 + k_e^2 - 2(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s) \cdot \mathbf{k}_e \quad (\text{I-15})$$

$$= q^2 + k_e^2 - 2\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_e + 2\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{k}_e \quad (\text{I-16})$$

$$= q^2 + k_e^2 - 2k_i k_e \cos \theta_{ie} + 2k_s k_e \cos \theta_{se} \quad (\text{I-17})$$

Où θ_{ie} est l'angle entre les vecteurs $\mathbf{k}_i$ et $\mathbf{k}_e$, et θ_{se} est l'angle entre les vecteurs $\mathbf{k}_s$ et $\mathbf{k}_e$. Sachant que

$$q^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_s \quad (\text{I-18})$$

$$q^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta_{is} \quad (\text{I-19})$$

Où θ_{is} est l'angle entre les vecteurs $\mathbf{k}_i$ et $\mathbf{k}_s$, et comme l'axe Oz du référentiel du laboratoire est choisi suivant la direction du vecteur $\mathbf{k}_i$, alors l'angle θ_{is} est forcément égale à l'angle θ_s que fait le vecteur $\mathbf{k}_s$ avec l'axe Oz ($\theta_{is} = \theta_s$). Alors

$$q^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-20})$$

Dans ce cas l'angle θ_{ie} est aussi égale à l'angle θ_e que fait le vecteur $\mathbf{k}_e$ avec l'axe Oz ($\theta_{ie} = \theta_e$). D'où

$$Q^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta_s + k_e^2 - 2k_i k_e \cos \theta_e + 2k_s k_e \cos \theta_{se} \quad (\text{I-21})$$

Puisque dans la géométrie coplanaire symétrique nous avons $k_s^2 = k_e^2$ et $\theta_s = \theta_e$, alors nous pouvons réécrire l'équation (I-21) sous la forme :

$$Q^2 = k_i^2 + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta_s + k_s^2 - 2k_i k_s \cos \theta_s + 2k_s^2 \cos(2\theta_s) \quad (\text{I-22})$$

$$= k_i^2 + 2k_s^2 + 2k_s^2 \cos(2\theta_s) - 4k_i k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-23})$$

$$= k_i^2 + 2k_s^2(1 + \cos(2\theta_s)) - 4k_i k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-24})$$

Sachant que

$$\cos(2\theta_s) = \cos^2 \theta_s - \sin^2 \theta_s \quad (\text{I-25})$$

$$1 = \cos^2 \theta_s + \sin^2 \theta_s \quad (\text{I-26})$$

Il est clair que

$$Q^2 = k_i^2 + 4k_s^2 \cos^2 \theta_s - 4k_i k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-27})$$

On remarque aussi que ce dernier résultat peut être réécrit sous la forme

$$Q^2 = (k_i - 2k_s \cos \theta_s)^2 \quad (\text{I-28})$$

Ce qui nous a permis de trouver que

$$Q = k_i - 2k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-29})$$

Alors la quantité Q du moment de recul sera nulle pour

$$\cos \theta_s = \frac{k_i}{2k_s} \quad (\text{I-30})$$

A partir de la condition de conservation de l'énergie donnée dans l'équation (I-9)

$$E_i = E_s + E_e + IP \quad (\text{I-31})$$

Et sachant que

$$E_i = \frac{k_i^2}{2}, \quad E_s = \frac{k_s^2}{2} \quad \text{et} \quad E_e = \frac{k_e^2}{2} \quad (\text{I-32})$$

Nous pouvons voir, puisque $k_e^2 = k_s^2$, que

$$\frac{k_i^2}{2} = k_s^2 + PI \quad (\text{I-33})$$

En supposant PI négligeable devant k_s^2 il est clair que :

$$\frac{k_i^2}{2} \approx k_s^2 \quad (\text{I-34})$$

En injectant ce résultat dans l'équation (I-30) nous pouvons trouver que

$$\cos \theta_s \approx \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \text{c.-à-d. que } \theta_s \approx 45^\circ \quad (\text{I-35})$$

Les calculs ci-dessus nous permettent de dire que dans la géométrie symétrique coplanaire, la quantité de mouvement de l'ion résiduel Q est faible pour l'angle θ_s inférieur à 60° ($Q \ll 1$ pour $\theta_s < 60^\circ$) et elle tend vers zéro pour $\theta_s \approx 45^\circ$ ($Q \approx 0$ pour $\theta_s \approx 45^\circ$). La quantité Q devient plus grande lorsque θ_s est supérieur à 90° ($\theta_s > 90^\circ$), et la collision dans ce cas est caractérisée par de grands moments de transfert q (voir équation (I-20)).

Il est important de savoir que si l'angle θ_s est faible, la répulsion électrostatique entre l'électron diffusé et l'électron éjecté (interaction poste-collision) devient importante. Dans ce cas il devient essentiel de la prendre en compte dans les calculs théoriques. La distribution angulaire des mesures d'un processus de collision fournit donc des informations sur la structure de la cible. Dans ces conditions, l'interaction entre les deux électrons incident et actif est importante avant et après la réaction de collision.

La géométrie coplanaire symétrique de la réaction (e,2e), proposée par (Armaldi et col. (1969)) [1], a été largement utilisée dans les expériences du processus de la simple ionisation au cours des années suivantes. Citons, par exemple, les travaux de Camilloni et col. (1978) [4] et Stefani et col. (1979) [5] qui ont utilisés des valeurs pour les angles polaires θ_s et θ_e allant de 25° à 75° pour une énergie d'incidence assez élevée (environ 2 keV) pour avoir une valeur assez grande du moment de transfert (4-7 u.a.) et une valeur assez petite de la quantité de mouvement de recul (inférieure que 2 u.a.). Dans ces conditions le mécanisme de la réaction (e,2e) sera bien décrit par les modèles théoriques du premier ordre. Quelques années après, Pochat et col. (1983) [6] et Tweed (1984) [7] ont utilisés sur la cible d'hélium des énergies d'incidence plus basses (entre 100 et 200

eV) avec les angles polaires θ_s et θ_e allant jusqu'à 117° . Dans ces conditions l'impulsion de recul Q n'est pas négligeable, et les données expérimentales ne sont interprétées que par des modèles qui tiennent compte des effets d'ordres supérieurs (Byron et col. (1983) [8]). En effet, en plus du pic de collision binaire pour 45° , un autre pic dit de recul se manifeste à 135° . Ce dernier ne peut être expliqué que par une théorie incluant la deuxième approximation de Born. Pour comprendre ce résultat, on suppose qu'un mécanisme de double diffusion est surgi, ce qui peut être interprété comme suit : dans un premier temps, l'électron incident subit une collision directe, dite binaire, avec l'électron actif de la cible qui est supposé être au repos, les conditions de conservation de l'énergie et de l'impulsion indiquent alors que la majorité des électrons diffusé et éjecté émergeront avec un angle $\theta = 45^\circ$ par rapport à la direction $(+\mathbf{k}_i)$; la collision binaire est donc responsable du pic observé à 45° . Dans un deuxième temps, par l'effet du champ du noyau l'électron incident est rétro diffusé vers l'arrière. Ce second mécanisme va faire intervenir un processus collisionnel double dans lequel une autre collision est surgie avec l'électron de la cible. Les deux électrons émergeront cette fois à 45° par rapport à la direction $(-\mathbf{k}_i)$, c'est-à-dire à 135° par rapport à celle de $(+\mathbf{k}_i)$. Actuellement on préfère réaliser des expériences (e,2e) symétriques non coplanaires.

I-3-1-1-2 Géométrie symétrique non coplanaire

Bien sûr nous avons dans une géométrie symétrique $E_s = E_e$ donc $k_s = k_e$. Cependant, contrairement à la géométrie coplanaire les angles azimutaux φ_e et φ_s d'éjection et de diffusion ne sont pas nuls dans une symétrie non coplanaire (cf Figure I.5). Pour l'angle $\varphi_s = 0$, l'angle φ_e varie alors que les angles polaires θ_e et θ_s sont fixés à 45° ($\theta_e = \theta_s = 45^\circ$).

En utilisant l'équation (I-6) de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e \quad (\text{I-36})$$

Les composantes du moment de recul s'écrivent :

$$Q_x = -k_s \sin \theta_s [\cos \varphi_s + \cos \varphi_e] \quad (\text{I-37})$$

$$Q_y = -k_s \sin \theta_s [\sin \varphi_s + \sin \varphi_e] \quad (\text{I-38})$$

$$Q_z = k_i - 2k_s \cos \theta_s \quad (\text{I-39})$$

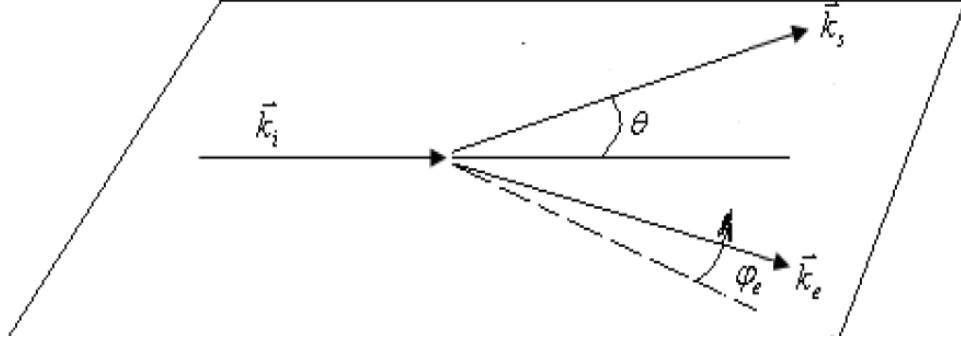


Figure I.6 : Schéma d'une collision (e, 2e) à géométrie symétrique non coplanaire

Dans ce type d'expériences l'expression du moment de recul s'écrit alors :

$$Q^2 = (k_i - 2k_s \cos \theta_s)^2 + 4k_s^2 \sin^2 \theta_s \cos^2 \left(\frac{\varphi_e}{2} \right) \quad (\text{I-40})$$

Puisque $E_s = E_e$, en suivant le même raisonnement de la section précédente de l'équation (I-31) à l'équation (I-34) nous pouvons supposée que $k_i^2/2 \approx k_s^2$. Ainsi puisque $\cos 45^\circ = \sin 45^\circ = \sqrt{2}/2$ alors

$$Q^2 = 2k_s^2 \cos^2 \left(\frac{\varphi_e}{2} \right) = k_i^2 \cos^2 \left(\frac{\varphi_e}{2} \right) \quad (\text{I-19})$$

Dans les expériences effectuées pour une géométrie symétrique non coplanaire, l'angle φ_e varie peu autour de 180° (généralement $\pm 20^\circ$). Cette géométrie est caractérisée par de grands moments de transfert et est généralement utilisée dans les mesures de densité de moment électronique connue par spectroscopie de moment électronique (Electron Momentum Spectroscopy (EMS)) ou par spectroscopie (e,2e) (Brion (1986) [9]). Dans les expériences (e,2e) symétriques spectroscopiques il est nécessaire que l'énergie

d'incidence soit trente fois supérieure à l'énergie d'ionisation de la couche électronique de la cible étudiée ($E_i > |30 \times PI|$).

Dans une expérience de géométrie symétrique non coplanaire la Section Efficace Triplement Différentielle (SETD) est déterminée en fonction du moment de recul Q ou de l'angle Φ tels que $\Phi = \pi - \varphi$ avec $\varphi = |\varphi_s - \varphi_e|$ étant l'angle azimutal entre l'électron diffusé et l'électron éjecté. Dans les conditions cinématiques la géométrie sous considération le moment de transfert est constant (il est donc maximum puisque $\theta_s = 45^\circ$).

Les expériences dans la géométrie symétrique non coplanaire sont un moyen très efficace pour les mesures d'énergies d'ionisation (ou de liaison) et pour les mesures des distributions de moments électroniques des orbitales de valence dans les atomes et les molécules (McCarthy et Weigold (1988) [10]).

Les expériences utilisées comme technique EMS sont un outil efficace pour fournir des informations qui ne peuvent être obtenues par aucune autre technique puisque la technique EMS forme aussi un moyen capable à remonter à la structure de la cible. En effet, puisque l'énergie d'incidence est assez élevée ($E_i > |30 \times PI|$, PI est l'énergie potentielle d'ionisation), la SETD devienne proportionnelle à la densité de moment électronique correspondant à l'orbitale à partir de laquelle l'électron a été éjecté et ceci est vrais aussi bien dans pour une cible atomique que moléculaire (McCarthy et col. (1976) [11]).

I-3-1-2 Géométrie asymétrique

Dans le cas de la géométrie asymétrique, les deux électrons diffusé et éjecté sont détectés avec des énergies très différentes ($E_s \neq E_e$). Si l'énergie E_s de l'électron diffusé est considérée dans ce cas proche de l'énergie d'incidente E_i et alors l'énergie E_e de l'électron éjecté E_e sera assez faible devant l'énergie E_s .

Les collisions (e,2e) dite spectroscopiques asymétriques, nécessitent que la norme du vecteur moment de transfert q soit proche de celle du vecteur quantité de mouvement de l'électron éjecté k_e ($q \approx k_e$) pour que la quantité de mouvement transférée à l'ion (Q)

soit la plus petite possible. L'énergie de l'électron éjecté doit être au moins égale à $10 \times |IP|$ et $E_i \geq 30 \times |IP|$ où PI est l'énergie potentielle d'ionisation.

I-3-1-2-1 Géométrie asymétrique coplanaire

Comme dans toute géométrie coplanaire, les électrons diffusé et éjecté se trouvent tous les deux dans le plan de collision ($\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s$). Dans ce type d'expériences, l'angle de diffusion est faible ($\theta_s \leq 15^\circ$) alors que l'angle d'éjection θ_e varie entre 0 et 360° (cf Figure I.6).

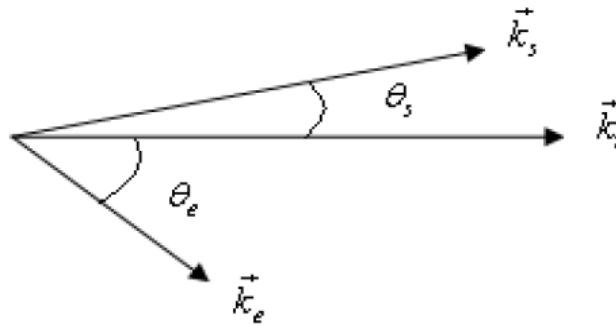


Figure I.7 : Géométrie coplanaire asymétrique

La géométrie coplanaire asymétrique avec les conditions cinématiques données ci-dessus, connue sous le nom de géométrie d'Ehrhardt (Ehrhardt et col. (1969) [12]) décrit essentiellement les réactions du régime dipolaire qui sont caractérisées par un faible moment de transfert. Les expériences effectuées dans ces conditions peuvent être réalisées à des énergies assez variées : très basses (Fournier-Lagarde et col. (1984)[13]), de quelques centaines d'électrons volts (Ehrhardt et col. (1986) [14]) jusqu'à 8 keV (Lahmam-Bennani et col.(1984) [15]). Ces diverses conditions expérimentales permettent d'avoir suffisamment de données pour l'étude de la dynamique du processus d'ionisation. A partir de 1983, sous certaines conditions cinématiques (Lahmam-Bennani et col. (1984, 1986) [15,16] et Avaldi et col. (1987) [17]) cette géométrie, en plus de l'étude de la dynamique d'une réaction de collision, s'est même révélée en mesure de donner des informations sur la structure de la cible. Ces expériences ont surtout été

réalisées sur des cibles atomiques assez simples avec des structures connues tels que l'hydrogène (Weigold et col. (1979) [18]), l'hélium (Ehrhardt et col. (1972) [19]) et l'hydrogène moléculaire (Jung et col. (1975) [20] et (Chérid et col. (1989) [21]) afin de permettre une étude théorique plus aisée.

I-3-1-2-2 Géométrie asymétrique non coplanaire

Dans les expériences réalisées dans une géométrie asymétrique non coplanaire, les électrons diffusé et éjecté sont détectés avec des énergies différentes ($E_s \neq E_e$), les angles polaires sont également différents ($\theta_s \neq \theta_e$) et ils sont détectés en dehors du plan de collision ($\vec{k}_i, \vec{k}_s$) (cf Figure I.7).

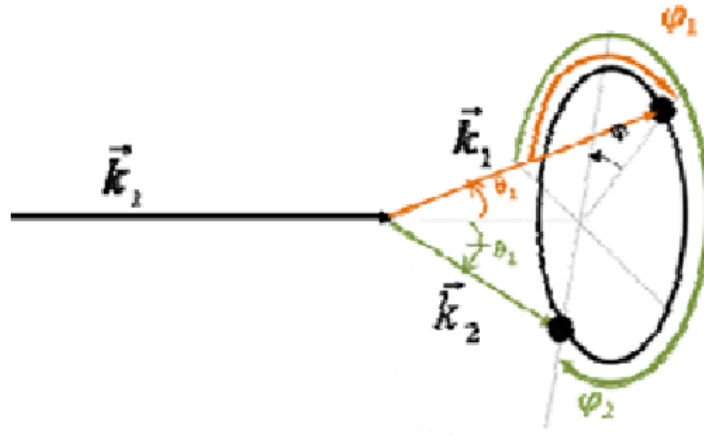


Figure I.8 : Géométrie asymétrique non coplanaire

Bibliographie du chapitre I

- [1] Armaldi U Jr, Egidi A, Marconero R and Pizzella G, *Phys. Rev. Sci. Instru* **40**, 1001 (1969).
- [2] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaat T and Willmann K, *Phys. Rev. Lett* **22**, 89-82 (1969).
- [3] Weigold E and McCarthy I E, *J. Phys. B* **14**, 127 (1978)
- [4] Camilloni R, Giardini-Guidoni A, McCarthy I E and Stefani G. *Phys. Rev. A* **17** (1978).
- [5] Stefani G, Camolloni R and Giardini- Guidoni A, *J. Phys. B* **12** 2583 (1979).
- [6] Pochat A, Tweed R J, Joacahin C J, Piraux B and Byron F W Jr *J. Phys. B* **16** L775 (1983).
- [7] Tweed R J, Lecture Notes in Chemistry Vol. 35, Ed, Gianturco F A and Stefani G (Berlin: Springer) p.220 (1984).
- [8] Byron F W Jr and Joachain C J, *J. Phys. Rep.* **34C**, 233 (1983).
- [9] Brion C E *Int. J. Quantum Chem.* **2**, 1397 (1986).
- [10] McCarthy I E and Weigold E, *Rept. Prog. Phys.* **51**, 299 (1988).
- [11] McCarthy I E and Weigold E, *Phys. Rep.* **27C**, 275 (1976).
- [12] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Sshlemmer P, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1807 (1969).
- [13] Fournier-Lagarde P, J. Mazeau and A. Huetz, *J. Phys. B* **17**, L591 (1984).
- [14] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Sshlemmer P, *Z. Phys. D* **1**, 3 (1986).
- [15] Lahmam-Bennani A, Wellenstein H F, Dal Cappello C and Rouault M and Duguet A, *J. Phys. B* **16** 2219 (1984b)

- [16] Lahmam-Bennani A, Duguet A and Dal Cappello C, *J. Elect. Spec. and Rel. Phenom* **40**, 141 (1986).
- [17] Avaldi L, Camilloni R, Fainelli E and Stefani G, *J. Phys. B* **20**, 4163 (1987).
- [18] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I, *J. Phys. B* **12**, 291 (1979).
- [19] Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, Schultz M and Willmann K, *J. Phys. B* **5**, 2107 (1972).
- [20] Jung K, Schubert E, Paul D A L and Ehrhardt H, *J. Phys. B* **8**, 1330 (1975).
- [21] Chérid M, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Zuraes R W, Lucchese R R, Dal Cappello M C and Dal Cappello C. *J. Phys. B* **22**, 3483 (1989).

Chapitre II : Section Efficace d'Ionisation.

II-1 Introduction

Parmi les processus de base en physique on trouve les réactions de radiations de particules chargées avec des cibles atomiques ou moléculaires. Les études sur ce types de processus forment l'un des moyens les plus puissants qui permettent l'investigation de la structure de la matière. Ces études sont d'une grande importance pour plusieurs domaines comme l'astrophysique, la physique des plasmas et notamment pour la médecine et la biologie.

Les études théoriques et expérimentales du processus d'ionisation simple d'une cible atomique ou moléculaire, connue par la réaction $(e,2e)$, a toujours fait l'objet de nombreuses investigations. La grandeur essentielle qui permet la compréhension le processus d'ionisation est la section efficace triplement différentielle (SETD) puisqu'elle permet de remonter à des informations détaillée sur ce processus et même sur la structure de la cible. Depuis les premières mesures de la SETD [1,2], plusieurs méthodes théoriques ont été élaborées pour comprendre les mécanismes de la simple ionisation. La collision de particules chargées avec des cibles atomiques ou moléculaires est souvent gouvernée par la nature des interactions de ces particules avec les électrons de la cible. La compréhension de cette réaction est d'importance capitale pour la description de la structure de la cible. L'intérêt de l'étude des corrélations entre les particules chargées et les électrons de la cible a été conforté par l'évolution des techniques expérimentales ainsi que des modèles théoriques. Cet intérêt était à l'origine des travaux théoriques de Bethe [3] et de Massey et Mohr [4], qui sont les premiers avoir établi les fondements du calcul théorique de la section efficace de diffusion dans la première approximation de Born.

L'objectif de ce travail consiste en étudier la simple ionisation d'une cible atomique. Le processus de collision particule-atome est un processus complexe vu la description des états de la cible ainsi que celle des électrons dans la voie de sortie. Dans ce chapitre nous

allons parler de notion de section efficace qui est une grandeur physique importante pour la théorie des collisions atomiques et moléculaires.

II-2 Notion de section efficace

La section efficace est généralement définie comme étant la probabilité indépendante du temps pour qu'un processus particulier s'effectue lors d'une collision. Cette probabilité peut être prédite par la mesure du nombre de particules qui ont subis une diffusion déterminée dans l'espace sur le nombre de particules incidentes. Elle caractérise un procédé de diffusion et elle est bien définie dans l'expérience de la réaction (e,2e). L'interaction effective entre l'électron et la cible dépend fortement de l'énergie de l'électron incident, comme elle dépend de l'angle de diffusion et la nature du processus. La section efficace qui mesure la probabilité pour qu'un type de réaction soit réalisé, va forcément dépendre des énergies et des angles des particules sortants et entrants. Telles sections efficaces sont usuellement appelées sections efficaces différentielles.

Considérons un flux monochromatique (particules avec la même énergie de propagation) d'un nombre N_i d'électrons par unité de temps et de surface, d'énergie E_i et de moment cinétique $\mathbf{k}_i$. Ce flux vient de l'infini le long de la direction de l'axe Oz pour entrer en interaction avec un nombre N_t de cibles atomiques localisées à l'origine du système de coordonnées. Nous supposons que chaque cible est au repos et très lourde par rapport aux électrons incidents pour que le centre du laboratoire et le centre de masse du système soient identiques. Lors de la réaction, le nombre N_s des électrons diffusés par unité de temps avec des énergies entre E_s et $E_s + dE_s$ dans l'élément d'angle solide $d\hat{\mathbf{k}}_s$ centré sur la direction la direction du moment $\mathbf{k}_s$ définie par les angles (θ_s, φ_s) est donné par

$$N_s dE_s d\hat{\mathbf{k}}_s = d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s) N_i N_t \quad (\text{II-1})$$

La section efficace doublement différentielle de la diffusion est définie donc par

$$\frac{d^2\sigma(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)}{dE_s d\hat{\mathbf{k}}_s} = \frac{N_s}{N_i N_t} \quad (\text{II-2})$$

Considérons le processus de diffusion pour lequel les électrons diffusée sont détectés. Le détecteur est localisé en face de la direction $d\hat{\mathbf{k}}_s = \sin \theta_s d\theta_s d\varphi_s$ pour détecter les électrons qui diffusent avec des énergies dans l'intervalle $[E_s, E_s + dE_s]$. Dans ce cas, le nombre N_s des électrons qui diffusent par unité de temps dans l'angle solide $d\hat{\mathbf{k}}_s$ est proportionnel au flux J_{k_s} de ces particules.

Le flux de probabilité pour une fonction d'onde quelconque $\psi(r)$ est défini par la formule

$$J_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{[\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})\nabla\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\nabla\psi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})]}{2i} \quad (\text{II-3})$$

Loin du centre de diffusion, la forme asymptotique de l'onde diffusée est la suivante

$$\varphi_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s) \frac{\exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r})}{r}, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (\text{II-4})$$

La grandeur $f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)$ est connue par l'amplitude de transition. Le courant radial sortant peut être déduit en utilisant l'équation (II-3). Pour une position $\mathbf{r}$ très loin du centre (r très grand $r \rightarrow \infty$), nous pouvons négliger le terme d'ordre r^{-3} , nous avons donc

$$J_{\mathbf{k}_s}(\mathbf{r}) = k_s |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (\text{II-5})$$

Le nombre d'électrons qui diffusent par unité de temps dans l'angle solide $d\hat{\mathbf{k}}_s$ et dans l'intervalle d'énergie $[E_s, E_s + dE_s]$ est ainsi proportionnel a

$$N_s \propto k_s |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s)|^2 d\hat{\mathbf{k}}_s \quad (\text{II-6})$$

La fonction d'onde de l'électron incident peut être normalisée dans le sens que la probabilité de le trouver dans un volume fini de l'espace est l'unité :

$$\varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II-7})$$

En utilisant la formule (II-3), nous pouvons trouver le flux de probabilité pour la fonction d'onde $\varphi_{k_i}(r)$ qui est le suivant :

$$J_{k_i}(\mathbf{r}) = k_i \quad (\text{II-8})$$

Le nombre N_i des électrons incidents est ainsi proportionnel a k_i :

$$N_i \propto k_i \quad (\text{II-9})$$

En injectant les résultats (II-6) et (II-9) dans l'équation (II-2) nous pouvons trouver la section efficace doublement différentielle de la diffusion par une cible atomique ($N_t = 1$) :

$$\frac{d^2\sigma(k_i, k_s)}{dE_s d\hat{k}_s} = \frac{k_s}{k_i} |f(k_i, k_s)|^2 \quad (\text{II-10})$$

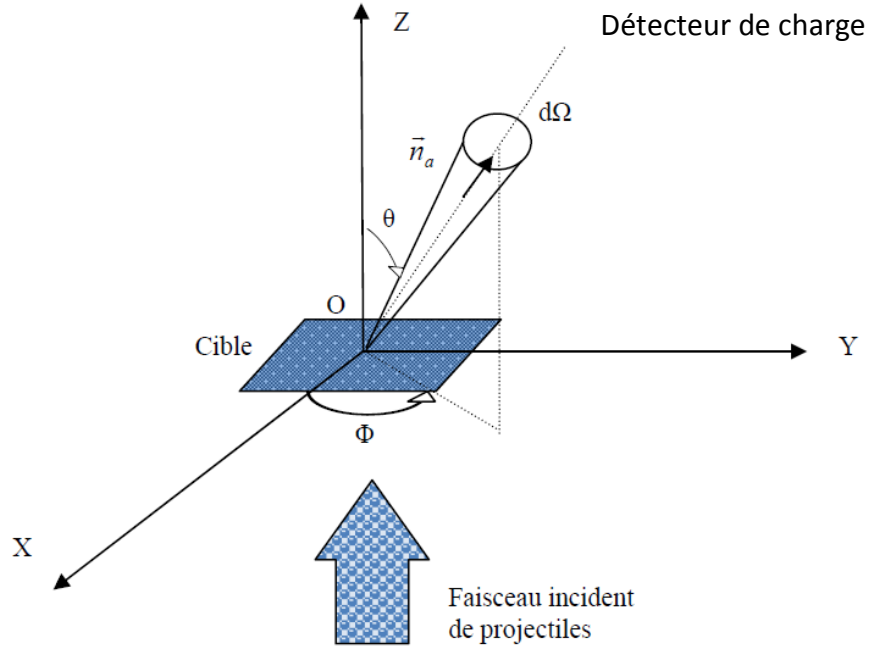


Figure II.1 : Schéma simplifié relatif à la notion de section efficace.

II-3 Section efficace triplement différentielle

La section efficace triplement différentielle est la mesure de la probabilité que dans une réaction (e,2e) un électron incident avec une énergie E_i et un moment $\mathbf{k}_i$ excite un électron de la cible vers un état de continuum d'énergie E_e et un moment $\mathbf{k}_e$. L'électron incident diffuse après la collision avec une énergie E_s et un moment $\mathbf{k}_s$. Les directions des électrons diffusé et éjecté sont $\hat{\mathbf{k}}_s$ et $\hat{\mathbf{k}}_e$, respectivement. Cette section efficace peut être définie par la relation :

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s d\hat{\mathbf{k}}_e dE_e} = \frac{k_s k_e}{k_i} |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e)|^2 \delta(E_i - E_s - E_e + IP) \quad (\text{II-11})$$

Si c'est l'énergie d'éjection qui est détecté dans l'expérience. Ou

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{\mathbf{k}}_s d\hat{\mathbf{k}}_e dE_s} = \frac{k_s k_e}{k_i} |f(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_s, \mathbf{k}_e)|^2 \delta(E_i - E_s - E_e + IP) \quad (\text{II-12})$$

Si c'est l'énergie de diffusion qui est détecté dans l'expérience. Rappelons que

$$\delta(E_i - E_s - E_e + IP) = \begin{cases} 0 & \text{si } (E_i - E_s - E_e + IP) \neq 0 \\ 1 & \text{si } (E_i - E_s - E_e + IP) = 0 \end{cases} \quad (\text{II-13})$$

Avec $E_i - E_s - E_e + IP = 0$ représente l'équation de conservation de l'énergie (voir chapitre I).

La section efficace triplement différentielle (SETD) c'est une grandeur mesurable par l'expérience dans une réaction (e,2e) si les deux électrons de l'état final sont analysés aussi bien suivant leurs directions que leurs énergies respectives. C'est une quantité qui fournit une description complète sur la cinématique du processus de l'ionisation puisqu'elle fait intervenir tous les paramètres cinématiques entrants en jeu, à savoir les énergies E_i , E_s , et E_e ainsi que les angles de diffusion (θ_s, φ_s) et les angles d'éjection (θ_e, φ_e) . Elle est dite complètement différentielle puisqu'elle fait intervenir tous les paramètres cinématiques entrant en jeu, à savoir les énergies E_i , E_s , E_e ainsi que les

angles solides $d\hat{k}_s$ et $d\hat{k}_e$. La SETD fournit le teste le plus fiable de la théorie (e,2e), ainsi elle permet de tester les différents modèles théoriques proposés. Pour s'assurer que les électrons diffusé et éjecté proviennent du même événement ionisant, dans une expérience de la simple ionisation, ces électrons doivent être détectés en coïncidence temporelle (au même instant) [5,6].

II-4 Section efficaces doublement différentielle

Si, lors d'une expérience de réaction (e,2e), seulement un électron est détecté, et on peut mesurer son énergie suivant sa direction d'émission. Alors la section efficace doublement différentielle (SEDD) est obtenue. Celle-ci est donnée par l'équation

$$\frac{d^2\sigma}{d\hat{k}_s dE_s} = \int_0^{4\pi} d\hat{k}_e \frac{d^3\sigma}{d\hat{k}_s d\hat{k}_e dE_s} \quad (\text{II-14})$$

si on s'intéresse à l'angle et l'énergie de l'électron diffusé. L'intégration sur l'angle solide $d\hat{k}_e$ signifie que durant l'expérience le détecteur mesure l'intensité (ou l'énergie E_s) d'un faisceau constitué de plusieurs électrons, de tel sorte que pour chaque électron diffusé correspond un électron éjecté dans une direction quelconque, ainsi toutes les directions sont possibles. Si c'est l'intensité du faisceau d'électrons diffusés qui est mesurée :

$$\frac{d^2\sigma}{d\hat{k}_e dE_e} = \int_0^{4\pi} d\hat{k}_s \frac{d^3\sigma}{d\hat{k}_s d\hat{k}_e dE_e} \quad (\text{II-15})$$

La SEDD est une grandeur est moins significative que la section efficace triplement différentielles puisqu'elle ne peut fournir que la description cinématique des particules diffusées ou éjectées après la collision.

Même si les particules sortantes sont indiscernables, on peut, dans certaines conditions cinématique affirmé si la particule détectée est diffusée ou éjectée. Les théories utilisées pour décrire les sections efficaces doublement différentielles doivent inclure tous les processus d'ionisation possibles et tous les états pouvant contribuer aux sections efficaces.

II-5 Section efficaces simplement différentielle

Si lors d'une expérience de la réaction (e,2e) un faisceau de particules diffusés ou éjectée est détectée sélectivement dans une certaine direction, avec une énergie comprise entre E_{min} et

E_{max} on parle de la section efficace simplement différentielle (SESD) en angle

$$\frac{d\sigma}{d\hat{k}_s} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE_s \frac{d^2\sigma}{d\hat{k}_s dE_s} \quad (II-16)$$

Si on s'intéresse à un faisceau d'électrons diffusés, et

$$\frac{d\sigma}{d\hat{k}_e} = \int_{E_{min}}^{E_{max}} dE_e \frac{d^2\sigma}{d\hat{k}_e dE_e} \quad (II-17)$$

Si on s'intéresse à un faisceau d'électrons éjectés.

La SESD quantité contient évidemment moins d'informations sur le processus d'ionisation comparée à celles donnée par les sections efficaces doublement et triplement différentielles, mais elle présente un grand intérêt dans, par exemple, l'étude des structures moléculaire. Si on s'intéresse au spectre de déperdition d'énergie, on définit une section efficace simplement différentielle en énergie.

$$\frac{d\sigma}{dE_s} = \int_0^{4\pi} d\hat{k}_s \frac{d^2\sigma}{d\hat{k}_s dE_s} \quad (II-18)$$

Si on s'intéresse au spectre énergétique d'un faisceau d'électrons diffusés, et

$$\frac{d\sigma}{dE_e} = \int_0^{4\pi} d\hat{k}_e \frac{d^2\sigma}{d\hat{k}_e dE_e} \quad (II-19)$$

Si on s'intéresse au spectre énergétique d'un faisceau d'électrons éjectés.

La SESD représente un outil majeur dans l'investigation de divers champs de la physique telle que l'étude de perte d'énergie des électrons dans l'ionosphère terrestre.

II-6 Théorie

Le but de la théorie de collision est de trouver un modèle qui peut définir l'évolution du système de collision dans la région d'interaction. Les résultats donnés par ce modèle doivent être comparable avec des observations mesurées par les expériences. Pour construire ce type de modèle il faut établir un rapport entre les fonctions d'ondes qui décrivent les états initial et final du système. Les modèles théoriques simplifiés peuvent fournir une compréhension superficielle du procédé d'ionisation ou la dynamique du système de collision est régie par les principes de la mécanique quantique. Le hamiltonien H est l'observable du système qui correspond à l'énergie totale pour un système conservatif.

Soit la collision d'un électron avec une cible atomique de N électrons, le hamiltonien de ce système est donnée par

$$H = H_0 + V \quad (\text{II-20})$$

Avec H_0 est un opérateur qui décrit les deux sous-systèmes charge incidente et cible atomique sans interaction. Nous avons donc $H_0 = H_t + K_0$ avec

$$K_0 = -\frac{1}{2}\nabla_0^2 \quad (\text{II-21})$$

est l'opérateur énergie cinétique de l'électron incident, et

$$H_T = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{N}{r_i} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (\text{II-22})$$

est l'opérateur hamiltonien qui décrit le système de la cible sans la perturbation V provoquée par l'électron incident

$$V = \left(-\frac{N}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i|} \right) \quad (\text{II-23})$$

Avec $\mathbf{r}_0$ le vecteur position de l'électron incident par rapport à l'origine qui est supposé confondu avec le noyau atomique, les $\mathbf{r}_i$ sont les vecteurs positions des électrons de la

cible atomique. Cependant la cible est supposée électriquement neutre avec une charge nucléaire $Z = N$.

Nous pouvons définir la matrice de transition par la formule

$$T_{fi} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (\text{II-24})$$

avec $|\Psi_i\rangle$ et $|\Psi_f\rangle$ les états initial et final, respectivement, du système de $(N+1)$ électrons. La matrice de transition relie la fonction d'onde qui décrit le système avant la collision à la fonction d'onde qui décrit le système après la collision. La relation entre la matrice de transition et l'amplitude de transition est la suivante :

$$f_{fi} = -(2\pi)^2 T_{fi} \quad (\text{II-25})$$

Ainsi la section efficace triplement différentielle, donnée dans la relation (II-11), peut être écrite sous la forme

$$\frac{d^3\sigma}{d\hat{k}_s d\hat{k}_e dE_e} = (2\pi)^4 \frac{k_s k_e}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{II-25})$$

Il est très compliqué de faire une étude théorique détaillée du processus d'ionisation, c'est pour cela que des méthodes approximatives sont souvent utilisées pour évaluer les éléments de la matrice T_{fi} . C'est la raisons pour laquelle nous pouvons trouver plusieurs modèles dans la littérature qui décrivent la réaction (e,2e). Nous pouvons mentionner quelques uns comme le modèle une fonction de Coulomb, le modèle deux fonctions de Coulomb [5,7], le modèle 3 fonctions de Coulomb connu aussi par le modèle BBK qui a été proposé par Brauner, Briggs et Klar [8] pour la première fois pour étudier le processus d'ionisation de l'atome d'hydrogène, et le modèle *Convergent Close Coupling* (CCC) qui a été proposé par Massey et Mohr [4] qui ont donné un formalisme général pour traiter les processus d'excitation vers les états atomiques discrets. Successivement développé par différents auteurs [9-21].

II-6-1 L'approximation de Born

Dans le cas de l'ionisation d'une cible atomique, l'état propre de la cible avant la collision est gouverné par l'équation de Schrödinger

$$H_T |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (\text{II-26})$$

ou E_n est l'énergie de l'état $|\phi_n\rangle$. Soit un électron incident avec un moment $\mathbf{k}_i$ sur la cible atomique dans l'état $|\phi_i\rangle$. La fonction d'onde $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ du système de $(N+1)$ électrons doit satisfaire l'équation différentielle

$$H |\Psi^{(+)}\rangle = \left(\frac{k_i^2}{2} + E_i \right) |\Psi^{(+)}\rangle \quad (\text{II-26})$$

La fonction d'onde $|\Psi_i^{(+)}\rangle$ satisfait la condition an limite

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle \xrightarrow{r_0 \rightarrow \infty} |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle + \text{onde sortante} \quad (\text{II-27})$$

Avec

$$|\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle |\phi_i\rangle = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) |\phi_i\rangle \quad (\text{II-28})$$

Dans l'équation (II-28) l'électron incident est considéré très rapide et donc ceci justifie qu'il peut être comme une onde plane

$$|\mathbf{k}_i\rangle = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{II-29})$$

L'équation de Schrödinger (II-26) avec la condition à la limite (II-27) peut être transformée en équation intégrale, connue par l'équation de Lippmann Schwinger :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle + G_0^{(+)} V |\Psi_i^{(+)}\rangle \quad (\text{II-30})$$

ou $G_0^{(+)}$ est l'opérateur de Green. La solution formelle de l'équation (II-29) est une série en puissance de V obtenue par itération :

$$|\Psi_i^{(+)}\rangle = \left(1 + G_0^{(+)} V + \left(G_0^{(+)} V \right)^2 + \dots + \left(G_0^{(+)} V \right)^p + \dots \right) |\mathbf{k}_i, \phi_i\rangle \quad (\text{II-31})$$

Cette série est connue par la série de Born pour une fonction d'onde.

Dans cette approximation l'effet de l'électron incident est considéré comme une perturbation. Ceci implique que cet électron va diffuser avec une énergie suffisamment grande pour que l'état finale $\langle \Psi_f |$ loin de la cible peut-être écrit sous la forme de produit de deux fonction d'ondes :

$$\langle \Psi_f | = \langle \mathbf{k}_f, \phi_f | = \langle \mathbf{k}_i | \langle \phi_i | \quad (\text{II-32})$$

Rappelons maintenant que l'amplitude de transition est définie dans l'équation (II-24), et que en introduisant les relations données dans les équations (II-31) et (II-32) dans la relation de l'amplitude de transition on trouve le développement de Born de l'amplitude de transition

$$T_{fi}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V + V G_0^{(+)} V + V (G_0^{(+)} V)^2 + \dots + V (G_0^{(+)} V)^p + \dots | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{II-33})$$

En se limitant au premier terme du développement de cette série on définit l'amplitude de transition dans la première approximation de Born

$$T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{II-34})$$

Le modèle de la première approximation de Born est le plus simple qu'on peut utiliser pour étudier la dynamique de la réaction (e,2e). Dans ce modèle la contribution des termes en puissances supérieures à 1 pour le potentiel d'interaction sont négligés. Ce modèle est valable dans le cas où l'énergie des électrons incidents est suffisamment élevée devant les potentiels d'ionisation des orbitales de la cible.

Si on ne retient que les deux premiers termes du développement dans la série de Born, donnée dans équation (II-34), on obtient la deuxième approximation de Born. L'amplitude de transition est définie dans ce cas comme :

$$T_{fi}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = T_{fi}^{B1}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) + T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) \quad (\text{II-35})$$

avec le premier terme T_{fi}^{B1} est définie dans l'équation (II-34), et le deuxième terme est définie par

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V G_0^{(+)} V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle \quad (\text{II-36})$$

Le second terme de Born T_{fi}^{B2} joue un rôle très important dans la réaction (e, 2e). Précisément dans la description des transitions vers les états intermédiaires.

Pour calculer le terme T_{fi}^{B2} il est utile de faire une résolution spectrale de l'opérateur de Green $G_0^{(+)}$, selon la relation

$$G_0^{(+)} = - \sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0+} \frac{1}{4\pi^3} \int dk \frac{|k, \phi_n\rangle \langle k, \phi_n|}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \quad (\text{II-37})$$

Ici la sommation est sur tous les états discrets et continues $|\phi_n\rangle$ de la cible atomique, k_n est définie par

$$k_n^2 = k_i^2 + 2(E_i - E_n) \quad (\text{II-38})$$

La substitution de l'équation (II-37) dans l'équation (II-36) donne

$$T_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = \frac{-1}{4\pi^3} \sum_n \lim_{\eta \rightarrow 0+} \int dk \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k}, \phi_n \rangle \langle \mathbf{k}, \phi_n | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \quad (\text{II-39})$$

L'une des difficultés du calcul de ce terme est de faire la somme sur tous les états intermédiaires $|\phi_n\rangle$. Pour trouver une bonne approximation pour le calcul de ce terme, on attribue aux états intermédiaires une énergie moyenne $\bar{E}$, ainsi k_n^2 devient indépendant de n

$$\bar{k}^2 = k_i^2 + 2(E_i - \bar{E}) \quad (\text{II-40})$$

Maintenant la relation de fermeture :

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1 \quad (\text{II-41})$$

peut être utilisée pour s'affranchir trivialement de la somme et trouver l'approximation suivante :

$$\bar{T}_{fi}^{B2}(\mathbf{k}_s, \mathbf{k}_i) = -\frac{1}{4\pi^3} \lim_{\eta \rightarrow 0+} \int d\mathbf{k} \frac{\langle \mathbf{k}_s, \phi_f | V | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_i, \phi_i \rangle}{k^2 - \bar{k}^2 - i\eta} \quad (\text{II-42})$$

Souvent appelée l'approximation de Born simplifier.

Bibliographie du chapitre II

- [1] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaas T and Willmann K. *Phys. Rev. Lett.* **22**, 89 (1969).
- [2] Amaldi V, Egidi A, Marconero R and Pizzella G. *Rev. Sci. Instr.* **40**, 1001 (1969).
- [3] Bethe H A. *Ann. Phys.* **5**, 325 (1930).
- [4] Massey H S W and Mohr C. *Proc. Roy. Soc. A.* **141**, 434 (1933).
- [5] Peterkop R K. *Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact*. Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder, (1977).
- [6] Weigold E and McCarthy I E. *Electron Momentum Spectroscopie*. Kluwer Academic. Plenum Publishers, New York (1999)
- [7] Peterkop R K. *Opt. Spectr.* **13**, 1220 (1961)
- [8] Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989)
- [9] Bray I, McCarthy I E, Mitroy J, and Ratnavelu K. *Phys. Rev. A.* **39**, 4998 (1989).
- [10] Bray I, Madison D H and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **41**, 5916 (1990).
- [11] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **43**, 1301 (1991).
- [12] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **43**, 5878 (1991).
- [13] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **44**, 5586 (1991).
- [14] Bray I, Konovalov D A and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **44**, 7179 (1991).
- [15] Bray I and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **46**, 5916 (1992).
- [16] Bray I and Stelbovics A T. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 53 (1992).
- [17] Bray I and Stelbovics A T. *Phys. Rev. A.* **46**, 6995 (1992).
- [18] Bray I and Stelbovics A T. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 746 (1993).

[19] Bray I, Fursa D V and McCarthy I E. *Phys. Rev. A.* **47**, 1101 (1993).

[20] Fursa D V and Bray I. *Phys. Rev. A.* **52**, 1279 (1995).

[21] Bray I Fursa D V. *Phys. Rev. A.* **54**, 2991 (1996).

Chapitre III : Fonction d'onde de l'anti-hydrogène.

III-1 Introduction

En physique classique, l'évolution d'une particule (la trajectoire de la particule) est décrite par l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{III-1})$$

Avec $\mathbf{r}$ représente la position de la particule dans l'espace, m sa masse et $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ la résultante des forces appliquée sur la particule.

En physique quantique, en vertu de la dualité onde-corpuscule, l'évolution de la particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r}, t)$ qui est définie par l'équation de Schrödinger. $\Psi(\mathbf{r}, t)$ est donc un champ scalaire dépendant du temps. Comme pour les phénomènes vibratoires et ondulatoires, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ est en général une fonction complexe. Selon l'interprétation de Born, le carré de la norme de la fonction d'onde

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2 = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{III-2})$$

ou $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ est le complexe conjugué de $\Psi(\mathbf{r}, t)$. La grandeur physique $\rho(\mathbf{r}, t)$ représente la densité de probabilité de trouver la particule à une position $\mathbf{r}$ de l'espace. Il est clair donc que la probabilité $P(\mathbf{r}, t)$ de trouver la particule dans un volume $d^3V = d\mathbf{r}$ autour de $\mathbf{r}$ est

$$P(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t)d\mathbf{r} \quad (\text{III-3})$$

La connaissance du champ $\Psi(\mathbf{r}, t)$ permet alors de connaître l'évolution dynamique de la probabilité en fonction du temps de trouver la particule à l'endroit $\mathbf{r}$. L'équation qui donne l'évolution de $\Psi(\mathbf{r}, t)$, connue sous le nom d'équation de Schrödinger dépendante du temps est la suivante :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (\text{III-4})$$

où :

- $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$
- ∇^2 est le laplacien.
- m la masse de la particule.
- $V(\mathbf{r})$ l'énergie potentielle de la particule au la position $\mathbf{r}$.

Lorsqu'on cherche une solution de $\Psi(\mathbf{r}, t)$ qui ne dépend pas du temps (solution stationnaire), l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{III-5})$$

où E est l'énergie de la particule.

III-2 L'atome d'anti-hydrogène

Avant la mécanique quantique, nous savions sur l'atome d'hydrogène qu'il y a un proton et un électron, entre les deux particules, il n'y a que du vide. L'atome de Bohr est décrit comme étant un électron tourne dans un orbitale fermée autour du proton. Le rayon de Bohr $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ correspondrait alors au rayon de l'orbitale de l'électron. L'énergie potentielle entre le proton et l'électron est donnée par le potentiel coulombien (classique)

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (\text{III-6})$$

où r est la distance entre le noyau (proton) et l'électron. L'équation de Schrödinger est alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (\text{III-7})$$

Nous prenons ici $\mu = m_e$ la masse de l'électron. Le potentiel $V(r)$ est négatif, alors si l'énergie

E est positive, elle est alors plus grand que $V(r)$ et, comme dans le cas classique, l'électron est libre. Pour E négative, l'électron est lié au proton.

Dans le cas de l'atome de l'anti-hydrogène le potentiel $V(r)$ entre le positron (antiélectron) et l'antiproton prend la même forme donnée dans l'équation (III-6). Alors l'équation de Schrödinger est dans ce cas la même que celle de l'atome d'hydrogène (equation (III-7)).

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas présent, nous utiliserons les coordonnées sphériques (figure III-1).

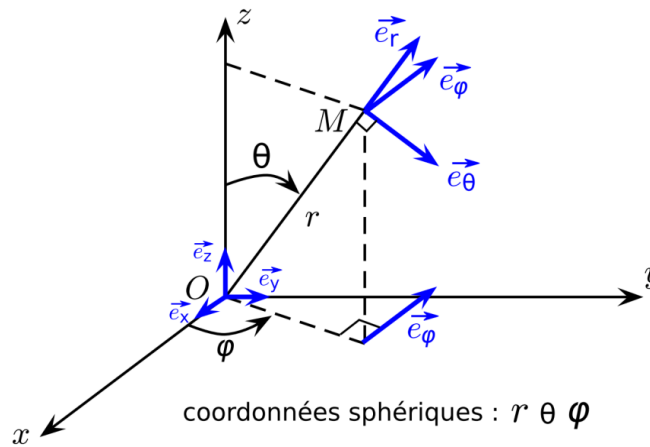


Figure III-1. Système de coordonnées sphériques.

Car ce système de coordonnées reflète la géométrie du problème. Dans ce système de coordonnées, le laplacien prend la forme

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right] \quad (\text{III-8})$$

Soit maintenant la grandeur vectorielle moment cinétique L :

$$L = r \times p \quad (\text{III-9})$$

où p représente la quantité de mouvement. En mécanique quantique cette grandeur vectorielle est définie par l'équation

$$p = -i\hbar \nabla \quad (\text{III-10})$$

Où le vecteur ∇ représente l'opérateur nabla défini en coordonnées cartésiennes par l'équation

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{e}_z \quad (\text{III-11})$$

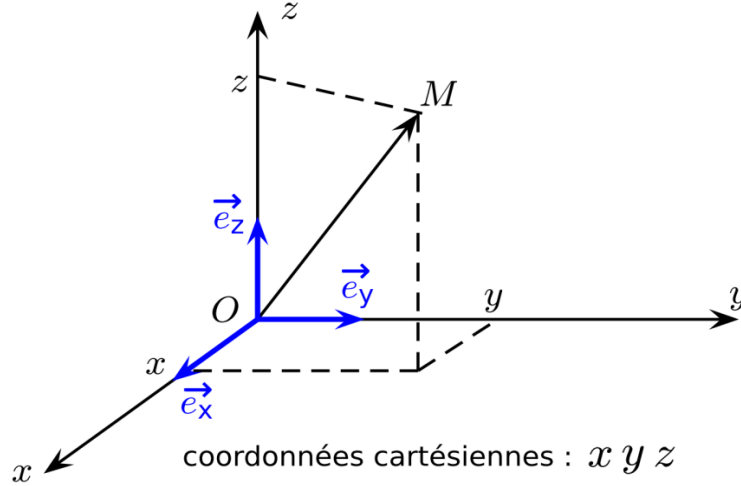


Figure III-2 : système de coordonnées cartésiennes.

La conversion en coordonnées sphériques de l'équation (III-9) nous amène à écrire :

$$\mathbf{L} = -i\hbar \left[\left(\frac{\cos \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \mathbf{e}_x + \left(\frac{\sin \varphi}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \mathbf{e}_y - \frac{\partial}{\partial \theta} \mathbf{e}_z \right] \quad (\text{III-12})$$

Et on remarque alors que :

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}) \right] \quad (\text{III-13})$$

L'équation (III-7) peut donc être écrite dans le système de coordonnées sphériques sous la forme suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) - E \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (\text{III-14})$$

ou

$$\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2} \frac{L^2}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = 0 \quad (\text{III-15})$$

Nous prendrons comme origine la position du proton. On remarque que les opérateurs comportent soit la coordonnée r , soient les coordonnées φ et θ , mais elles ne sont pas mélangées. A partir de

cette remarque, on peut supposer une solution (en utilisant la méthode de séparation des variables) de type

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi) \quad (\text{III-16})$$

où $R(r)$ est la partie radiale de la fonction d'onde et $Y(\theta, \varphi)$ la partie angulaire. L'équation (III-15) peut donc être écrite sous la forme

$$Y(\theta, \varphi) \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) R(r) Y(\theta, \varphi) - \frac{R(r)}{r^2} \frac{L^2}{\hbar^2} Y(\theta, \varphi) = 0 \quad (\text{III-17})$$

En divisant cette dernière équation sur $R(r)Y(\theta, \varphi)$ et en multipliant par r^2 on obtient :

$$\left[\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - r^2 \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] - \frac{L^2}{\hbar^2} \frac{Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)} = 0 \quad (\text{III-18})$$

Remarquons que le premier terme, entre crochet, dans cette équation ne dépend que de r et le deuxième terme ne dépend que des angles θ et φ . Ceci nous ramène à dire que les deux termes sont égaux à la même constante Λ (avec signe opposées pour que la somme soit égale à zéro) :

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - r^2 \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) = \Lambda \quad (\text{III-19})$$

$$\frac{L^2}{\hbar^2} \frac{Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)} = -\Lambda \quad (\text{III-20})$$

La constante Λ est connue par la constante de séparation. Normalement, cette constante est arbitraire et doit être identifiée avec la solution. Cependant le choix $\Lambda = l(l+1)$, avec l un entier naturel ($l \in \mathbb{N}$) nous ramène à une identification directe de nos équations différentielles avec d'autres équations de solutions connues. Les équations (III-19) et (III-20) prennent les formes :

$$\frac{L^2}{\hbar^2} \frac{Y(\theta, \varphi)}{Y(\theta, \varphi)} = -l(l+1) \quad (\text{III-21})$$

$$\frac{r^2}{R(r)} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - r^2 \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) = l(l+1) \quad (\text{III-22})$$

Ou les formes :

$$L^2 Y(\theta, \varphi) = -l(l+1)\hbar^2 Y(\theta, \varphi) \quad (\text{III-23})$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right) R(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R(r) = 0 \quad (\text{III-24})$$

On obtient ainsi deux équations, une radiale et une angulaire. En fait l'équation angulaire (III-23) représente une équation aux valeurs propres $-l(l+1)\hbar^2$. En mathématiques, les solutions de cette équation sont connues. Elles sont appelées harmoniques sphériques, et sont fonctions propres de L^2 .

III-3 Solution de l'équation angulaire

Les solutions de l'équation angulaire sont les harmoniques sphériques, est les 1 utiliser dans la constante de séparation sont les indices des harmoniques sphériques $Y_l(\theta, \varphi)$, ce sont les nombres quantiques du moment angulaire. Pour résoudre l'équation angulaire :

$$\left(\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}\right) + l(l+1)\right) Y_l(\theta, \varphi) = 0 \quad (\text{III-25})$$

Faisons la séparation des variables suivante :

$$Y_l(\theta, \varphi) = \Theta_l(\theta) \Phi(\varphi) \quad (\text{III-26})$$

Nous avons alors

$$\frac{\Theta_l(\theta)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{\Phi(\varphi)}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta_l(\theta)}{\partial \theta}\right) + l(l+1) \Theta_l(\theta) \Phi(\varphi) = 0 \quad (\text{III-27})$$

En divisant cette équation sur $\Theta_l(\theta) \Phi(\varphi)$ nous pouvons la réécrire sous la forme :

$$\frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\Theta_l(\theta) \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta_l(\theta)}{\partial \theta}\right) + l(l+1) = 0 \quad (\text{III-28})$$

En multipliant cette dernière par $\sin^2 \theta$ on obtient :

$$\left[\frac{\sin \theta}{\Theta_l(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta_l(\theta)}{\partial \theta}\right) + l(l+1) \sin^2 \theta\right] + \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = 0 \quad (\text{III-29})$$

Nous remarquons que le premier terme, entre crochets, ne dépend que de l'angle θ et le deuxième terme ne dépend que de l'angle φ . De la même manière que précédemment nous allons introduire une constante de séparation positive m^2 :

$$\frac{\sin \theta}{\Theta_l(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta_l(\theta)}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2 \quad (\text{III-30})$$

$$\frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = -m^2 \quad (\text{III-31})$$

qui nous ramène aux deux équations, azimutale et polaire, écrite sous les formes :

$$\frac{d^2 \Phi_m(\varphi)}{d\varphi^2} + m^2 \Phi_m(\varphi) = 0 \quad (\text{III-32})$$

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta_l^m(\theta)}{d\theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2 \Theta_l^m(\theta) \quad (\text{III-33})$$

La solution de l'équation azimutale (III-32) est bien connue :

$$\Phi_m(\varphi) = \exp(im\varphi) \quad (\text{III-34})$$

La condition de périodicité sur la fonction $\Phi_m(\varphi)$ impose que la constante m soit un entier ($m \in \mathbb{Z}$). On note que le nombre m représente le nombre quantique magnétique. Dans l'équation polaire (III-33) nous avons :

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) \right) = \frac{d \sin \theta}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) + \sin \theta \frac{d^2}{d^2\theta} \Theta_l^m(\theta) \quad (\text{III-35})$$

$$= \cos \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) + \sin \theta \frac{d^2}{d^2\theta} \Theta_l^m(\theta) \quad (\text{III-36})$$

L'équation (III-33) peut donc être réécrite sous la forme

$$\sin^2 \theta \frac{d^2}{d^2\theta} \Theta_l^m(\theta) - \sin \theta \cos \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) + l(l+1) \sin^2 \theta \Theta_l^m(\theta) - m^2 \Theta_l^m(\theta) = 0 \quad (\text{III-37})$$

En posant $x = \cos \theta$, et sachant que :

$$\frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) = \frac{dx}{d\theta} \frac{d}{dx} \Theta_l^m(\theta) = -\sin \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(\theta) \quad (\text{III-38})$$

Et que

$$\frac{d^2}{d^2\theta} \Theta_l^m(\theta) = \frac{d}{d\theta} \left(\frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) \right) = \frac{d}{d\theta} \left(-\sin \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) \right) \quad (\text{III-39})$$

$$= -\frac{d \sin \theta}{d\theta} \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) - \sin \theta \frac{d}{d\theta} \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) \quad (\text{III-40})$$

$$= -\cos \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) - \sin \theta \frac{dx}{d\theta} \frac{d^2}{dx^2} \Theta_l^m(x) \quad (\text{III-41})$$

$$= -\cos \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) + \sin^2 \theta \frac{d^2}{dx^2} \Theta_l^m(x) \quad (\text{III-42})$$

Alors

$$\frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) \right) = \frac{d \sin \theta}{d\theta} \frac{d}{d\theta} \Theta_l^m(\theta) + \sin \theta \frac{d^2}{d\theta^2} \Theta_l^m(\theta) \quad (\text{III-43})$$

$$= -2 \cos \theta \sin \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) + \sin^3 \theta \frac{d^2}{dx^2} \Theta_l^m(x) \quad (\text{III-44})$$

L'équation polaire peut donc être réécrire sous la forme :

$$-2 \cos \theta \sin^2 \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) + \sin^4 \theta \frac{d^2}{dx^2} \Theta_l^m(x) + l(l+1) \sin^2 \theta \Theta_l^m(x) - m^2 \Theta_l^m(x) = 0 \quad (\text{III-45})$$

Divisons cette équation par $\sin^2 \theta$ on obtient :

$$\sin^2 \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) - 2 \cos \theta \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) + l(l+1) \Theta_l^m(x) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \Theta_l^m(x) = 0 \quad (\text{III-46})$$

À partir de la relation trigonométrique

$$\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1 \quad (\text{III-47})$$

Il est évident que

$$\sin^2 \theta = 1 - x^2 \quad (\text{III-48})$$

Cette dernière nous permet donc de réécrire l'équation (III-46) sous la forme

$$(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} \Theta_l^m(x) - 2x \frac{d}{dx} \Theta_l^m(x) + l(l+1) \Theta_l^m(x) - \frac{m^2}{(1-x^2)} \Theta_l^m(x) = 0 \quad (\text{III-49})$$

Cette équation différentielle peut être identifiée avec celle du polynôme de Legendre associé $P_l^m(x)$ qui peut être générer du polynôme de Legendre $P_l^0(x)$:

$$P_l^m(x) = (-1)^m \sqrt{(1-x^2)^m} \frac{d^m}{dx^m} P_l^0(x) \quad (\text{III-50})$$

Les polynômes de Legendre peuvent être générés à partir de l'équation :

$$P_l^0(x) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (\text{III-51})$$

Rappelons que les polynômes $P_l^0(x)$ sont des solutions de l'équation différentielle (III-49) pour $m = 0$. Finalement on trouve la solution de l'équation (III-25) sous la forme ;

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \Theta_l^m(\theta) \Phi_m(\varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(x) \exp(im\varphi), \quad (m \geq 0) \quad (\text{III-52})$$

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \varphi)]^* \quad (\text{III-53})$$

Notons que la norme au carré de la fonction d'onde représente une probabilité de présence, alors elle doit être normalisée à l'unité, d'où la constante de normalisation

$$(-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \quad (\text{III-54})$$

Dans la définition de l'harmonique sphérique (équation (III-52)).

III-3 Solution de l'équation radiale

Pour résoudre l'équation radiale (III-24) :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) R(r) - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(V(r) - E - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) = 0 \quad (\text{III-55})$$

nous posons $u(r) = r R(r)$, ce qui donne

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u(r)}{r} - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) \frac{u(r)}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{u(r)}{r} = 0 \quad (\text{III-56})$$

Comme

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u(r)}{r} = \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \frac{u(r)}{r} \quad (\text{III-57})$$

Il est clair que

$$\frac{d}{dr} \frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{du(r)}{dr} + u(r) \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \quad (\text{III-58})$$

et

$$\frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{du(r)}{dr} - \frac{u(r)}{r^2} \right) = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \frac{du(r)}{dr} - \frac{d}{dr} \frac{u(r)}{r^2} \right) \quad (\text{III-59})$$

$$= \left(\frac{d}{dr} \frac{1}{r} \right) \frac{du(r)}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} - \frac{d}{dr} \frac{u(r)}{r^2} \quad (\text{III-60})$$

$$= \frac{-1}{r^2} \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} + \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} - \left(\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} u(r) + u(r) \frac{d}{dr} \frac{1}{r^2} \right) \quad (\text{III-61})$$

$$= \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} - \frac{2}{r^2} \frac{d}{dr} u(r) + 2 \frac{u(r)}{r^2} \quad (\text{III-62})$$

Alors

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) \frac{u(r)}{r} = \frac{1}{r} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} \quad (\text{III-63})$$

L'équation (III-56) peut donc être réécrite sous la forme

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \frac{u(r)}{r} = \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) \frac{u(r)}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{u(r)}{r} = 0 \quad (\text{III-64})$$

Multipliant cette équation par r on obtient :

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) - \left[\frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \frac{u(r)}{r} = 0 \quad (\text{III-65})$$

Pour l'instant nous ne faisons aucune hypothèse sur la forme du potentiel, si ce n'est qu'il ne dépend que de la variable r (pas des angles θ et φ). Or nous savons que pour $l = 0$, on doit retomber sur les niveaux simples de Bohr, qui sont des niveaux discrets qui s'écrivent en fonction de la constante de Rydberg E_0 . Il doit donc exister plusieurs solutions discrètes dépendant du nombre quantique n , mais également de l . Nous écrirons dès lors ces solutions comme $u_{nl}(r)$. Pour simplifier l'écriture de l'équation (III-65), nous allons utiliser la constante de structure fine α , le rayon de Bohr a_0 , ainsi que constante de Rydberg E_0 :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar a^2}; \quad a_0 = \frac{\hbar}{\alpha\mu c^2}; \quad E_0 = \frac{1}{2} \alpha\mu c^2 \quad (\text{III-66})$$

Alors le potentiel de Coulomb donné dans l'équation (III-6) peut être écrit sous la forme

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{\alpha\hbar c}{r} \quad (\text{III-67})$$

Ainsi en posant $\rho = a_0 r$ et $\epsilon_{nl} = -E/E_0$, on obtient l'équation :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} u_{nl}(\rho) + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \epsilon_{nl} \right] u_{nl}(\rho) = 0 \quad (\text{III-68})$$

Nous déterminons une solution à cette équation différentielle en examinant les cas où $\rho \rightarrow 0$ (dans ce cas le terme en ρ^{-2} est prépondérant) et $\rho \rightarrow \infty$ (dans ce cas seul reste le terme ϵ_l)

$$\rho \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{d^2}{d\rho^2} u_{nl}(\rho) - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{nl}(\rho) = 0 \quad (\text{III-69})$$

$$\rho \rightarrow \infty \Rightarrow \frac{d^2}{d\rho^2} u_{nl}(\rho) - \epsilon_{nl} u_{nl}(\rho) = 0 \quad (\text{III-70})$$

La solution générale de l'équation (III-69) prend la forme :

$$u_{nl}(\rho) = b\rho^{l+1} + \frac{c}{\rho^l} \quad (\text{III-71})$$

En raison du fait que la fonction d'onde ne peut être infinie quand $\rho \rightarrow 0$, le deuxième terme $c\rho^{-l}$ dans la solution (III-71) ne doit pas figurer dans la solution ($c = 0$), la solution est donc de la forme

$$\rho \rightarrow 0 \Rightarrow u_{nl}(\rho) = b\rho^{l+1} \quad (\text{III-72})$$

La solution générale de l'équation (III-70) prend la forme :

$$u_{nl}(\rho) = b' \exp(-\sqrt{\epsilon_{nl}}\rho) + c' \exp(+\sqrt{\epsilon_{nl}}\rho) \quad (\text{III-73})$$

En raison du fait que la fonction d'onde ne peut être infinie quand $\rho \rightarrow \infty$, le deuxième terme $c' \exp(+\sqrt{\epsilon_{nl}}\rho)$ dans la solution (III-73) ne doit pas figurer dans la solution ($c' = 0$), la solution s'écrit alors comme :

$$u_{nl}(\rho) = b' \exp(-\sqrt{\epsilon_{nl}}\rho) \quad (\text{III-74})$$

La solution de l'équation (III-68) est donc de la forme

$$u_{nl}(\rho) = (A_{l+1}\rho^{l+1} + A_{l+2}\rho^{l+2} + \dots + A_k\rho^k + \dots) \exp(-\sqrt{\epsilon_{nl}}\rho) \quad (\text{III-75})$$

Où le polynôme doit être fini pour que la fonction d'onde soit finie. En injectant cette solution dans l'équation (III-68), on trouve la relation de récurrence suivante :

$$A_{k+1} = \frac{2(k\sqrt{\epsilon_{nl}}-1)}{k(k+1)-l(l+1)} A_k \text{ pour } k \geq l+1 \quad (\text{III-76})$$

Si on considère que le polynôme s'arrête à l'ordre p , on doit donc avoir $A_{p+1} = 0$ ce qui conduit à la $\sqrt{\epsilon_{nl}} = p^{-1}$, et on remarque ainsi que le degré maximum du polynôme n'est autre que n . L'énergie des niveaux ne dépend donc pas de l et s'écrit bien comme le proposait Bohr :

$$\epsilon_{nl} = \frac{1}{n^2} = \epsilon_n \quad \text{soit} \quad E = -\frac{E_0}{n^2} \quad (\text{III-77})$$

L'indice l doit donc vérifier la condition $+1 \leq n$, et on constate qu'il existe plusieurs sous-niveaux d'indice l différents pour une même valeur du nombre quantique n et donc de l'énergie. A partir de ces conclusions, on retrouve les fonctions radiales :

$$u_{nl}(\rho) = \exp(-\sqrt{\epsilon_n}\rho) \sum_{k=1}^{n-1} A_{l+k} \rho^{k+l} \quad (\text{III-78})$$

$$= \rho^{l+1} \exp(-\sqrt{\epsilon_n}\rho) \sum_{k=0}^{n-l-1} A_{l+k+1} \rho^k \quad (\text{III-79})$$

$$A_{k+1} = \frac{1}{n^2} \left[\frac{2(k-n^2)}{k(k+1)-l(l+1)} \right] A_k \quad (\text{III-80})$$

Dans l'équation (III-68) nous pouvons aussi poser $\epsilon_{nl} = \zeta_{nl}^2/4$ ce qui donne :

$$\frac{d^2}{d\rho^2} u_{nl}(\rho) + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{\zeta_{nl}^2}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u_{nl}(\rho) = 0 \quad (\text{III-81})$$

Effectuons maintenant le changement de variable suivant :

$$x = \rho \zeta_{nl} \Rightarrow \rho = \frac{x}{\zeta_{nl}} \Rightarrow \rho = \frac{dx}{\zeta_{nl}} \quad (\text{III-82})$$

L'équation (III-81) prend la forme

$$\zeta_{nl}^2 \frac{d^2 u_{nl}(x)}{dx^2} + \left[\frac{2\zeta_{nl}}{x} - \frac{\zeta_{nl}^2}{4} - \zeta_{nl}^2 \frac{l(l+1)}{x^2} \right] u_{nl}(x) = 0 \quad (\text{III-83})$$

en divisant cette équation par ζ_{nl}^2 on trouve :

$$\frac{d^2 u_{nl}(x)}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{2}{\zeta_{nl} x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] u_{nl}(x) = 0 \quad (\text{III-84})$$

Posons :

$$l(l+1) = \frac{k^2+1}{4} \text{ et } \frac{2}{\zeta_{nl}} = \frac{2j+k+1}{2} \quad (\text{III-85})$$

On obtient une équation différentielle de solutions connues :

$$\frac{d^2 u_{nl}(x)}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{2j+k+1}{2x} - \frac{k^2+1}{4x^2} \right] u_{nl}(x) = 0 \quad (\text{III-86})$$

Les solutions de cette équation sont:

$$u_{nl}(x) = \sqrt{x^{(k+1)}} \exp\left(-\frac{x}{2}\right) L_j^k(x) \quad (\text{III-87})$$

Où $L_j^k(x)$ est le polynôme de Laguerre associé qui peuvent être définies par la représentation de Rodrigues :

$$L_j^k(x) = \frac{1}{j!x^k} \exp(x) \frac{d^j}{dx^j} [x^{j+k} \exp(-x)] \quad (\text{III-88})$$

$$= (-1)^k \frac{d^j}{dx^j} L_{j+k}(x) \quad (\text{III-89})$$

Où $L_{j+k}(x)$ est le polynôme de Laguerre. Nous avons :

$$l(l+1) = \frac{k^2-1}{4} \Rightarrow k = 2l+1 \quad (\text{III-90})$$

$$\frac{2}{\zeta_{nl}} = \frac{2j+k+1}{2} = j+l+1 \quad (\text{III-91})$$

Les indice k et j du polynôme de Laguerre associe ne sont pas des entier négatifs. Nous pouvons donc supposer que la somme $(j+l+1)$ est un entier positif n supérieur que zéro ($n \geq 1$). L'indice n est connu comme le nombre quantique principal. En utilisant ce nombre quantique on définit la valeur propre de l'atome d'hydrogène

$$\zeta_{nl} = \frac{2}{n} = 2\sqrt{\epsilon_{nl}} \Rightarrow \epsilon_{nl} = \frac{1}{n^2} \Rightarrow E = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar}\right)^2 \frac{\mu}{2n^2} \quad (\text{III-92})$$

Nous avons donc :

$$j = n - l - 1; \quad x = \rho \zeta_{nl} = 2\rho\sqrt{\epsilon_{nl}} = \frac{2\rho}{n}; \quad r = \rho a_0 \Rightarrow x = \frac{2r}{a_0 n} \quad (\text{III-93})$$

D'où le resultat :

$$u_{nl}(r) = \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^{l+1} \exp\left(-\frac{r}{a_0 n}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right) \quad (\text{III-94})$$

Comme : $u_{nl}(r) = r R_{nl}(r)$ alors :

$$R_{nl}(r) = A \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{a_0 n}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right) \quad (\text{III-95})$$

Ici nous avons introduit la constante de normalisation qui a absorbé le facteur $\frac{2}{a_0 n}$. Comme la norme au carré de la fonction radiale $R_{nl}(r)$ représente une probabilité de presence, elle doit être normalisée à l'unité. D'où le résultat :

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{a_0 n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{a_0 n}\right)^l \exp\left(-\frac{r}{a_0 n}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{a_0 n}\right) \quad (\text{III-96})$$

Bibliographie du chapitre III

- [1] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 41, 145201. (2008).
- [2] Bethe H A. Ann. Phys. 5, 325 (1930).
- [3] Sahlaoui M. Thèse Doctorat : *Application du Formalisme Variationnel à l'ionisation de la Molécule d'Eau*. Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen. Algérie. (2012) (on line <http://dspace.univ-tlemcen.dz/bitstream/112/3757/1/these-SAHLAOUI-Mohammed.pdf>)
- [4] Landau L et Lifchitz E. Mécanique Quantique vol III. Editions Mir. (1967).
- [5] Mc Dowell M R C and Coleman J P. Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions, North-Holland Publishing Company, Amsterdam. (1970).
- [6] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 88, 905–910 (2010)
- [7] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 89, 723–727(2011).
- [8] Sahlaoui M and Bouamoud M. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** 085201 (2012).
- [9] Sahlaoui M, Lasri B and Bouamoud M. Can. J. Phys. **92** 136–140 (2014)
- [10] Marchalant J P, Whelan C T and Walters H R J. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 31, 1141–1178 (1998).
- [11] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 18, 3203 (1985).
- [12] Lewis R R Jr. Phys. Rev. 102, 537–543 (1956).

Chapitre IV : Section Efficace l'Ionisation de l'anti-hydrogène.

IV-1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter la section efficace de l'ionisation simple de l'anti-hydrogène atomique. La structure de cette cible atomique est constituée d'un noyau de charge négative (anti-proton) et un positron (anti-electron). Ce type de problème est forme une grande importance pour les recherches actuelles sur la nature de la matière et l'antimatière. Ce problème de collision rentre dans le cadre de problèmes de plusieurs particules qui sont connus par être parmi les problèmes les plus compliqués en physique. C'est pour cette raison que des approximations sont nécessaires afin de trouver une solution à ce problème.

IV-2 Section efficace triplement différentielle

La section efficace triplement différentielle est définie pour un processus de l'ionisation d'une cible atomique par impact de positron par l'équation :

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\hat{k}_e d\hat{k}_s} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_e k_s}{k_i} |T_{fi}|^2 \quad (\text{IV-1})$$

Ou $\hat{k}_s \equiv (\theta_s, \varphi_s)$ et $\hat{k}_e \equiv (\theta_e, \varphi_e)$ sont les angles solides qui donnent les directions de diffusion et d'éjection, respectivement, et E_e représente l'énergie avec laquelle le positron actif est éjecté. T_{fi} est un élément de la matrice de transition du système projectile-cible de l'état initial $|\Psi_i\rangle$ à l'état final $|\Psi_f\rangle$, définie par :

$$T_{fi} = \langle \Psi_f | (V + V G_0^{(+)} V) | \Psi_i \rangle \quad (\text{IV-2})$$

Où $G_0^{(+)}$ est l'opérateur de Green et V l'énergie d'interaction entre la particule incidente et la cible atomique

$$V = -\frac{1}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|r_0 - r_i|} \quad (\text{IV-3})$$

Où $\mathbf{r}_0$ est le vecteur position du positron incident, $\mathbf{r}_i$ est le vecteur position du positron de la cible. L'état initial qui correspond à une particule incidente et un positron liés peut être décrit par le produit :

$$|\Psi_i\rangle = \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0)\Phi_i(\mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-4})$$

Où $\mathbf{k}_i$ est le moment de la particule incidente. L'état final est caractérisé par :

$$|\Psi_f\rangle = \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0)\Phi_f(\mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-5})$$

Où $\mathbf{k}_s$ est le moment de la particule diffusée.

Pour des petits angles entre les deux directions de diffusion et d'éjection l'interaction poste-collision entre les particules diffusée et éjectée devienne importante. Alors nous avons besoin d'inclure cette interaction dans la section efficace mais sans compliquer les calculs. Une solution pour ce problème a été donnée par Kheifets et col [1] où il est démontré que l'effet le plus large de l'interaction poste-collision est contenu dans le facteur de normalisation de la fonction de Coulomb, connu par le facteur de Gamow

$$|D_{\xi_{se}}^{(-)}|^2 = \frac{2\pi\xi_{se}}{\exp(2\pi\xi_{se})-1} \quad (\text{IV-6})$$

Où $\xi_{se} = 1/q_{se}$ et $\mathbf{q}_{se} = \mathbf{k}_s - \mathbf{k}_e$. Ainsi la SETD donnée dans l'équation (IV-1) doit être multipliée par le facteur donné dans l'équation (IV-6)

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\hat{\mathbf{k}}_e d\hat{\mathbf{k}}_s} = \frac{1}{(2\pi)} \frac{k_e k_s}{k_i} \frac{2\pi\xi_{se}}{(\exp(2\pi\xi_{se})-1)} |T_{fi}|^2 \quad (\text{IV-7})$$

IV-3 Deuxième Approximation de Born

Il est difficile de traiter le problème de de diffusion. Pour raison nous allons utiliser la deuxième approximation de Born pour réduire les calculs. Comme le positron incident est considéré très rapide l'interaction de cette particule avec le positron de la cible s'effectue

dans un temps très court et les angles de diffusion seront dans ce cas petits. L'avantage de cette approximation est que les calculs analytiques et numériques seront fortement réduits. Nous supposons aussi que le positron éjecté est plus lent que le positron diffusé d'où la détection discernable des deux particules. Avec cette supposition nous pouvons sans risque négliger l'effet d'échange entre les deux positrons sortants.

Dans l'approximation de Born, les fonctions d'ondes $\varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0)$ et $\varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0)$ données dans les équations (IV-4) et (IV-5) sont des ondes planes

$$\varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0) \quad (\text{IV-8})$$

$$\varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0) \quad (\text{IV-9})$$

Les fonctions qui décrivent les états initial et final du système de collision sont donc réduites aux formes simples suivantes :

$$\Psi_i(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-10})$$

$$\Psi_f(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) = \exp(i\mathbf{k}_s \cdot \mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \quad (\text{IV-11})$$

Où $\phi_{AO}(\mathbf{r}_1)$ est l'orbitale atomique (OA) qui va être ionisée et $\mathbf{r}_1$ le vecteur position du positron actif lequel est décrit après l'éjection par la fonction d'onde du continuum $\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1)$ avec $\mathbf{k}_e$ son moment.

L'élément de matrice T_{fi} est donc réduit à la somme des deux termes de l'approximation de Born suivant :

$$T^{B1} = \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \left| V \right| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{IV-12})$$

$$T^{B2} = \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \left| V G_0^{(+)} V \right| \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \right\rangle \quad (\text{IV-13})$$

Une résolution spectrale de l'opérateur de Green $G_0^{(+)}$ [2,3] mène à écrire le terme T^{B2} sous la forme :

$$T^{B2} = -\frac{1}{4\pi^3} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{k^2 - k_n^2 - i\eta} \left\langle \varphi_{k_s}(\mathbf{r}_0) \psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1) \left| V \right| \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \phi_n(\mathbf{r}_1) \right\rangle$$

$$\times \langle \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_0) \phi_n(\mathbf{r}_1) | V | \varphi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}_0) \phi_{AO}(\mathbf{r}_1) \rangle \quad (\text{IV-14})$$

Où $\eta \rightarrow 0^+$. La somme est sur tous les états discrets et continus $\phi_n(\mathbf{r}_1)$ de la cible atomique et k_n définie par $k_n^2 = k_i^2 - 2(E_n - E_{OA})$, E_n étant la valeur propre de l'hamiltonien atomique qui correspond au vecteur propre $|\phi_n\rangle$. En utilisant l'intégrale suivante

$$\int \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_0)}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}|} d\mathbf{r}_0 = \frac{4\pi}{q^2} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{IV-15})$$

connue par l'intégrale de dite de Bethe [4], nous pouvons déduire les résultats suivants :

$$T^{B1} = \frac{4\pi}{q^2} \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} - 1 | \phi_{AO}(\mathbf{r}) \rangle \quad (\text{IV-16})$$

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_n \int d\mathbf{k} \frac{\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{r}} - 1 | \phi_n(\mathbf{r}) \rangle \langle \phi_n(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}} - 1 | \phi_{AO}(\mathbf{r}) \rangle}{(k^2 - k_n^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-17})$$

Où $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_s$ est le moment de transfert, $\mathbf{q}_i = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}$ et $\mathbf{q}_s = \mathbf{k} - \mathbf{k}_s$. Notons que pour simplifier l'écriture l'indice du vecteur position $\mathbf{r}_1$ est omis puisqu'il ne reste que l'intégration sur une seule variable. Utilisons maintenant dans l'équation (IV-18) l'approximation de fermeture, où la différence $E_n - E_{OA}$ est remplacée par une moyenne $\bar{w}$ sur les énergies d'excitations. Dans ce cas la relation de fermeture $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1$ peut être utilisée, et nous arrivons à écrire le résultat suivant :

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \sum_n \int d\mathbf{k} \frac{\langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | (e^{i\mathbf{q}_s \cdot \mathbf{r}} - 1)(e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}} - 1) | \phi_{AO}(\mathbf{r}) \rangle}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta) q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-18})$$

L'état du continuum $\psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r})$ du positron éjecté est d'écrit ici par la fonction d'onde de Coulomb qui satisfait la condition aux limites sortantes :

$$\psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{D_{\xi_e}^{(-)}}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r}) {}_1F_1[i\xi_e; 1; -i(\mathbf{k}_e \cdot \mathbf{r} + k_e r)] \quad (\text{IV-19})$$

Avec $D_{\xi_e}^{(-)} = e^{-\frac{\pi\xi_e}{2}} \Gamma(1 - i\xi_e)$ $i\xi_e = -1/k_e$ est le paramètre de Sommerfeld. La fonction d'onde qui décrit un orbitale atomique prend la forme :

$$\phi_{AO}(\mathbf{r}) = R_n^l(r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{IV-20})$$

Ou $Y_l^m(\hat{\mathbf{r}})$ est l'harmonique sphérique normalisée et $R_n^l(r)$ la partie radiale définie dans le chapitre précédent.

En injectant dans les équations (IV-16) et (IV-18) les fonctions d'ondes données dans les équations (IV-19) et (IV-20) nous pouvons écrire T^{B1} et T^{B2} sous les formes :

$$T^{B1} = \frac{4\pi}{q^2} [F_{nlm}(\mathbf{q}) - P_{nlm}] \quad (\text{IV-21})$$

$$T^{B2} = -\frac{4}{\pi} \int d\mathbf{k} \frac{F_{nlm}(\mathbf{q}) + P_{nlm} - H_{nlm}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i)}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta)q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-22})$$

Ou

$$F_{nlm}(\mathbf{q}) = \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | R_n^l(r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \rangle \quad (\text{IV-23})$$

$$P_{nlm} = \langle \psi_{\mathbf{k}_e}^{(-)}(\mathbf{r}) | R_n^l(r)Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \rangle \quad (\text{IV-24})$$

et

$$H_{nlm}(\mathbf{q}_s, \mathbf{q}_i) = F_{nlm}(\mathbf{q}_s) + F_{nlm}(\mathbf{q}_i) \quad (\text{IV-25})$$

Les formes analytiques des fonctions d'ondes des états initial et final choisis ici nous permettent de résoudre analytiquement les intégrales tridimensionnelles qui figurent dans les équations (IV-23), (IV-24) et (IV-25) [5-8].

Le deuxième terme de l'approximation de Born T^{B2} donnée dans l'équation (IV-22) contient une intégrale tridimensionnelle singulière souvent difficile à résoudre numériquement. Ce terme peut être résolu numériquement en utilisant l'approche donnée par Sahlaoui et Bouamoud [7] et ou celle donnée par Marchalant et col [9]. L'intégrale tridimensionnelle singulière suivante :

$$I(\mathbf{k}_i; \mathbf{k}_s; -i\bar{k}) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(k^2 - \bar{k}^2 - i\eta)q_i^2 q_s^2} \quad (\text{IV-26})$$

Qui figure dans l'équation (IV-22) peut être déduit à partir du travail effectué par Byron et col [10], qui peut être exactement évaluée en utilisant la méthode des résidus de Lewis [11].

Bibliographie du chapitre IV

[1] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. J. Phys. B : At.

Mol. Opt. Phys. 41, 145201. (2008).

[2] Landau L et Lifchitz E. Mécanique Quantique vol III. Editions Mir. (1967).

[3] Mc Dowell M R C and Coleman J P. Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions, North-Holland Publishing Company, Amsterdam. (1970).

[4] Bethe H A. Ann. Phys. 5, 325 (1930).

[5] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 88, 905–910 (2010)

[6] Sahlaoui M and Bouamoud M. Can. J. Phys. 89, 723–727(2011).

[7] Sahlaoui M and Bouamoud M. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **45** 085201 (2012).

[8] Sahlaoui M, Lasri B and Bouamoud M. Can. J. Phys. **92** 136–140 (2014)

[9] Marchalant J P, Whelan C T and Walters H R J. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 31, 1141–1178 (1998).

[10] Byron F W Jr, Joachain C J and Piraux B. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. 18, 3203 (1985).

[11] Lewis R R Jr. Phys. Rev. 102, 537–543 (1956).

Chapitre V : Résultats et Discussions.

V-1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats de calculs de la section efficace triplement différentielle de la simple ionisation de l'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}$ atomique par impact de positron e^+ . Les résultats sont calculés dans la première et la deuxième approximation de Born. La fonction d'onde de l'atome d'anti-hydrogène est une solution exacte de l'équation de Schrödinger à deux particules. La fonction d'onde du continuum du positron éjecté est aussi une solution exacte de l'équation de Schrödinger pour une diffusion dans potentiel coulombien de symétrie centrale. Puisque l'expérience de l'ionisation de l'anti-hydrogène par impact d'électron et de positron, jusqu'à présent, n'a pas encore été réalisée. Alors les résultats de la section efficace triplement différentielle ne sont pas disponibles. Pour cette raison nous avons été obligés de comparer nos résultats avec ceux de l'ionisation simple de l'hydrogène atomique par impact d'électron. Cette comparaison est bien justifiée par le fait que la fonction d'onde de l'atome d'anti-hydrogène est une symétrie miroir de l'atome d'hydrogène. La réaction de diffusion d'un positron dans un champ coulombien centrale négatif est aussi une symétrie miroir de la réaction de diffusion d'un électron dans un champ coulombien centrale positif. Il est évident donc que la réaction $(e^+, 2e^+)$ est la symétrie miroir de la réaction $(e, 2e)$. Il bien justifie donc que les résultats expérimentaux de l'ionisation de l'atome d'anti-hydrogène par impact de positron vont avoir la même distribution que ceux de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron (jusqu'à que l'expérience soit réalisée).

Les résultats expérimentaux de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par impact d'électron existent, en particulier pour la section efficace triplement différentielle (Weigold *et col.* [1], Lohmann *et col* [2], Ehrhardt *et col* [3, 4]).

V-2 Résultats et discussions

Dans la figure V.1 nous avons présenté les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'anti-hydrogène par impact de positron. Ces résultats sont obtenus pour la première et la deuxième approximation de Born. Ces résultats sont comparés avec les résultats des expériences (e,2e) de Ehrhardt *et col* [3,4] pour l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène par impact d'électron réalisées dans des géométries coplanaires asymétriques. Dans la figure V.1 nous avons trois conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 3$ eV l'expérience a été effectuée pour les trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . Dans chaque expérience les mesures de la section efficace triplement différentielle sont obtenues pour plusieurs angles d'éjection θ_e (l'expérience n'est pas possible pour certains angles). Les résultats théoriques eux aussi ont été obtenus pour les mêmes géométries coplanaires et pour les mêmes conditions cinématiques mais pour des angles d'éjection θ_e qui varient de 0° jusqu'à 360° .

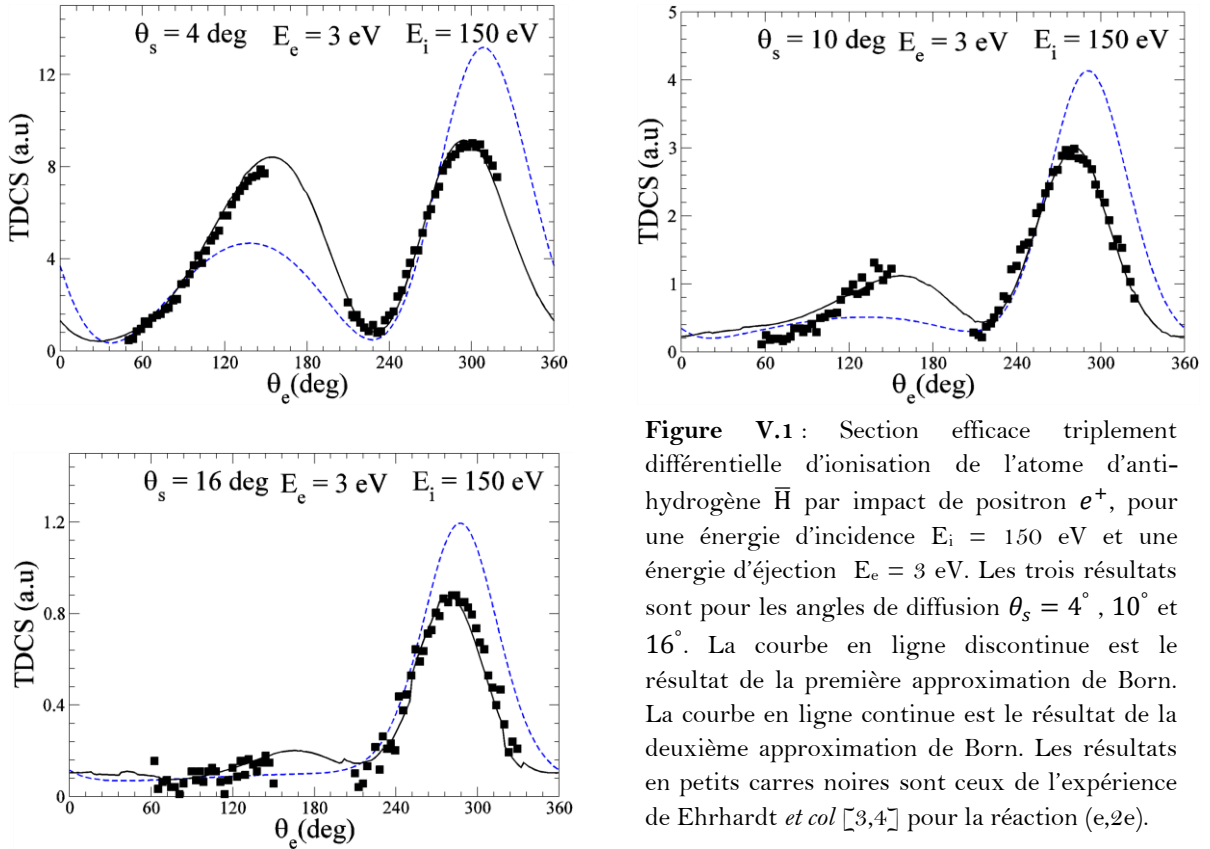


Figure V.1 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}$ par impact de positron e^+ , pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 3$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne discontinue est le résultat de la première approximation de Born. La courbe en ligne continue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [3,4] pour la réaction (e,2e).

L'énergie d'incidence $E_i = 150$ eV est très élevée devant le potentiel d'ionisation. Cependant, l'énergie d'éjection $E_e = 3$ eV est petite, donc la première approximation de Born n'est pas bonne pour décrire les résultats expérimentaux comme il est bien montres par la figure V.1. Il est donc bien remarquable que la deuxième approximation de Born est nécessaire dans ce cas. D'une façon générale, les résultats théoriques sont en très bon accord avec ceux des expériences dans les deux régions de collision binaire (pour $180^\circ \leq \theta_e \leq 360^\circ$) et de recule (pour $0^\circ \leq \theta_e \leq 180^\circ$). Nous remarquons aussi que dans la figure ou $\theta_s = 4^\circ$ l'accord entre la théorie est l'expérience dans la région de recule est mieux que celui des figures ou $\theta_s = 10^\circ$ et $\theta_s = 16^\circ$. En comparant les figures ou $\theta_s = 10^\circ$ et $\theta_s = 16^\circ$ nous pouvons voir que l'accord entre la théorie est l'expérience dans la région de recule est mieux pour $\theta_s = 10^\circ$ que celui $\theta_s = 16^\circ$. Pour explique ceci nous rappelons que dans l'approximation de Born la particule diffusée est décrite par une onde plane suivant la supposition que cette particule ne subis qu'une légère perturbation qui le fait dévier de sa « trajectoire » avec un petit angle. C'est pour cette raison que plus l'angle de diffusion θ_s est grande plus l'approximation de Born devienne moins précise.

Dans la figure V.2 comme dans la figure V.1, nous avons présenté les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'anti-hydrogène par impact de positron. Ces résultats sont obtenus pour la première et la deuxième approximation de Born. Nos résultats théoriques sont comparés avec les résultats expérimentaux de Ehrhardt *et col* [3,4] réalisés dans la géométrie coplanaire asymétrique pour l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène par impact d'électron. Dans la figure V.2 comme dans la figure V.1 nous avons aussi trois conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV l'expérience a été effectuer pour les trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ, 10^\circ$ et 16° . Les résultats théoriques ont été obtenue dans la géométrie coplanaire asymétrique pour les mêmes conditions cinématiques utiliser dans les expériences et pour des angles d'éjection θ_e qui varient de 0° jusqu'à 360° .

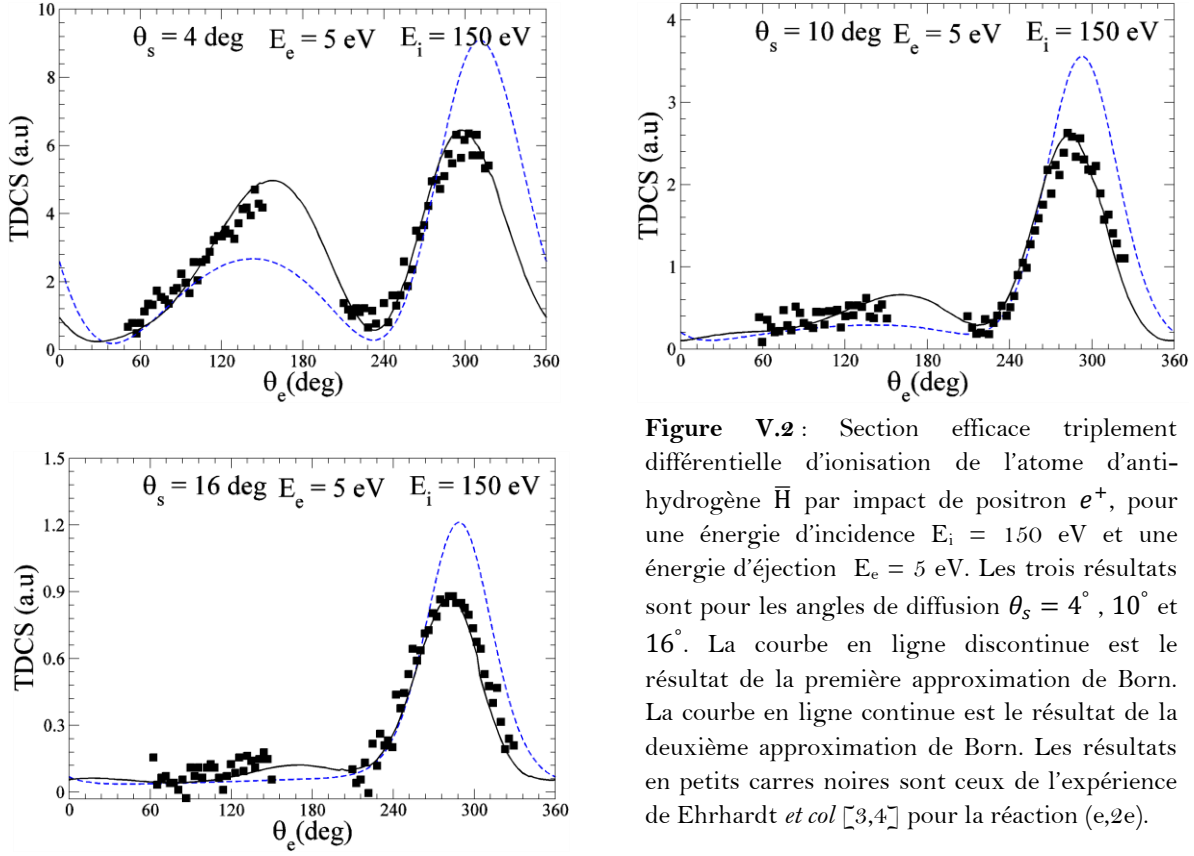


Figure V.2 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}$ par impact de positron e^+ , pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne discontinue est le résultat de la première approximation de Born. La courbe en ligne continue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [3,4] pour la réaction $(e,2e)$.

Dans la figure V.2 l'énergie d'incidence $E_i = 150$ eV est très élevée devant le potentiel d'ionisation, mais l'énergie d'éjection $E_e = 3$ eV est petite, donc la première approximation de Born n'est pas bonne pour décrire les résultats expérimentaux comme il est bien montres par la figure. Comme dans la figure V.1, il est bien remarquable dans la figure V.2 que la deuxième approximation de Born est nécessaire. D'une façon générale, les résultats théoriques sont en très bon accord avec ceux des expériences dans les deux régions de collision binaire et de recule. Dans la figure V.2, nous avons les mêmes remarques sur la figure V.1, que pour $\theta_s = 4^\circ$ l'accord entre la théorie est l'expérience dans la région de recule est mieux que celui des figures ou $\theta_s = 10^\circ$ et $\theta_s = 16^\circ$. En comparant les figures ou $\theta_s = 10^\circ$ et $\theta_s = 16^\circ$ nous pouvons voir aussi que l'accord entre la théorie est l'expérience dans la région de recule est mieux pour l'angle de diffusion $\theta_s = 10^\circ$ que celui ou $\theta_s = 16^\circ$. Ceci confirme ce que nous avons dit précédemment sur l'approximation de Born qui devienne moins précise pour des grandes angles de diffusion θ_s .

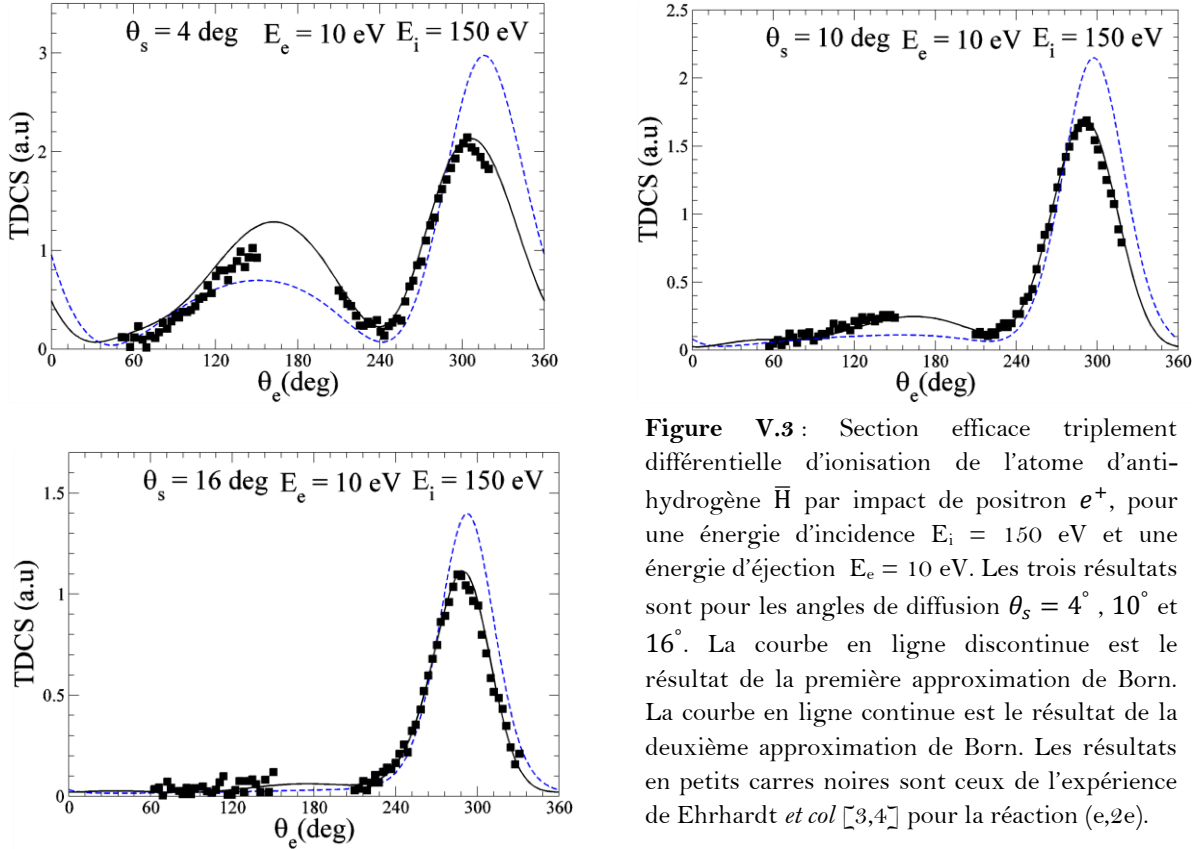


Figure V.3 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}$ par impact de positron e^+ , pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 10$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne discontinue est le résultat de la première approximation de Born. La courbe en ligne continue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [3,4] pour la réaction $(e,2e)$.

La figure V.3 représente aussi les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'anti-hydrogène par impact de positron. Ces résultats sont aussi obtenus dans la première et la deuxième approximation de Born et sont comparés avec les résultats expérimentaux de Ehrhardt *et col* [3,4] réalisés dans la géométrie coplanaire asymétrique pour la réaction $(e,2e)$ de l'atome d'hydrogène. Dans la figure V.3, comme dans les figures précédents (figures V.1 et V.2), nous avons aussi trois conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 10$ eV l'expérience a été effectuée pour les trois angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . Les résultats théoriques sont aussi obtenus dans la géométrie coplanaire asymétrique pour les mêmes conditions cinématiques utilisées dans les expériences et pour des angles d'éjection θ_e qui varient de 0° jusqu'à 360° .

Sur la figure V.3 nous avons les mêmes remarques données sur les figures V.1 et V.2 : l'énergie d'incidence $E_i = 150$ eV est élevée mais l'énergie d'éjection $E_e = 3$ eV est petite, donc la première approximation de Born n'est pas suffisante pour décrire la réaction ($e^+, 2e^+$) dans ce cas et c'est la deuxième approximation de Born qui est nécessaire. Mais, d'une façon générale, nous remarquons un très bon accord entre les résultats théoriques et les expériences. Dans la figure V.3, nous voyons aussi que pour $\theta_s = 4^\circ$ l'accord entre la théorie et l'expérience dans la région de recule est mieux que celui des figures où $\theta_s = 10^\circ$ et $\theta_s = 16^\circ$, et pour l'angle de diffusion $\theta_s = 16^\circ$ l'approximation de Born devienne moins précise que celle pour des petites angles de diffusion.

En choisissant les premiers résultats pour $\theta_s = 4^\circ$ dans la figure V.I, et en analysant l'accord entre la théorie et l'expérience dans la région de recule ($0^\circ \leq \theta_e \leq 180^\circ$) nous pouvons bien voir que la courbe qui représente la deuxième approximation de Born est légèrement au-dessus des données expérimentaux. Pour expliquer ceci nous devons rappeler que nous avons utilisé une fonction d'onde plane pour décrire le positron diffusé et une fonction d'onde de Coulomb pour décrire le positron éjecté. Malgré que cette dernière fonction et une solution exacte de l'équation de Schrödinger pour un potentiel Coulombien elle n'est pas vraiment une solution exacte pour la réaction ($e^+, 2e^+$). Nous pouvons trouver dans la littérature une solution plus précise pour ce type de problème présenté par Peterkop [5,6]. Dans son modèle pour la réaction ($e, 2e$) connue par le modèle deux fonctions de Coulomb (two Coulomb waves 2CW), Peterkop trouve que l'état final constitué de deux électrons qui diffuse dans le continuum peut être décrits dans la région asymptotique (loin du centre de collision) par le produit de deux fonctions d'ondes de Coulomb. Nous pouvons trouver aussi dans la littérature un autre modèle présenté par Brauner, Briggs et Klar [7] qui est encore plus précis que celui que le modèle deux fonctions de Coulomb. Ce dernier est connu par le modèle BBK ou le modèle trois fonctions d'ondes de Coulomb et représente une solution exacte pour les réactions ($e, 2e$) dans la région asymptotique. La puissance de ce modèle réside dans le fait que l'interaction post-collision entre les électrons diffusé et éjecté est très bien décrite. Plus l'angle entre les deux électrons sortants est petit et les énergies de ces deux

électrons sont proches plus cette interaction devienne importante. Dans ce cas on doit bien décrire l'interaction poste collision dans le formalisme théorique. Dans notre formalisme nous avons bien pris en compte cette interaction mais d'une façon approximative en introduisant le facteur de Gamow [8] (voir chapitre IV équation (IV-6)). C'est pour cette raison que nous supposons que quand l'énergie d'éjection E_e devient plus grande nous remarquons un léger désaccord entre la théorie et l'expérience. Ceci est bien remarquable quand nous comparons la figure V.1 avec la figure V.2 et cette dernière avec la figure V.3.

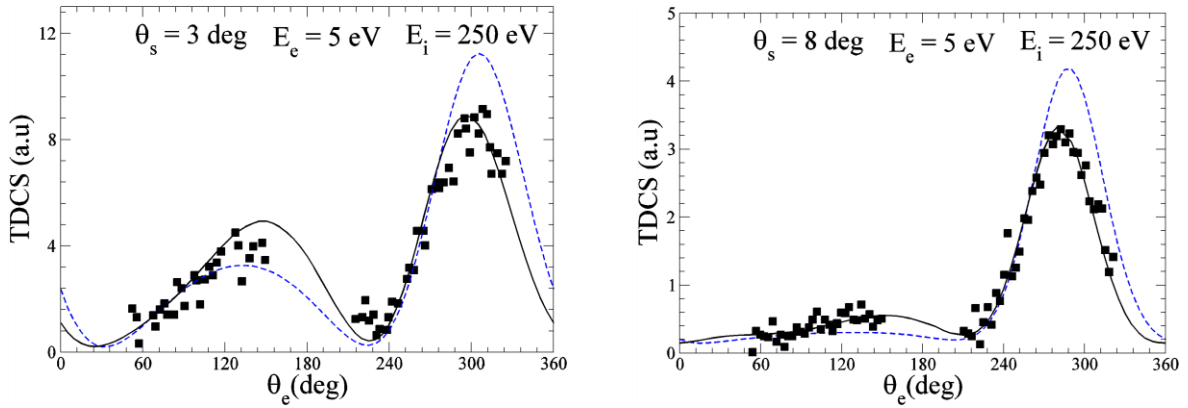


Figure V.4 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}$ par impact de positron e^+ , pour une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 3^\circ$ et 8° . La courbe en ligne discontinue est le résultat de la première approximation de Born. La courbe en ligne continue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [3,4] pour la réaction $(e,2e)$.

Dans la figure V.4 nous avons présenté la distribution de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'anti-hydrogène par impact de positron dans géométries coplanaires asymétriques en fonction de l'angle d'éjection θ_e qui varie de 0° jusqu'à 360° . Les résultats théoriques sont obtenus dans la première et la deuxième approximation de Born. Ces résultats sont comparés avec les résultats des expériences $(e,2e)$ de Ehrhardt *et col* [3,4] pour l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène. Dans la figure V.4 nous avons deux conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i =$

250 eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV l'expérience a été effectuée pour les deux angles de diffusion $\theta_s = 3^\circ$ et 8° .

La figure V.4 confirme bien ce qui a été dit précédemment sur la théorie et la réaction ($e^+, 2e^+$). Cette figure est importante puisque elle présente des résultats avec une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV très très élevée devant le potentiel d'ionisation et des angles de diffusion très petites diffusion $\theta_s = 3^\circ$ et 8° . Le très bon accord entre la théorie et l'expérience dans les deux régions de recul et binaire est bien remarquable dans la figure V.1 montre bien que la deuxième approximation de Born est très précise pour de tels conditions cinématiques.

Dans la figure V.5 nous avons présenté les résultats des calculs théoriques de la section efficace triplement différentielle de l'ionisation de l'anti-hydrogène par impact de positron. Comme dans les figures précédentes, ces résultats sont obtenus pour la première et la deuxième approximation de Born. Nos résultats sont comparés avec les résultats des expériences (e,2e) de Weigold *et col* [1] pour l'ionisation simple de l'atome d'hydrogène par impact d'électron réalisées dans des géométries coplanaires asymétriques. Dans la figure V.5 nous avons trois conditions cinématique : pour une énergie d'incidence $E_i = 250$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 50$ eV l'expérience a été effectuée pour les cinq angles de diffusion $\theta_s = 15^\circ, 20^\circ, 25^\circ, 30^\circ$ et 35° . Les résultats théoriques sont obtenue pour les mêmes géométries coplanaires, pour les mêmes conditions cinématiques et pour des angles d'éjection θ_e qui varient de 30° jusqu'à 100° dans la région de collision binaire.

La figure V.5 montre bien que plus l'angle de diffusion θ_s est grand l'accord entre la théorie et l'expérience devient bon. Ceci peut paraître contradictoire avec ce qui été dit précédemment sur l'approximation de Born qui est plus précise pour les petites angles de diffusion. Cependant, il faut noter ici que dans le cas des résultats présentés dans la figure V.5 l'énergie d'incidence est très grande devant l'énergie d'ionisation de l'état fondamentale de la cible. En calculons l'énergie de diffusion E_s à partir de l'équation du bilan énergétique donnée dans le chapitre I (équation (I-4)) nous allons trouver que la particule diffuse avec une grande vitesse. Ceci implique que l'approximation de la

fonction d'onde plane est bonne dans ce cas. Donc même pour des angles de diffusions un peu élevés l'approximation de Born reste précise dans le cas présent.

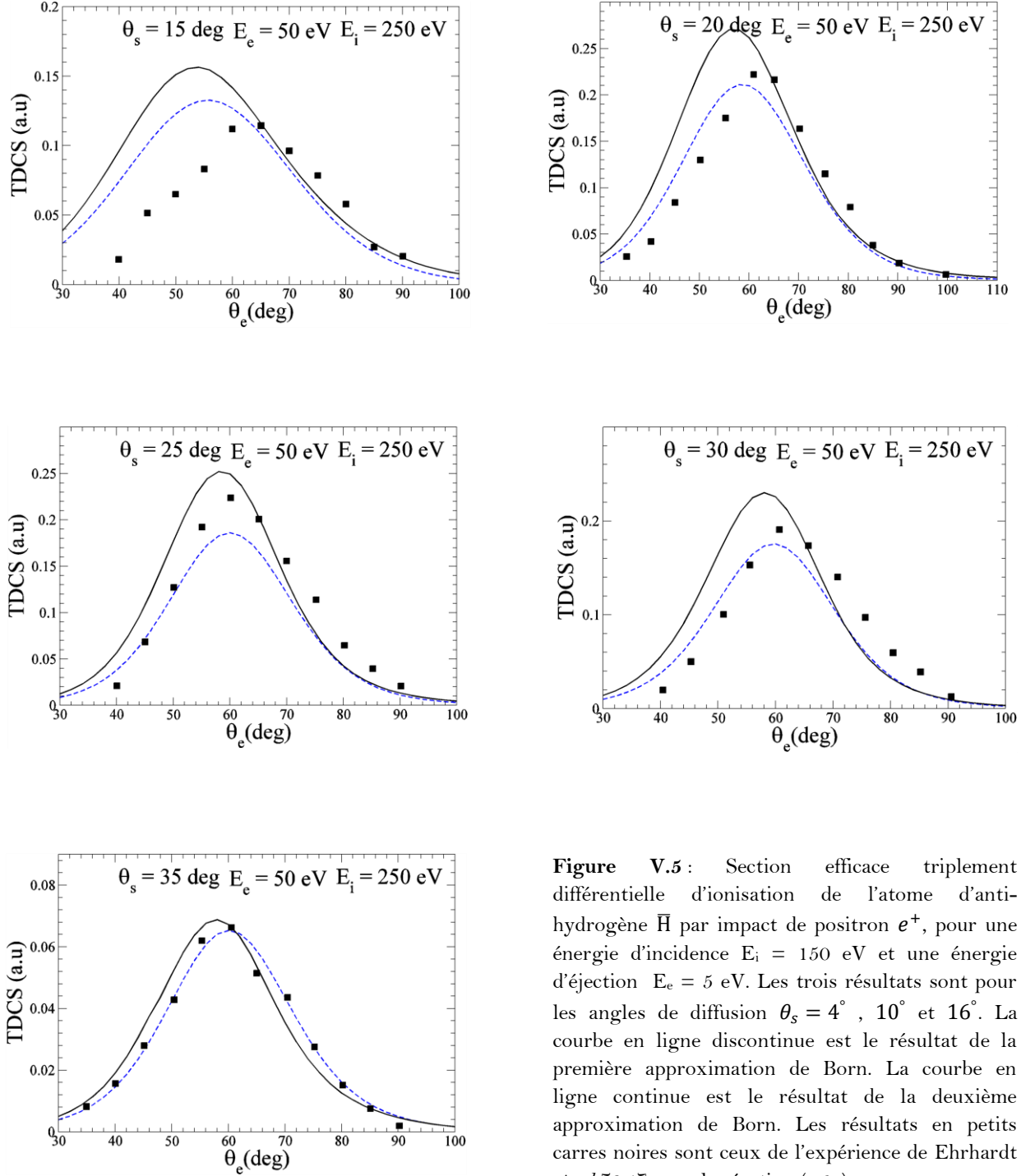


Figure V.5 : Section efficace triplement différentielle d'ionisation de l'atome d'anti-hydrogène $\bar{\text{H}}$ par impact de positron e^+ , pour une énergie d'incidence $E_i = 150$ eV et une énergie d'éjection $E_e = 5$ eV. Les trois résultats sont pour les angles de diffusion $\theta_s = 4^\circ$, 10° et 16° . La courbe en ligne discontinue est le résultat de la première approximation de Born. La courbe en ligne continue est le résultat de la deuxième approximation de Born. Les résultats en petits carres noirs sont ceux de l'expérience de Ehrhardt *et col* [3,4] pour la réaction $(e,2e)$.

Pour expliquer le désaccord entre la théorie et l'expérience pour des angles de diffusion inférieurs que 35° , nous devons d'abord rappeler que nous avons déjà vu dans les résultats présenter dans les figures précédents que plus l'énergie d'éjection E_e est grande plus l'interaction poste-collision devient importante. Nous savons que dans l'état final de la réaction, c.-à-d. après la collision, deux particules de mêmes charges sortent chacune avec une certaine vitesse. Il y a donc une interaction de répulsion entre les deux particules. Cette interaction devienne importante quand la distance entre les particules diffusé et éjecté devienne petite. Cette distance est en fonction de l'angle entre les deux particules mais aussi elle dépend des vitesses ou des énergies des deux particules, c.-à-d., que plus l'angle entre les particules est grande plus la distance entre eux est importante, et plus les énergies des particules sont proches plus la distance entre eux est petite. Donc comme l'énergie d'éjection $E_e = 50$ eV dans la figure V.1 forcément l'interaction poste-collision entre les particules sortantes est importante dans ce cas, et cette interaction devienne moins importante si l'angle de diffusion est grand.

Bibliographie du chapitre V

- [1] Weigold E, Noble C J, Hood S T and Fuss I. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **12**, 291 (1979).
- [2] Lohmann B, McCarthy I E, Stelbovics A T and Weigold E. *Phys. Rev. A.* **30**, 758 (1984).
- [3] Ehrhardt H, Knoth G, Schlemmer P and Jung K. *Phys. Lett.* **110**, 92 (1985).
- [4] Ehrhardt H, Jung K, Knoth G and Schlemmer P. *Z. Phys. D.* **1**, 3 (1986).
- [5] Peterkop R K. *Opt. Spectr.* **13**, 1220 (1961).
- [6] Peterkop R K. *Theory of Ionization of Atoms by Electron Impact. Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder*, (1977).
- [7] Brauner M, Briggs J S and Klar H. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22**, 2265–2287 (1989).
- [8] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M and Lahmam-Bennani A. *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **41**, 145201. (2008).

Conclusion Générale

L'atome d'anti-hydrogène est l'antimatière de l'hydrogène et ces deux atomes forment l'une des constituants de la matière primordiale de l'univers, ce qui les rend prioritaires dans les recherches de la physique contemporaine. Un formalisme théorique qui décrit avec précision la réaction de particules chargées avec l'anti-hydrogène, et l'antimatière d'une façon générale, est actuellement très demandé. C'est pour cette raison que nous nous sommes intéressés dans le travail actuel à l'étude de la simple ionisation de l'atome d'anti-hydrogène par impact de positron. Dans le quatrième chapitre nous avons calculé la section efficace triplement différentielle dans le cadre de la première et la deuxième approximation de Born. Et nous avons consacré le cinquième chapitre aux résultats et aux discussions.

Nous avons vu à partir des cinq figures présentées dans le dernier chapitre, que nos résultats présentent un très bon accord avec l'expérience. Nous avons vu aussi que la première approximation de Born ne suffit pas pour décrire la réaction $(e^+, 2e^+)$, des ordres plus supérieurs comme la deuxième approximation de Born sont nécessaires. $(e^+, 2e^+)$. Nous avons remarqué aussi que quand l'angle entre les positrons diffusé et éjecté est petit et quand leurs énergies sont proches l'interaction post-collision entre ces particules devient importante et doit être correctement décrite dans le formalisme théorique. Mais d'une façon générale nous nous sommes très satisfaits des résultats présentés dans ce travail. Mais nous planifions d'améliorer notre formalisme théorique en utilisant des modèles plus sophistiqués.

Résumé

De nouvelles expériences sont actuellement menées au CERN (l'Organisation Européenne pour la recherche nucléaire) sous le nom du projet GBAR (Gravitationnel Behaviourisme of Antihydrogen at Rest), qui s'apprête à en explorer l'effet de la gravité sur

L'antimatière. L'un des expériences consiste à mesurer l'effet de la gravité sur les Atomes d'anti hydrogène à partir du spectre d'ionisation de ces atomes par impact de Positrons. Notre travail consiste à prédire d'une façon théorique ce spectre d'ionisation

Summary

New experiments are being conducted at CERN (the Organization European Union for Nuclear Research) under the name of the GBAR project (Gravitational Behavior of Antihydrogen at Rest), which is about to explore the effect of gravity on antimatter. One of the experiments is to measure the effect of gravity on anti-hydrogen atoms from the ionization spectrum of these atoms by impact of positrons. Our job is to theoretically prédit This ionisation Spectrum