

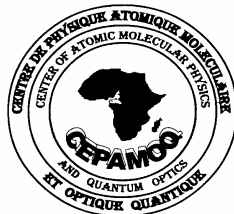
UNIVERSITE DE DOUALA



The Abdus Salam
INTERNATIONAL CENTRE FOR
THEORETICAL PHYSICS (ICTP)



CENTRE DE PHYSIQUE ATOMIQUE
MOLECULAIRE ET OPTIQUE
QUANTIQUE (CEPAMOQ)



UNIVERSITE CATHOLIQUE DE LOUVAIN



LABORATOIRE DE PHYSIQUE
ATOMIQUE ET MOLECULAIRE
(PAMO)



Année académique 2009-2010

**ETUDE THEORIQUE DU ROLE DES CORRELATIONS ELECTRONIQUE LORS DU PROCESSUS
D'IONISATION-EXCITATION DE L'ATOME D'HELIUM PAR ABSORPTION DE DEUX PHOTONS
XUV ET PAR IMPACT D'ELECTRONS RAPIDES
ET
EFFETS D'ANOMALIE DU MOMENT MAGNETIQUE DE L'ELECTRON DANS LA DIFFUSION DE
MOTT EN CHAMP LASER INTENSE DANS L'APPROXIMATION COULOMBIENNE**

Thèse en cotutelle

Présentée et soutenue le 16 Octobre 2009

Par

Jean Marcel NGOKO DJIOKAP

Noma (UCL) : 8145-05-00

Matricule (UD) : 01Z631

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR en Sciences de l'Université Catholique de Louvain
et de**

**DOCTEUR en Sciences de l'Université de Douala
Spécialité : Atomes et Molécules**

Jury

Président :

Promoteurs :

Examineurs :

Pr. J.-P. ANTOINE

Pr. B. PIRAUX

Pr. M.G. KWATO NJOCK

Dr. E. M. STAICU CASAGRANDE

Dr. H. BACHAU

Pr. X. URBAIN

Pr. P. DEFANCE

Université Catholique de Louvain, Belgique

Université Catholique de Louvain, Belgique

Université de Douala, Cameroun

Université de Paris Sud XI, France

Directeur de recherche, CNRS, France

Université Catholique de Louvain, Belgique

Université Catholique de Louvain, Belgique

Dédicaces

*Cette thèse est l'oeuvre du Seigneur
A ma Famille et ma belle Famille
A mon Epouse Lyanna.*

Acknowledgements

I am highly indebted to Prof. Bernard PIRAUX of Université Catholique de Louvain (Belgium) and to Prof. Moïse Godfroy KWATO NJOCK of the University of Douala (Cameroon) for accepting to co-supervise this work. I will never forget their appreciated support and advice, without which it would have been difficult to achieve this personal challenge.

I am grateful to Prof. J.-P. ANTOINE, Dr. E. M. STAICU CASAGRANDE, Dr. H. BACHAU, to Prof. X. URBAIN and to Prof. P. DEFRANCE for accepting to be member of jury of this thesis. In particular, thanks a lot to the last two Professors for very helpful suggestions and discussions. I can't forget to thank Prof. R. SHAKE-SHAFT, Prof. LAHMAM-BENANNI, Prof. S. DOMNGANG, Prof. O. BOUBA, Prof. P. ANTOINE, Prof. A. WAGUE, Prof. Y. POPOV, Prof. L. C. OWONO OWONO and Prof. A. STARACE.

I would like to thank to the administration of Université Catholique de Louvain and the University of Douala. I can't forget the warm hospitality of the entire Unité PAMO during my four years stay at Louvain-la-Neuve in Belgium.

I acknowledge the financial support of the Administration des Relations Internationales (ADRI) of Université Catholique de Louvain, of the Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (through the project OEA-AC-71) and of the Centre for Atomic Molecular Physics and Quantum Optics (CEPAMOQ). In particular, I am grateful Ms. Louisa Baeyens of the ADRI for all things she did concerning the achievement of this art.

I am indebted to the "Institut de calcul intensif et stockage de masse" (CISM, UCL) without whom it would have been difficult to achieve all my numerical calculations.

I would like to say thank you to all my classmates of CEPAMOQ and other universities like Ngachin Merlin, Dr. Bouri Celsus, Dr. Waffeu olivier, Dr. Saïdou, Souley, Siaka, Dr. Malonda, Edimo, Dr. Dehayem, Djiedeu, Makam, Sabanna, Nkem, Ngwa, Moketo, Douma, Fidel Ntie Kang, Jouonang, Bell, Mbesse, Silenou Marius, Valery Mezoui, Joseph, Deborah, Abdourahimi, Saturnin, Thierry, NDJAKA Manyol, Martial and Sidonie, Eric Defo and Suzy. I express my gratitude to Bifere's family, Biakop's family from China, Garlais and Georgette, Chrispin Djomo's family, Mireille

and Hones's family, Laurent's family, Laure Sinou, Marie Dushimire's family, Evelyne, Michelle, Carine, Les jumelles, Stella Danie, Alvine Michelle, Ayissi, Felio and Maguy, BZ's family, Hamido's wife, Elie's family, Dominique's family, Eric's family, Thierry Amougou, JC, Michka, Gizou, Aimée, Nkalla, Kotto's family.

Especially, I am indebted to Dr. Foumouo and his family for very helpful exchange. It is impossible to forget H. M. Tetchou Nganso and his wife Emilienne for some advice. To all others colleagues of our group of research (PAMO) like Hamido Aliou, Marius, Valery, Javier, Johannes, Amin, Amine, Deraoui and Hippolite.

Table des matières

Dédicaces	i
Remerciements	iii
Table des matières	ix
I Etude théorique du rôle des corrélations électroniques lors du processus d'ionisation-excitation de l'atome d'hélium par absorption de deux photons XUV et par impact d'électrons rapides.	xi
Résumé et Abstract	xiii
1 Introduction Générale	1
1.1 Contexte et formulation générale du problème	1
1.2 Structure de la thèse	5
2 Traitement numérique de la cible d'hélium	9
2.1 Introduction	9
2.2 Hamiltonien du système atomique	10
2.3 Approche spectrale pour la résolution de l'ESS	12
2.3.1 Méthode spectrale	12
2.3.2 Les fonctions sturmiennes non-relativistes	16
2.3.3 Décomposition de la partie spatiale de la fonction d'onde sur la base de fonctions sturmiennes	18
2.3.4 Formulation matricielle de l'équation de Schrödinger	20
2.3.5 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger	28
3 Formulation du problème de l'ionisation-excitation de l'hélium par absorption de deux photons	31
3.1 Introduction	31
3.2 Fonctions d'onde du système initial et final du processus $(N\gamma, e)$	32
3.2.1 Fonction d'onde de la cible d'hélium	32

3.2.2	Fonction d'onde de la cible d'ion H^-	33
3.2.3	Fonction d'onde de l'état final	34
3.3	Dérivation des amplitudes et des sections efficaces des processus $(N\gamma, e)$	38
3.4	Différents régimes d'ionisation de l'hélium à deux photons	40
3.4.1	Régime séquentiel	41
3.4.2	Régime direct	42
4	Formulation du problème de l'ionisation-excitation de l'hélium par impact d'électron	43
4.1	Introduction	43
4.2	Lois de conservation	46
4.2.1	Conservation de l'impulsion	46
4.2.2	Conservation de l'énergie	47
4.3	Cinématique de la réaction $(e, 2e)$ de He	47
4.4	Fonctions d'onde initiale et finale du système collisionnel	48
4.4.1	Etat initial du système collisionnel	49
4.4.2	Etat final du système collisionnel	50
4.5	Expression des sections efficaces différentielles triples du processus $(e, 2e)$	56
4.5.1	Section efficace différentielle triple du processus électronique	56
4.5.2	Commentaire du rôle de la corrélation électronique dans le cadre du traitement perturbatif de Born	58
4.6	Conclusion	62
5	Etude du processus d'ionisation excitation de He par absorption de deux photons : rôle des résonances de coeur	65
5.1	Introduction	65
5.2	Description de la méthode	66
5.3	Résultats et discussions	69
5.3.1	Validation de la méthode	70
5.3.2	Résonances de coeur $n \geq 2$ et simple ionisation de He à deux photons.	82
6	Etude du processus d'ionisation-excitation de l'hélium par impact d'électrons dans l'approximation de Born	93
6.1	Introduction	93
6.2	Quelques données expérimentales	94
6.3	Quelques approches théoriques	97
6.4	Sections efficaces du processus $(e, 2e)$ sans excitation dans l'approximation de Born	98
6.4.1	Calcul de la matrice de transition	99
6.4.2	Calcul numérique de sections efficaces du processus $(e, 2e)$ sans excitation dans l'approximation de Born	105
6.5	Sections efficaces du processus $(e, 2e)$ avec excitation dans l'approximation de Born	122
6.5.1	Ionisation-excitation vers le niveau $He^+(n = 2)$	123
6.5.2	Ionisation-excitation vers le niveau $He^+(n = 3)$	146
6.6	Conclusion	150

7 Conclusion et perspectives	153
II Effets d'anomalie du moment magnétique de l'électron dans la diffusion de Mott en champ laser intense dans l'approximation coulombienne.	155
Résumé et Abstract	157
8 Introduction générale	159
9 Etats de Coulomb-Dirac-Volkov avec anomalie du moment magnétique de l'électron	163
9.1 Introduction	163
9.2 Equation de Dirac pour l'électron dans un champ électromagnétique .	164
9.3 Etats de Coulomb-Dirac-Volkov avec anomalie du moment magnétique de l'électron	165
9.3.1 Fonctions d'onde de Dirac-Volkov	165
9.3.2 Fonction d'onde de Coulomb-Dirac du spectre continu	167
9.3.3 Approximation coulombienne des états de Dirac-Volkov	167
10 Diffusion d'un faisceau d'électrons non polarisés assistée par champ laser ultra intense	169
10.1 Introduction	169
10.2 Matrice S de Dirac	169
10.3 Sections efficaces différentielles	172
10.3.1 En champ laser polarisé linéairement	172
10.3.2 En champ laser polarisé circulairement	177
10.4 Résultats numériques	179
10.4.1 Cinématique de la collision	179
10.4.2 Exemples numériques	180
11 Conclusion et perspectives	187
A Systèmes d'unités Gaussien, SI et Atomiques	189
A.1 Unités et équations électromagnétiques	189
A.2 Différents types de systèmes d'unités électromagnétiques	192
A.3 Unités atomiques	193
B Méthode de la matrice de Jacobi généralisée	197
B.1 Introduction	197
B.2 Construction des fonctions SCWF à deux et à trois régions	198
B.2.1 Développement des ondes coulombiennes sur la base sturmienne	202
B.2.2 SCWF à deux régions	205
B.2.3 SCWF à trois régions	207
B.3 Construction des SCWF avec dépendance angulaire	208

C	Préconditionnement d'un système linéaire et Méthode des gradients biconjugués	211
C.1	Introduction	211
C.2	Préconditionnement d'un système linéaire	214
C.2.1	Généralités	214
C.2.2	Préconditionnement par les méthodes itératives	216
C.3	Méthodes des sous-espaces de Krylov	218
C.3.1	Introduction	218
C.3.2	Espaces de Krylov	218
C.3.3	Processus de Lanczos classique et BiCG	223
C.3.4	BiCGSTAB	226
D	Tests de validation des résultats du premier et du second Born	229
D.1	Introduction	229
D.2	Méthodes numériques d'évaluation des intégrales radiales	229
D.2.1	Quadrature de Gauss-Laguerre associée au prolongement analytique	230
D.2.2	Quadrature de Gauss-Laguerre associée aux approximants de Padé	232
D.2.3	Méthode d'intégration de Butcher	232
D.2.4	Méthode d'intégration de Filon	233
D.2.5	Comparaison des résultats des différentes méthodes	235
D.2.6	Traitement analytique de l'intégrale radiale et le cas limite où le transfert d'impulsion K est faible	236
D.3	Tests de validation du code numérique du premier Born	242
D.3.1	Introduction	242
D.3.2	Calcul analytique du premier Born sans excitation	242
D.3.3	Calcul numérique du premier Born sans excitation	243
D.3.4	Conclusion	244
D.4	Tests de validation du code numérique du second Born	245
D.4.1	Introduction	245
D.4.2	Tests sur les éléments de matrice du second Born	246
D.4.3	Calcul numérique de l'intégrale de Dalitz	246
D.4.4	Test de convergence de l'intégrale angulaire $I_\Omega(p)$ dans le cadre de la contribution du fondamental comme état intermédiaire du second Born.	257
D.4.5	Conclusion du test sur le second Born	263
E	Second Born pour un processus $(e, 2e)$ de He	265
E.1	Introduction	265
E.2	Processus $(e, 2e)$ dans l'approximation de fermeture	266
E.2.1	Evaluation du terme du second Born	268
E.2.2	Second Born dans l'approximation de fermeture et lien avec l'intégrale de Dalitz	275
E.3	Contributions de quelques états intermédiaires dans l'évaluation du 2nd Born	276
E.3.1	Introduction	276

E.3.2	Quelques états intermédiaires	277
E.3.3	Contribution du fondamental ($L_{int} = 0$) comme état intermédiaire	280
E.3.4	Conclusion	282
F	Expression des termes de la section efficace avec AMM en polarisation linéaire et circulaire	283
F.1	Polarisation linéaire	284
F.2	Polarisation circulaire	285
	Bibliographie générale	287

Première partie

Etude théorique du rôle des
corrélations électroniques lors
du processus
d'ionisation-excitation de
l'atome d'hélium par absorption
de deux photons XUV et par
impact d'électrons rapides.

Résumé

Dans ce travail, nous étudions le rôle des corrélations électroniques lors des processus d'ionisation-excitation de l'hélium par absorption de deux photons XUV d'une part, et d'autre part, par impact électronique. Dans le cas du processus photonique, nous montrons à l'aide d'un traitement de Floquet perturbatif, qu'à l'instar des transitions séquentielles, les résonances de coeur sont présentes dans les sections efficaces partielles et totales d'ionisation-excitation directes. Nous discutons l'origine physique de ces résonances. Dans le cas du processus électronique, nous effectuons un calcul perturbatif du premier ordre où les états initial et final sont décrits par des fonctions d'onde prenant en compte les corrélations électroniques de manière rigoureuse. Nous étudions en particulier, le rôle des canaux de sortie conduisant à l'autoionisation de l'hélium. Une comparaison détaillée de nos résultats avec d'autres résultats théoriques et des résultats expérimentaux disponibles est présentée et discutée. Ce travail ouvre les perspectives intéressantes qui sont reprises dans la conclusion.

Mots clés : processus $(2\gamma, e)$, équation de Lippmann-Schwinger, résonances de coeur, corrélations électroniques, processus $(e, 2e)$, matrice de Jacobi, états autoionisants, sections efficaces.

Abstract

In this work, we investigate the role of the electronic correlations in the two-photon XUV single ionization-excitation and in the electron-impact ionization-excitation of the helium atom. In the two-photon process, we show by means of perturbative Floquet treatment that like for the sequential transition, the core resonances are present in the partial and total cross sections in a regime where two-photon double ionization is direct. We analyse the physical origin of these resonances. Concerning the electron-impact process, we use a first-order time-independent perturbative theory where the wave function of the initial and the final states includes the electronic correlation rigorously. In particular, we study the role of the exit channels leading to the autoionization of the atom. A detailed comparison between theoretical predictions and experimental data is presented and discussed. Interesting perspectives are given in the conclusion.

Keywords : $(2\gamma, e)$ process, Lippmann-Schwinger equation, core resonances, electronic correlations, $(e, 2e)$ process, J-matrix method, autoionizing states, cross sections.

TABLE 1 – *Liste des abréviations de la partie I.*

Sigle	Signification
IAE	Ionisation avec excitation
ISE	Ionisation sans excitation
WF	Wave function (fonction d'onde)
SC	Simple continuum
DC	Double continuum
DE	Doublement excité
SE	Simplement excité
EC	Explicitement corrélée
IC	Interaction de configuration
EEFA	Etats excités fortement asymétriques
ICWF	Fonction d'onde de type IC
Matrice J	Matrice de Jacobi
SCWF	WF du simple continuum issue de la méthode de la matrice J
PSCB	Produit symétrisé fonction liée et fonction coulombienne
BYWF	Fonction d'onde de Byron et Joachain
LSWF	WF solution de l'équation de Lippmann-Schwinger
TDCS	Section efficace différentielle triple
EST	Equation de Schrödinger dépendante du temps
ESS	Equation de Schrödinger stationnaire
TDCC	EST pour un système de 3 électrons
FBA	First Born approximation (premier Born)
B2	Second Born
RMPS	R-matrix with pseudostates
RMPS23	RMPS avec 23 états dont 13 pseudo-états
DWB1	First-order distorted-wave Born
DWB2	Second-order distorted-wave Born
CCC	Convergent close-coupling
CCC38	Convergent close-coupling with 38 states
PWBA-M	TDCS de Marchalant <i>et al.</i> du premier Born
PWB2-M	TDCS de Marchalant <i>et al.</i> du second Born
PN-TW	TDCS de Tweed avec polarisation et avec facteur de Gamow
PN0-TW	TDCS de Tweed avec polarisation et sans facteur de Gamow
TW	TDCS de Tweed sans polarisation et sans facteur de Gamow
$(e, 2e)$	1 électron incident, 2 électrons émergents (1 diffusé et 1 éjecté)
$(N\gamma, e)$	N -photon(s) absorbé(s) et 1 électron éjecté
CEF	Corrélations électroniques dans l'état final
LAPACK	Linear Algebra PACKage
BiCGSTAB	Méthode des gradients biconjugués
BLAS	Basic Linear Algebra Subprograms

Chapitre 1

Introduction Générale

1.1 Contexte et formulation générale du problème

L'atome d'hélium qui est constitué d'un noyau et de deux électrons, apparaît comme le prototype le plus simple d'un problème coulombien à trois corps, problème qui reste non résolu tant en mécanique classique qu'en mécanique quantique. La résolution de celui-ci est d'une importance capitale car elle permettrait d'établir un pont entre la dynamique d'un système constitué de deux particules (hydrogène dont la dynamique est très bien connue) et celle d'un système composé d'un grand nombre de particules. Parmi les interactions entre les trois corps de l'hélium, nous avons les deux attractions coulombiennes entre le noyau et les deux électrons, et enfin la répulsion coulombienne entre les deux électrons qui génère la **corrélacion électronique**. Il faut noter que dans la littérature, ce terme revêt souvent plusieurs sens. Cette répulsion coulombienne est singulière à l'origine et de portée infinie, et elle conduit à des échanges d'énergie importants entre les deux électrons. La dynamique classique de ce système est non intégrable donnant lieu à une structure dans l'espace des phases composée de zones régulières et chaotiques [1]. C'est la corrélation électronique qui est responsable de cette non-intégrabilité. Quantiquement, les corrélations sont responsables de l'extraordinaire complexité du spectre de l'hélium et dans ce spectre, de la présence des états doublement excités autoionisants. Ces faits sont exposés en détail par Madronero *et al.* [2].

La présence d'un électron extérieur rend ce problème coulombien encore plus complexe puisque le système est dès lors à quatre corps. Le

nombre d'interactions augmente dans ce cas de trois car nous avons en plus de l'attraction coulombienne entre l'électron incident et le noyau, les répulsions coulombiennes entre l'électron incident et les deux électrons de la cible. En principe, tous ces électrons doivent être traités sur le même pied d'égalité car ils sont identiques et indiscernables. Mais en pratique et dans certains cas, on suppose que seuls les deux électrons de la cible sont identiques et indiscernables. Ceci est vrai tant qu'expérimentalement, le faisceau d'électrons incidents est préparé avec une énergie très grande par rapport à celle de l'électron qui sera éjecté de l'atome suite à la collision. Ainsi, l'électron détecté avec une grande énergie sera assimilé à l'électron diffusé tandis que celui détecté avec une faible énergie sera assimilé à l'électron éjecté. Dans le cadre de l'approximation de Born, on montre facilement qu'en négligeant les corrélations électroniques dans la cible, l'ionisation avec excitation (IAE) ne peut avoir lieu contrairement à l'ionisation sans excitation (ISE). On s'attend donc à ce que les corrélations électroniques jouent un rôle beaucoup plus important dans le cas de l'IAE. Cette prédiction sera analysée minutieusement au cours de ce travail. Pour mener cette investigation, nous avons utilisé les fonctions d'onde fortement corrélées pour décrire les états initial et final du système collisionnel. Il s'agit d'une fonction d'onde générée à l'aide d'une méthode spectrale (ICWF) pour l'état initial et d'une fonction d'onde multicanaux du simple continuum de He générée à l'aide de la méthode de la matrice de Jacobi (SCWF) pour l'état final. La fonction d'onde SCWF est un modèle très précis du fait qu'il tient compte de manière précise les corrélations électroniques, notamment au niveau du couplage entre les différents canaux. Ainsi, lorsque nous branchons ou débranchons la corrélation, nous avons remarqué que les résultats de la section efficace différentielle triple (TDCS) varient très peu pour l'ionisation dans lequel l'ion résiduel reste dans son fondamental. Les résultats sont quasi égaux à ceux obtenus à partir du modèle PSCB qui est le produit symétrisé d'une fonction coulombienne (qui décrit l'électron éjecté du continuum) et d'une fonction liée qui se trouve dans l'état $1s$. Notons que la fonction PSCB dont la validité n'est justifiée qu'asymptotiquement, décrit mal l'état final du simple continuum de He (prise en compte des effets d'écrantage). Il n'est donc pas étonnant que ce dernier modèle ne permet pas de reproduire les données expérimentales de l'ionisation avec excitation de He.

A ce stade, notre objectif est un calcul dans la première approximation de Born où il ne subsiste plus d'ambiguïté quant à un contrôle des

approximations introduites habituellement dans le traitement des corrélations électroniques au niveau de la cible. Nous avons également effectué un calcul du second ordre dans les mêmes conditions et mis au point un code robuste. Mais il requiert des ressources informatiques non disponibles à ce jour.

Le développement en série de l'opérateur de Bethe $\frac{4\pi}{K^2} \sum_i (e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_i} - 1)$, $i = 2, 3$ dans le processus électronique nous montre qu'il se réduit à l'opérateur dipolaire du processus par impact photonique lorsque le transfert d'impulsion K est suffisamment faible. Ainsi, on peut conclure que le processus électronique dans la première approximation de Born est la généralisation du processus à 1-photon dans l'approximation dipolaire. Comme dans le cas du processus électronique, la présence d'un champ électromagnétique extérieur rend complexe ce problème coulombien à trois corps. L'interaction de l'atome d'hélium avec un champ extérieur permet d'explorer des zones très étendues de l'espace de Hilbert et les continua simples et doubles. Les corrélations électroniques jouent à nouveau un rôle déterminant dans ce contexte [3]. Jusqu'à présent, seule l'ionisation simple et double à un photon de l'hélium a fait l'objet de nombreuses études tant expérimentales que théoriques. Le fait de considérer les transitions à deux photons introduit une complexité supplémentaire dans le problème (les états finaux sont à présent de symétries S et D) et donne lieu à de nouveaux processus. L'ionisation avec excitation à deux photons de l'hélium peut être soit directe, soit séquentielle. Par séquentiel, nous entendons qu'un des électrons absorbe d'abord un photon, ce qui conduit à son éjection. En présence du champ, l'ion résiduel va se relaxer sur son état fondamental et ensuite absorber le second photon, donnant lieu à l'excitation du second électron. Il est important de signaler que l'excitation du second électron n'est possible que pour les fréquences des photons comprises entre 1.5 u.a. et 2.0 u.a. . Lors du processus direct d'ionisation-excitation, le processus a lieu pendant un intervalle de temps inférieur au temps nécessaire à la relaxation de l'ion résiduel. L'ionisation-excitation séquentielle peut être assimilée à une succession de deux processus indépendants : une ionisation simple suivie de l'excitation de l'ion He^+ . En conséquence, la probabilité d'ionisation-excitation est proportionnelle au minimum au carré de la durée de l'impulsion laser [4]. La probabilité d'ionisation-excitation directe est cette fois proportionnelle à la durée de l'impulsion. De plus, on a deux processus possibles dans le régime direct. Le premier correspond à l'absorption des deux photons par un seul électron, suivie d'une relaxation vers les

niveaux excités $n = 2, 3, \dots$ de l'ion résiduel. Notons que cette relaxation

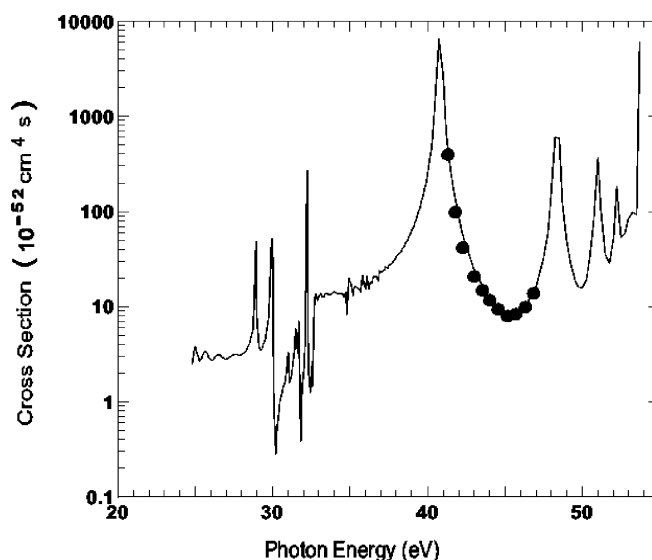


FIGURE 1.1 — *Section efficace totale généralisée à deux photons de la simple ionisation de He. Sont représentés sur ce graphe : en trait continu, les résultats de Shakeshaft [5] et en cerle plein, les résultats de Feng et al. [6].*

est uniquement due aux corrélations électroniques qui assure le couplage entre ce continuum et ce niveau discret de l'ion résiduel. Le second correspond au cas où chaque électron absorbe son photon qui "propulse" l'un dans le simple continuum de l'hélium et le second électron dans un état excité de l'ion résiduel. Ce second cas est semblable au processus séquentiel mais la seule différence est que les deux transitions ne sont plus indépendantes. Shakeshaft [5] et Feng *et al.* [6] ont calculé à l'aide de deux approches différentes (respectivement calcul perturbatif et calcul Floquet-matrice R) les sections efficaces totales généralisées de la simple ionisation de l'hélium après absorption de deux photons en fonction de l'énergie des photons (voir figure 1.1). Il apparaît clairement des résonances de coeur de l'ion He^+ notamment $n = 2, 3, 4, 5$. *Nous nous sommes posés la question de savoir quel est le rôle des résonances de coeur lors de l'ionisation-excitation directe de l'hélium par absorption de deux photons. Tel est le second objectif auquel nous tenterons de répondre au cours de ce travail.*

1.2 Structure de la thèse

Dans le **chapitre 2**, nous présentons l'outil théorique permettant de calculer le spectre en énergie d'un système coulombien à trois corps (états liés et états simplement ou doublement excités). Cet outil repose sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps à l'aide d'une méthode spectrale de type Galerkin. Cette dernière consiste à développer les fonctions radiales sur une base de fonctions de carré sommable. Les durées de vie des états doublement excités s'obtiennent à l'aide d'une rotation complexe du hamiltonien. Cette méthode a été initialement développée par Lagmago [7], améliorée et généralisée à des systèmes coulombiens à quatre corps par Fomouo [8].

Nous présentons les différentes fonctions d'onde utilisées pour décrire les états initial et final du système après absorption de photons ou du système collisionnel. Ainsi, l'état fondamental de l'hélium est soit décrit par la fonction d'onde de Byron et Joachain [9] (donnée dans le **chapitre 4**), soit par celle issue de la méthode spectrale (présentée dans le **chapitre 3**). L'état final du processus photonique est décrit par une fonction d'onde solution de l'équation de Lippmann-Schwinger (LSWF). Cette fonction d'onde LSWF est présentée dans le **chapitre 3**. Quant à l'état final du processus collisionnel, il est soit décrit par le produit symétrisé d'une fonction coulombienne et d'une fonction liée (PSCB) qui est présenté dans le **chapitre 3**, soit par la fonction d'onde de diffusion multicanaux (développée dans le **chapitre 4**) du simple continuum (SCWF) de He générée à l'aide de la méthode de Jacobi. Notons que la partie asymptotique des fonctions d'onde LSWF et SCWF est décrite par la fonction d'onde PSCB. De plus, la précision des fonctions d'onde SCWF a été testée par Fomouo [8, 10, 11] sur la photoionisation de l'hélium et de l'ion H^- . En revanche, dans le **chapitre 4**, nous rappelons les lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion au cours de la collision, et enfin la géométrie et la cinématique de la diffusion du processus $(e, 2e)$.

Puisque le processus d'ionisation par impact électronique est une généralisation du processus d'ionisation par impact photonique, il semble pédagogique de débiter par l'étude du processus photonique. Une formulation du problème de l'ionisation-excitation de l'hélium par absorption de deux photons est faite dans le **chapitre 3** et une étude de ce processus est réalisée dans le **chapitre 5**. Nous nous penchons sur une

question qui reste d'actualité à savoir le rôle des résonances de coeur lors de l'ionisation-excitation directe de l'hélium par absorption de deux photons.

Les **chapitres 4 et 6** sont consacrés aux processus électroniques. Ainsi nous commençons par présenter le formalisme du processus $(e, 2e)$ dans le **chapitre 4**. La description de notre modèle et nos résultats issus du calcul des sections efficaces différentielles triples (TDCS) du premier Born du processus $(e, 2e)$ de l'hélium dans lequel l'ion résiduel He^+ se trouve dans les états $n = 1, 2$ et 3 sont présentés dans le **chapitre 6**. Nous rappelons aussi de manière succincte les différents résultats théoriques et expérimentaux existants. Enfin, nous comparons nos résultats théoriques à ceux des autres approches théoriques disponibles [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18], et aux données expérimentales de Dupré *et al.* [19], de Avaldi *et al.* [20], de Rouvellou *et al.* [13], de Dogan et Crowe [21] et de Bellm *et al.* [22, 23]. Dans l'**annexe E**, nous faisons une présentation analytique succincte du second Born du processus $(e, 2e)$ accompagnée de nombreux tests numériques. Les codes numériques ont été écrits mais le calcul complet du second Born exige de gros moyens de calculs dont nous ne disposons pas à l'heure actuelle.

Nous terminons ce travail par la conclusion et quelques perspectives. Les unités atomiques présentées en **annexe A** c'est-à-dire $\hbar = m_e = e = 1$ sont utilisées tout au long de ce travail.

Ce travail de thèse fera l'objet de quatre publications

1. **"Effects of the electron's anomaly in relativistic laser-assisted Mott scattering"**
J.M. Ngoko Djiokap, H.M. Tetchou Nganso and M.G. Kwato Njock, Phys. Scr. 75 (2007) 726-733.
2. **"Electron-impact ionization-excitation of helium in the quasi-limit photon regime"**
J.M. Ngoko Djiokap, E. Fomouo, M.G. Kwato Njock and B. Piraux, soumis à *Physical Review A* (2009).
3. **"Role of core resonances in the two-photon XUV single ionization of helium in the regime where two-photon double ionization is direct."**
J.M. Ngoko Djiokap, M.G. Kwato Njock, R. Shakeshaft and B. Piraux, (en cours de soumission, *J. Phys. B*).
4. **"Single and double ionization of helium by electrons impact and by absorption of two-photon"**
M. Silenou Mengoué, J.M. Ngoko Djiokap, M. G. Kwato Njock, Yu. V. Popov and B. Piraux, (en cours de soumission, *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.*).

de deux preprints à ICTP publications

1. **"Effects of the electron's anomaly in relativistic laser-assisted Mott scattering"**
J.M. Ngoko Djiokap, H.M. Tetchou Nganso and M.G. Kwato Njock, ICTP Preprint Publications IC/2006/007
2. **"Coulomb effects in relativistic laser-assisted Mott scattering"**
J.M. Ngoko Djiokap, H.M. Tetchou Nganso and M.G. Kwato Njock, ICTP Preprint Publications IC/2004/82

et trois communications orales

1. **"Single ionization-excitation of hélium by two-photon absorption and by fast electron impact"**
J.M. Ngoko Djiokap, E. Fomouo, M.G. Kwato Njock and B. Piraux, Joint general scientific meeting 2009, Belgium Physical Society and Belgium Biological Society, April 1st 2009 - Universiteit Hasselt, (Hasselt, Belgium).

2. **"Effects of the electron's anomaly in relativistic laser-assisted Mott scattering"**

J.M. Ngoko Djiokap, H.M. Tetchou Nganso and M.G. Kwato Njock, 6th Edward Bouchet-Abdus Salam Institute International Conference, 23 - 26 January 2007, iThemba LABS, Cape Town, South Africa.

3. **"Coulomb effects in relativistic laser-assisted Mott scattering"**

J.M. Ngoko Djiokap, H.M. Tetchou Nganso and M.G. Kwato Njock, 7th International Workshop on Laser Physics and its Applications, 5 - 11 December 2004, CEPAMOQ, Douala, Cameroon

Chapitre 2

Traitement numérique de la cible d'hélium

2.1 Introduction

Ce chapitre est consacré aux systèmes atomiques non relativistes à deux électrons en absence de champ électromagnétique. Les modèles neutre et ionique les plus simples d'un tel système sont respectivement l'atome d'hélium et l'ion H^- . Ainsi tout le traitement numérique fait ici est appliqué avec succès aussi bien sur He que sur H^- . Cette procédure a été mise sur pied par Lagmago [7] et améliorée par Fomouo [8]. Il est bien établi qu'un tel système n'admet pas de solution analytique à cause des interactions entre les électrons. En théorie, la détermination des énergies et des fonctions propres associées à ces systèmes passent par des méthodes numériques fondées sur des approximations. Très souvent, le spectre est obtenu en résolvant l'équation de Schrödinger sur une base finie de fonctions de carré sommable. C'est ainsi que l'on distingue deux types de base : les bases explicitement corrélées (EC) dans lesquelles la distance inter-électronique r_{12} est utilisée explicitement comme variable spatiale et les bases de type interaction de configuration (IC) pour lesquelles les fonctions de base sont des combinaisons linéaires symétriques ou antisymétriques des fonctions monoélectroniques. La technique présentée ici est une méthode spectrale de type IC dans laquelle la partie radiale de la fonction d'onde est décrite par des fonctions sturmiennes et la partie angulaire par des harmoniques bipolaires. Ainsi dans ce qui suit, nous présentons les caractéristiques générales d'un système à deux électrons. Ensuite, nous présentons une approche spectrale pour résoudre numé-

riquement l'équation de Schrödinger stationnaire dans une base réelle et complexe (rotation complexe). Enfin, nous précisons les natures des structures que présentent la matrice de recouvrement S et la matrice H_0 du hamiltonien sans le terme en $1/r_{12}$ dans la base sturmienne.

2.2 Hamiltonien du système atomique

Au cours des processus $(2\gamma, e)$ et $(e, 2e)$ de l'atome d'hélium, la cible d'hélium se trouvant dans un état quelconque, absorbe deux photons ou entre en collision avec un électron incident. Avant d'étudier ces processus, il est important de connaître la structure de la cible. Ceci passe par la résolution numérique de l'équation de Schrödinger d'un système constitué de trois particules. Chaque particule de ce système peut être repérée par un vecteur $\vec{r}_i$, ($i = 1, 2, 3$) dans l'espace des coordonnées à trois dimensions. Si l'origine du référentiel du laboratoire est placée en un point quelconque de l'espace, alors pour décrire complètement le problème, on aura besoin de 9 coordonnées. Ce nombre se réduit à 6 si cette origine est confondue avec le centre de masse du système car suite à l'invariance par translation des coordonnées $\vec{r}_i$, l'impulsion totale se conserve. Dans la plupart des problèmes en physique atomique et moléculaire, on fait appel à l'*approximation de la masse infinie* encore appelée *approximation adiabatique* pour simplifier le problème. Elle consiste à supposer que la masse du noyau est infiniment grande comparée à celle d'un électron, ce qui implique aussi que le centre de masse est confondu avec le noyau du système atomique. L'application de cette approximation a pour effet de découpler le mouvement des électrons de celui du noyau. Ce qui permet d'éliminer ainsi certains termes de l'équation de Schrödinger. Ainsi, dans l'approximation adiabatique, les coordonnées $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$ des deux électrons suffisent pour décrire complètement la partie spatiale du système.

Considérons un système constitué d'un noyau de masse M contenant Z protons et de deux électrons de masse m , la description théorique d'un tel système exige la connaissance de son opérateur hamiltonien. Repérons le noyau et les deux électrons par les coordonnées respectives $\vec{R}_0$ et $\vec{R}_j$, ($j = 1, 2$) par rapport à une origine fixe O . Si nous introduisons la coordonnée $\vec{R}$ du centre de masse par rapport à cette origine fixe O et les coordonnées relatives $\vec{r}_j = \vec{R}_j - \vec{R}_0$, ($j = 1, 2$) des électrons par rapport au noyau, on établit [27] que le hamiltonien d'un tel système

lorsqu'on passe des coordonnées $(\vec{R}_0, \vec{R}_1, \vec{R}_2)$ à $(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est donné par

$$H_{tot} = -\frac{\hbar^2}{2(M+2m)}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{r_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{r_2}^2 - \frac{\hbar^2}{M}\vec{\nabla}_{r_1} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (2.1)$$

avec $\mu = mM/(m+M)$ qui est la masse réduite de l'électron par rapport au noyau. Le premier terme de (2.1) qui fait intervenir la coordonnée $\vec{R}$, représente l'opérateur d'énergie cinétique du centre de masse. Le second et le troisième représentent les opérateurs d'énergie cinétique des deux électrons. Le quatrième terme est souvent appelé le terme de polarisation de masse. Le reste des termes représente les interactions coulombiennes entre les électrons et le noyau d'une part, et entre les deux électrons d'autre part. ϵ_0 est la permittivité du vide et notons que $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ est la distance inter-électronique. L'équation de Schrödinger stationnaire pour la partie spatiale de la fonction d'onde d'un système à trois particules s'écrit

$$H_{tot}\Psi(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = E_{tot}\Psi(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.2)$$

avec E_{tot} qui est l'énergie totale du système. Puisque les coordonnées électroniques $(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et du centre de masse $\vec{R}$ ne sont pas couplées dans le hamiltonien, la solution de l'équation (2.2) peut s'écrire

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2) = F(\vec{R})\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.3)$$

telle que les fonctions $F(\vec{R})$ et $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ satisfassent les équations respectives

$$-\frac{\hbar^2}{2(M+2m)}\nabla_R^2 F(\vec{R}) = E_{CM}F(\vec{R}), \quad (2.4)$$

et

$$H_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.5)$$

avec

$$H_{12} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{r_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{r_2}^2 - \frac{\hbar^2}{M}\vec{\nabla}_{r_1} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}, \quad (2.6)$$

où $E_{tot} = E_{CM} + E$. La relation (2.4) montre que le mouvement du centre de masse est similaire à celui d'une particule libre de masse égale à la masse totale du système $M + 2m$ et d'énergie E_{CM} . D'autre part

la relation (2.5) décrit le mouvement relatif des électrons y compris les corrélations électroniques, lesquelles sont d'une importance capitale en physique des structures atomiques.

Notons aussi que dans l'approximation adiabatique ($M \rightarrow \infty$), on a $\mu \simeq m$ et on peut négliger le terme de polarisation de masse. Ainsi le hamiltonien du système électronique devient

$$H = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{p_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}. \quad (2.7)$$

Dans le système d'unité atomique, on a

$$H = H_0 + U, \quad H_0 = \sum_{i=1}^2 \left(\frac{p_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i} \right), \quad U = \frac{1}{r_{12}}. \quad (2.8)$$

Comme nous connaissons le hamiltonien d'un système à deux électrons actifs, nous allons à présent nous focaliser sur la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire (ESS).

2.3 Approche spectrale pour la résolution de l'ESS

2.3.1 Méthode spectrale

Dans cette section, nous utilisons une approche spectrale pour résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire (2.5). Toutes les méthodes spectrales sont fondées sur le développement de la solution $\Phi_{espace}(\vec{r})$ en série tronquée de fonctions de base de carré sommable $\{\phi_j\}_{j=1}^N$ dans un espace de Hilbert, en imposant qu'une quantité comme le résidu soit nulle dans un certain sens. Nous écrivons alors

$$\Phi_{espace}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(\vec{r}) \quad (2.9)$$

où $\vec{r}$ représente la position des deux électrons, N désigne le nombre de fonctions de base ϕ_j . Soit $R_N(\vec{r})$ le résidu défini par $R_N(\vec{r}) = (H - E)\Phi_{espace}(\vec{r})$. Pour calculer les coefficients c_j du développement (9.8), il

faut annuler le résidu $R_N(\vec{r})$. Cette opération consiste à écrire que le produit scalaire de ce résidu avec des fonctions d'essai $\varphi_\alpha(\vec{r})$ est nul [28]

$$\langle R_N | \varphi_\alpha(\vec{r}) \rangle = \int \omega(\vec{r}) R_N(\vec{r}) \varphi_\alpha(\vec{r}) d\vec{r} = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N \quad (2.10)$$

où $\omega(\vec{r})$ est le poids associé aux fonctions d'essai. Le choix des fonctions d'essai et du poids définissent la méthode spectrale. Ainsi, si les fonctions d'essai sont des produits des fonctions delta $\prod_{i=1}^2 \delta(\vec{r}_i - \vec{r})$ et $\omega = 1$, la méthode est de type *collocation*. Dans cette dernière variante, on force le résidu R_N à s'annuler uniquement en certains points $\vec{r}_i$ appelés *points de collocation*. Cette méthode est similaire à la méthode de grille sauf que dans ce cas, le choix des points de collocation n'est pas arbitraire ; ces points sont directement liés au choix des fonctions d'essai. Dans la plupart des cas, les N points de collocation sont des abscisses d'une quadrature de Gauss ; très souvent, cette propriété conduit à une convergence très rapide (exponentielle) en terme du nombre de points [29]. Lorsque les fonctions d'essai sont les mêmes que les fonctions de base, on dit que la méthode spectrale est de type *Galerkin* dans laquelle le résidu est en moyenne nul. La méthode de *Galerkin* ne s'applique que lorsque les fonctions de base $\phi_\alpha(\vec{r}) \equiv \varphi_\alpha(\vec{r})$ satisfont les conditions aux frontières qui peuvent être de type Dirichlet, Neumann ou Cauchy-Robin. Si les fonctions de base ne satisfont pas les conditions aux frontières, nous avons alors la méthode spectrale de type *Tau* [30] qui a été introduite par Lanczos. Puisque la fonction d'onde est développée sur une base, résoudre l'équation de Schrödinger (2.5) revient tout simplement à résoudre un problème aux valeurs propres généralisé $HC = ESC$ où C est un vecteur dont les composantes sont les c_j , c'est-à-dire les composantes de la fonction $\Phi_{espace}(\vec{r})$ sur la base. Sur cette base, les éléments de matrice de H et S sont respectivement $H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle$ et $S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle$. Dans le cadre de ce travail, nous utilisons une méthode spectrale de type Galerkin. Les fonctions de base sont les fonctions sturmiennes qui sont évoquées dans la sous-section suivante et présentées en détails dans la thèse de Lagmago [7]. A ce niveau, on distingue d'une part, les bases explicitement corrélées (EC) qui contiennent explicitement la distance inter-électronique r_{12} comme coordonnée spatiale et d'autre part, les bases IC pour lesquelles les fonctions de base sont des combinaisons linéaires antisymétriques des fonctions monoélectroniques.

Concernant les bases EC, deux types de fonctions ont été employées. Il s'agit d'une part des fonctions sturmiennes en coordonnées périmétriques

[31, 32] : $u = -r_1 + r_2 + r_{12}$, $v = r_1 - r_2 + r_{12}$ et $w = r_1 + r_2 - r_{12}$; et d'autre part, les fonctions de type Hylleraas [33] de forme $r_1^k r_2^m r_{12}^n e^{-\alpha r_1} e^{-\beta r_2}$ où k , m et n sont des entiers positifs, α et β des paramètres non linéaires. Généralement, l'avantage des méthodes EC est qu'elles décrivent très bien les fonctions d'onde pour des petites distances inter-électroniques, notamment l'état fondamental et quelques états simplement ou doublement excités. De plus, dans le cas où les fonctions de base sont des fonctions sturmiennes en coordonnées périmétriques, la matrice associée au hamiltonien a une structure bande et le calcul de tous ses éléments peuvent se faire analytiquement [34]. Cependant, cette méthode présente quelques failles puisqu'elle n'est pas efficace pour décrire les états excités fortement asymétriques (EEFA) où l'un des électrons est dans un état très excité tandis que l'autre est dans un état faiblement excité. La raison de cette inefficacité est liée au fait que ces états impliquent de grandes valeurs de r_{12} . Pour ces états, on note une convergence lente des valeurs propres [35, 36]. Pour améliorer la précision de cette méthode, on a souvent recours à des tailles grandes des matrices limitant de ce fait la technique aux petites valeurs du moment angulaire total L c'est-à-dire ($L = 0, 1$).

Contrairement aux méthodes EC, on peut facilement appliquer les méthodes IC aux systèmes à deux électrons ou plus. En outre, signalons que les éléments de matrice sont assez simples à évaluer. La méthode IC est fondée sur le développement en multipôles de l'interaction électron-électron

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{q=0}^{\infty} \sum_{p=-q}^q \frac{4\pi}{2q+1} \frac{r_{<}^q}{r_{>}^{q+1}} Y_{qp}^*(\hat{r}_1) Y_{qp}(\hat{r}_2) \quad (2.11)$$

avec $Y_{qp}(\hat{r})$ qui est une harmonique sphérique et $r_{<} = \min(r_1, r_2)$ et $r_{>} = \max(r_1, r_2)$. La différence entre les méthodes IC réside dans le choix des fonctions de base à utiliser dans les calculs : fonctions de Slater [37, 38, 39, 40], B-splines [41], fonctions hydrogéoïdes [42, 43, 44]. Le plus souvent, la description de la partie angulaire se fait à l'aide des harmoniques bipolaires qui couplent les moments cinétiques individuels λ et l des deux électrons pour un moment angulaire total L donné. En pratique, la prise en compte des effets de corrélation se fait par l'inclusion de plusieurs configurations (λ, l) qui vont se coupler au moment q du développement en ondes partielles (9.10). Ainsi, il en ressort que la précision d'une méthode IC dépend du nombre de fonctions radiales et du nombre de configurations angulaires utilisées. En général, pour les méthodes IC et indépendamment du type des fonctions radiales utilisées, les valeurs

propres convergent lentement en fonction du nombre de fonctions radiales et du nombre de configurations angulaires pris en compte dans les calculs. La faiblesse de cette méthode est liée à la lente convergence des énergies des états correspondant à de petites distances inter-électroniques. Cette convergence lente [7, 8] qui est particulièrement marquée dans le cas du fondamental est due au fait que le développement (9.10) ne vérifie pas la condition du "cusp" de Kato [45]. En effet pour un système à deux électrons, le hamiltonien possède trois singularités : $r_1 = 0$, $r_2 = 0$ et $r_{12} = 0$. Les deux premières sont masquées dans une approche IC du fait de l'utilisation explicite de r_1 et r_2 comme coordonnées. La faible convergence radiale des méthodes IC est due à la troisième singularité car le potentiel $1/r_{12}$ possède des dérivées discontinues en $r_1 = r_2$. En revanche, la méthode IC converge plus rapidement et donne des résultats précis pour les EEFA car le recouvrement entre les nuages électroniques des deux électrons est très faible. La description des EEFA a été depuis longtemps un véritable défi en physique atomique. Les méthodes variationnelles donnent d'excellents résultats seulement pour les états faiblement excités, mais pas pour les EEFA. Les difficultés rencontrées dans la description des EEFA sont dues au fait que pour ces états, il existe deux régions distinctes de l'espace auxquelles est associée la distribution de probabilité : une région proche du noyau pour l'électron interne et une région loin du noyau pour l'électron éloigné. Pour qu'une fonction décrive efficacement un tel état, il faut que la base sur laquelle elle est développée couvre correctement ces deux régions de l'espace. La technique IC que nous présentons ici permet de surmonter cette difficulté en combinant à la fois la structure de la méthode IC et les propriétés des fonctions sturmiennes [8]. En dépit du fait que les méthodes EC sont généralement préférées pour leur convergence rapide et pour leur précision, nous avons choisi d'utiliser la méthode IC pour deux raisons essentielles :

1. Cette méthode s'avère être la plus appropriée pour le calcul des différents observables dans le cadre de l'étude de l'ionisation par impact photonique et électronique.
2. En construisant de manière adéquate le développement (9.10), il est connu que la technique IC peut être l'une des meilleures techniques *ab initio* pour décrire les EEFA.

2.3.2 Les fonctions sturmiennes non-relativistes

Cette section est consacrée aux fonctions sturmiennes non-relativistes. Le terme "sturmiennes" n'a pas d'autre signification historique que celle de rappeler que ces fonctions sont solutions d'un problème de type Sturm-Liouville [46] dont l'équation aux valeurs propres est semblable à celle de Schrödinger pour un atome hydrogénoïde. Ces fonctions forment une base particulièrement bien adaptée aux problèmes de l'hydrogénoïde et de l'hélium en présence d'un champ électromagnétique. Ceci tient au fait que le spectre du hamiltonien atomique possède une partie purement continue. L'utilisation d'une base de fonctions sturmiennes permet d'éviter ce problème en discrétisant le continuum à un électron. L'intérêt de choisir une base de fonctions sturmiennes réside également dans la forme extrêmement simple des éléments de matrice [47, 48] associées aux opérateurs $\hat{P}^2$, $\hat{P}$ et $1/r$. Les sturmiennes peuvent s'écrire en termes de polynômes de Laguerre [49]

$$S_{n,l}^\kappa(r) = \tilde{N}_{n,l}^\kappa r^{l+1} e^{-\kappa r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\kappa r), \quad (2.12)$$

avec

$$\tilde{N}_{n,l}^\kappa = \frac{(n-l-1)!(2l+1)!}{(n+l)!} = \sqrt{\frac{\kappa}{n}} (2\kappa)^{l+1} \left[\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!} \right]^{1/2}. \quad (2.13)$$

On obtient avec ces coefficients de normalisation la condition de normalisation des sturmiennes (normalisation de Shakeshaft [50])

$$\langle S_{n,l}^\kappa | S_{n,l}^\kappa \rangle \equiv \int_0^\infty S_{n,l}^\kappa(r) S_{n,l}^\kappa(r) dr = 1. \quad (2.14)$$

Les détails sur le problème de Sturm-Liouville, les propriétés fondamentales des valeurs et fonctions propres sont consignées dans le livre de Nikiforov [51] et dans la thèse de Lagmago [7]. Remarquons que dans la définition des fonctions sturmiennes, le fait que la variable r soit multipliée par κ nous permet de donner un sens physique au paramètre κ : c'est un facteur de dilatation. En effet, d'après la figure **2.1**, pour n fixé, plus κ augmente, plus le graphe est comprimé et il est étiré lorsque κ diminue. En conséquence, il faut des sturmiennes de paramètre κ petit pour reproduire une fonction spatialement étendue et un κ grand pour reproduire des fonctions oscillant rapidement. Passons à présent au comportement de la fonction sturmienne en fonction de n . La figure **2.2** montre que le nombre d'oscillations augmente lorsque n augmente et que le nombre de

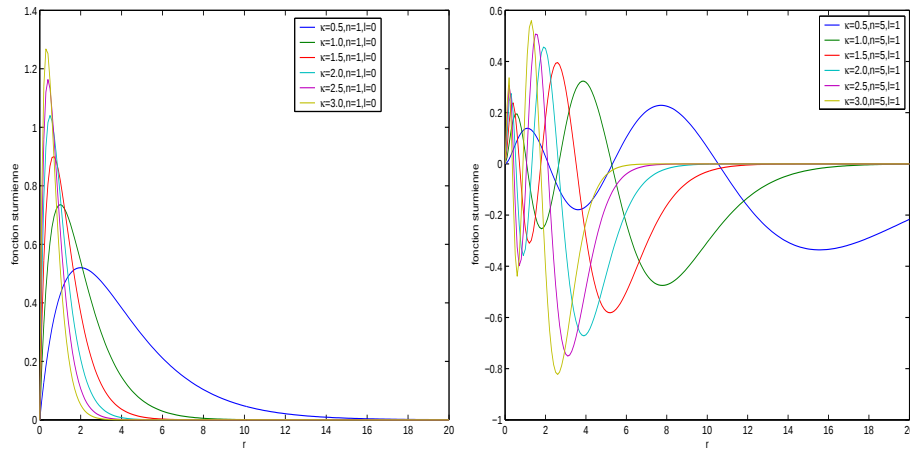


FIGURE 2.1 – Comportement des sturmiennes en fonction du paramètre κ pour $n = 1$ et $l = 0$ à gauche, pour $n = 5$ et $l = 1$ à droite.

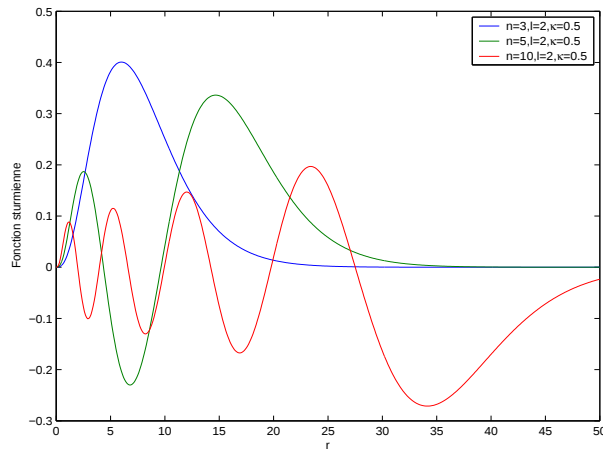


FIGURE 2.2 – Comportement des sturmiennes en fonction de n pour $l = 2$ et $\kappa = 0.5$

zéros est donné par $n_r = n - l - 1$ qui est le nombre quantique principal radial. Nous remarquons aussi que l'étendue de la fonction croît avec n . Ainsi, si nous voulons reproduire une fonction étendue ou qui oscille rapidement, nous devons utiliser des fonctions sturmiennes d'indice n élevé. Signalons pour terminer ce paragraphe, que la période des oscillations augmente avec r lorsque les paramètres κ et n sont donnés.

2.3.3 Décomposition de la partie spatiale de la fonction d'onde sur la base de fonctions sturmiennes

La description complète d'un système à deux électrons passe par la connaissance des fonctions d'onde spatiales et spinorielles pour ce système. Puisque les fonctions de spin pour un tel système sont bien connues, il nous reste juste à déterminer les fonctions d'onde spatiales. Nous pouvons alors décomposer cette fonction sur la base des fonctions sturmiennes

$$\Phi_{\text{espace}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{LM} \sum_{\lambda l} \sum_s \sum_{\nu n} \alpha_{\nu n}^{\lambda l} \psi_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM} \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.15)$$

avec

$$F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda LM}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{S_{\nu \lambda}^{\kappa_s}(r_1)}{r_1} \Lambda_{\lambda l}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \frac{S_{nl}^{k_s}(r_2)}{r_2} \quad (2.16)$$

et $\mathcal{A} = (1 + \varepsilon P_{21})/\sqrt{2}$ est l'opérateur de symétrisation pour un système de deux particules identiques. ε est le paramètre de symétrie valant $+1$ pour les états singulets et -1 pour les états triplets. P_{21} est l'opérateur de permutation qui tient compte de l'indiscernabilité des deux électrons. En d'autres termes, permuter les deux électrons est équivalent à agir soit sur les coordonnées spatiales $[\vec{r}_1 \rightleftharpoons \vec{r}_2]$, soit sur les paramètres intrinsèques $[(n, l, k_s) \rightleftharpoons (\nu, \lambda, \kappa_s)]$. Les lettres grecques κ_s , ν , λ et μ représentent respectivement le paramètre non linéaire, les nombres quantiques principal, orbital et magnétique associés à l'électron 1 tandis que les lettres romaines k_s , n , l et m sont les mêmes paramètres pour l'électron 2. Le paramètre $\alpha_{\nu n}^{\lambda l}$ défini par

$$\alpha_{\nu n}^{\lambda l} = 1 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - 1 \right) \delta_{\nu n}^{\lambda l} \quad (2.17)$$

contrôle les éventuelles redondances qui pourraient survenir dans la base à cause de l'échange. Pour les éviter, on impose dans la relation (2.15) la contrainte $\lambda \leq l$ et si $\lambda = l$ alors $\nu \leq n$. La partie radiale des fonctions de base est décrite par un produit de deux fonctions sturmiennes $S_{\nu \lambda}^{\kappa_s}(r)$ et $S_{nl}^{k_s}(r)$ avec $\nu = \lambda + \nu_<, \lambda + \nu_< + 1, \dots, \lambda + \nu_>$ et $n = l + n_<, l + n_< + 1, \dots, l + n_>$. Les entiers $\lambda + \nu_<$ et $\lambda + \nu_>$ (respectivement $n = l + n_<$ et $n = l + n_>$) sont les bornes inférieure et supérieure qui encadrent les valeurs prises par le paramètre ν (respectivement n) des sturmiennes. L'indice ν de ces fonctions est tel que $\nu \geq \lambda + 1$ de manière à ce que le nombre quantique

radial soit $\tilde{\nu} = \nu - \lambda - 1$. La partie angulaire de la fonction d'onde spatiale est décrite par les harmoniques bipolaires définies par

$$\Lambda_{\lambda l}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = \sum_{\mu m} (-1)^{\lambda-l+M} [L] \begin{pmatrix} \lambda & l & L \\ \mu & m & -M \end{pmatrix} Y_{\lambda\mu}(\hat{r}_1) Y_{lm}(\hat{r}_2), \quad (2.18)$$

où $[L] = \sqrt{2L+1}$ et les fonctions $Y_{\lambda\mu}(\hat{r})$ désignent les harmoniques sphériques et $\hat{r} = (\theta, \phi)$ les coordonnées angulaires des électrons. Ces harmoniques bipolaires satisfont la relation d'orthogonalité

$$\int d\hat{r}_1 \int d\hat{r}_2 \Lambda_{\lambda' l'}^{L' M'}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \Lambda_{\lambda l}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{ll'} \delta_{LL'} \delta_{MM'}. \quad (2.19)$$

Les coefficients $\psi_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda L M}$ de décomposition de la fonction d'onde spatiale sur la base sturmienne sont calculés en résolvant l'équation aux valeurs propres du hamiltonien H . D'autre part, on montre facilement que la fonction (2.15) est également une fonction propre des opérateurs P_{21} , L^2 et L_z . De plus, pour un L fixé, la fonction d'onde d'un système possède toujours une parité bien définie puisqu'elle est fonction propre de l'opérateur parité Π . On sait que sous l'action de l'opérateur Π , les coordonnées spatiales (r, θ, ϕ) deviennent $(r, \pi - \theta, \pi + \phi)$. D'après la définition des harmoniques sphériques [52], on aura

$$\Pi(Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)) = Y_{\lambda\mu}(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-1)^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi). \quad (2.20)$$

Il s'en suit donc que $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$ a une parité de $(-1)^\lambda$. Ainsi les harmoniques bipolaires apparaissant dans l'expression (2.15) ont une parité $(-1)^{\lambda+l}$. Pour que la fonction d'onde $\Phi_{espace}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ait une parité bien définie pour un moment angulaire total L et sa projection M , chaque couple de moment angulaire apparaissant dans le développement (2.15) doit vérifier la relation

$$(-1)^{\lambda+l} = (-1)^L. \quad (2.21)$$

Dans un processus photonique, les règles de selection fixent la valeur de L et donc fixe du coup la parité du système. Par contre, si nous traitons les processus $(e, 2e)$, on a aucune restriction sur les valeurs de L et du coup, la parité de la fonction d'onde sera donc une superposition des parités paire et impaire. Ainsi, il faudrait prendre en compte les couples de moments angulaires (λ, l) qui violent la condition de parité donnée par (2.21).

Dans le développement (2.15), les valeurs prises par L sont telles que $L_{min} \leq L \leq L_{max}$, avec $L_{min} \geq 0$. Sa projection M est telle que $|M| \leq L$.

Dans la suite, nous considérons dans un premier temps l'interaction de l'atome avec un champ électrique polarisé linéairement. Si l'état initial de cet atome est un état S , on peut poser $M = 0$ dans tous les calculs car elle est issue de la règle de sélection obtenue grâce à la condition de non nullité des coefficients de Wigner. Par contre, lorsque nous traiterons l'interaction de l'atome avec un électron incident, aucune restriction sur L , M et les moments individuels ne sont à envisager. Pour chaque valeur de L , plusieurs couples de moments angulaires des électrons (λ, l) tels que $0 \leq \lambda \leq \lambda_{\max}$ et $0 \leq l \leq l_{\max}$ peuvent être sélectionnés. La seule condition à leur imposer est de satisfaire la relation (2.21) si nous traitons des transitions photoniques. De plus, pour chaque couple (λ, l) , on a la possibilité d'utiliser plusieurs ensembles de fonctions sturmiennes, chacune d'elles étant associée à un couple de paramètres non linéaires (κ_s, k_s) , avec $s = 1, 2, \dots, N_s$. En clair, à chacune des N_s valeurs de s , est associé un ensemble de fonctions sturmiennes $S_{\nu\lambda}^{\kappa_s}$ et $S_{nl}^{k_s}$. Le choix de l'utilisation de plusieurs paramètres non linéaires et nombres de fonctions sturmiennes par électron est dicté par les spécificités du problème physique étudié. Ainsi, si les deux électrons décrivent la même région de l'espace (cas du fondamental de He), il est judicieux de choisir un seul paramètre non linéaire et un seul nombre de sturmiennes pour décrire chaque électron. Par contre, si les deux électrons ne sont plus équivalents : l'un est plus proche du noyau que l'autre (cas des EEFA de He), il est indiqué de décrire les deux électrons par des paramètres non linéaires différents et des nombres de sturmiennes par électron différents.

2.3.4 Formulation matricielle de l'équation de Schrödinger

Il est donc question de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour un système à deux électrons

$$(H_0 + U - E) \Phi_{\text{espace}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0. \quad (2.22)$$

En multipliant à gauche l'équation (2.22) par $\mathcal{A}F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l m}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, on obtient après intégration dans tout l'espace, l'équation matricielle suivante

$$\sum_{LM} \sum_{\lambda l} \sum_s \sum_{\nu n} \alpha_{\nu n}^{\lambda l} \left(H_{0\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l m} + U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l m} - E S_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l m} \right) = 0 \quad (2.23)$$

avec les intégrales

$$H_{0\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \mathcal{A} F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M' \star}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H_0 \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.24)$$

$$S_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \mathcal{A}' F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.25)$$

et

$$U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M} = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 \mathcal{A}' F_{\kappa'_s k'_s \nu' n'}^{\lambda' l' L' M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)^* \frac{1}{r_{12}} \mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (2.26)$$

qui représentent respectivement les éléments de matrice du hamiltonien du modèle indépendant H_0 , de la matrice de recouvrement S et de l'interaction coulombienne U entre les deux électrons. Ainsi donc, résoudre l'équation de Schrödinger sur la base des fonctions sturmiennes $\mathcal{A} F_{\kappa_s k_s \nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est équivalent à résoudre le problème aux valeurs propres généralisé

$$\{H_0 + U\} \Psi = ES\Psi, \quad (2.27)$$

où Ψ est un vecteur dont les composantes sont les coefficients de la fonction d'onde $\Phi_{espace}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sur la base.

Rotation complexe du hamiltonien

La méthode de la rotation complexe ou méthode de dilatation a été largement utilisée pour déterminer les résonances en physique atomique, en chimie et en physique nucléaire [53, 54, 55]. Le terme *rotation complexe* signifie rotation dans le plan complexe. En théorie de diffusion, les résonances peuvent être identifiées comme étant des pôles de la matrice S de diffusion. Une résonance est un état métastable se trouvant dans le continuum. Ce sont des états qui possèdent une durée de vie finie. Le fil conducteur de cette technique est le prolongement analytique du hamiltonien dans le plan complexe moyennant la transformation des coordonnées radiales

$$r \rightarrow r e^{i\theta} \quad (2.28)$$

où θ est l'angle de rotation et $e^{i\theta}$ est appelé *facteur d'échelle*. Lorsque nous substituons la relation (2.28) dans les expressions des éléments de matrice obtenus dans une base sturmiennne réelle, on peut montrer que c'est équivalent de considérer une base sturmiennne complexe où on a plutôt

$$\kappa \rightarrow \kappa e^{-i\theta}. \quad (2.29)$$

La valeur de κ est alors choisie de façon à ce que le demi plan complexe impliqué soit le quadrant droit du bas de manière à simuler les conditions asymptotiques en onde sortante des canaux ouverts et d'exponentielle décroissante pour les canaux fermés. Ainsi la valeur de θ doit varier dans l'intervalle $[0, \pi/2]$. De plus, la base réelle se déduit de la base complexe en posant $\theta = 0$.

L'évaluation des éléments de matrice (2.25) dans le plan complexe donne

$$S_{\kappa_s' k_s' \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda L M} = \left\{ \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{l' l} \right. \\ \left. + \epsilon[(\nu, \lambda, \kappa_s) \rightleftharpoons (n, l, k_s)] \right\} \delta_{L' L} \delta_{M' M}, \quad (2.30)$$

qui est réelle, symétrique et définie positive quelle que soit la valeur de θ . C'est donc dire que cette matrice de recouvrement a la même expression tant en base réelle qu'en base complexe. Quant à l'élément de matrice (2.24) dans le plan complexe $\mathbf{H}_0(\theta)$ donné par

$$\mathbf{H}_{0 \kappa_s' k_s' \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda L M}(\theta) = \left\{ \left((\kappa_s \nu - Z e^{i\theta}) \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | \frac{1}{r} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \right. \right. \\ \left. - \frac{\kappa_s^2 + k_s^2}{2} \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \right. \\ \left. + (\kappa_s n - Z e^{i\theta}) \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | \frac{1}{r} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \right) \\ \times e^{-2i\theta} \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{l' l} + \epsilon[(\nu, \lambda, \kappa_s) \rightleftharpoons (n, l, k_s)] \left. \right\} \\ \times \delta_{L' L} \delta_{M' M}, \quad (2.31)$$

il se déduit facilement de l'élément de matrice H_0 calculé dans la base réelle

$$H_{0 \kappa_s' k_s' \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda L M} = \left\{ \left((\kappa_s \nu - Z) \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | \frac{1}{r} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \right. \right. \\ \left. - \frac{\kappa_s^2 + k_s^2}{2} \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \right. \\ \left. + (\kappa_s n - Z) \langle S_{\nu', \lambda'}^{\kappa_s'} | S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s} \rangle \langle S_{n', l'}^{k_s'} | \frac{1}{r} | S_{n, l}^{k_s} \rangle \right) \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{l' l} \\ \left. + \epsilon[(\nu, \lambda, \kappa_s) \rightleftharpoons (n, l, k_s)] \right\} \delta_{L' L} \delta_{M' M}. \quad (2.32)$$

L'expression de l'élément de matrice (2.26) dans la base complexe se déduit de celui dans la base réelle

$$U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M}(\theta) = e^{-i\theta} U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M} \quad (2.33)$$

avec $U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M}$ qui est l'élément de matrice de corrélation électronique dans la base réelle. Il sera élucidé dans la sous-section suivante car l'étude de sa stabilité mérite une attention particulière. Mais nous pouvons déjà noter que l'élément de matrice relatif à $H = H_0 + U$ est réel et symétrique dans la base réelle et complexe symétrique dans la base complexe. De plus, ses valeurs propres ainsi que ses vecteurs propres sont complexes dans la base complexe. Par conséquent cet hamiltonien $\mathbf{H}(\theta)$ dans la base complexe n'est plus hermitien. Dans les différentes expressions des éléments de matrice données ci-dessus, la quantité $(\nu, \lambda, \kappa_s) \rightleftharpoons (n, l, k_s)$ signifie que pour obtenir le terme d'échange, il faut permuter ν avec n , λ avec l et κ_s avec k_s .

La figure 2.3 présente le spectre du hamiltonien complexe $\mathbf{H}(\theta)$. Sur celle-ci, la figure du haut montre le spectre du hamiltonien $\mathbf{H}(\theta = 0)$. Les

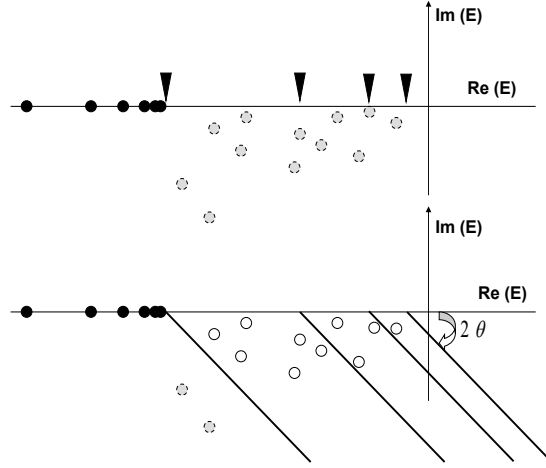


FIGURE 2.3 – Spectre de $\mathbf{H}(\theta)$ dans le plan d'énergie E .

triangles indiquent les points de branchement des continua (traits gras sur la figure du bas) qui correspondent aux différents seuils d'ionisation simple. Les cercles pleins correspondent aux états discrets du système,

tandis que les cercles en trait pointillé sont les résonances cachées. La figure du bas montre le spectre du hamiltonien $\mathbf{H}(\theta)$: les continua sont tournés d'un angle 2θ dans le demi-plan complexe inférieur. Les états discrets sont restés sur l'axe réel, certaines résonances sont maintenant découvertes ; elles correspondent aux états propres de $\mathbf{H}(\theta)$ d'énergie complexe. Les cercles en trait pointillé indiquent les résonances n'apparaissant pas dans le spectre de $\mathbf{H}(\theta)$, mais susceptibles d'apparaître si on augmente θ . En vertu du théorème d'Aguilar-Balslev-Combes, le spectre d'énergie du hamiltonien dilaté a les propriétés suivantes :

1. Les énergies des états liés sont situées sur l'axe réel. Elles ne sont pas affectées par la rotation complexe du hamiltonien
2. Les coupures à partir de chaque seuil de simple ionisation représentent les énergies des états du continuum. Elles sont tournées d'un angle de 2θ dans le sens horloger.
3. Des valeurs propres complexes et discrètes $E = E_{res}$ attribuées aux résonances apparaissent dans le demi-plan inférieur droit dès que θ est supérieur à $\frac{1}{2}Arg(E_{res})$. Ces valeurs propres sont telles que $E_{res} = E_r - i\Gamma/2$ où E_r est la position de la résonance et Γ sa largeur.

Evaluation de l'élément de matrice $U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda L M}$

Dans cette sous-section, nous présentons le calcul de $U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda L M}$ fait par Lagmago [7] et amélioré par Fomouo [8]. Pour évaluer ce terme, on remplace dans (2.26) l'interaction $1/r_{12}$ par le développement en multipôle (9.10). On obtient

$$U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda L M} = \sum_{q=0}^{\infty} \left\{ \tilde{\mathcal{R}}_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' \lambda l q} \tilde{\mathcal{A}}_{\lambda' l' \lambda l}^{L' M' L M q} + \epsilon[(\nu, \lambda, \kappa_s) \rightleftharpoons (n, l, k_s)] \right\}, \quad (2.34)$$

où la partie radiale est donnée par

$$\tilde{\mathcal{R}}_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' \lambda l q} = \int dr_1 \int dr_2 S_{\nu', \lambda'}^{\kappa'_s *}(r_1) S_{n', l'}^{\kappa'_s *}(r) \frac{r_{<}^q}{r_{>}^{q+1}} S_{\nu, \lambda}^{\kappa_s}(r_1) S_{n, l}^{\kappa_s}(r_2), \quad (2.35)$$

avec r_1 et r_2 qui varient de 0 à ∞ ; et la partie angulaire par

$$\tilde{\mathcal{A}}_{\lambda'l'\lambda l}^{L'M'LMq} = \frac{4\pi}{2q+1} \sum_{p=-q}^q \int d\hat{r}_1 d\hat{r}_2 \Lambda_{\lambda'l'}^{L'M'}(\hat{r}_1, \hat{r}_2)^* Y_{q,p}^*(\hat{r}_1) Y_{q,p}(\hat{r}_2) \Lambda_{\lambda l}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2), \quad (2.36)$$

soit encore

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{A}}_{\lambda'l'\lambda l}^{L'M'LMq} &= (-1)^{\lambda'+\lambda+L} [\lambda', \lambda, l', l] \begin{pmatrix} \lambda' & q & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & q & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\times \left\{ \begin{matrix} \lambda & l & L \\ l' & \lambda' & q \end{matrix} \right\} \delta_{L'L} \delta_{M'M}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Numériquement, l'évaluation de l'intégrale (2.35) requiert plus d'attention. En effet, il est nécessaire de réécrire l'intégrale (2.35) comme suit [8] afin d'éviter la propagation des erreurs d'arrondi qui détériorent la précision des résultats

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' \lambda l q} &= \int_0^\infty dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) r_2^q \int_{r_2}^\infty dr_1 S_{\nu',\lambda'}^{\kappa'_s}(r_1) S_{\nu,\lambda}^{\kappa_s}(r_1) \frac{1}{r_1^{q+1}} \\ &+ \int_0^\infty dr_1 S_{\nu',\lambda'}^{\kappa'_s}(r_1) S_{\nu,\lambda}^{\kappa_s}(r_1) r_1^q \int_{r_1}^\infty dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) \frac{1}{r_2^{q+1}}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Il faut remarquer que l'expression ci-dessus n'est pas le développement conventionnel qui consiste à écrire [7]

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{R}}_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' \lambda l q} &= \int_0^\infty dr_1 S_{\nu',\lambda'}^{\kappa'_s}(r_1) S_{\nu,\lambda}^{\kappa_s}(r_1) \frac{1}{r_1^{q+1}} \int_0^{r_1} dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) r_2^q \\ &+ \int_0^\infty dr_1 S_{\nu',\lambda'}^{\kappa'_s}(r_1) S_{\nu,\lambda}^{\kappa_s}(r_1) r_1^q \int_{r_1}^\infty dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) \frac{1}{r_2^{q+1}}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Pour utiliser la quadrature de Gauss-Laguerre, on est obligé de transformer l'intégrale interne sur r_2

$$\begin{aligned} \int_0^{r_1} dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) r_2^q &= \int_0^\infty dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) r_2^q \\ &- \int_{r_1}^\infty dr_2 S_{n',l'}^{k'_s}(r_2) S_{n,l}^{k_s}(r_2) r_2^q. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ainsi, l'intégrale (2.39) devient une somme de trois termes. On a remarqué qu'en général, deux de ces trois termes sont très proches et se détruisent presque exactement. Ce qui introduit de ce fait de sérieuses erreurs d'arrondi. Par ailleurs, l'expression (2.38) est très stable numériquement car dans ce cas, on additionne deux termes qui sont à peu près du même ordre de grandeur et de même signe. Nous avons vérifié que même pour de grandes valeurs du paramètre n des sturmiennes ($n \approx 150$), le calcul des éléments de matrice $\tilde{\mathcal{R}}_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' \lambda l q}$ avec la formule (2.38) est numériquement stable.

Structures des matrices

Dans ce paragraphe, nous décrivons les structures que présentent les différentes matrices impliquées dans la résolution de l'équation de Schrödinger. Notons que ces structures n'ont jamais été exploitées auparavant dans les résolutions numériques. Elles seront très utiles dans le **chapitre 3** pour le choix du préconditionnement d'un système d'équations linéaires.

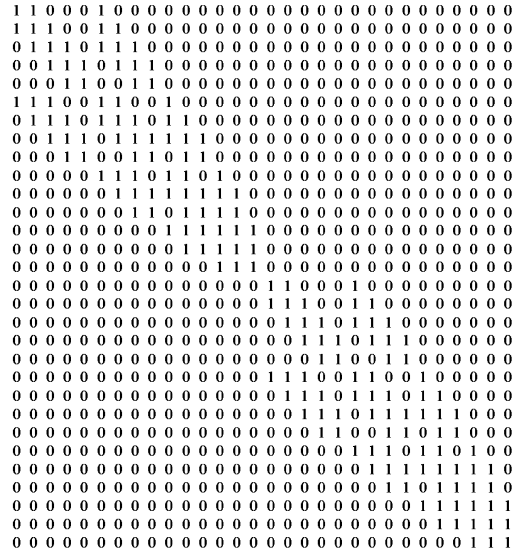


FIGURE 2.4 – Structure en *cactus* de la matrice de recouvrement S pour 5 sturmiennes et 2 sous-blocs $(\lambda, l) = (0, 0), (1, 1)$ de $L = 0$.

En effet, on sait très bien que pour une seule paire de paramètres non linéaires κ , la matrice de recouvrement à une variable dans la base

sturmiennes a une structure bande et est tridiagonale. Son calcul se fait analytiquement et peut aussi se faire numériquement à l'aide de la quadrature de Gauss-Laguerre [7, 49] avec un nombre de points suffisant. Par contre, lorsqu'on utilise des κ différents, cette matrice de recouvrement n'est plus bande car la matrice correspondant à ce sous-bloc est pleine. Le calcul de cette matrice dans ce cas ne peut se faire que numériquement en utilisant la quadrature de Gauss-Laguerre. Il en découle donc que la matrice de recouvrement à deux variables S qui est le produit tensoriel de deux matrices de recouvrement à une variable aura une certaine structure lorsque l'on utilise une seule paire de κ . De plus, la matrice S sera pleine

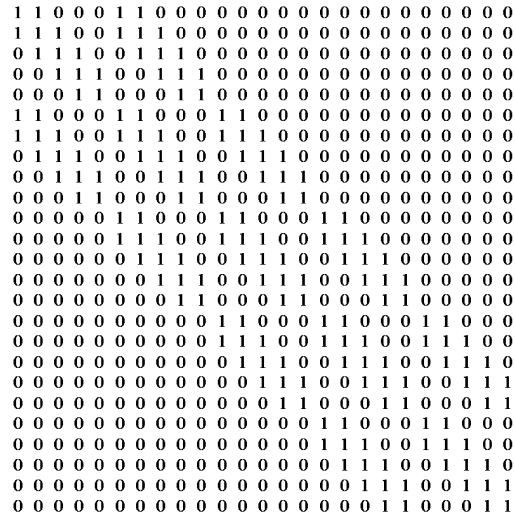


FIGURE 2.5 – Structure **tribande** de la matrice de recouvrement S pour 5 sturmiennes et 1 seul sous-bloc $(\lambda, l) = (0, 1)$ de $L = 1$.

si on utilise des κ différents. Nous avons remarqué que d'une part, la matrice du hamiltonien total lorsqu'on néglige la corrélation électronique H_0 possède la même structure que la matrice S . D'autre part, l'élément de matrice $U_{\kappa'_s k'_s \nu' n' \kappa_s k_s \nu n}^{\lambda' l' L' M' \lambda l L M}$ a une structure pleine quelles que soient les valeurs des paramètres non linéaires. Mais il est très important de remarquer que les éléments extra-bandes (structures de S et H_0) de la matrice U sont petits par rapport aux éléments appartenant à ces deux structures. Cet élément de matrice peut se calculer à l'aide de la quadrature de Gauss-Laguerre qui dans le cas présent, donne des résultats assez précis. Par contre, on peut aussi combiner la quadrature de Gauss-Laguerre à la re-

lation de récurrence des fonctions sturmiennes pour obtenir un résultat plus précis de cet élément de matrice. Par ailleurs, nous avons observé que pour les cas redondants ($L = 0$ par exemple), les matrices S et H_0 ont une structure en *cactus* (voir la figure 2.4). De plus, les cas non-redondants ($L = 1$ par exemple) confèrent à ces matrices la structure *tribande* (voir la figure 2.5). Par contre, le cas $L = 2$ qui est un mélange de cas redondants et non-redondants confère à ces matrices un mélange de structures, c'est-à-dire les structures en *cactus* et *tribande* pour des sous-blocs correspondants. De plus, toutes les trois matrices S , H_0 et U sont symétriques.

En conclusion, pour une valeur du moment angulaire L , la matrice du hamiltonien H est donc pleine à cause du terme d'interaction $1/r_{12}$ qui couple les différents moments angulaires des électrons individuels. Par contre, les matrices de recouvrement S et sans corrélation H_0 ont une structure bloc-diagonale, chaque bloc étant associé à un couple de moment angulaire (λ, l) . Chaque bloc peut contenir un ou plusieurs sous-blocs. Chaque sous-bloc correspond à un ensemble de paramètres non linéaires donné. En clair, le nombre de sous-blocs par couple de moments angulaires (λ, l) est égal au nombre d'ensembles de paramètres non linéaires sélectionnés pour ce couple de moments angulaires.

2.3.5 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger

Dans cette partie, nous résolvons numériquement l'équation de Schrödinger stationnaire tout en tenant compte du problème lié à la "surcomplétude" numérique de la base sturmienne. En effet, l'utilisation de plusieurs ensembles de paramètres non linéaires rend la base *numériquement sur-complète* en ce sens que la matrice de recouvrement S n'est plus définie positive. En effet, certaines valeurs propres de S sont proches de zéro (en fait, elles deviennent plus petites que la précision de la machine). Cette situation est source de problèmes numériques car pour résoudre l'équation de Schrödinger, on est obligé d'inverser la matrice de recouvrement. La technique adoptée [8] pour contourner ce problème peut se résumer en deux étapes :

1. On définit un paramètre de coupure ϵ_c de l'ordre de 10^{-12} . Toutes les valeurs propres de la matrice de recouvrement en dessous de cette valeur ϵ_c sont rejetées. Cette opération entraîne la réduction de la taille des matrices S de recouvrement et H du hamiltonien

2. On redéfinit le problème aux valeurs propres avec la nouvelle matrice de H que l'on résout en utilisant des algorithmes se trouvant dans les bibliothèques LAPACK.

Pour plus de détails, supposons que n soit la taille des matrices H et S . Soit T la matrice orthogonale qui diagonalise la matrice de recouvrement S ($TT^t = 1$) et s une matrice diagonale dont les termes diagonaux sont les valeurs propres de la matrice de recouvrement S , on a

$$T^t S T = s. \quad (2.41)$$

Si p est le nombre de valeurs propres de S plus grandes que ϵ_c , après avoir réjeté les $n - p$ valeurs propres inférieures à la valeur de coupure ϵ_c , les tailles de la matrice T qui contient les vecteurs propres de S , et de la matrice diagonale s sont respectivement $(n \times p)$ et $(p \times p)$. Soit D la matrice $(n \times p)$ définie par

$$D = T s^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.42)$$

on démontre aisément que D satisfait les relations

$$D^t D = s^{-1}, \quad D^t S D = \mathbf{1}, \quad (2.43)$$

où $\mathbf{1}$ est la matrice unité. On peut dès lors réécrire le problème aux valeurs propres (2.27) de la manière suivante :

$$\tilde{H} \tilde{\Psi} = E \tilde{\Psi}, \quad (2.44)$$

où

$$\tilde{H} = D^t H D, \quad \tilde{\Psi} = D^{-1} \Psi. \quad (2.45)$$

$\tilde{H}$ est une matrice carrée de taille p et $\tilde{\Psi}$ un vecteur de même taille. En diagonalisant $\tilde{H}$ par les techniques standards, on obtient les valeurs propres et les vecteurs propres du système à deux électrons. Par une simple transformation $\Psi = D \tilde{\Psi}$, on détermine les composantes des vecteurs propres sur la base sturmienne initiale. Cependant, le nombre de valeurs et vecteurs propres de la matrice de recouvrement, qui sont éliminés, peut parfois être très grand (environ 10% du nombre total). Au lieu d'éliminer certains vecteurs propres, nous ajoutons à la matrice S initiale une matrice diagonale R dont les éléments sont aléatoires et très petits (de l'ordre de 10^{-13} ou 10^{-14} , ce qui correspond à peu près à la précision de la machine quand on travaille en double précision). On obtient alors

$$S' = S + R. \quad (2.46)$$

On diagonalise ensuite cette nouvelle matrice de recouvrement S' et on utilise ses vecteurs propres pour régénérer la nouvelle base et calculer la nouvelle matrice $\tilde{H}$. Il faut signaler que les vecteurs propres de S' diffèrent très peu de ceux de S : en utilisant le théorème de Wielandt-Hoffman [56], Li et Shakeshaft [57] ont montré que si le plus grand des éléments de la matrice diagonale R est de l'ordre de 10^{-13} , alors

$$|v'^t S v' - v^t S v| \approx 10^{-13} \sqrt{n} \quad (2.47)$$

où v' et v sont respectivement les vecteurs propres normalisés de S' et S . n est la dimension de ces vecteurs. La relation (2.47) indique clairement que la différence entre v' et v est très faible. Avec cette nouvelle procédure, aucun des vecteurs propres de S n'est rejeté ce qui améliore les résultats.

Chapitre 3

Formulation du problème de l'ionisation-excitation de l'hélium par absorption de deux photons

3.1 Introduction

L'ionisation de l'atome d'hélium par impact d'un photon a fait l'objet de beaucoup d'investigations tant sur le plan théorique qu'expérimental. Par contre, l'ionisation multiphotonique dans le domaine XUV de l'hélium a reçu moins d'attention et ceci est dû aux difficultés théoriques et expérimentales qui en découlent. Sur le plan théorique et même dans le cas à 1-photon, la difficulté majeure provient de la non connaissance du comportement asymptotique exact de la fonction d'onde du double continuum. Sur le plan expérimental, c'est le caractère non linéaire de la transition qui pose problème. En effet, il est nécessaire de travailler avec des sources de radiation XUV d'intensité suffisamment élevée. Actuellement, les seules sources disponibles sont les lasers à électrons libres [58] et la génération d'harmoniques d'ordre élevé [59]. Toutefois, dans les deux cas, les profils spatial et temporel des impulsions ne sont pas bien connus. Il faut noter que la non linéarité de la transition implique une grande sensibilité des résultats aux fluctuations en énergie des impulsions. Une discussion des problèmes expérimentaux liés à ce type de processus se trouve dans l'article d'Antoine *et al.* [60]. Il ne faut donc pas s'étonner que pour la section totale de double ionisation à deux photons,

il n'y ait pas d'accord entre les différents résultats théoriques [61]-[69]. En outre, les résultats expérimentaux ne sont pas suffisamment fiables pour pouvoir les comparer à la théorie. Dans le cas de la simple ionisation-excitation à deux photons, il n'y a pas à notre connaissance des résultats expérimentaux. Dans ce qui suit, nous donnons les expressions des fonctions d'onde initiale et finale que nous utilisons dans les **chapitres** 5 et 6 pour étudier les processus photonique et électronique dans l'hélium. Nous dérivons ensuite les expressions des amplitudes et des sections efficaces différentielles et totales pour le processus d'ionisation-excitation à N -photons. Nous achevons le chapitre en définissant les différents régimes d'ionisation à deux photons pour l'hélium.

3.2 Fonctions d'onde du système initial et final du processus ($N\gamma, e$)

Les cibles considérées dans les processus photoniques que nous étudions sont des systèmes à deux électrons plus précisément l'atome d'hélium et l'ion H^- .

3.2.1 Fonction d'onde de la cible d'hélium

Dans la plupart de nos investigations, nous considérons que la cible d'hélium se trouve initialement dans son état fondamental c'est-à-dire son état de plus basse énergie. Elle correspond donc à un spin total minimal $S_i = 0$ et un moment angulaire total $L_i = 0$. Ainsi, les projections de spin et de moment sont alors $M_{S_i} = 0$ et $M_i = 0$ respectivement. Pour décrire cet état, nous faisons appel à une méthode spectrale [7] qui est largement détaillée dans le **chapitre** 2. La partie spatiale de la fonction d'onde correspondante est développée sur la base sturmienne et donnée par

$$\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \alpha_{n_2 n_3}^{l_2 l_3} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3} \mathcal{A} \left(\frac{S_{n_2 l_2}^\kappa(r_2)}{r_2} \Lambda_{l_2 l_2}^{L_i M_i}(\hat{r}_2, \hat{r}_3) \frac{S_{n_3 l_3}^k(r_3)}{r_3} \right), \quad (3.1)$$

où les différents symboles sont définis dans le **chapitre** 2. Notons que l'énergie du fondamental de l'hélium est limitée ici à 5 chiffres significatifs pour les tailles de base choisies ici parce que la condition de Kato (discontinuité de la fonction d'onde suite à la divergence du terme en $1/r_{12}$)

TABLE 3.1 – *Energie de l'état fondamental de l'hélium en fonction du paramètre non linéaire κ pour $n_{\max} = 30$ sturmiennes par électron, $l_{\max} = 6$.*

κ	$-R_e(E)(u.a.)$
1.2	2.903566
1.5	2.903603
1.8	2.9036218

n'est pas vérifiée par la relation (3.1). Pour 30 sturmiennes par électron, 4 couples de moments angulaires et pour un seul couple de paramètres non linéaires ($\kappa = k = 2$), l'énergie du fondamental de l'hélium obtenue par notre approche spectrale vaut $E_{He} = -2.90331321$ *u.a.* laquelle représente 99.9858% de la valeur expérimentale qui est de -2.90378 *u.a.*. Notons que nos résultats sont moins précis que ceux obtenus par Drake [70] qui est de -2.9037243770341195 *u.a.*, mais ils sont assez précis pour être utilisés dans les calculs des sections efficaces des processus d'ionisation par impact photonique ou électronique.

3.2.2 Fonction d'onde de la cible d'ion H^-

L'ion H^- tout comme l'atome d'hélium possède deux électrons actifs. La différence entre ces deux systèmes se situe au niveau de la charge du noyau qui vaut $Z = 1$ pour l'ion et $Z = 2$ pour l'atome. La fonction d'onde décrivant le fondamental de l'ion H^- est aussi générée à l'aide de la même méthode spectrale et donnée par la relation (3.1). Analysons l'influence des nombres quantiques principal n et orbital l sur l'énergie du fondamental de l'ion H^- dans ce cas. Rappelons que ces deux nombres quantiques décrivent respectivement la partie radiale et la partie angulaire de la fonction d'onde. Quand le nombre de moments angulaires est élevé, la corrélation électronique est mieux décrite entraînant ainsi une meilleure description de l'état fondamental. Dans la table 7.1, nous analysons l'influence du nombre de moments angulaires individuels des électrons et du nombre de sturmiennes par électron et par paire (λ, l) de moments angulaires. On voit bien que quand n croît, la valeur de l'énergie

devient plus précise. Mais la convergence n'est pas toujours très bonne car la fonction d'onde de H^- présente aussi (comme He) une dérivée première discontinue lors de la coalescence des deux électrons. Notre résultat

TABLE 3.2 – *Energie de l'état fondamental de l'ion H^- en fonction du nombre de sturmiennes et du maximum du moment angulaire utilisé l_{max} pour $\kappa = 1$.*

l_{max}	n_{max}	$-R_e(E)(u.a.)$
4	40	0.52766865600
6	35	0.52771137706
7	25	0.52772071186
8	25	0.52772271335
9	25	0.52772354350

de l'énergie du fondamental de H^- de la table **7.1** est comparé à celui plus précis obtenu par Drake [70] qui est $E_{H^-} = -0.527751016544377 u.a.$. Il est clair que notre résultat est moins précis que celui de Drake.

3.2.3 Fonction d'onde de l'état final

Dans cette section, nous présentons deux fonctions d'onde qui décrivent un électron qui s'éloigne dans le champ du système résiduel (He^+ pour He et H pour H^-). Nous commençons par le produit symétrisé d'une fonction coulombienne et d'une fonction liée noté PSCB, ensuite nous enchaînons avec une fonction d'onde, solution de l'équation de Lippmann-Schwinger notée LSWF, et qui tient compte de la corrélation électronique.

Fonction d'onde PSCB

Une façon d'aborder le problème de la fonction d'onde décrivant le système final $\{e^-(\vec{k}_e) + He^+\}$ est de considérer le cas où l'électron éjecté se trouve très éloigné de l'électron lié. Ainsi dans le modèle de la charge effective, l'électron qui se trouve dans le continuum "voit" le noyau avec une charge $\tilde{Z} = Z - 1$. Cet électron peut être décrit par une fonction coulombienne. Quant à l'électron lié, il est décrit par une fonction d'onde liée ϕ_{bound} . La fonction d'onde totale de ce système est le produit symétrisé

de ces deux fonctions

$$\Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \mathcal{A} \left(\phi_{bound}(\vec{r}_2) \psi_{\vec{k}_3, c}^{(-)}(\vec{r}_3) \right). \quad (3.2)$$

En général, l'état lié du système résiduel après éjection de l'électron est décrit comme suit

$$\phi_{bound}(\vec{r}) = \sum_{\nu=\lambda+1}^{\nu_{>}} a_{\nu\lambda} \frac{S_{\nu\lambda}^{\kappa}(r)}{r} Y_{\lambda\mu}(\hat{r}) \quad (3.3)$$

où $Y_{\lambda\mu}(\hat{r})$ est l'harmonique sphérique décrivant la partie angulaire de l'électron lié. Notons qu'en choisissant $\kappa = Z/\nu$ avec $\nu = 1$, $\lambda = 0$ et $\mu = 0$, ce développement se réduit à un seul terme, la fonction sturmienne S_{10}^{κ} coïncidant avec la fonction hydrogénoïde.

La fonction coulombienne avec un comportement asymptotique d'onde sortante et développée en ondes partielles s'écrit

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) &= \frac{\exp(-\pi\alpha/2)}{(2\pi)^{3/2}} \Gamma(1+\alpha) e^{ikz} {}_1F_1(-i\alpha; 1; ik(r-z)) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\sigma_l} F_l(k/r) P_l(\cos\theta), \end{aligned} \quad (3.4)$$

avec $\alpha = -Z/k$, $\sigma_l = \arg \Gamma(l+1+i\alpha)$ et θ qui est l'angle entre les vecteurs $\vec{k}$ et $\vec{r}$. La fonction d'onde coulombienne sphérique régulière à l'origine d'ordre l est donnée par [71]

$$\begin{aligned} F_l(k/r) &= \frac{2^l e^{-\pi\alpha/2} |\Gamma(l+1+i\alpha)|}{(2l)!} (2ikr)^l e^{ikr} \\ &\times {}_1F_1(l+1+i\alpha; 2l+2; -2ikr), \end{aligned} \quad (3.5)$$

où ${}_1F_1$ est la fonction hypergéométrique confluyente [49]. Notons que $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ est normalisée sur la fonction delta en impulsion $\delta(\vec{k}' - \vec{k})$. Nous avons besoin d'une onde entrante $\psi_{\vec{k}}^{(-)}(\vec{r})$ dans le calcul des éléments de matrice du processus collisionnel. Elle se déduit directement par la relation

$$\psi_{\vec{k}}^{(-)}(\vec{r}) = \psi_{-\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})^* \quad (3.6)$$

La fonction d'onde telle qu'elle est représentée dans l'équation (3.4) n'est pas commode à utiliser dans le calcul des éléments de matrice. En effet

la fonction d'onde de l'état initial ayant été développée dans la base sturmienne, il convient également de décomposer celle de l'état final dans la même base. La fonction d'onde coulombienne régulière $F_l(k/r)$ a été développée dans la base sturmienne

$$F_l(k/r) = \sum_{n=l+1} a_{n-l-1} \sqrt{\frac{n}{\kappa}} \left\{ \frac{(n+l)}{(n-l-1)} \right\}^{1/2} S_{nl}^{\kappa}(r), \quad (3.7)$$

avec le coefficient de développement qui est donné par

$$a_{n-l-1} = \frac{2^l |\Gamma(l+1+i\alpha)|}{\Gamma(2l+2)} e^{-(\pi/2+\epsilon\pi)\alpha} e^{-\theta\alpha} (\sin\theta)^{l+1} e^{-i(n-l-1)\theta} \\ \times {}_2F_1(l+1-n; l+1+i\alpha; 2l+2; 1-e^{2i\theta}), \quad (3.8)$$

Les détails sur la décomposition de cette fonction coulombienne sphérique régulière sur la base sturmienne est donnée dans les articles de Yamani *et al.* [71] et dans la thèse de Fomouo [8]. On retient que la fonction d'onde coulombienne régulière décomposée sur la base sturmienne et décrivant l'électron du continuum est donnée par

$$\psi_{\vec{k},c}^{(-)}(\vec{r}) = \sum_{l,n,m} b_{n,l}(k) \frac{S_{n,l}^{\kappa}(r)}{r} y_{l,m}(\hat{r}) y_{l,m}(\hat{k}), \quad (3.9)$$

avec

$$b_{n,l}^{\kappa}(k) = 2^{\lambda} \frac{(n-l-1)! |\Gamma(l+1-i\eta)|}{\Gamma(n+l+1)} \exp\left(\frac{\pi}{2} + \epsilon\pi\right) \exp(\theta\eta) \\ \times (\sin(\theta))^{l+1} P_{n-l-1}^{l+1}\left(\cos(\theta), \frac{z}{\kappa}, -\frac{z}{\kappa}\right), \quad (3.10)$$

et

$$\epsilon = \begin{cases} -1 & \text{si } \theta \in [0, \pi] \\ 1 & \text{si } \theta \in [0, -\pi] \end{cases}, \quad \sin(\theta) = \frac{\eta}{\eta^2 + 1/4}, \quad \cos(\theta) = \frac{\eta^2 - 1/4}{\eta^2 + 1/4}, \quad (3.11)$$

et

$$\eta = \frac{k}{2\kappa}, \quad \theta = \arctan\left(\frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}\right), \quad (3.12)$$

où $P_{n-l-1}^{l+1}\left(\cos\theta, \frac{z}{\kappa}, -\frac{z}{\kappa}\right)$ sont les polynômes de Pollaczek. Revenons à la PSCB donnée par la relation (3.2). En utilisant la relation suivante

$$y_{\lambda,\mu}(\hat{r}_2) y_{l,m}(\hat{r}_3) = \sum_{L_f M_f} C_{\lambda\mu l m}^{L_f M_f} \Lambda_{\lambda l}^{L_f M_f}(\hat{r}_2, \hat{r}_3), \quad (3.13)$$

on montre facilement que la PSCB peut être mise sous la forme finale

$$\Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \sum_{L_f M_f} \sum_{\lambda l} \sum_{\nu n} \sum_{\mu m} a_{\nu\lambda} b_{n,l}(k) \mathcal{C}_{\lambda\nu lm}^{L_f M_f} F_{\nu n}^{\lambda L_f M_f}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) y_{lm}^*(\hat{k}) \quad (3.14)$$

où la fonction $F_{\nu n}^{\lambda L_f M_f}(\vec{r}_2, \vec{r}_3)$ est donnée par la relation (2.16) et $\mathcal{C}_{\lambda\nu lm}^{L_f M_f}$ est le coefficient du Clebsh Gordan [52, 27].

Fonction d'onde LSWF

Soit H_a le hamiltonien du système atomique à deux électrons donné par

$$H_a = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (3.15)$$

Il est commode à ce stade de décomposer le hamiltonien de la manière suivante $H_a = H_0 + W$ avec

$$H_0 = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z-1}{r_2}, \quad (3.16)$$

et

$$W = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2}. \quad (3.17)$$

On peut montrer facilement que la perturbation W se comporte en $1/r_2^2$ lorsque $r_2 \rightarrow \infty$. Si nous négligeons le terme W dans le hamiltonien, l'état final qui nous intéresse devient solution du hamiltonien H_0 . Il peut s'écrire comme le produit tensoriel direct $|\phi_{\lambda'}\rangle \otimes |\psi_{\nu',\epsilon}\rangle$ d'une fonction coulombienne $\psi_{\nu',\epsilon}$ et d'une fonction liée $\phi_{\lambda'}$ convenablement symétrisée. Cette fonction d'onde n'est rien d'autre que la PSCB qui a fait l'objet de la sous-section précédente. Introduisons la résolvante

$$G_a^\pm(E) = \frac{1}{E - H_a \pm i\eta}, \quad \eta \rightarrow 0^+. \quad (3.18)$$

La description complète de l'état final peut alors se faire au moyen de l'équation de Lippmann-Schwinger

$$|\Psi_f^-\rangle = \mathcal{P} (1 + G_a^-(E)W) \{|\phi_{\lambda'}\rangle \otimes |\psi_{\nu',\epsilon}\rangle\} \quad (3.19)$$

où $\mathcal{P}$ est le symétriseur. De plus, signalons que la LSWF est exacte et n'est valide que pour des perturbations W décroissant plus vite que le potentiel coulombien lorsque $r \rightarrow \infty$.

3.3 Dérivation des amplitudes et des sections efficaces des processus ($N\gamma, e$)

Dans le système international d'unité (SI), les opérateurs d'interaction dans l'approximation dipolaire en jauges longueur et vitesse s'écrivent respectivement

$$V(t) = e\vec{E}(t) \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2), \quad (3.20)$$

et

$$V(t) = \frac{e}{m}\vec{A}(t) \cdot (\vec{p}_1 + \vec{p}_2), \quad (3.21)$$

où $\vec{E}(t)$ et $\vec{A}(t)$ sont respectivement le champ électrique et le potentiel vecteur de la radiation laser. Les vecteurs $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$, $\vec{p}_1$ et $\vec{p}_2$ sont respectivement les vecteurs positions et moments canoniques des deux électrons. Dans le cas présent, nous considérons le cas d'un champ électrique monochromatique de fréquence ω

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \sin(\omega t). \quad (3.22)$$

Le potentiel vecteur se déduit du champ électrique par la relation

$$\vec{E}(t) = -\frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t}. \quad (3.23)$$

Si nous ne nous intéressons qu'à la jauge vitesse, l'opérateur (3.21) peut s'écrire sous la forme

$$V(t) = V_+ e^{-i\omega t} + V_- e^{i\omega t} \quad (3.24)$$

où les opérateurs V_+ et V_- sont donnés en fonction de l'opérateur

$$D_V = \vec{e}_z \cdot (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) \quad (3.25)$$

sans le facteur en champ $-eA_0/2im$ par la relation

$$V_+ = -\frac{eA_0}{2im}D_V, \quad V_- = \frac{eA_0}{2im}D_V \quad (3.26)$$

Notons que V_+ et V_- sont respectivement les opérateurs dipolaires correspondant à l'absorption et à l'émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega$. De plus, on vérifie facilement que $V_-^\dagger = V_+$. Mais avant d'effectuer la transition dipolaire, l'état du système juste après l'absorption de N photon(s) est donné par les états $|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle$ qui satisfont l'équation couplée [72]

$$\begin{cases} (E_i^{(0)} + N\hbar\omega - H_a)|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle = V_+|\mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)}\rangle \\ |\mathcal{F}_0^{(0)}\rangle = |\Psi_i\rangle \end{cases}, \quad (3.27)$$

où $|\Psi_i\rangle$ décrit le fondamental du système à deux électrons et la conservation de l'énergie au cours du processus d'ionisation à N -photon s'écrit $E_f^{(0)} = E_i^{(0)} + N\hbar\omega$. Le système final correspondant à l'ionisation est donc constitué par un électron e_1^- se trouvant dans un état lié de l'ion résiduel He^+ ou de l'atome d'hydrogène H selon la nature de la cible, et d'un électron éjecté e_2^- se trouvant dans le simple continuum. Notons que les équations (3.27) proviennent du traitement perturbatif dans le cadre de la méthode de Floquet.

Suite à l'absorption de N photon(s), le taux d'ionisation dans la théorie des perturbations (en unités atomiques) est donné par

$$\Gamma_N = 2\pi |A_{fi}^{(N)}|^2 \delta(E_f - E_i - N\omega) \quad (3.28)$$

avec l'amplitude de transition qui est donnée par

$$A_{fi}^{(N)} = \langle \Psi_f^- | V_+ | \mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)} \rangle. \quad (3.29)$$

L'état final $|\Psi_f^- \rangle$ est décrit par les fonctions d'onde LSWF. Si dn est le nombre d'états dont le vecteur d'onde $\vec{k}_e$ pointe dans l'angle solide $d\Omega_e$ et dont l'énergie est située dans l'intervalle $[E_e, E_e + dE_e]$, alors on a

$$dn = \rho(E_e) dE_e d\Omega_e = k_e^2 dk_e d\Omega_e, \quad (3.30)$$

avec la densité d'états $\rho(E_e) = k_e^2 dk_e / dE_e$. Le taux c'est-à-dire la probabilité de transition par unité de temps pour une particule émergente dans un angle solide $d\Omega_e$ est donnée par

$$dW = \Gamma_N dn = 2\pi |A_{fi}^{(N)}|^2 \delta(E_f - E_i - N\omega) k_e^2 dk_e d\Omega_e. \quad (3.31)$$

L'intensité de la radiation laser décrite par le champ électrique $\vec{E}$ et le potentiel vecteur $\vec{A}$ est donnée par

$$I = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c E_0^2 = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \omega^2 A_0^2 \quad (3.32)$$

Le flux de photons incidents est égal à l'intensité de la radiation laser divisée par l'énergie d'un photon

$$\phi_i = \frac{I}{\hbar\omega}. \quad (3.33)$$

En unités atomiques, on a $4\pi\varepsilon_0 = 1$. Le passage des unités SI aux unités atomiques permet d'avoir l'expression de la section efficace différentielle double

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega_e} = \frac{(4\pi)^2 k_e}{c\omega A_0^2} |A_{fi}^{(N)}|^2 \delta(E_f - E_i - N\omega). \quad (3.34)$$

Introduisons la fonction de réponse $|\chi_N\rangle$ sans les facteurs du champ

$$(E_i^{(0)} + N\omega - H_a)|\chi_N\rangle = D_V|\chi_{N-1}\rangle, \quad (3.35)$$

qui est tel que

$$A_{fi}^{(N)} = - \left(\frac{A_0}{2} \right)^N \langle \Psi_f^- | D_V | \chi_{N-1} \rangle, \quad (3.36)$$

on montre facilement que le taux d'ionisation Γ_N à N -photon d'un système à deux électrons est proportionnel à la puissance N^{ieme} de l'intensité du champ laser associé aux photons

$$\frac{\Gamma_N}{I^N} = \frac{2 \times 2^N \pi^{N+1}}{c^N \omega^{2N}} |\langle \Psi_f^- | D_V | \chi_{N-1} \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - N\omega). \quad (3.37)$$

Une fois la voie d'ionisation fixée, la relation de conservation de l'énergie permet de donner le jeu des valeurs des énergies de l'électron éjecté E_e et du photon ω

$$\omega = \frac{1}{N}(E_{He^+} - E_{He} + E_e). \quad (3.38)$$

Le lien entre le taux de transition et la section efficace généralisée σ_N est donnée par la relation

$$\Gamma_N = \sigma_N \phi_i^N, \quad (3.39)$$

et c'est de cette façon que nous extrayons la section efficace généralisée du processus d'absorption à N -photon. Si le taux de transition Γ_N s'exprime en s^{-1} , l'énergie du photon en Joules et l'intensité du champ en Wcm^{-2} , alors σ_N s'exprimera en $cm^{2N}s^{N-1}$. Pour un processus à N -photon, la relation entre la section efficace généralisée en unité $cm^{2N}s^{N-1}$ et la section efficace généralisée en unités atomiques est donnée par

$$\sigma_N(cm^{2N}s^{N-1}) = (5.29177)^{2N} \times (24.1889)^{N-1} \times 10^{-36N+18} \sigma_N(u.a.). \quad (3.40)$$

3.4 Différents régimes d'ionisation de l'hélium à deux photons

Dans la réalité, les champs électriques ne sont jamais purement monochromatiques et les expériences se font avec des impulsions de durée finie. Dans ces conditions, le processus d'ionisation-excitation peut se dérouler de manière séquentielle ou directe.

3.4.1 Régime séquentiel

Par processus séquentiel, nous entendons qu'un des électrons absorbe d'abord un photon, ce qui conduit à son éjection. En présence du champ,

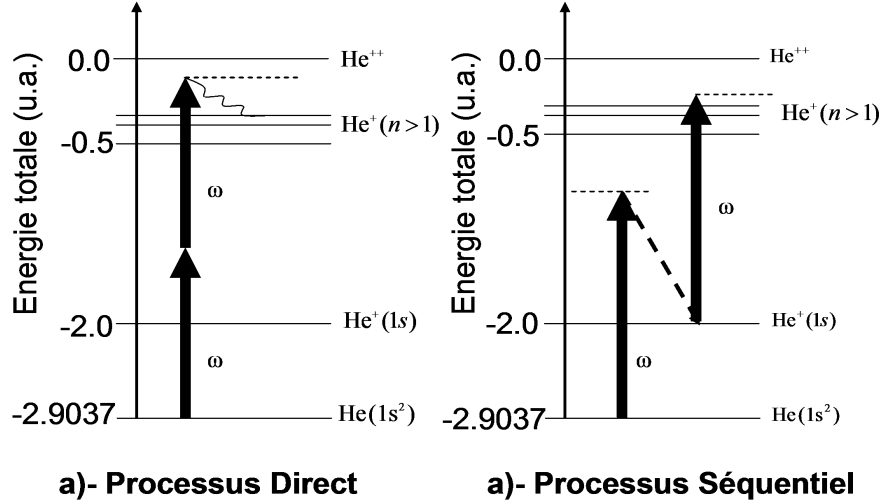


FIGURE 3.1 – Schéma des processus direct et séquentiel d'ionisation-excitation de l'hélium par absorption de deux photons.

l'ion résiduel va se relaxer sur son état fondamental et ensuite absorber le second photon, donnant lieu à un état excité de l'ion résiduel He^+ . Nous pouvons donc voir le processus séquentiel comme une ionisation simple de la cible suivie d'une excitation de l'ion résiduel. Dans ce cas, la probabilité d'ionisation-excitation est donnée par le produit des probabilités de ces transitions (ionisation simple de He et excitation de $\text{He}^+(1s)$). Si nous supposons restés dans le régime des très basses intensités, la probabilité du processus $(2\gamma, e)$ avec excitation est donc au moins proportionnelle au carré de la durée d'interaction. Ceci exclut toute définition de la section efficace généralisée. Comme souligné par Lambropoulos [73], les seules données quantitatives que l'on peut obtenir sur les probabilités d'ionisation-excitation dans le domaine séquentiel découlent de la résolution des équations de taux. En outre, on s'attend dans ce cas, à ce que les corrélations électroniques ne jouent aucun rôle [4]. Notons enfin que l'ionisation-excitation séquentielle n'est possible que si l'énergie des photons est supérieure au premier seuil d'excitation de He^+ soit 1.5 u.a. . Pour des énergies de photon supérieures à 1.5 u.a. , les canaux liés aux

résonances de coeur sont ouverts. La relation de conservation de l'énergie pour les deux processus indépendants est

$$E_e = E_{He} - E_{He^+(1s)} + \omega, \quad E_{He^+(1s)} + \omega = E_{He^+(n \geq 2)}. \quad (3.41)$$

Passons à présent au second régime c'est-à-dire le régime direct.

3.4.2 Régime direct

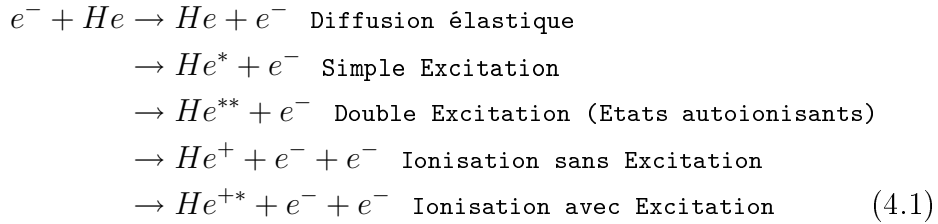
Dans le régime direct, on suppose que la transition se fait pendant un temps plus court que le temps de relaxation. On peut alors envisager trois processus. Dans le premier, un électron absorbe les deux photons, l'ion résiduel restant dans l'état fondamental. Il s'agit du processus ATI (Above Threshold Ionization). Dans le second, on suppose qu'après l'absorption des deux photons par un des électrons, l'ion résiduel se retrouve dans un état excité. Dans le troisième processus enfin, chaque électron absorbe un photon, avec excitation de l'ion résiduel. La probabilité d'un processus direct est proportionnelle au temps d'interaction. Dès lors, contrairement au processus séquentiel, le taux correspondant devient indépendant du temps et il est licite de définir une section efficace généralisée à l'aide d'un calcul perturbatif indépendant du temps. La question que nous discutons dans ce travail concerne le rôle des résonances de coeur lors du processus d'ionisation-excitation de l'hélium dans le régime $1.5 \leq \omega(u.a.) \leq 2.0$ où la double ionisation à deux photons de l'hélium est directe : ces résonances apparaissent-elles dans la section efficace totale ? Cette question mérite d'être posée car la connaissance des taux d'ionisation-excitation est cruciale lorsqu'il s'agit d'extraire les sections efficaces de double ionisation à deux photons des données expérimentales sur le nombre d'ion He^{++} produits. En effet, ces derniers peuvent provenir des transitions séquentielles à trois photons impliquant le processus d'ionisation-excitation direct à deux photons.

Chapitre 4

Formulation du problème de l'ionisation-excitation de l'hélium par impact d'électron

4.1 Introduction

Considérons un faisceau incident d'électrons énergétiques qui entre en collision avec une cible d'atome d'hélium. Selon la gamme d'énergie de ces électrons incidents, plusieurs processus peuvent avoir lieu.



Dans le cas de la double excitation, le système final peut se retrouver dans des états résonnants qui sont des états autoionisants. Nous entendons par simple ionisation sans (avec) excitation d'un atome, un processus au cours duquel suite à l'impact électronique, l'atome est ionisé pendant que simultanément l'ion résiduel se retrouve soit dans son état fondamental ou dans un état excité. Les expériences concernant ces réactions dans l'hélium se sont limitées pendant très longtemps à l'analyse de la dépendance en énergie des sections efficaces totales [74]. L'étude systématique des processus $(e, 2e)$ ne débuta qu'en 1969 par les premières mesures de sections efficaces différentielles triples d'ionisation de l'hélium

réalisées par Ehrhardt *et al.* [75]. Ces auteurs se sont intéressés plus particulièrement à la distribution angulaire des électrons éjectés de faibles énergies en considérant des cinématiques coplanaires caractérisées par de petits transferts d'impulsion. De telles sections efficaces sont très sensibles à la dynamique collisionnelle et constituent des tests très sévères des différents modèles théoriques.

Les mesures de sections efficaces différentielles triples du processus ($e, 2e$) se divisent en trois classes : premièrement les mesures qui consistent à sonder la structure de la cible (McCarthy *et al.* [76], Dixon *et al.* [77], Cook *et al.* [78], Smith *et al.* [79], Dupré *et al.* [19], Lahmam-Bennani *et al.* [80], Zheng *et al.* [81]). Dans ce cas, l'énergie incidente des électrons est très élevée et les deux électrons sortants partagent la même énergie. Deuxièmement celles de Lahmam-Bennani *et al.* [80], de Stefani *et al.* [20] et Murray et Read [82] qui sont basées sur l'étude de la dynamique collisionnelle. Enfin, celles très récentes de Bellm *et al.* [22, 23] qui consistent à mesurer le rapport des sections efficaces différentielles triples des différents niveaux avec le niveau $n = 1$ comme référence. Les deux premières classes n'ont traité que l'ionisation avec excitation dans lequel l'ion résiduel He^+ se trouve dans les états dégénérés $n = 2$ c'est-à-dire les états $2s$ et $2p$. La distinction de ces deux états fait appel à l'expérience ($e, 2e + \gamma$) qui est plus complexe et dans laquelle le photon issu de la déexcitation radiative du niveau $\text{He}^+(2p)$ est détecté en coïncidence avec les deux électrons émergents (Robaux *et al.* [83], Dupré *et al.* [19]). Néanmoins, certains progrès visant cet objectif ont été faits par Hayes et Williams [84] qui ont mesuré la section efficace différentielle double pour l'ionisation avec excitation $\text{He}^+(2p)$ dans laquelle l'énergie et l'angle de l'électron diffusé sont fixés, l'énergie de l'électron éjecté pouvant être déduite de la relation de conservation de l'énergie, en supposant que les cascades radiatives vers les états $\text{He}^+(2p)$ sont négligeables.

Les mesures de Stefani *et al.* [20] ont été faites pour des énergies de 1500 et 570 eV pour l'électron diffusé, et 10, 20 et 40 eV pour l'électron éjecté. Les données expérimentales de Dupré *et al.* [19] sont pour une énergie d'impact plus élevée et l'ion résiduel peut rester dans des états $n = 2, 3, 4$. Ici, l'électron est diffusé avec une énergie de 5500 eV et l'électron est éjecté avec des énergies de 5, 10 et 75 eV. Dans ces deux expériences, la géométrie est coplanaire et les énergies des électrons incident et diffusé sont élevées et supérieures à l'énergie de l'électron éjecté. Ces réactions sont donc caractérisées par de faibles transferts d'impulsion et donc par de grands paramètres d'impact. Ceci signifie que les

effets d'échange (entre électron incident et électrons de la cible) sont négligeables. Par ailleurs, le transfert d'énergie de l'électron incident vers la cible est tel que certains canaux impliquant un état final doublement excité sont ouverts. A de telles hautes énergies d'impact, il est naturel de considérer un traitement perturbatif et c'est l'approche que nous adoptons dans ce travail. Il existe plusieurs études théoriques qui ont été faites sur la réaction $(e, 2e)$ de l'ionisation-excitation $\text{He}^+(n = 2)$. La plupart des calculs ont été menés dans le cadre de l'approximation de Born (Robaux *et al.* [83], Dupré *et al.* [19], Tweed *et al.* [85], Kheifets *et al.* [86], Knyr *et al.* [87], Nath *et al.* [88]) ou bien dans l'approximation de Born "modifiée" (Robaux *et al.* [89], Tweed *et al.* [85]). Aucune de ces théories n'est en excellent accord avec les expériences de Dupré *et al.* [19] et de Stefani *et al.* [20]. A notre connaissance, il n'y a que très peu de travaux qui vont au delà de la première approximation de Born. Il s'agit des travaux du second Born qui ont été faits moyennant certaines approximations. Nous pouvons citer entre autres les travaux de Saxena *et al.* [90], Franz et Altick [91, 92, 93], Marchalant *et al.* [94], Bartschat [15], Chen [14]. Quant aux deux expériences de Bellm *et al.* [22, 23], elles ont été motivées par le fait que la plupart des expériences existantes souffrent d'au moins un des problèmes suivants : (i) toutes les données mesurées sont relatives, (ii) le ratio signal-bruit de fond est faible c'est-à-dire que les barres d'erreurs statistiques sont importantes, (iii) l'énergie de l'électron le plus lent parmi les deux électrons émergents est souvent choisie entre 5 et 10 eV ; ce qui pose problème puisque les effets de résonance associés aux niveaux $n = 3$ et $n = 4$ des états doublement excités de l'hélium font que la comparaison entre la théorie et l'expérience est très difficile à réaliser. Ainsi, pour résoudre tous ces problèmes cités ci-dessus, Bellm *et al.* ont mesuré plutôt le rapport des sections efficaces de différents états de l'ion avec l'état $n = 1$ comme référence. Mais ici, les énergies incidentes considérées $E_i < 320$ eV sont relativement faibles comparativement à celles des expériences de Dupré *et al.* et de Stefani *et al.*. De plus, la géométrie considérée est coplanaire avec une cinématique qui est soit asymétrique ou soit symétrique. La validation de cette expérience a été faite jusqu'à présent par les seuls calculs théoriques de la méthode "R matrix pseudo states" du premier Born (DWB1-RMPS) et du second Born (DWB2-RMPS) de Barstchat *et al.* [15]. En terme d'accord, il faut noter que globalement l'accord est loin d'être parfait bien que le second Born soit plus proche de l'expérience que le premier quand on utilise comme référence, pour le rapport, les résultats de l'ionisation

sans excitation obtenus à partir de la méthode "Close Coupling Convergence" (CCC).

Dans ce chapitre, nous rappelons d'abord les lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion au cours de la collision. Ensuite, nous présentons brièvement la cinématique de la réaction $(e, 2e)$ dans une géométrie coplanaire. Nous passons ensuite à la génération des fonctions d'onde initiale et finale utilisées pour décrire le processus $(e, 2e)$. Enfin, nous terminons par une dérivation des expressions des sections efficaces différentielles triples telle que faite dans le **chapitre 3**.

4.2 Lois de conservation

Supposons le noyau de la cible atomique d'hélium initialement au repos dans le référentiel du laboratoire. Ce dernier diffère peu du référentiel du centre de masse dans la mesure où le noyau de la cible est beaucoup plus lourd que les électrons. Si on envoie sur cette cible, dans l'état $|\phi_i\rangle$ un électron d'énergie E_i supérieure au premier seuil de simple ionisation, les voies de la simple ionisation avec ou sans excitation sont ouvertes : de la zone de collision, émergeront deux électrons e_1 et e_3 d'énergies respectives E_f et E_e . Même s'il n'est pas licite de distinguer ces deux électrons, il est commode d'appeler l'électron 1 celui qui est diffusé avec une énergie E_f et l'électron 3 celui qui est éjecté avec une énergie $E_e < E_f$. L'ion résiduel reste alors dans l'état quantique $|\phi_f^{ion}\rangle$. Ce processus de réarrangement se réalise en respectant les deux contraintes suivantes :

4.2.1 Conservation de l'impulsion

Dans le référentiel du laboratoire, si $\vec{k}_i$, $\vec{k}_f$ et $\vec{k}_e$ sont respectivement les impulsions des électrons incident, diffusé et éjecté, la conservation de l'impulsion s'écrit :

$$\vec{k}_i = \vec{k}_f + \vec{k}_e + \vec{q}, \quad (4.2)$$

où le vecteur $\vec{q}$ est l'impulsion de l'ion de recul. Il faut remarquer que même si l'ion résiduel possède une énergie cinétique négligeable (étant donnée sa masse), il n'en va pas de même pour son impulsion. Par ailleurs, la relation vectorielle (4.2) n'impose pas que les trajectoires des électrons incident et émergents soient coplanaires.

4.2.2 Conservation de l'énergie

Si W_i est l'énergie interne de l'He dans l'état $|\phi_i\rangle$ et si E_n est l'énergie de l'ion résiduel dans l'état $|\phi_i^{ion}\rangle$, T_{ion} étant son énergie cinétique, la conservation de l'énergie s'écrit dans le même référentiel

$$E_i + W_i = E_f + E_e + E_n + T_{ion}. \quad (4.3)$$

Par ailleurs, nous savons que le n-ième seuil de simple ionisation s'écrit $I_n^+ = E_n - W_i$, de sorte que la relation (4.3) se met sous la forme

$$E_i - I_n^+ = E_f + E_e + T_{ion} \approx E_f + E_e. \quad (4.4)$$

Physiquement, cette dernière relation signifie que l'excès d'énergie se redistribue entre les deux électrons sortants puisque T_{ion} est négligeable. Par conséquent, la mesure simultanée de E_i , E_f , et E_e fournit directement la valeur de I_n^+ précisant ainsi le type de réaction qui est en jeu.

4.3 Cinématique de la réaction (e, 2e) de He

On distingue les cinématiques de géométrie coplanaire et non coplanaire. L'adjectif coplanaire se réfère aux trois impulsions $\vec{k}_i$, $\vec{k}_f$ et $\vec{k}_e$. Mais suivant les valeurs des énergies des électrons émergents de la zone de collision, on distingue la cinématique asymétrique et symétrique.

Cinématique asymétrique

Dans ce cas, on envoie des électrons d'énergie E_i supérieure à 5 ou 10 fois I_n^+ sur la cible en détectant en coïncidence un électron E_f proche de E_i et un électron d'énergie E_e très faible. L'angle diffusé θ_f fixé doit être inférieur à 20° tandis que l'angle d'éjection θ_3 est variable ($0 \leq \theta_3 \leq \pi$ si $\phi_3 = 0$ et $180 \leq \theta_3 \leq 2\pi$ si $\phi_3 = \pi$). Ce régime cinématique est caractérisé par de faibles transferts d'impulsion K . La figure (10.1) nous donne le schéma représentant la géométrie coplanaire et asymétrique du processus (e,2e).

Cinématique symétrique

Si les énergies des deux électrons sortant de la zone de collision deviennent identiques, alors ces deux électrons deviennent "indiscernables"

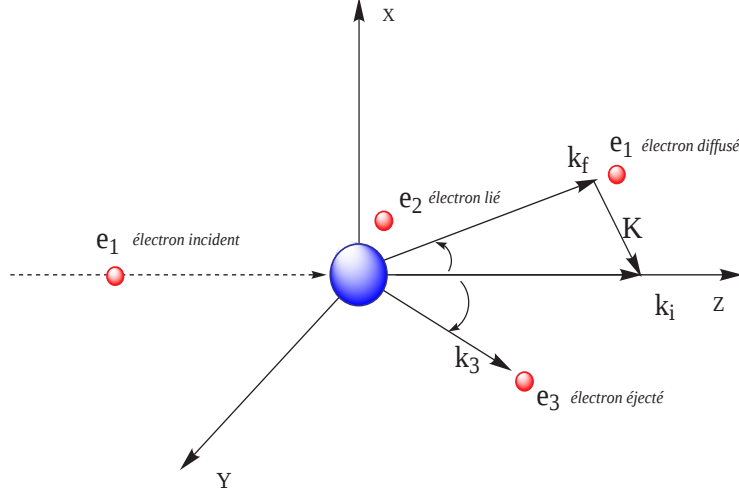


FIGURE 4.1 – Cinématique coplanaire asymétrique de la réaction $(e, 2e)$ de l'hélium. Les vecteurs impulsions $\vec{k}_i$, $\vec{k}_f$ et $\vec{k}_3 \equiv \vec{k}_e$ sont dans le plan (xoz) .

et le terme d'échange n'est plus négligeable. En ce moment, il est commode de choisir une géométrie dans laquelle les deux électrons sortants sont détectés en coïncidence suivant des angles égaux ($\theta_f = \theta_3$) et avec des énergies égales ($E_f = E_e$). Dans ces conditions, le grand transfert d'impulsion conduit à une collision à petit paramètre d'impact.

4.4 Fonctions d'onde initiale et finale du système collisionnel

Dans cette section, il est question de donner les expressions des fonctions d'onde utilisées pour décrire les états initial et final du système collisionnel. Pour la cible d'hélium, plusieurs approches théoriques permettent de reproduire le fondamental avec une certaine précision parmi lesquelles les fonctions d'Hylleraas [33], celle de Byron et Joachain (BYWF) [95], celle de Tweed et Langlois [96], celle fortement corrélée issue d'une méthode spectrale de *Galerkin* de type IC (ICWF) donnée par la relation (3.1), etc. Dans ce travail, nous considérons que l'état initial de l'hélium est décrit soit par le BYWF, soit par le ICWF. Quant à l'état final de la cible, nous supposons qu'il est décrit soit par le PSCB, soit par la fonction d'onde de diffusion multicanaux décrivant le simple continuum du

système $\{e^- + He^+\}$ générée à l'aide de la méthode la matrice de Jacobi (SCWF). Comme le PSCB et le ICWF ont été développés dans le **chapitre 3**, cette section est donc réservée à la dérivation de la BYWF et du SCWF.

4.4.1 Etat initial du système collisionnel

Pour décrire le système collisionnel, nous nous restreignons au cas où l'énergie de l'électron incident est très grande. Dans ces conditions, on peut considérer que l'électron incident "rapide" se distingue des deux électrons atomiques. Ainsi, la fonction d'onde qui décrit ce système à trois électrons est donnée par

$$\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1) \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3), \quad (4.5)$$

où les indices 1, 2 et 3 se rapportent respectivement aux électrons incident et de la cible. L'onde plane dans la relation (4.5) décrit le mouvement du projectile d'impulsion $\vec{k}_i$ car nous négligeons les effets de distorsion coulombienne entre le projectile et le noyau de la cible (grand paramètre d'impact). La fonction $\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3)$ est la fonction d'onde décrivant la cible.

Fonction d'onde de Byron et Joachain (BYWF)

La fonction d'onde de Byron et Joachain [9] est un simple fit analytique de la fonction de Hartree-Fock décrivant l'état fondamental de l'atome d'hélium. Elle est analytique et est donnée par

$$\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \phi_0(\vec{r}_2) \phi_0(\vec{r}_3), \quad (4.6)$$

avec

$$\phi_0(\vec{r}) = (A \exp(-\alpha r) + B \exp(-\beta r)) Y_{00}(\hat{r}), \quad (4.7)$$

où $A = 2.60505$, $B = 2.08144$, $\alpha = 1.41$ et $\beta = 2.61$. Avec cette fonction d'onde, on obtient pour le fondamental de l'hélium défini par $L = 0$ et $M = 0$, une énergie de $E_{He} \simeq -2.86 \text{ u.a.}$ dont un seul couple de moment angulaire $(l_2, l_3) = (0, 0)$ contribue. Elle représente environ 96,4278% de la valeur expérimentale. La décomposition de la fonction de Byron et Joachain sur la base sturmienne nous donne pour un seul paramètre non linéaire ($\kappa = 2$)

$$\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \sum_{n_2 n_3} \alpha_{n_2 n_3}^{00} a_{n_2 n_3}^{00} \mathcal{A} \frac{S_{n_3 0}^\kappa(r_3)}{r_3} y_{00}(\hat{r}_3) y_{00}(\hat{r}_2) \frac{S_{n_2 0}^\kappa(r_2)}{r_2}. \quad (4.8)$$

L'information dans cette fonction d'onde est à présent renvoyée dans les coefficients de développement $a_{n_2 n_3}^{00}$ qui sont inconnus. En utilisant la relation d'orthogonalité des sturmiennes par rapport à la fonction poids $1/r$, on obtient facilement

$$a_{n_2 n_3}^{00} = \frac{\sqrt{2}}{\kappa^2} n_2 n_3 I_{n_2} I_{n_3} \quad \text{si } n_2 < n_3, \quad (4.9)$$

$$a_{n_2 n_3}^{00} = \frac{n_2^2}{\kappa^2} I_{n_2}^2 \quad \text{si } n_2 = n_3, \quad (4.10)$$

avec $I_n = \int_0^\infty dr S_{n0}^\kappa(r) \phi_0(r)$. Sachant que $S_{n0}^\kappa(r) = \exp(-\kappa r) T_{n0}^\kappa(r)$ et en utilisant la quadrature de Laguerre-Gauss [49], on trouve que

$$I_n = A \sum_{i=1}^N \tilde{\omega}_i T_{n0}^\kappa(\tilde{x}_i) + B \sum_{i=1}^N \bar{\omega}_i T_{n0}^\kappa(\bar{x}_i), \quad (4.11)$$

où $\tilde{\omega}_i = \omega/(\alpha + \kappa)$, $\tilde{x}_i = x/(\alpha + \kappa)$, $\bar{\omega}_i = \omega/(\beta + \kappa)$, $\bar{x}_i = x/(\beta + \kappa)$. Des tests numériques ont été faits pour s'assurer que ces coefficients sont bien calculés. Le fait que cette fonction d'onde soit à la fois analytique et numérique est d'une utilité extrême car il nous permet de réaliser plusieurs tests de validation du code du premier Born (voir **annexe D.3**).

4.4.2 Etat final du système collisionnel

Si nous supposons que le projectile a été très peu perturbé (approximation de Born), alors il est licite de discerner l'électron diffusé des électrons éjecté et lié. Ainsi, tout comme dans l'état initial, la fonction d'onde du système dans l'état final s'écrit

$$\Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1) \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3), \quad (4.12)$$

où l'électron diffusé est décrit aussi par une onde plane. Dans la suite, nous décrivons le système $\{e^- + He^+\}$ par la fonction d'onde de diffusion multicanaux obtenue à l'aide de la méthode de la matrice de Jacobi.

Fonction d'onde du simple continuum (SCWF) générée par la méthode de la matrice J

En résolvant le problème aux valeurs propres généralisé (2.22), on obtient les états liés et des états du continuum. Comme on utilise une base finie de fonctions de carré sommable, ces états ne sont pas en réalité

de vrais états du continuum mais des *pseudoétats* normalisés à 1, représentant le continuum dans un espace fini. Ces états sont en réalité, des combinaisons linéaires des vrais états du continuum. Les valeurs propres inférieures au premier seuil de simple ionisation $E \leq -2 \text{ u.a.}$ sont attribuées aux états liés. Pour des valeurs propres comprises entre -2 u.a. et 0 u.a. , les *pseudoétats* qui leur sont associés appartiennent au simple continuum. Par contre au dessus de 0 u.a. , il est impossible de dire si le *pseudoétat* associé est un état du simple ou bien du double continuum. En d'autres termes, chaque *pseudoétat* d'énergie $E > 0$ est nécessairement un mélange des états de simple et du double continuum, ce qui veut donc dire que simple et double continua sont enchevêtrés. En fait, chaque valeur de l'énergie totale $E > 0$ est dégénérée. Il est important de rappeler que les fonctions du simple et du double continuum diffèrent par leur comportement asymptotique qui malheureusement ne peut pas être reproduit avec une base finie. Rappelons également que les vrais états du continuum sont normalisés sur des fonctions delta soit dans l'espace des impulsions $\vec{k}$,

$$\int \psi_{c,\vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{c,\vec{k}_2}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2), \quad (4.13)$$

ou dans l'espace des énergies

$$\int \psi_{c,\vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{c,\vec{k}_2}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(\epsilon_1 - \epsilon_2) \delta(\Omega_1 - \Omega_2), \quad (4.14)$$

avec $\epsilon_i = k_i^2/2$ et $\Omega_i = (\theta_i, \phi_i)$, $i = 1, 2$. Ω_1 et Ω_2 représentent les coordonnées angulaires des deux électrons dans l'espace des impulsions. Les problèmes sus-évoqués font partie des difficultés auxquelles on doit faire face si on souhaite calculer des probabilités de simple et double ionisation suite à l'interaction du système avec un champ électromagnétique ou avec un électron. En principe, les solutions du continuum de l'équation de Schrödinger sont des fonctions de diffusion multivoies. Pour évaluer avec précision une fonction du continuum, il faut dès lors tenir compte correctement du couplage de toutes ces voies ou canaux entre eux. L'origine de ce couplage vient de l'interaction entre les deux électrons $1/r_{12}$. Supposons dans un premier temps que l'énergie du système est telle que $-2 < E < 0$. Dans ces conditions, les canaux correspondant à la double ionisation sont fermés et les fonctions d'onde qui leur sont associées décroissent exponentiellement à l'infini tandis que les fonctions d'onde associées aux canaux de simple ionisation ont un comportement asymptotique d'onde sortante. Pour générer des fonctions du simple continuum,

nous utilisons la **méthode de la Matrice de Jacobi** encore appelée **méthode de la matrice J**. Nous présentons ici uniquement les aspects essentiels de cette technique. Nous renvoyons le lecteur dans l'**annexe B** où les détails de calcul sur la méthode de la matrice J à deux et à trois régions sont présentés. Vanroose et co-auteurs ont développé une version améliorée de la technique matrice J permettant de résoudre les problèmes dans lesquels les interactions sont de longue portée [97]. Plus précisément, ils ont introduit entre la zone *interne* et la zone *asymptotique* une région intermédiaire dans laquelle les formes asymptotiques des éléments de matrice du hamiltonien sont utilisées. Cette procédure apporte des termes additionnels à la relation de récurrence à trois termes qui tiennent compte des effets du potentiel à grande distance. La méthode de la matrice J est une méthode algébrique (les coefficients des fonctions d'onde sont obtenus en résolvant un système de N équations à N inconnues) qui a été largement utilisée pour résoudre des problèmes de physique atomique et nucléaire [98, 99, 100]. Sa structure dans l'espace des fonctions est analogue à celle de la matrice R dans l'espace des configurations. Notons que dans la zone asymptotique, le potentiel est donc purement coulombien faisant que la résolution du hamiltonien libre se fasse analytiquement.

L'idée centrale de cette technique consiste à séparer l'espace des fonctions en deux zones : une zone *interne* et une zone dite *asymptotique*. Dans la zone *interne*, le hamiltonien du problème à deux corps est diagonalisé sur la base des fonctions sturmiennes donnée par la relation (2.16). Notons que dans le cadre de la méthode de la matrice J, on utilise un seul ensemble de paramètres non linéaires dans la base réelle. Dans la zone *asymptotique*, on suppose que l'électron éjecté se meut dans un potentiel "écranté". L'état final du système est équivalent à celui d'un processus de diffusion d'un électron par l'ion He^+ . Dans un processus de diffusion, l'ion résiduel peut se retrouver soit dans l'état fondamental, soit dans un état excité, ou même être ionisé. Chaque état de l'ion résiduel définit *un canal d'ionisation*. En diagonalisant le hamiltonien de l'ion résiduel sur une base de fonctions sturmiennes, on obtient des états liés et les pseudoétats du problème à un électron. La fonction d'onde dans cette zone doit être construite de manière à reproduire le comportement asymptotique correct d'une fonction de simple continuum. Pour cela, il est nécessaire de compléter la base des fonctions sturmiennes utilisées dans la zone *interne*. En clair, la fonction d'onde dans la zone *asymptotique* est développée sur les fonctions sturmiennes qui n'ont pas été utilisées dans la zone *interne*.

Compte tenu des informations précédentes, la fonction d'onde multivoies pour un canal d'ionisation Γ donné et une énergie totale E est :

$$\begin{aligned} \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \equiv \Theta_\Gamma^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E, \hat{k}_e) &= \sum_j b_{j,\Gamma}^{L,M}(E, \hat{k}_e) \Psi_j^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &+ \sum_{\Gamma'} \sum_{n'=N}^{\infty} \Phi_{n'}^{\Gamma'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) f_{n',\Gamma'}^{\Gamma}(E, \hat{k}_e), \end{aligned} \quad (4.15)$$

où les coefficients $b_{j,\Gamma}^{L,M}(E, \hat{k}_e)$ et $f_{n',\Gamma'}^{\Gamma}(E, \hat{k}_e)$ sont à déterminer. Notons que $\hat{k}_e$ est la partie angulaire de l'impulsion de l'électron éjecté. Les canaux Γ sont les canaux d'ionisation décrits par un ensemble de cinq nombres quantiques : $\Gamma = (\tilde{\nu}, \lambda, l; L, M)$. De plus, $\tilde{\nu}$ et λ sont respectivement le nombre quantique principal et orbital de l'électron de He^+ , l est le moment angulaire de l'électron éjecté ; L et M sont respectivement le moment angulaire total et sa projection sur l'axe de quantification. La fonction d'onde (4.15) contient deux termes : le premier

$$\Theta_\Gamma^{inner,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E, \hat{k}_e) = \sum_j b_{j,\Gamma}^{L,M}(E, \hat{k}_e) \Psi_j^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (4.16)$$

décrit la fonction d'onde de diffusion dans la zone *interne*. Il est développé sur les fonctions propres $\Psi_j^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ du hamiltonien total obtenues après diagonalisation de ce dernier sur la base finie de fonctions sturmiennes :

$$\Psi_j^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\lambda \leq l} \sum_{\nu, n} \psi_{\nu, n, j}^{\lambda, l, L, M} F_{\nu, n}^{\lambda, l, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (4.17)$$

où les $F_{\nu, n}^{\lambda, l, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sont les fonctions de base définies par

$$F_{\nu, n}^{\lambda, l, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1 + \epsilon P_{21}}{\sqrt{2}} S_{\tilde{\nu}, \lambda}^\kappa(r_1) S_{\tilde{n}, l}^\kappa(r_2) \Lambda_{\lambda, l}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2), \quad (4.18)$$

avec $\nu, n = 1, 2, \dots, N-1$, $\tilde{\nu} = \nu + \lambda$ et $\tilde{n} = n + l$. Le second terme

$$\Theta_\Gamma^{asympt,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E, \hat{k}_e) = \sum_{\Gamma'} \sum_{n'=N}^{\infty} \Phi_{n'}^{\Gamma'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) f_{n',\Gamma'}^{\Gamma}(E, \hat{k}_e), \quad (4.19)$$

reproduit le comportement asymptotique exact d'une fonction d'onde de diffusion. Il est développé dans un premier temps sur tous les canaux d'ionisation considérés pour évaluer la fonction d'onde dans la voie Γ et ensuite, sur l'indice radial $n' \geq N$ des fonctions sturmiennes associées

à l'électron éjecté qui n'ont pas été utilisées dans la zone *interne*. Les fonctions de base de la zone *asymptotique* sont données par

$$\Phi_{\nu,n}^{\lambda,l,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1 + \epsilon P_{21}}{\sqrt{2}} \chi_{\tilde{\nu},\lambda}^{\kappa}(r_1) S_{\tilde{n},l}^{\kappa}(r_2) \Lambda_{\lambda,l}^{L,M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2). \quad (4.20)$$

où $\chi_{\tilde{\nu},\lambda}^{\kappa}(r_1)$ est une fonction propre de He^+ obtenue avec la base tronquée de $N - 1$ fonctions sturmiennes comme dans la zone *interne*

$$\chi_{\tilde{\nu},\lambda}^{\kappa}(r_1) = \sum_{\mu=1}^{N-1} D_{\mu,\nu}^{\lambda} S_{\mu,\lambda}^{\kappa}(r_1). \quad (4.21)$$

Il convient de souligner que le coefficient de décomposition de la fonction d'onde dans la zone *asymptotique* $f_{n',l'}^{\Gamma'\Gamma}(E, \hat{k}_e)$ qui est le coefficient de couplage entre le canal Γ et les autres canaux Γ' est donnée par

$$f_{n',l'}^{\Gamma'\Gamma}(E, \hat{k}_e) = f_{n',l'}^{\Gamma'\Gamma}(E) \sum_{\mu',m'} (-1)^{\lambda' - l' + M} [L] \begin{pmatrix} \lambda' & l' & L \\ \mu' & m' & -M \end{pmatrix} y_{l'm'}^*(\hat{k}_e), \quad (4.22)$$

où $[L] = \sqrt{2L+1}$. Il faut remarquer ici que l'indice radiale n des sturmiennes varie de N à ∞ et $\nu < N$. Par conséquent, la condition $\lambda \leq l$ qu'il faut respecter dans l'expression (4.17) pour éviter les redondances n'a plus de raison d'être car les deux fonctions radiales sont complètement différentes. Pour déterminer les coefficients $b_{j,\Gamma}^{L,M}(E, \hat{k}_e)$ et $f_{n',l'}^{\Gamma'\Gamma}(E, \hat{k}_e)$ du développement (4.15), on force la fonction de diffusion $\Theta_{\Gamma}^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E, \hat{k}_e)$ à être solution de l'équation de Schrödinger dans tout l'espace :

$$\{H - E\} \Theta_{\Gamma}^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E, \hat{k}_e) = 0. \quad (4.23)$$

En considérant pour les fonctions $\Theta_{\Gamma}^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E, \hat{k}_e)$ un comportement asymptotique en terme de la matrice de transition T [8], on obtient pour les coefficients $f_{n',l'}^{\Gamma'\Gamma}(E)$ l'expression suivante :

$$f_{n',l'}^{\Gamma'\Gamma}(E) = R_{n',l'}(E - \epsilon_{\tilde{\nu}',\lambda'}) \delta_{\Gamma'\Gamma} - Q_{n',l'}(E - \epsilon_{\tilde{\nu}',\lambda'}) T_{\Gamma'\Gamma}, \quad (4.24)$$

où $\epsilon_{\tilde{\nu}',\lambda'}$ est l'énergie de l'électron de He^+ . $R_{n',l'}(\epsilon)$ sont les coefficients du développement de la fonction coulombienne régulière sur la base sturmiienne. $Q_{n',l'}(\epsilon)$ sont les coefficients du développement de la fonction coulombienne sortante (pour les voies ouvertes) ou d'une fonction coulombienne dont le comportement asymptotique est une exponentielle décroissante (pour les voies fermées) sur les fonctions sturmiennes. Un canal Γ' décrit par les paramètres $(\tilde{\nu}', \lambda', l'; L', M')$ est dit ouvert si $\epsilon =$

$E - \epsilon'_{\nu',\lambda} > 0$. Par contre si $\epsilon < 0$, le canal Γ' est fermé et dans ce cas, seul le deuxième terme de la relation (4.24) contribue puisque la voie Γ est ouverte dès le départ. Lorsque la voie Γ' est ouverte, les coefficients $T_{\Gamma\Gamma'}$ sont à un facteur près, ceux de la matrice de transition T . Lorsque l'énergie totale du système E est inférieure au seuil de double ionisation ($E < 0$), tous les canaux associés à la double ionisation sont fermés. Toutefois, leur contribution dans le calcul des éléments de matrice de transition $T_{\Gamma\Gamma'}$ est non négligeable et doit être prise en compte dans les calculs pour avoir une bonne convergence. Lorsque E devient positif, ces canaux s'ouvrent progressivement et contribuent de façon significative au calcul des éléments de la matrice T . Il est important de signaler que dans la zone *asymptotique* et dans ces canaux, l'un des électrons est décrit par une onde coulombienne et l'autre par un *pseudoétat* de l'ion résiduel He^+ . Ce type d'approximation est utilisé dans la méthode *Convergent Close-Coupling* (CCC) [101]. Toutefois, dans le cas de la méthode CCC, un électron est décrit par une fonction coulombienne de $Z = 2$ dans tout l'espace alors que dans notre cas, cette approximation n'est faite que dans la zone *asymptotique*. La fiabilité de cette technique pour le calcul des probabilités et des sections efficaces est liée à la précision avec laquelle les fonctions de diffusion multivoies sont calculées. Dans ce contexte, il est donc impératif de tester la précision de la méthode de la matrice J . Les tests de précision de la méthode de la matrice J ont été faits par Broad [102] et par Fomouo [8] pour étudier l'ionisation de l'hélium et de l'ion H^- par impact photoniques. Les résultats obtenus sont très bons et fiables compte tenu de la façon dont la méthode prend en compte les corrélations électroniques.

Comparaison entre le SCWF et la LSWF

La fonction d'onde solution de l'équation de Lippmann-Schwinger possède deux régions tout comme la fonction SCWF. La fonction PSCB qui est le premier terme de droite de la relation (3.19) décrit le système final dans la zone *asymptotique*. Quand au second terme, il décrit la zone *interne* du système final dans lequel l'erreur que l'on fait en considérant la PSCB est corrigée par la résolvante $G_a^-(E_f^{(0)})$. Le couplage de la voie considérée avec toutes les autres voies se fait via l'interaction W qui contient la corrélation électronique. Ainsi nous pouvons affirmer que la LSWF est pratiquement compatible à la fonction SCWF. La seule différence est que la base utilisée pour traiter la fonction SCWF est réelle

tandis qu'elle est complexe pour la LSWF. L'utilité d'une base complexe dans ce cas est d'une importance capitale car elle permet de calculer le propagateur qui présente des pôles. Donc elle permet d'explorer les résonances qui sont cachées lorsque nous travaillons en base réelle. Notons enfin, que les bases complexes impliquent des tailles de base moins grandes que les bases réelles.

4.5 Expression des sections efficaces différentielles triples du processus $(e, 2e)$

Il est question dans cette section de dériver les expressions des sections efficaces différentielles du processus électronique. Nous allons ensuite faire un commentaire sur le rôle de la corrélation électronique dans le cadre du traitement perturbatif de Born.

4.5.1 Section efficace différentielle triple du processus électronique

Dans le cas quantique d'une simple diffusion par un potentiel V , le problème est le suivant : un électron incident e_1 ayant une impulsion $\vec{k}_i$ et une énergie E_i est préparé et envoyé sur une cible. On cherche la probabilité pour que la particule diffusée soit détectée dans l'angle solide $\Omega_f = \Omega(\theta_f, \varphi_f)$. Par définition, la section efficace de ce processus [27, 95, 103] est donnée par

$$d\sigma(\Omega_f) = \frac{W_{i \rightarrow f}}{\phi_i}. \quad (4.25)$$

où ϕ_i est le flux de particules incidentes et $W_{i \rightarrow f}$ est le nombre de particules diffusées en s^{-1} dans l'angle solide Ω_f . La pertinence de cette relation est que le potentiel V est remplacé par une surface $d\sigma(\Omega_f)$ qui est perpendiculaire à la direction de l'impulsion de l'électron libre incident. Ainsi, toutes les particules libres passant à travers cette surface $d\sigma(\Omega_f)$ sont diffusées dans la direction Ω_f avec une incertitude $d\Omega_f$. D'où le vocable section efficace que l'on donne à la grandeur $d\sigma(\Omega_f)$. Le nombre de particules diffusées en s^{-1} dans l'angle solide Ω_f avec une incertitude $d\Omega_f$ est calculé via la règle d'or de Fermi

$$W_{i \rightarrow f} = 2\pi |T_{fi}|^2 \rho_f, \quad (4.26)$$

où ρ_f est la densité d'états du système final par unité d'énergie et T_{fi} est la matrice de transition du processus. Le flux incident est donné par

$$\phi_i = |\psi_i|^2 p_i = \frac{p_i}{(2\pi)^3}. \quad (4.27)$$

Dans ce processus précis, nous aurons deux particules émergentes dans l'état final et rappelons que les énergies et les impulsions des différentes particules devront satisfaire les lois de conservation données dans la section précédente. Dans ce contexte, la densité d'états finaux par unité d'énergie est donnée par

$$\rho_f = \delta(E_{final} - E_{initial}) d^3 \vec{p}_f d^3 \vec{p}_e, \quad (4.28)$$

où

$$E_{initial} = \frac{p_i^2}{2}, \quad E_{final} = \frac{p_f^2}{m} + \frac{p_e^2}{2} + E_{He+}. \quad (4.29)$$

Si les éléments de volume de ces deux particules émergentes dans l'espace des impulsions $d^3 \vec{p}_f$ et $d^3 \vec{p}_e$ sont exprimés en termes d'énergies, il vient que

$$\rho_f = p_f dE_f d\Omega_f p_e dE_e d\Omega_e \delta(E_{final} - E_{initial}). \quad (4.30)$$

Substituons cette relation (4.30) dans l'équation (4.25), elle devient

$$d\sigma = (2\pi)^4 \sqrt{\frac{2E_f E_e}{E_i}} |T_{fi}|^2 dE_f dE_e d\Omega_f d\Omega_e \delta(E_{final} - E_{initial}). \quad (4.31)$$

En intégrant sur dE_e et en utilisant le système d'unités atomiques, on obtient très aisément la section efficace différentielle triple (TDCS)

$$\frac{d^3 \sigma}{dE_f d\Omega_f d\Omega_e} = (2\pi)^4 \sqrt{\frac{2E_f E_e}{E_i}} |T_{fi}|^2. \quad (4.32)$$

En remplaçant les énergies par leurs expressions en termes d'impulsions, la TDCS prend la forme

$$\frac{d^3 \sigma}{dE_f d\Omega_f d\Omega_e} = (2\pi)^4 \frac{k_f k_e}{k_i} |T_{fi}|^2, \quad (4.33)$$

où l'expression générale de la matrice de transition est donnée par la série de Born

$$T_{fi} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle + \sum_{j_1 \neq i} \int \frac{\langle \psi_f | V | j_1 \rangle \langle j_1 | V | \psi_i \rangle}{E_i - E_{j_1}} + \langle \psi_f | V | \phi^{(n)} \rangle, \quad (4.34)$$

avec

$$|\phi^{(n)}\rangle = \sum_{j_n \neq i} \int \frac{|j_n\rangle \langle j_n| V}{E_i - E_{j_n}} \dots \sum_{j_1 \neq i} \int \frac{|j_1\rangle \langle j_1| V |\psi_i\rangle}{E_i - E_{j_1}}. \quad (4.35)$$

Dans ce travail, nous nous limitons uniquement aux contributions des deux premiers ordres de la série de Born. Ainsi, dire que nous travaillons dans l'approximation de Born revient à ne considérer que le premier ordre de la matrice de transition

$$T_{fi}^{(1)} = \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle. \quad (4.36)$$

Ensuite, la seconde approximation consiste à prendre en compte en plus du premier ordre, le second terme de la série de Born c'est-à-dire

$$T_{fi}^{(2)} = \sum_{j_1 \neq i} \int \frac{\langle \psi_f | V | j_1 \rangle \langle j_1 | V | \psi_i \rangle}{E_i - E_{j_1}}. \quad (4.37)$$

Comme les expressions de la TDCS sont connues, passons à présent à l'étude de ce processus lorsque l'on néglige la corrélation électronique dans la cible atomique.

4.5.2 Commentaire du rôle de la corrélation électronique dans le cadre du traitement perturbatif de Born

Normalement, les corrélations entre les électrons de la cible sont traitées à tous les ordres. De plus, les corrélations entre les électrons incident/diffusé et les électrons de la cible sont traitées à l'ordre 1 dans le cadre de la première approximation de Born, et à l'ordre 2 dans le cadre de la seconde approximation de Born. Dans ce qui suit, nous analysons l'effet d'annuler les corrélations entre les électrons de la cible dans le cadre de la première et la seconde approximation de Born.

Dans un processus $(e, 2e)$, le hamiltonien du système collisionnel s'écrit

$$H = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} + \frac{p_3^2}{2} - \frac{Z}{r_2} - \frac{Z}{r_3} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}}, \quad (4.38)$$

où $p_i^2/2$ (pour $i = 1, 2, 3$) sont les énergies cinétiques des électrons, Z est la charge de la cible et $r_{ij} = |\vec{r}_j - \vec{r}_i|$ est la distance entre différentes

particules. L'amplitude de transition du premier Born du processus ($e, 2e$) en théorie des perturbations est donnée par

$$T_{fi}^{B1} = -(2\pi)^2 \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle. \quad (4.39)$$

Si nous supposons que les électrons incident et diffusé sont discernables des deux autres électrons de la cible, alors la fonction d'onde initiale et finale du système sont données par les équations (4.12) et (4.5). En théorie des perturbations, le hamiltonien total (4.38) peut s'écrire comme $H = H_0 + V$ où H_0 est le hamiltonien du système non perturbé et V , la perturbation du système collisionnel responsable de la transition qui est issue de l'interaction entre l'électron incident et la cible

$$V = -\frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}}. \quad (4.40)$$

Rappelons que les fonctions d'ondes spatiales $\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3)$ et $\Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3)$ sont symétriques par rapport aux variables $\vec{r}_2$ et $\vec{r}_3$. De plus si l'on substitue les relations (4.12), (4.5) et (4.40) dans la relation (4.39), en intégrant sur la variable $\vec{r}_1$ en vertu de la relation de Bethe [104], on obtient facilement

$$T_{fi}^{B1} = -\frac{4}{K^2} \langle \Theta_f | -1 + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) | \Theta_i \rangle, \quad (4.41)$$

avec $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ qui est l'impulsion transférée au cours de la collision. Notons que le fait que le hamiltonien (4.38) soit indépendant du spin nous conduit à un processus qui conserve le spin total $S = 0$. De plus si les fonctions d'ondes initiale et finale du système atomique sont exactes, alors elles sont orthogonales c'est-à-dire $\langle \Theta_f | \Theta_i \rangle = 0$ mais tel n'est pas toujours le cas en pratique puisque les fonctions d'onde utilisées sont toujours truffées d'approximations. Pour évaluer (4.41), on peut donc soit ignorer ce défaut d'orthogonalité en calculant les deux termes, soit utiliser le théorème de Gram-Schmidt pour fabriquer une fonction d'onde finale orthogonale à la fonction d'onde initiale

$$\tilde{\Theta}_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) - \langle \Theta_i | \Theta_f \rangle \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3). \quad (4.42)$$

La formule (4.41) nous donne l'expression de l'amplitude de transition en jauge longueur.

Il est instructif de regarder la contribution du premier Born lorsqu'on néglige les corrélations des électrons de la cible (He décrit dans le cadre

du modèle des particules indépendantes). Pour des états singlets de spin du fondamental de l'hélium et dans le cas des particules non corrélées, on peut écrire les fonctions d'onde initiale et finale comme des produits des fonctions d'onde mono-électroniques

$$\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = \phi_0(\vec{r}_2)\phi_0(\vec{r}_3), \quad (4.43)$$

et

$$\Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = N_{fg}\{\phi_f(\vec{r}_2)\phi_g(\vec{r}_3) + \phi_g(\vec{r}_2)\phi_f(\vec{r}_3)\}. \quad (4.44)$$

De manière générale, nous écrivons comme fonctions d'onde qui permettront de décrire les états intermédiaires dans l'étude du second Born

$$\Theta_n(\vec{r}_2, \vec{r}_3) = N_{pq}\{\phi_p(\vec{r}_2)\phi_q(\vec{r}_3) + \phi_q(\vec{r}_2)\phi_p(\vec{r}_3)\}, \quad (4.45)$$

avec

$$\langle \phi_p | \phi_q \rangle = \delta_{pq}, \quad N_{pq} = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{ si } p \neq q, \quad N_{pq} = \frac{1}{2} \text{ si } p = q. \quad (4.46)$$

En portant les relations (4.43) et (4.44) dans la relation (4.39), il vient que

$$T_{fi}^{B1} = -\frac{N_{fg}}{\pi} \{ \langle \vec{k}_f \phi_f | V_1 | \vec{k}_i \phi_0 \rangle \langle \phi_g | \phi_0 \rangle + \langle \vec{k}_g \phi_f | V_1 | \vec{k}_i \phi_0 \rangle \langle \phi_f | \phi_0 \rangle \}, \quad (4.47)$$

avec

$$\langle \vec{k}_p \phi_p | V_1 | \vec{k}_q \phi_q \rangle = \langle e^{i\vec{k}_p \cdot \vec{r}_1} \phi_p | -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} | e^{i\vec{k}_q \cdot \vec{r}_1} \phi_q \rangle. \quad (4.48)$$

Deux cas physiques intéressants ont retenu notre attention dans le modèle non-corrélé des électrons de l'hélium :

- Dans le cas de la simple excitation (SE) du système final, nous avons $\phi_g = \phi_0$ et $\phi_f \neq \phi_0$ et il s'en suit que

$$T_{SE}^{B1} = -\frac{N_{fg}}{\pi} \langle \vec{k}_f \phi_f | V_1 | \vec{k}_i \phi_0 \rangle \neq 0 \quad (4.49)$$

car $\langle \phi_g | \phi_0 \rangle = 1$ et $\langle \phi_f | \phi_0 \rangle = 0$. Or l'ionisation sans excitation (ISE) est un cas particulier de la simple excitation. On en conclut que la contribution du premier Born du processus d'ionisation sans excitation dans le cas où on néglige la corrélation des électrons de la cible, est non nulle.

- Dans le cas de la double excitation (DE) du système final, on a $\phi_g \neq \phi_0$ et $\phi_f \neq \phi_0$ et il s'en suit que

$$T_{DE}^{B1} = 0. \quad (4.50)$$

Or l'ionisation avec excitation (IAE) est un cas particulier de la double excitation. On en conclut que la contribution du premier Born dans le cas où on éteint la corrélation des électrons de la cible du processus d'ionisation avec excitation, est nulle.

Tout de même, la contribution $T_{fi}^{IAE} = 0$ dans le modèle non corrélé des électrons de la cible prédit que les effets de corrélation dans les états initial et final seront plus importants pour le processus d'ionisation avec excitation que pour le processus d'ionisation sans excitation. Cette affirmation sera démontrée au cours de ce travail. Mais notons déjà que pour montrer la pertinence de l'étude qui sera faite, nous avons utilisé les fonctions d'onde fortement corrélées pour décrire les états initial et final notamment la ICWF et la SCWF. La SCWF est une fonction d'onde très précise qui tient compte des corrélations électroniques à tous les ordres dans la *zone interne* et à travers le couplage entre les canaux de simple ionisation.

L'amplitude du second Born est donnée par

$$T_{fi}^{B12} = T_{fi}^{B1} + T_{fi}^{B2}, \quad (4.51)$$

avec le terme du second ordre qui est donné par

$$T_{fi}^{B2} = \frac{1}{8\pi^4} \sum_n \int d\vec{q} \frac{\langle \vec{k}_f \Theta_f | V | \vec{q} \Theta_n \rangle \langle \vec{q} \Theta_n | V | \vec{k}_i \Theta_i \rangle}{q^2 - k_i^2 - 2(\varepsilon_i - \varepsilon_n) - i\eta}, \quad \eta \rightarrow 0^+. \quad (4.52)$$

Considérons l'élément de matrice $\langle \vec{q} \Theta_n | V | \vec{k}_i \Theta_i \rangle$ de la relation (4.52), il représente une collision virtuelle simple dans laquelle l'électron incident excite l'atome d'hélium depuis son fondamental Θ_i jusqu'à Θ_n . Le second élément de matrice $\langle \vec{k}_f \Theta_f | V | \vec{q} \Theta_n \rangle$ représente une seconde collision virtuelle dans laquelle l'atome quitte l'état excité Θ_n vers l'état final Θ_f . Dans le cas de l'ionisation avec excitation, le terme du second ordre T_{fi}^{B2} contient un *processus à deux étapes* qui se doit d'être important [105, 106, 107]. Supposons que $\phi_f \neq \phi_0$ et $\phi_g \neq \phi_0$ et prenons l'état intermédiaire comme étant la somme sur les deux voies possibles

$$\begin{aligned} \tilde{\Theta}_n = & N_{g0} \{ \phi_g(\vec{r}_2) \phi_0(\vec{r}_3) + \phi_g(\vec{r}_3) \phi_0(\vec{r}_2) \} \\ & + N_{f0} \{ \phi_f(\vec{r}_2) \phi_0(\vec{r}_3) + \phi_f(\vec{r}_3) \phi_0(\vec{r}_2) \}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

En substituant la relation (4.53) dans la relation (4.52), en appliquant la sommation sur n et après quelques développements et simplifications, il vient que le terme du second ordre pour le processus d'ionisation-excitation est donné par

$$T_{fi}^{B2,DE} = \frac{N_{fg}}{4\pi^4} \int d\vec{q} \frac{\langle \vec{k}_f \phi_f | V_1 | \vec{q} \phi_0 \rangle \langle \vec{q} \phi_g | V_1 | \vec{k}_i \phi_0 \rangle}{q^2 - k_{g0}^2 - i\eta} + \frac{N_{fg}}{4\pi^4} \int d\vec{q} \frac{\langle \vec{k}_f \phi_g | V_1 | \vec{q} \phi_0 \rangle \langle \vec{q} \phi_f | V_1 | \vec{k}_i \phi_0 \rangle}{q^2 - k_{f0}^2 - i\eta}, \quad (4.54)$$

avec $k_{pq}^2 = k_i^2 + 2(\varepsilon_0 - \varepsilon_{pq})$. Tout comme dans la première approximation de Born, le terme du second ordre fait ressortir deux remarques importantes :

- Le résultat (4.54) peut être interprété comme un *processus à deux étapes* dans lequel l'électron incident collisionne avec un des électrons sur l'orbitale ϕ_0 , l'excitant sur l'orbitale ϕ_g ou ϕ_f . Ensuite il suit une seconde collision virtuelle entre l'électron incident et l'électron restant dans l'orbitale ϕ_0 qui le propulse à un état excité d'orbitale ϕ_f ou ϕ_g . La contribution des deux voies possibles se fait de façon cohérente. De plus, pour des fonctions d'onde initiale et finale corrélées, le terme du second ordre ne peut se réduire à la forme simple donnée par (4.54). Néanmoins, ce résultat (4.54) suggère que ce terme pourrait être dominé par le mécanisme à deux étapes via les états intermédiaires simplement excités Θ_{f0} et Θ_{g0} , ou par leur équivalent en présence des corrélations.
- La seconde observation que l'on puisse faire est que contrairement au cas T_{IAE}^{B1} dans le modèle non corrélé de la fonction d'onde initiale, le terme du second ordre est non nul pour le processus d'ionisation avec excitation. Il faut donc s'attendre à ce que le terme du second ordre joue un rôle important même lorsque l'énergie de l'électron incident est élevée.

4.6 Conclusion

Notons que tout comme le processus de double ionisation multiphotonique, le processus d'ionisation-excitation par impact électronique, qui est une généralisation du processus photonique, est extrêmement corrélé. Nous disposons à présent de tous les outils nécessaires à l'étude des processus de simple ionisation de l'hélium par impact électronique. Cette

étude fera l'objet du **chapitre 6** et de l'**annexe E**. Mais avant d'y arriver, nous commençons par étudier les processus d'ionisation par impact photonique qui sont relativement facile à traiter par rapport au processus $(e, 2e)$.

Chapitre 5

Etude du processus d'ionisation excitation de He par absorption de deux photons : rôle des résonances de coeur

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions en détail le rôle des résonances de coeur lors de l'ionisation-excitation de l'hélium par impact de deux photons. Nous utilisons une méthode qui a été développée par Proulx *et al.* [108] pour calculer les taux d'ionisation d'un système à deux électrons, en particulier H^- après absorption de deux photons. Notons que les corrélations électroniques sont plus importantes dans H^- que dans l'atome d'hélium. Ceci tient au fait que le potentiel que ressent un des électrons est plus faible dans le cas de l'ion. Dans un premier temps, nous testons notre code numérique en reproduisant les résultats obtenus par Proulx *et al.* [108, 109]. Il s'agit pour le système H^- de l'exploration des résonances de forme et de Feshbach $^1S^e$ et $^1D^e$ en dessous des seuils d'excitation $n = 2$ et $n = 3$ de H d'une part ; et pour He, de l'exploration des résonances des états autoionisants en dessous des seuils d'excitation $n = 2$ et $n = 3$ de He^+ d'autre part. Dans un second temps, nous calculons les sections efficaces partielles et totales du processus de simple ionisation avec excitation $n \geq 2$ de l'hélium après absorption de deux photons dans le régime ($1.45 \leq \omega(u.a.) \leq 2.0$). Il est question de voir si le processus direct apporte une contribution résonnante à la section efficace totale.

5.2 Description de la méthode

Nous rappelons que l'opérateur dipolaire responsable de la transition V_+ est donné par le premier terme de la relation (3.26). Si $E_i^{(0)}$ et $|\Psi_i\rangle$ sont l'énergie et la fonction d'onde du système non perturbé, alors l'amplitude pour que le système absorbe N photon(s) et fasse une transition vers l'état final $|\Psi_f\rangle$ avec un électron dans le continuum, est donnée à l'ordre le plus bas de la théorie des perturbations, c'est-à-dire à l'ordre N , par

$$A_{fi}^{(N)} = \langle \Psi_f | V_+ | \mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)} \rangle. \quad (5.1)$$

Nous renvoyons le lecteur au livre de Faisal [110] pour la démonstration de la formule (5.1) de l'amplitude. Les états $|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle$ satisfont l'équation couplée de Dalgarno-Lewis donnée par la relation (3.27).

Sachant que $[G_a^-(E_f^{(0)})W]^\dagger = WG_a^+(E_f^{(0)})$, portons la relation (3.19) dans la relation (5.1), il vient que

$$A_{fi}^{(N)} = \mathcal{P} \left\{ \langle \phi_{\lambda'} | \otimes \langle \psi_{\nu, \epsilon} | \left(1 + WG_a^+(E_f^{(0)}) \right) \right\} | V_+ | \mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)} \rangle, \quad (5.2)$$

avec $W = 1/r_{12} - 1/r_2$ qui est la corrélation électronique dans la voie finale (CEF). La relation (3.27) de Dalgarno-Lewis s'écrit encore

$$|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle = \frac{1}{E_f^{(0)} - H_a} V_+ |\mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)}\rangle = G_a^+(E_f^{(0)}) V_+ |\mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)}\rangle. \quad (5.3)$$

En utilisant la relation (5.3), la relation (5.2) peut encore s'écrire sous la forme

$$A_{fi}^{(N)} = B_{fi}^{(N)} + C_{fi}^{(N)}. \quad (5.4)$$

$B_{fi}^{(N)}$ est l'amplitude obtenue si on néglige la corrélation dans la voie finale (CEF)

$$B_{fi}^{(N)} = \mathcal{P} \{ \langle \phi_{\lambda'} | \otimes \langle \psi_{\nu, \epsilon} | \} V_+ |\mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)}\rangle, \quad (5.5)$$

tandis que $C_{fi}^{(N)}$ est la correction apportée par la CEF

$$C_{fi}^{(N)} = \mathcal{P} \{ \langle \phi_{\lambda'} | \otimes \langle \psi_{\nu, \epsilon} | W \} |\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle. \quad (5.6)$$

Sachant que $H_a = H_0 + W$ et $H_0 |\phi_{\lambda'}\rangle \otimes |\psi_{\nu, \epsilon}\rangle = E_f^{(0)} |\phi_{\lambda'}\rangle \otimes |\psi_{\nu, \epsilon}\rangle$, on peut remplacer $W = H_a - E_f^{(0)} + H_a^\dagger - H_a$ ou $W = H_a - E_f^{(0)} + H_0^\dagger - H_0$

dans la droite de la relation (5.6), il vient que

$$A_{fi}^{(N)} = \sqrt{2}\{\langle\phi_{\lambda'}|\otimes\langle\psi_{l',\epsilon}|\}V_+|\mathcal{F}_{N-1}^{(N-1)}\rangle + \sqrt{2}\{\langle\phi_{\lambda'}|\otimes\langle\psi_{l',\epsilon}|\}(H_a - E_f^{(0)} + H_0^\dagger - H_0)|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle, \quad (5.7)$$

et en utilisant la relation (3.27), on peut réécrire la relation (5.7) sous la forme

$$A_{fi}^{(N)} = \sqrt{2}\{\langle\phi_{\lambda'}|\otimes\langle\psi_{l',\epsilon}|\}(H_0^\dagger - H_0)|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle, \quad (5.8)$$

ou sous la forme

$$A_{fi}^{(N)} = \sqrt{2}\{\langle\phi_{\lambda'}|\otimes\langle\psi_{l',\epsilon}|\}(E_f^{(0)} - H_0)|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle. \quad (5.9)$$

Pour évaluer les taux d'ionisation à 2-photon, nous avons donc deux expressions de la matrice de transition. On a l'expression (5.4) à deux termes (5.5) et (5.6) d'une part, et d'autre part, l'expression (5.9). Ces expressions possèdent leurs avantages et leurs inconvénients sur le plan numérique tout en étant équivalentes sur le plan analytique. Il faut bien les analyser en regardant la convergence pour choisir le calcul le plus précis quelles que soient les paramètres cinématiques utilisés. Sur le plan numérique, ces calculs font appel comme nous le voyons dans la suite aux approximants de Padé et Levin [111, 112, 113, 114] pour accélérer la convergence. Comparativement aux autres relations, la relation (5.5) de la première expression est plus facile à calculer car c'est un élément de matrice du type $(N-1)$ -photon. Dans certains cas, ce terme converge même sans avoir recours aux algorithmes d'accélération de convergence. Quant au second terme (5.6), on a un élément de matrice de type N -photon dans lequel la matrice est la CEF. En d'autres termes, nous avons à évaluer le couplage de deux fonctions du continuum via l'interaction $W = 1/r_{12} - 1/r_2$ qui a un comportement asymptotique en $1/r_2^2$. Cette interaction qui décroît plus vite que $1/r_2$ est suffisante pour faciliter la convergence dans certains cas, et insuffisante dans d'autres cas. Par ailleurs, la deuxième expression donnée par la relation (5.9) semble la plus indiquée pour un calcul numérique puisque H_0 ne contient pas l'interaction électron-électron. Ainsi les éléments de matrice de H_0 peuvent être calculés facilement et rapidement avec un minimum d'erreur bien que les composantes harmoniques de Dalgarno-Lewis $|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle$ contiennent cette interaction électron-électron. Un autre fait plus important est que chacun des trois termes différents donnés par (5.5), (5.6) et (5.9) est exact dans le cadre de la théorie des perturbation à l'ordre le plus bas.

Dans la pratique, nous avons implémenté les deux expressions du taux et à chaque fois, nous avons toujours noté un recouvrement notable (au moins 4 chiffres) entre les résultats. Nous avons aussi remarqué que la convergence de la somme partielle n'est pas en général bonne et dépend aussi de la relation de la matrice de transition utilisée. Par contre, les résultats des sommes accélérées convergent assez bien et on a toujours au moins 2 chiffres de recouvrement entre les approximants de Padé et Levin.

Nous utilisons une base de fonctions sturmiennes complexes. Le fait qu'elles sont complexes garantit le bon comportement asymptotique. Dans ce cas, les fonctions $|\mathcal{F}_N^{(N)}\rangle$ en représentation position s'écrivent

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2 | \mathcal{F}_N^{(N)} \rangle = \sum_{L=0}^N \sum_{\lambda l} \sum_{\nu n} a_{\nu n N}^{\lambda l L}(\omega) F_{\nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (5.10)$$

avec $M = 0$ et **la condition** $(-1)^L = (-1)^N$ qui vient du fait que nous avons considéré un champ laser polarisé linéairement. En portant la relation (5.10) dans l'équation de Dalgarno-Lewis, puis en projetant à gauche par $F_{\nu' n'}^{\lambda' l' L' M'^*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ et après intégration sur les variables $\vec{r}_1$ et $\vec{r}_2$, il vient que

$$\begin{aligned} (-1)^L &= (-1)^N & (-1)^L &= (-1)^{N-1} \\ \sum_{L=0}^N \sum_{\lambda l} \sum_{\nu n} \left[\Delta_{\nu' n' \nu n}^{\lambda' l' \lambda l} - H_{a \nu' n' \nu n}^{\lambda' l' \lambda l L} \right] a_N \delta_{LL'} &= \sum_{L=0}^{N-1} \sum_{\lambda l} \sum_{\nu n} V_{+ \nu' n' \nu n}^{\lambda' l' \lambda l L' L} a_{N-1}, \end{aligned} \quad (5.11)$$

avec $a_N = a_{\nu n N}^{\lambda l L}$ et les éléments de matrice qui sont définis par

$$\Delta_{\nu' n' \nu n}^{\lambda' l' \lambda l} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 F_{\nu' n'}^{\lambda' l' L' M'^*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) F_{\nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (5.12)$$

$$H_{a \nu' n' \nu n}^{\lambda' l' \lambda l L} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 F_{\nu' n'}^{\lambda' l' L' M'^*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) H_a F_{\nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (5.13)$$

$$V_{+ \nu' n' \nu n}^{\lambda' l' \lambda l L' L} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 F_{\nu' n'}^{\lambda' l' L' M'^*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_+ F_{\nu n}^{\lambda l L M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (5.14)$$

La résolution de l'équation (5.11) à l'aide des *routines LAPACK* ou par la *méthode des gradients biconjugués (BiCGSTAB)* permet d'avoir les coefficients $a_{\nu n N}^{\lambda l L}(\omega)$. Le système linéaire (5.11) fait intervenir des matrices gigantesques ($\dim_L = 30.000$) complexes qui possèdent une structure.

TABLE 5.1 – *Comparaison de la vitesse de résolution d'un système linéaire par la routines LAPACK ou par la méthode des gradients biconjugués (BiCGSTAB) optimisée à l'aide d'un préconditionneur par bloc. La valeur maximale des moments angulaires individuels est $l_{max} = 5$, N_s est le nombre de sturmienne par électron, $accr$ précise le nombre de chiffres (7) de recouvrement entre les deux méthodes, t_L est le temps machine en CPU d'un run par les routines LAPACK, et enfin t_{BPG} est celui de la méthode BiCGSTAB avec préconditionnement par bloc. Plus la taille de la base croît, plus notre procédure est rapide comparée à la routine LAPACK.*

l_{max}	N_s	$accr$	t_L (CPU)	t_{BPG} (CPU)	$fac = t_L/t_{BPG}$
5	30	10^{-7}	57.21	9.662	5.92
5	40	10^{-7}	225.42	21.629	10.42
5	50	10^{-7}	841.03	68.43	12.29
5	60	10^{-7}	3282.86	234.36	14.01

Ces structures ont été commentées dans le **chapitre 2**. Mais il est très important de remarquer que les éléments extra structures tri-bande et cactus (structures des matrices S et H_0) de la matrice U sont petits par rapport aux éléments appartenant à ces deux structures. C'est précisément cette remarque qui va nous amener à *un préconditionnement du système* et puis à l'utilisation de la *méthode des gradients biconjugués* (BiCGSTAB) pour résoudre ce système linéaire de taille gigantesque. Notons que la *méthode du BiCGSTAB* telle que utilisée a été optimisée (*préconditionnement par bloc*) et est par conséquent plus rapide que la *routine LAPACK* (voir table 5.1). Nous renvoyons le lecteur pour plus de détails sur le *préconditionnement d'un système linéaire* et la *méthode des gradients biconjugués* à l'**annexe C**. Nous avons utilisé la jauge vitesse pour représenter l'interaction avec le champ oscillant lorsque N est grand car la convergence de l'amplitude $A_{fi}^{(N)}$ est beaucoup plus rapide quand la taille de la base augmente.

5.3 Résultats et discussions

Il est question dans cette section d'étudier le rôle des résonances de coeur lors de la simple ionisation de l'hélium après absorption de deux pho-

tons. Shakeshaft [5] et Feng et van der Hart [6] ont calculé les sections efficaces totales de la simple ionisation de l'hélium après absorption de deux photons en fonction de l'énergie des photons (voir figure 1.1) par deux approches théoriques différentes. Ces sections efficaces sont caractérisées par une série de résonances de coeur de l'ion He^+ , en particulier pour $n = 2, 3, 4, 5$. Dans la suite, nous calculons les contributions partielles dudit processus dans le régime direct. De plus, nous essayons de comprendre l'origine de cette résonance tout en étudiant le rôle des corrélations au cours de ce processus. Par ailleurs, la dégénérescence des états de coeur laisse penser que les canaux éventuels ns , nd , nf et ng devraient présenter des résonances tout comme les canaux np . Nous tentons de vérifier ce point.

5.3.1 Validation de la méthode

Dans cette partie, il est question d'appliquer la méthode de Floquet perturbative et indépendante du temps pour étudier les processus d'ionisation par absorption de un, deux ou trois photons des systèmes à deux électrons actifs et retrouver des résultats qui existent dans la littérature. De manière générale, la description de l'état du système après absorption de N photon(s) passe par la résolution d'un système linéaire (5.11) dont les inconnues sont les coefficients $a_{\nu n N}^{\lambda L}(\omega)$ de la décomposition de ces fonctions de réponse sur la base sturmienne. Notons que le calcul de l'élément de matrice $V_{+\nu' n' \nu n}^{\lambda' L' \lambda L' L M}$ de ce système impose une règle de sélection concernant le choix des moments angulaires totaux L' du premier membre et L du second. Ces moments totaux L' et L obéissent respectivement aux règles de sélection $(-1)^{L'} = (-1)^N$ et $(-1)^L = (-1)^{N-1}$. Pour être plus précis, on a toujours $L' = L \pm 1$. D'une part, dans le cas du processus à un photon, l'état initial est l'état fondamental, alors $L = 0$ et par suite, la seule valeur du moment angulaire total L' retenue dans le premier membre vaut $L' = 1$. D'autre part, dans le cas du processus à deux photons (trois photons), comme la valeur du moment angulaire total dans le second membre est $L = 1$ ($L = 0, 2$), alors les valeurs du moment angulaire total L' retenues dans le premier membre valent respectivement $L' = 0, 2$ ($L' = 1, 3$). Par ailleurs, nous utilisons le produit symétrisé d'une fonction coulombienne et d'une fonction liée (PSCB) pour décrire la zone asymptotique du système final. Ceci introduit dans les calculs une somme infinie qu'il faut bien gérer numériquement de manière à avoir de bonne convergence des grandeurs calculées.

Ainsi, pour le calcul des sections efficaces et des taux d'ionisation à N -

TABLE 5.2 – *Taux d'ionisation de $\text{He}((1s^2)^1S^e)$ par unité du carré de l'intensité laser après absorption de 1 photon en fonction de l'angle de la rotation complexe pour plusieurs valeurs du paramètre non linéaire κ . Les autres paramètres sont $N = 20$, $l_{\max} = 3$ et l'énergie du photon vaut $\omega = 26 \text{ eV}$*

$\theta(\text{rad})$	$\kappa = 0.5$	$\kappa = 1.0$	$\kappa = 2$
0.0	6.88839323	6.95842494	6.17660149
0.1	6.79004006	6.82233601	6.61638142
0.175	6.78756301	6.79453611	6.74615781
0.2	6.78840729	6.79242375	6.76250077
0.3	6.79646580	6.79046552	6.78613798
0.4	6.79612572	6.79050048	6.78950061
0.5	6.79409469	6.79058498	6.78953606
0.6	6.76080850	6.79062585	6.78947823
0.7	0.72362974	6.79031943	6.78974814
0.8	1.26059136	4.85017512(-4)	6.73186870(-7)
0.9	0.30066469	3.17136922(-3)	3.16717256(-6)

photon, nous utilisons avec succès les approximants de Padé et Levin sus-mentionnés pour accélérer la convergence et le recouvrement entre ces deux méthodes est toujours au moins de deux à trois chiffres. De plus, suivant les valeurs du moment angulaire total, il faut tenir compte de la redondance qui est étroitement lié à la notion d'échange. Nous avons déjà dit que nous utilisons la méthode de la rotation complexe qui est équivalent à travailler avec les fonctions sturmiennes complexes car elle permet d'explorer les résonances. L'angle de rotation θ varie de 0 à $\pi/2$ et le calcul des observables ne doit pas dépendre de cet angle. En pratique, on constate malheureusement que suite à des imprécisions numériques, les calculs des taux sont instables à partir d'une certaine valeur critique de θ_c . Il semble donc indiqué de se fixer sur cette valeur seuil qui procurent une bonne convergence pour les différents processus à N -photon étudiés. Ainsi, pour des raisons de simplicité, commençons par le processus d'ionisation à 1-photon de $\text{He}((1s^2)^1S^e)$. En jouant sur les valeurs du paramètre non linéaire κ , la table 5.2 nous indique que pour les paramètres cinématiques indiqués dans le titre de cette figure,

TABLE 5.3 – Taux d’ionisation ($\Gamma_2/(I^2 \times k_e)$) de $He((1s^2)^1S^e)$ après absorption de 2-photon en fonction de l’angle de la rotation complexe pour plusieurs valeurs du paramètre non linéaire κ . Les autres paramètres sont $N = 20$, $l_{max} = 3$ et $L_f = 0, 2$; et l’énergie de l’électron éjecté vaut $E_e = k_e^2/2 = 0.15$ u.a.

$\theta(rad)$	$\kappa = 0.5$	$\kappa = 1.0$
0.0	0.42397610575152717	0.42338716726398384
0.1	0.44155638079896897	0.40751006875621548
0.175	0.44500526717079841	0.41434277054560392
0.2	0.44580130686252495	0.41739392945028547
0.3	0.45530974721568129	0.43427389649281711
0.4	0.45395695726360474	0.46123501932957173
0.5	0.46829459822317282	0.50210980864814581
0.6	0.4669704240091121	0.55450137745678563
0.7	0.19501802943706506	0.58361959729421464
0.8	0.21943512670435605	9.08566150105470094(-2)

on a une stabilité à deux chiffres du taux pour des angles θ inférieurs à 35° . Pour mener cette étude, nous avons pris comme valeur de l’angle de rotation complexe $\theta = 10^\circ$. Ensuite, nous sommes passés à l’étude de la stabilité des taux en fonction de θ pour l’ionisation simple par absorption de deux photons de He en jouant aussi sur le paramètre de dilatation κ . La table **5.3** nous montre que le domaine de stabilité des résultats en fonction de l’angle de rotation diminue fortement par rapport au cas à 1-photon. Cette détérioration de la convergence est due au fait que dans ce cas, nous avons à évaluer l’intégrale de deux fonctions du continuum. Mais pour la valeur $\theta = 10^\circ$, les résultats restent néanmoins fiables.

Ainsi, pour $\theta = 10^\circ$, 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$ et $\kappa = 1$, nous avons tracé la variation de la section efficace partielle de simple ionisation sans excitation de l’hélium par absorption d’un photon en dessous du seuil de double ionisation (voir figure **5.1**). Ces résultats sont déjà précis même lorsque nous n’avons que 20 sturmiennes et $\kappa = 1$. Pour un paramètre non linéaire par couple de moments angulaires ($\kappa = 2$), pour 30 sturmiennes et 3 paires de moments angulaires, et pour des énergies fixées du photon, nous avons reproduit sur la table **5.4** les sections efficaces totales d’ionisation en jauge longueur (L) et vitesse (V) de l’hélium par absorption d’un photon en dessous du seuil $n = 2$. L’écart entre notre

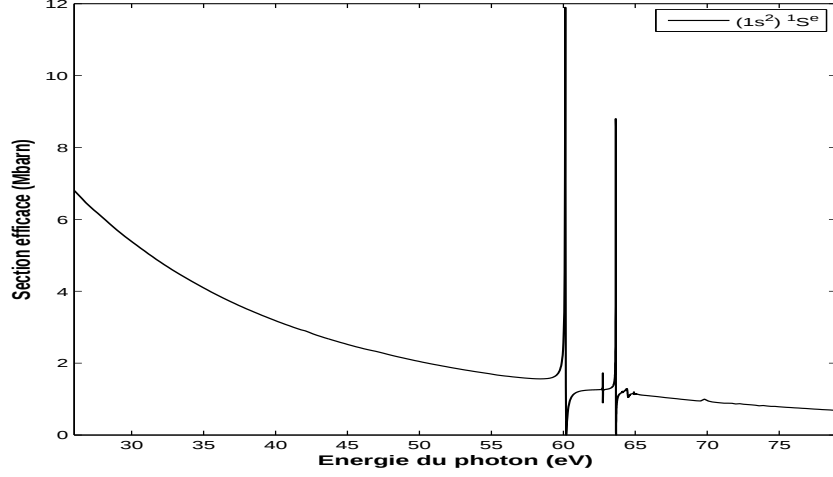


FIGURE 5.1 – Section efficace partielle de simple ionisation de l'hélium par absorption d'un photon en dessous du seuil de double ionisation. L'ion résiduel He^+ est dans l'état $n = 1$.

approche, celle de Fomouo *et al.* [8] (méthode IC combinée à la méthode de la matrice de Jacobi) et celle de Venuti *et al.* [115] qui est aussi une méthode IC est d'environ 1%. De plus, on note que nos résultats et ceux de Fomouo *et al.* sont indépendants de la jauge. L'accord avec l'expérience de Samson *et al.* [116] est au moins de 98%. Ce petit écart reste encore vrai lorsque l'ion résiduel de l'ion He^+ reste dans les états dégénérés $2s$ et $2p$. Notons que les résultats de Nicolaides *et al.* [117] sont les moins précis car ils ont utilisé une méthode variationnelle combinée à une technique de type IC qui n'est pas très précise dans ce cas.

Nous nous sommes ensuite focalisés sur le processus de photodétachement de l'ion H^- après absorption de deux photons. Dans un premier temps, nous considérons le cas où l'atome résiduel est dans le fondamental de H. Nous considérons une base sturmienne caractérisée par $l_{\max} = 3$, 20 sturmiennes par électrons et dépendant de la valeur de κ . Pour ces paramètres, nous obtenons une affinité électronique de l'ion H^- comprise entre 0.0274 et 0.0275 *u.a.* qui est moins précis que les résultats de référence de Pekeris 0.027751 *u.a.*. Les résultats présentés sur la figure 5.2 sont obtenus en résolvant l'équation (5.9). L'accord avec les résultats de Proulx *et al.* [108] est remarquable. Les petites différences proviennent du fait Proulx *et al.* [108] ont utilisé la masse réduite du système pour

TABLE 5.4 – *Section efficace totale d'ionisation en jauge longueur (L) et vitesse (V) de l'hélium par absorption d'un photon en dessous du seuil $n = 2$ pour 30 sturmiennes et $\kappa = 1$. La quatrième colonne contient les résultats expérimentaux de Samson et al. [116] et les deux dernières ceux de Fomouo et al. [8].*

Energie du photon (eV.)	Sections efficaces (en Mb)				
	Fomouo [8]		Expérience (Réf. [116])	Nos résultats	
	L	V		L	V
24.60	7.4010	7.4009	7.40	7.3794	7.3780
25.00	7.2091	7.2090	7.21	7.2036	7.2020
26.00	6.7856	6.7779	6.79	6.8049	6.7963
27.00	6.4123	6.4049	6.40	6.4061	6.3980
30.00	5.3854	5.3787	5.38	5.3913	5.3848
32.00	4.8038	4.7976	4.82	4.8188	4.8130
35.00	4.0973	4.0917	4.09	4.0987	4.0939
38.00	3.5070	3.5020	3.50	3.5136	3.5095
40.00	3.1835	3.1788	3.16	3.1843	3.1807
45.00	2.5213	2.5174	2.48	2.5264	2.5236
50.00	2.0425	2.0392	2.02	2.0459	2.0437
55.00	1.6766	1.6738	1.67	1.6984	1.6965

faire des calculs. De plus, le calcul des éléments de matrice associés à $1/r_{12}$ n'était pas stable pour des nombres de sturmiennes supérieurs à 30. Nous avons exploré la région des *résonances de Feshbach* $^1S^e$ et $^1D^e$ en dessous des seuils d'excitation $n = 2$ et $n = 3$ de l'hydrogène. Ces résonances sont spécifiques à l'impact à deux photons et n'apparaissent que dans la région où un photon est presque suffisant pour arracher l'électron au système. L'origine de ces types de résonances [118, 119] est due à la formation d'un *état lié temporaire* qui est énergétiquement en dessous du système *parent* qui est l'atome d'hydrogène. On note donc une largeur très faible des pics et par ricochet, une durée de vie finie assez élevée. Dans un second temps, nous nous sommes penchés sur le cas où l'atome résiduel reste dans les états excités $2s$ et $2p$. Nous avons reproduit avec succès la variation du taux d'ionisation Γ/I^2 à deux photons en fonction de l'énergie du photon (voir figure 5.3) qui a été calculée par Proulx *et*

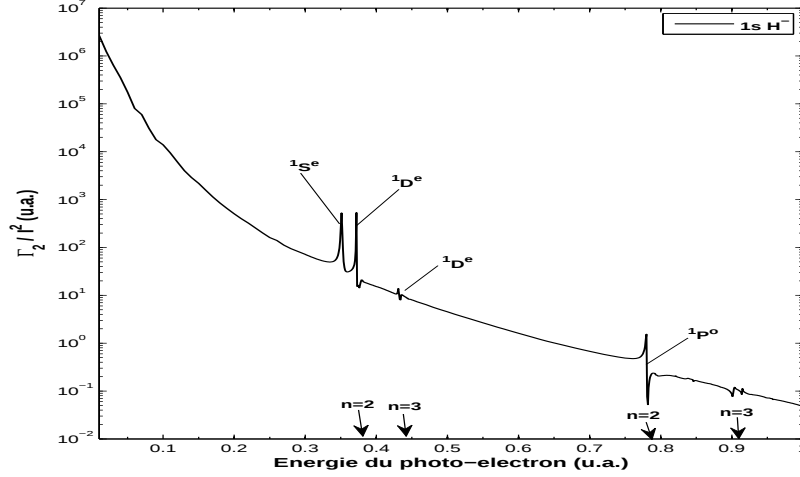


FIGURE 5.2 – Taux d'ionisation (par unité du carré de l'intensité du laser) en fonction de l'énergie de l'électron éjecté lors du processus d'ionisation sans excitation de l'ion H^- dans son fondamental par absorption de deux photons. L'énergie du photo-électron est inférieure à 1 u.a.. Les paramètres considérés sont 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

al. [109]. Cette figure montre que dans la gamme $0.15 \leq \omega(u.a.) \leq 0.35$, il existe une succession de résonances. Au delà $\omega = 0.35$ u.a., il apparaît une résonance très large pour le canal d'ionisation $2p$ qui est attribuée à une transition résonnante du coeur $1s \rightarrow 2p = 0.375$ u.a.. Notons que les contributions $2s$ sont beaucoup plus faibles. De plus, pour la fréquence du photon $\omega = 0.4$ u.a., on a un pic étroit qui provient d'une résonance de forme (à un photon), elle est liée à la dégénérescence des états $2s$ et $2p$.

D'autre part, nous appliquons la méthode au calcul des taux d'ionisation sans excitation à deux photons dans les cas où l'atome d'hélium est initialement dans l'état fondamental ou sur l'état métastable $(1s2s)^1S^e$ de l'hélium. Une fois de plus, tout comme dans le cas de l'ionisation multiphotonique de l'ion H^- , nous avons utilisé une base contenant au plus $l_{max} = 3$, 20 sturmiennes par électrons. Avec ces paramètres, nous avons obtenu des états liés de l'hélium d'énergies comprises entre -2.90283 et -2.90316 u.a. pour le fondamental de He et entre 2.145892 et 2.145926 pour l'état excité métastable $(1s2s)^1S^e$. Ces résultats de l'énergie du fondamental de l'hélium et de l'état excité métastable $(1s2s)^1S^e$ sont moins

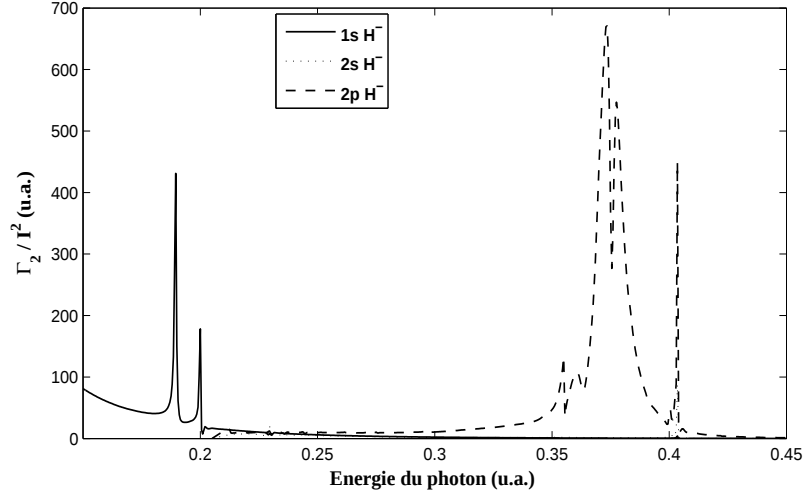


FIGURE 5.3 – Variation du taux d'ionisation $\Gamma/I^2(u.a.)$ à deux photons de H^- en fonction de l'énergie du photon ω . Le nombre de sturmienne utilisé est de $N = 30$ et le paramètre non linéaire utilisé est $\kappa = 1$.

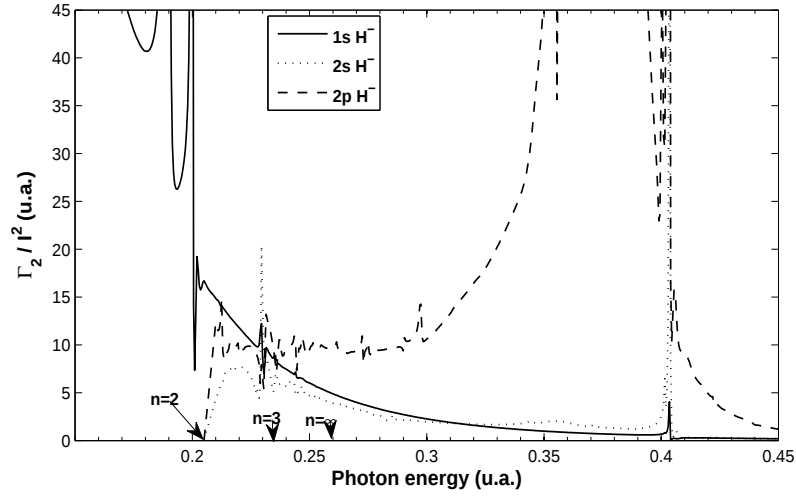


FIGURE 5.4 – Agrandissement en amplitude de la figure 5.3. Les flèches marquent les seuils d'excitation $n = 2$ et $n = 3$ de H , et le seuil de double ionisation de H^- .

précis que les résultats de référence de Pekeris $-2.903724374 u.a.$ pour le fondamental et $2.145974030 u.a.$ pour l'état $(1s2s)$. Nous avons comparé

TABLE 5.5 – Comparaison du taux d'ionisation Γ/I^2 (u.a.) entre nos résultats pour l'ionisation sans excitation à 2-photon de $\text{He}((1s^2) \ ^1S)$ pour plusieurs valeurs de κ et ceux de Proulx et al. [108]. Les paramètres considérés sont $N = 20$, $l_{\max} = 3$ et l'angle de rotation complexe $\theta = 10^\circ$. E_e est l'énergie de l'électron éjecté.

E_e	Proulx	Ngoko($\kappa = 0.5$)	Ngoko($\kappa = 1.0$)	Ngoko($\kappa = 2.0$)
0.15	0.23170	0.24309	0.22640	0.23630
0.30	0.14357	0.14892	0.14427	0.14603
0.45	0.09246	0.10571	0.09536	0.09438
0.60	0.09828	0.16026	0.10165	0.10580
0.75	0.02685	0.03093	0.02842	0.02747

TABLE 5.6 – Comparaison du taux d'ionisation Γ/I^2 (u.a.) entre nos résultats pour l'ionisation sans excitation à 2-photon de $\text{He}((1s^2) \ ^1S)$ entre nos résultats (5.9) et (5.4) et ceux de Proulx et al. [108]. Les paramètres considérés sont $N = 20$, $l_{\max} = 3$, $\kappa = 1$ et l'angle de rotation complexe $\theta = 10^\circ$. E_e est l'énergie de l'électron éjecté.

E_e	Nos calculs (5.9)	Nos calculs (5.4)	Γ_2/I^2 de Proulx
0.15	0.226396701674797	0.226397228176982	0.23170
0.30	0.144265120990515	0.144265278885034	0.14357
0.45	0.095360899834285	0.09536267776471	0.09246
0.60	0.101648221765382	0.101646581581105	0.09828
0.75	0.02841725673184449	0.028418006777545	0.02684

nos résultats de taux à ceux obtenus par Proulx *et al.* [108]. Ces résultats sont consignés dans la table 5.5. L'étude de la table 5.5 porte sur la recherche de la bonne valeur de κ qui permet de se rapprocher le plus possible des résultats de Proulx *et al.* [108]. Une analyse de cette table montre toute la difficulté que nous avons à obtenir ne serait-ce que trois chiffres de recouvrement entre nos calculs issus des formules (5.9), et ceux de Proulx *et al.* [108]. Notons que Proulx *et al.* [108] ont rencontré des problèmes de convergence dans le calcul de l'élément de matrice en

$1/r_{12}$ lorsque la taille de la base croît. Ceci est dû au fait qu'ils ont utilisé des relations de récurrence qui sont instables sur le plan numérique. Concernant la convergence de nos résultats obtenus à l'aide des deux approximations et à partir de la relation (5.9), nous avons une très bonne convergence (au moins 5 chiffres) pour $\kappa = 1$ et 20 sturmiennes entre les deux approximations. Par contre, quand on diminue κ à 0.5, on constate que la convergence s'est quand même dégradée (au moins 2 chiffres) et ne perdons pas de vue la mauvaise description du fondamental de l'hélium avec cette valeur de κ . Mais si nous augmentons le nombre de sturmiennes à 30 tout en maintenant $\kappa = 0.5$, alors cette convergence s'améliore car elle passent à moins 4 chiffres entre les deux approximations. Ainsi, pour cette valeur de $\kappa = 1$ et les paramètres cinématiques de cette table, nous avons comparé (voir table 5.6) nos résultats obtenus à l'aide des formules (5.9) et (5.4). On note une excellente convergence des deux termes (5.5) et (5.6) de la relation (5.4) dans ce régime précis. De plus, le recouvrement entre ces résultats et celui obtenu à l'aide de la relation (5.9) est d'au moins 5 décimales.

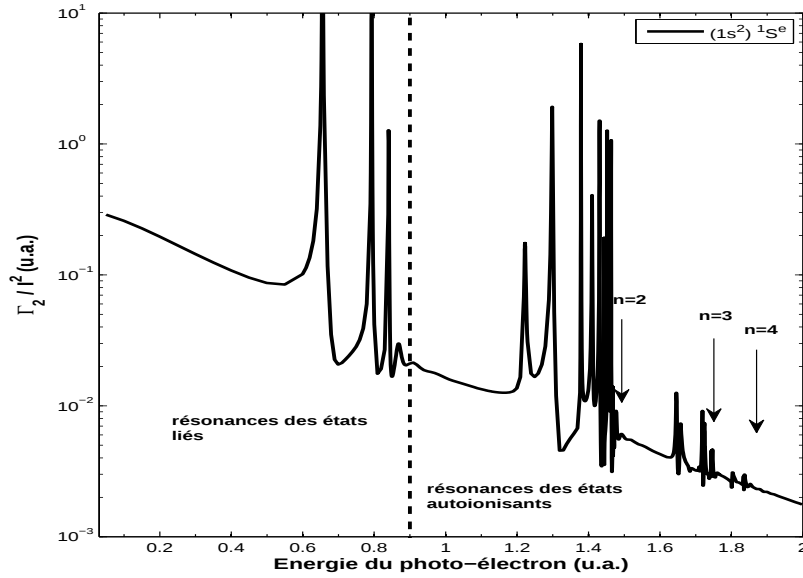


FIGURE 5.5 – Variation du taux d'ionisation Γ/I^2 (u.a.) en fonction de l'énergie de l'électron éjecté lors du processus $(2\gamma, e)$ sans excitation de $\text{He } (1s^2) ^1S$ par absorption de deux photons. Les paramètres utilisés sont 20 sturmiennes, $l_{\max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

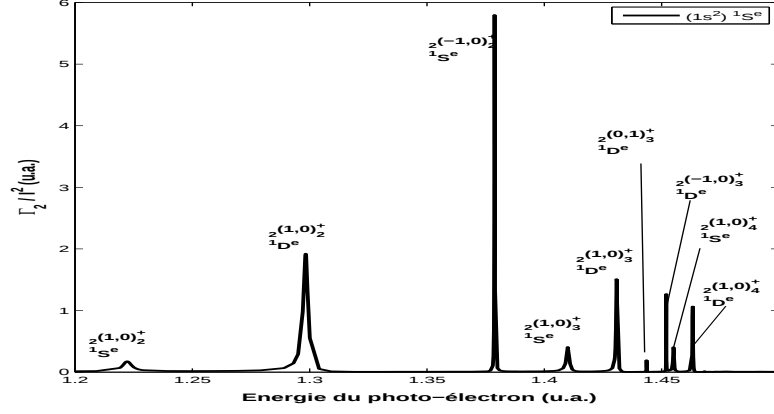


FIGURE 5.6 – Résonances en dessous du seuil $n = 2$ de l'ionisation sans excitation de l'hélium provenant de l'état $(1s^2) \ ^1S$ par impact de deux photons. Les paramètres utilisés sont 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

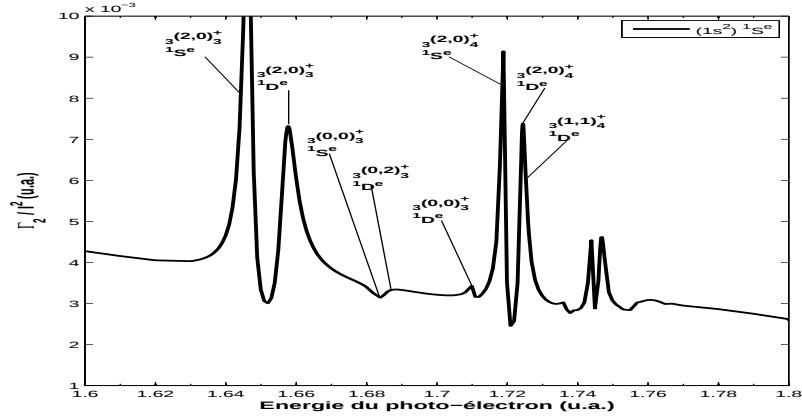


FIGURE 5.7 – Résonances en dessous du seuil $n = 3$ de l'ionisation sans excitation de l'hélium provenant de l'état $(1s^2) \ ^1S$ par impact de deux photons. Les paramètres utilisés sont 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

En utilisant ces mêmes paramètres, nous nous sommes ensuite placés dans le régime en énergie des photons qui nous permettra d'explorer les résonances $^1S^e$ et $^1D^e$ en dessous des seuils d'excitation $n = 2$ et $n = 3$ de He^+ . Les figures 5.5 et 5.8 nous donnent les spectres en énergie des taux $\Gamma/I^2(u.a.)$ dans les cas où l'hélium est initialement dans l'état

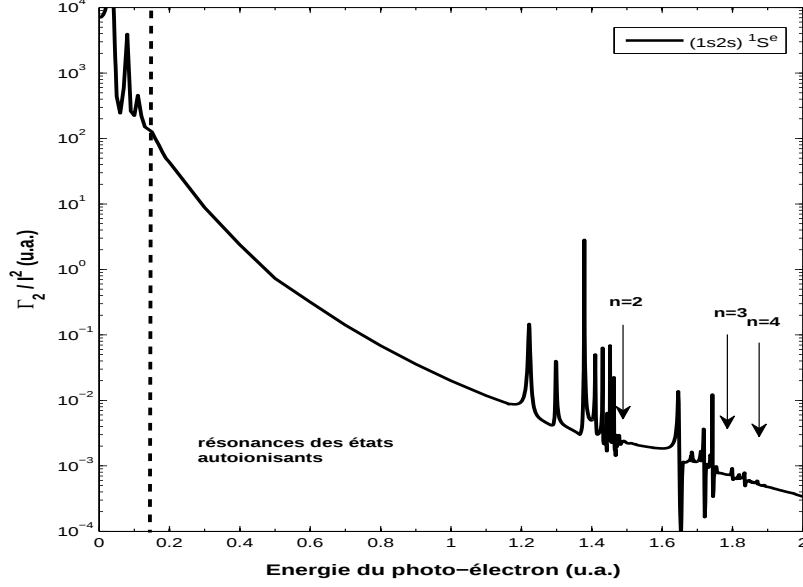


FIGURE 5.8 – Variation du taux d’ionisation Γ/I^2 (u.a.) en fonction de l’énergie de l’électron éjecté lors du processus $(2\gamma, e)$ sans excitation de He $(1s2s) {}^1S^e$ par absorption de deux photons. Les paramètres utilisés sont 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

fondamental et l’état métastable $(1s2s) {}^1S^e$. Le champ laser est polarisé linéairement et sa fréquence varie et couvre la région où un photon est presque suffisant pour ioniser simplement l’atome d’hélium. On constate que ces spectres présentent beaucoup de structures provenant des résonances dues aux transitions à 1-photon vers les états liés et simplement excités d’une part, et aux transitions à deux photons vers les états autoionisants qui sont des états doublement excités en dessous des seuils d’excitations $n = 2$ et $n = 3$ de He^+ d’autre part. Les figures 5.6 et 5.7 d’une part, 5.9 et 5.10 d’autre part sont des agrandissements respectifs des figures 5.5 et 5.8. Elles permettent de mieux visualiser les résonances (états autoionisants) de type *Feshbach* qui s’y trouvent. Notons que les positions et les largeurs des résonances ${}^1S^e$ et ${}^1D^e$ ont été calculées par Proulx *et al.* [108] et comparées à celles de Ho *et al.* [55] et Oza *et al.* [120]. Il convient de souligner que le maximum d’énergie avec lequel nous frappons le système jusqu’à présent est $\omega = 1.45$ u.a.. Lorsque le système absorbe deux photons ayant cette énergie suivant un processus direct,

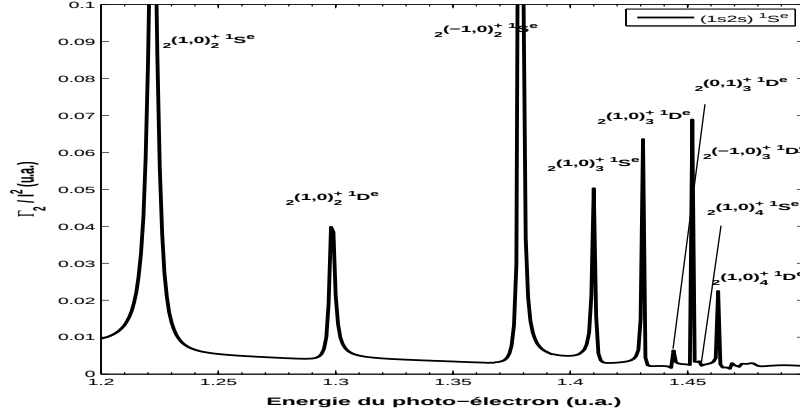


FIGURE 5.9 – Résonances en dessous du seuil $n = 2$ de l'ionisation sans excitation de l'hélium provenant de l'état $(1s2s) {}^1S$ par impact de deux photons. Les paramètres utilisés sont 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

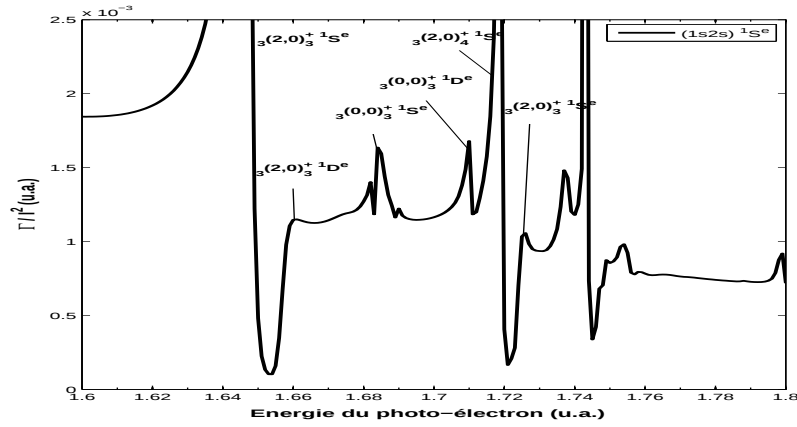


FIGURE 5.10 – Résonances en dessous du seuil $n = 3$ de l'ionisation sans excitation de l'hélium provenant de l'état $(1s2s) {}^1S$ par impact de deux photons. Les paramètres utilisés sont 20 sturmiennes, $l_{max} = 3$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

on se trouve juste en dessous du seuil de double ionisation et dans le voisinage des seuils de simple ionisation $n \geq 4$. Nous constatons qu'avec ces paramètres cinématiques relativement faibles, nous reproduisons toutes les structures existantes dans le taux sous les seuils $n = 2$ et $n = 3$. Mais sous le seuil $n = 4$, cette même base ne permet pas de reproduire les bons

résultats. Pour le faire, nous devons encore diminuer la valeur de κ ou augmenter le nombre de sturmiennes et le nombre de couples de moments angulaires. Comme nous utilisons le même paramètre non linéaire pour décrire l'état initial et l'état final, diminuer κ va détériorer énormément la qualité du fondamental de l'hélium. Ainsi, il est utile d'introduire deux valeurs différentes de κ : une grande valeur pour décrire l'état initial et une petite valeur (inférieure à 0.5) pour décrire l'état final. Dans ce cas, les matrices de recouvrement et associée à $1/r$ sont pleines, et ne peuvent être calculées analytiquement comme tel est le cas actuellement. Nous sommes obligés d'utiliser la quadrature de Gauss-Laguerre pour évaluer ces éléments de matrice. C'est de cette manière que nous procédons dans la sous-section suivante concernant le rôle des résonances de coeur lors de l'ionisation avec excitation après absorption de deux photons par le système.

5.3.2 Résonances de coeur $n \geq 2$ et simple ionisation de He à deux photons.

Il est évident que les résonances de coeur jouent un rôle important dans le régime séquentiel puisque la fréquence du photon peut être égale aux fréquences des transitions $\text{He}^+(1s) \rightarrow \text{He}^+(np)$. En outre, si le processus est purement séquentiel, seuls les processus d'ionisation-excitation où l'ion résiduel est dans un état excité np peuvent avoir un caractère résonnant. Une transition séquentielle vers les états nl (avec $l \neq 1$) est donc impossible (règle de sélection). Dans le cas du processus direct où les corrélations électroniques jouent un rôle important, trois questions se posent.

1. La section efficace totale de simple ionisation avec excitation de He à deux photons du régime direct peut-elle aussi avoir un caractère résonnant ?
2. S'il y a des résonances, ces dernières sont-elles présentes dans tous les spectres de sections partielles ?
3. S'il y a des résonances, quelle est leur véritable origine ?

Pour répondre à ces questions, considérons à présent la section de simple ionisation-excitation dans les niveaux dégénérés $n = 2$ de He^+ . Pour une base de 20 sturmiennes, nous obtenons des spectres en énergie du taux d'ionisation des voies $2s$ et $2p$ qui sont donnés respectivement

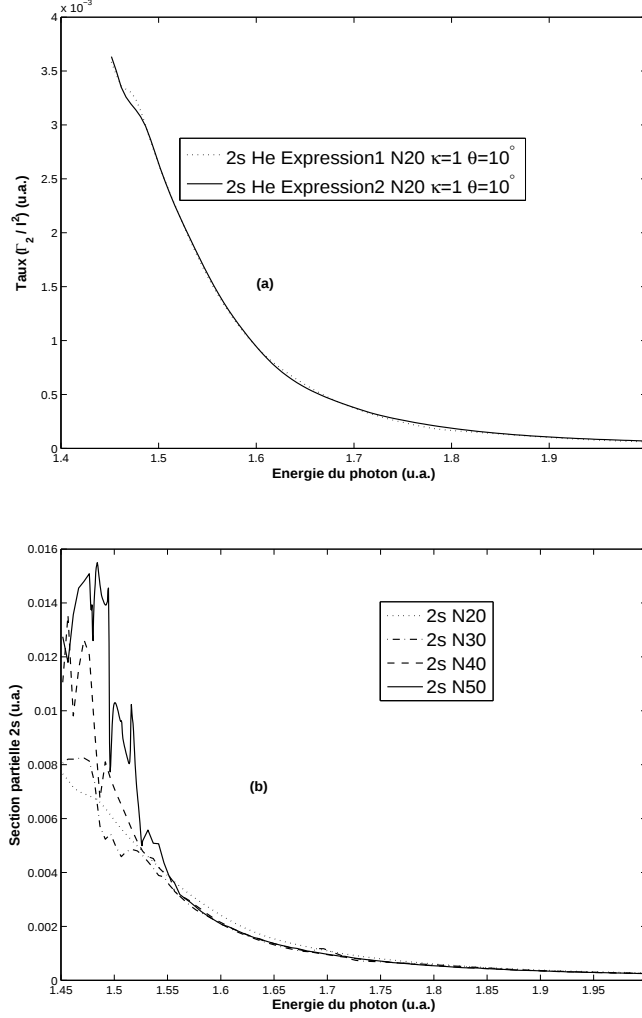


FIGURE 5.11 – (a) Contribution de la résonance de coeur $2s$ au taux de la simple ionisation à deux photons de He . Les paramètres cinématiques sont $N = 20$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$. (b) Etude de la convergence de la section efficace partielle généralisée (u.a.) de la voie $2s$ en fonction du nombre de sturmienne N pour $\kappa = 1$.

dans les figures 5.11(a) et 5.12(a). Sur la figure 5.11(a), on constate que le spectre $2s$ a une allure décroissante douce sans aucune résonance autour de $\omega_{1s \rightarrow 2p} = 40.8 \text{ eV}$ (1.5 u.a.). On note toutefois que proche du seuil ($\omega \sim 39.5 \text{ eV}$ (1.45 u.a.)), les sections efficaces partielles calculées à l'aide des deux méthodes (5.4) et (5.3) sont légèrement différentes.

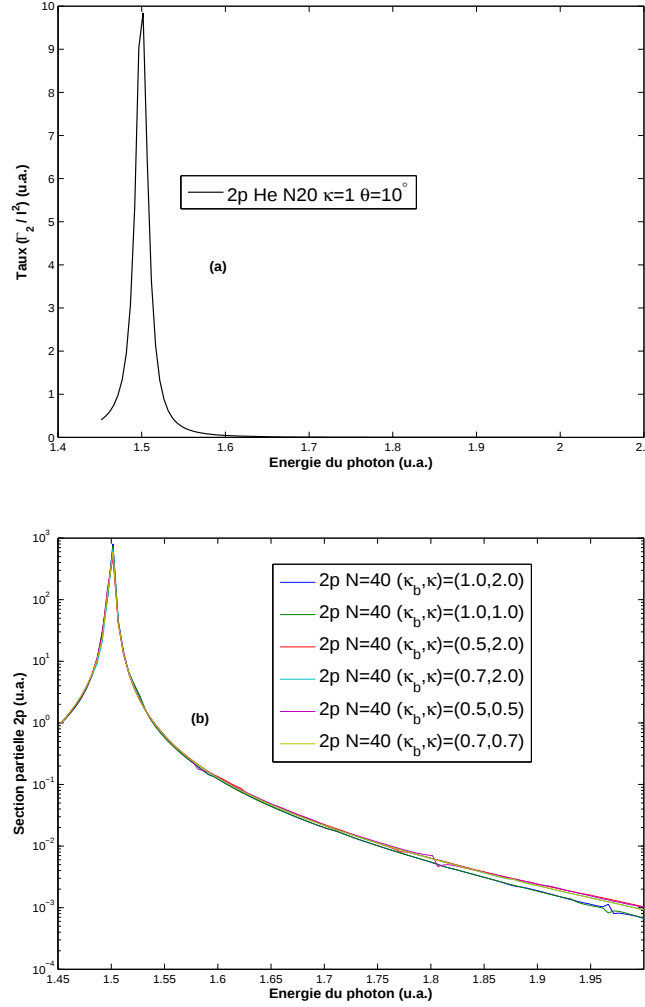


FIGURE 5.12 – (a) Contribution de la résonance de coeur $2p$ au taux de la simple ionisation à deux photons de He. Les paramètres cinématiques sont $N = 20$, $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$. (b) Etude de la convergence de la section efficace partielle généralisée (u.a.) de la voie $2p$ en fonction de kappa pour $N = 40$.

Par ailleurs, la section partielle $2p$ (voir figure 5.12(a)) présente une large résonance autour de $\omega_{1s \rightarrow 2p} = 40.8 \text{ eV}$ (1.5 u.a.) et décroît ensuite tout doucement comme la section partielle $2s$. Pour 40 sturmiennes, la convergence des résultats $2p$ est étudiée sur la figure 5.12(b)) en fonction des couples de paramètres non linéaires. On note une excellente

convergence des résultats quelles que soient les expressions utilisées. En revanche, on s'attend à ce que la section efficace partielle d'ionisation simple avec excitation dans l'état $2s$ présente également un caractère résonnant suite au mélange Stark (en champ faible) des états $2s$ et $2p$, provenant du champ électrique créé par l'électron éjecté. On peut légitimement donc se demander si les résultats ont convergé en fonction du nombre de sturmiennes. Les résultats pour 30, 40 et 50 sturmiennes qui sont représentés dans la figure 5.11(b) montrent qu'il existe bien une instabilité numérique contrairement à ce que nous obtenons pour le canal $2p$. Nous avons également évalué pour 40 sturmiennes la section

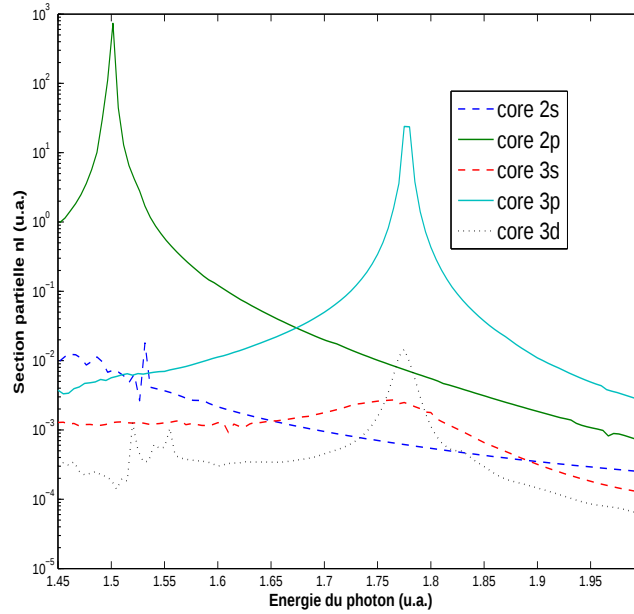


FIGURE 5.13 – Sections efficaces partielles des voies $n = 2$ et $n = 3$ d'ionisation-excitation de He par absorption de deux photons. Le nombre de sturmiennes utilisé est de $N = 40$ et le paramètre non linéaire utilisé est $\kappa = 1$.

efficace du processus $(2\gamma, e)$ avec excitation pour les canaux dégénérés $n = 3, 4$ et 5 . Dans ces cas, nous n'observons presque plus d'instabilités numériques et les résonances de coeur se manifestent bien dans presque tous les canaux. Sur la figure 5.13, on observe sur toutes les sections efficaces partielles des voies $3s$, $3p$ et $3d$, la présence des résonances au voisinage de la fréquence de transition $1s \rightarrow 3p$ à 1-photon du parent He^+

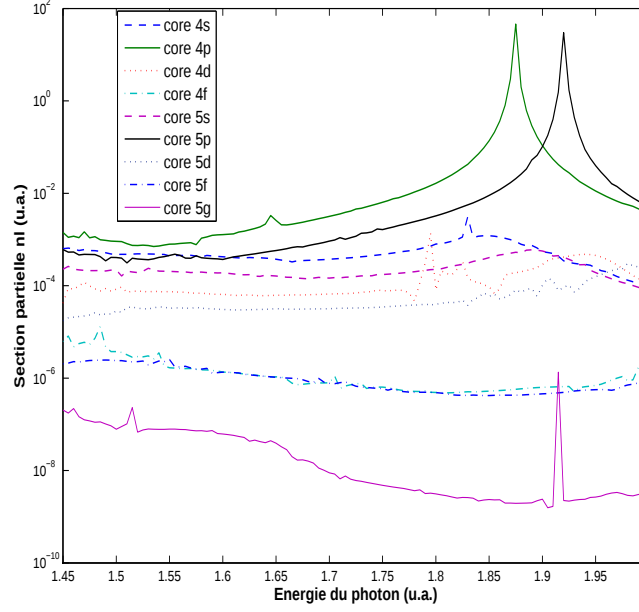


FIGURE 5.14 – Sections efficaces partielles des voies $n = 4$ et $n = 5$ d'ionisation-excitation de He par absorption de deux photons. Le nombre de sturmienne utilisé est de $N = 40$ et le paramètre non linéaire utilisé est $\kappa = 1$.

qui est de $\omega_{1s \rightarrow 3p} = 48.4 \text{ eV}$ (1.78 u.a.). Pour les voies $n = 4$ et $n = 5$ (voir figure 5.14), on note que les sections partielles des canaux $4s$ et $4p$ d'une part, $5s$, $5p$ et $5g$ d'autre part présentent des résonances pour des énergies respectives du photon autour de $\omega_{1s \rightarrow 4p} = 51.03 \text{ eV}$ (1.87 u.a.) et $\omega_{1s \rightarrow 5p} = 52.25 \text{ eV}$ (1.92 u.a.). Par contre, on observe des instabilités dans les sections partielles des canaux $4d$ et $5d$ pour ces gammes d'énergie. Par ailleurs, les sections partielles des voies $4f$ et $5f$ ont presque le même comportement avec une absence de résonance. Nous pensons que ce sont des problèmes de convergences numériques qui sont responsables de ces instabilités et de cette absence de résonance dans les sections partielles nd et nf de la figure 5.14. En conclusion, nous pouvons dire que les canaux np contribuent majoritairement et que la présence des structures dans la section partielle des autres canaux nl avec $l \neq 1$ provient du mélange Stark des états nl et np dû au champ électrique produit par le premier électron éjecté. En revanche, la figure (5.15) montre que les canaux np suffisent à reproduire les résonances de coeur qui ont été obtenues.

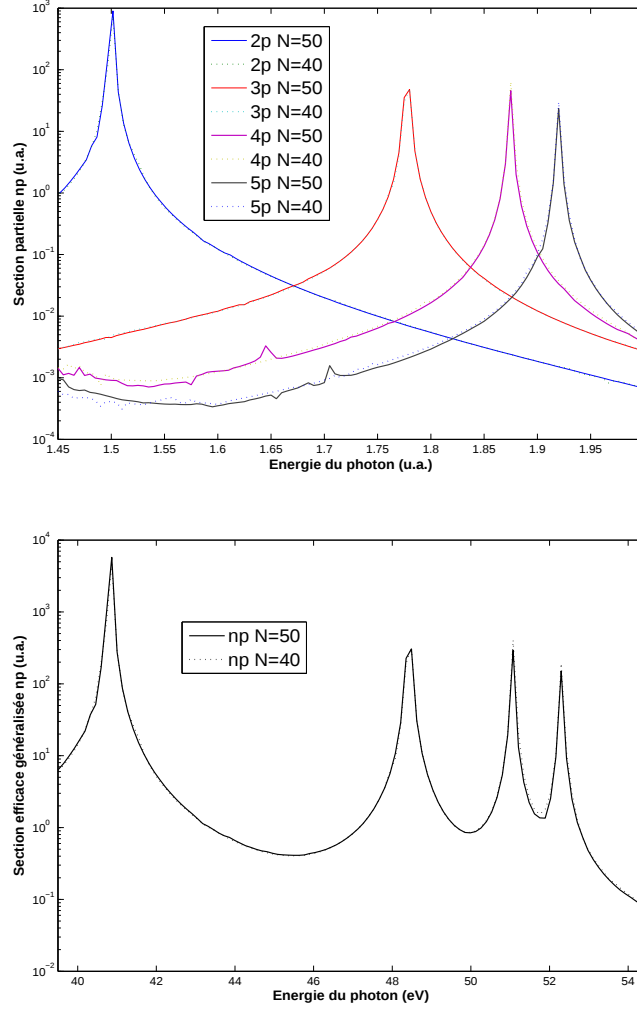


FIGURE 5.15 – A gauche, convergence des résultats des sections efficaces partielles np à deux photons de He en fonction du nombre de sturmiennes par électron. A droite, section efficace généralisée totale des voies np . Les paramètres cinématiques sont $N = 40$ et 50 , $\kappa = 1$ et $\theta = 10^\circ$.

nues par des approches théoriques différentes de Shakeshaft [5] et de Feng et van der Hart [6]. De plus, excepté les canaux np , les contributions des sections partielles sont une fonction décroissante des nombres quantiques principal n et orbital l . Sur la figure 5.16, nous comparons nos résultats de la section efficace totale du processus direct d'ionisation-excitation

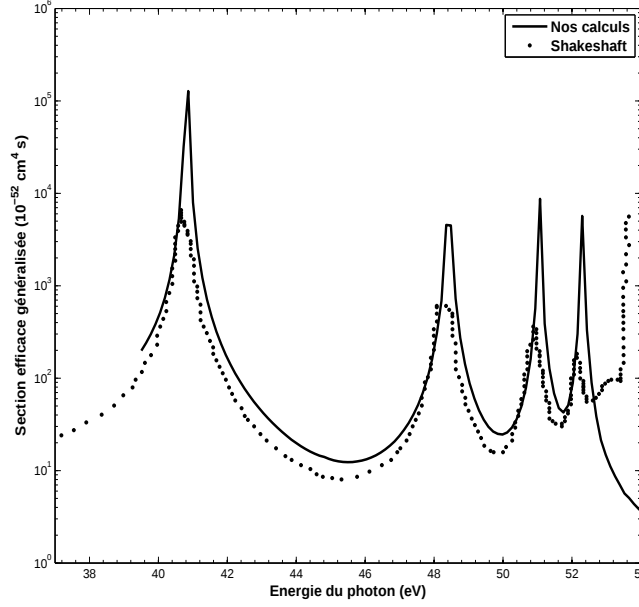


FIGURE 5.16 – Sections efficaces totales du processus direct d’ionisation-excitation de He par absorption de deux photons. Le nombre de sturmiennes utilisé est de $N = 40$ et le paramètre non linéaire utilisé est $\kappa = 1$. En losange, ce sont les résultats de la TCS de Shakeshaft [5] et en trait continu, nos résultats.

par absorption de deux photons aux résultats obtenus par Shakeshaft [5] et par Feng et van der Hart [6]. Qualitativement, nous remarquons que nos résultats sont bons car les larges résonances de coeur sont situées aux positions attendues. Quantitativement, nous avons montré que le léger écart observé est lié à un problème de convergence des différentes méthodes théoriques.

Penchons-nous à présent sur la question sensible de l’origine de ces larges pics qui sont observés dans les figures ci-dessus. Revenons à l’amplitude de transition qui s’écrit

$$A_{\vec{k},nl}^{(2)} = \langle \Psi_{\vec{k},nl}^- | V_+ G_a^{(+)}(E_i + \omega) V_+ | \Psi_i \rangle. \quad (5.15)$$

Réécrivons le propagateur $G_a^{(+)}(E)$ sous la forme

$$G_a^{(+)}(E) = \frac{|\Psi_i\rangle\langle\Psi_i|}{E - E_i} + \sum_{n'l'} \int d\vec{k}' \frac{|\Psi_{\vec{k}',n'l'}^- \rangle \langle \Psi_{\vec{k}',n'l'}|}{E - E_{\vec{k}',n'l'}}, \quad (5.16)$$

où la sommation sur n' et l' porte aussi sur les états intermédiaires du continuum de l'ion résiduel. Utilisons la relation de conservation de l'énergie du processus à deux photons qui permet d'écrire que $E_i + \omega = E_{\vec{k},nl} - \omega$. De plus, insérons la relation (5.16) dans (5.15) et sachant que $\langle \Psi_i | V_+ | \Psi_i \rangle = 0$, on obtient

$$A_{\vec{k},nl}^{(2)} = \sum_{n'l'} \int d\vec{k}' \frac{\langle \Psi_{\vec{k},nl}^- | V_+ | \Psi_{\vec{k}',n'l'}^- \rangle \langle \Psi_{\vec{k}',n'l'}^- | V_+ | \Psi_i \rangle}{E_{\vec{k},nl} - \omega - E_{\vec{k}',n'l'}}. \quad (5.17)$$

Nous voyons que le dénominateur de la relation (5.17) possède un pôle lorsque $k_e = k'_e$ et $E_{\vec{k},nl} - E_{\vec{k}',n'l'} = \omega$. Ce pôle est proche de l'axe de coupure dans l'espace complexe des énergies et qui correspond aux états du continuum. Notons qu'on ne s'attend pas à ce que ce pôle donne lieu à la résonance. En revanche, le premier élément de matrice de la relation (5.17) est très "piqué" lorsque $k_e = k'_e$. En effet, si on néglige les corrélations électroniques, cet élément de matrice qui implique le couplage de fonctions coulombiennes pour des énergies $k_e = k'_e$ est une distribution. Dans le cas où les corrélations électroniques sont présentes, le problème de savoir si on obtient encore une distribution reste ouvert.

Pour répondre à cette question, nous avons fait une description mathématique des larges pics observés dans les sections totales ci-dessus. Ainsi, nous avons utilisé les fonctions SCWF de la méthode de la matrice J à deux régions pour étudier la transition dipolaire donnée par le second terme du taux partiel (5.17)

$$A_{(\vec{k}'_{e,1s}) \rightarrow (\vec{k}_{e,2p})} = \langle \Theta_{\vec{k}_{e,2p}}^{L_f M_f} | V_+ | \Theta_{\vec{k}'_{e,1s}}^{L_{int} M_{int}} \rangle, \quad (5.18)$$

et voir si c'est cette transition qui est responsable de la résonance observée dans la section partielle $2p$. Notons que cette relation (5.18) correspond à une transition à 1-photon dans laquelle les états initial et final sont des fonctions du simple continuum décrites respectivement par des fonctions du simple continuum $\Psi_{\vec{k}'_{e,1s}}^-$ de la voie $1s$ et $\Psi_{\vec{k}_{e,2p}}^-$ de la voie $2p$ obtenues à l'aide de la méthode de Jacobi. Dans la relation (5.17), nous supposons que l'état intermédiaire dominant est le canal $1s$ qui a été obtenu après que l'atome d'hélium ait absorbé un photon et ait fait la dite transition. Ainsi, l'énergie de cet état est obtenue à partir de la relation de conservation pour une transition à 1-photon. De plus, nous notons que l'énergie de la voie $2p$ est issue de la relation de conservation pour une transition à 2-photon. Si nous substituons la relation (4.15) pour chaque canal dans

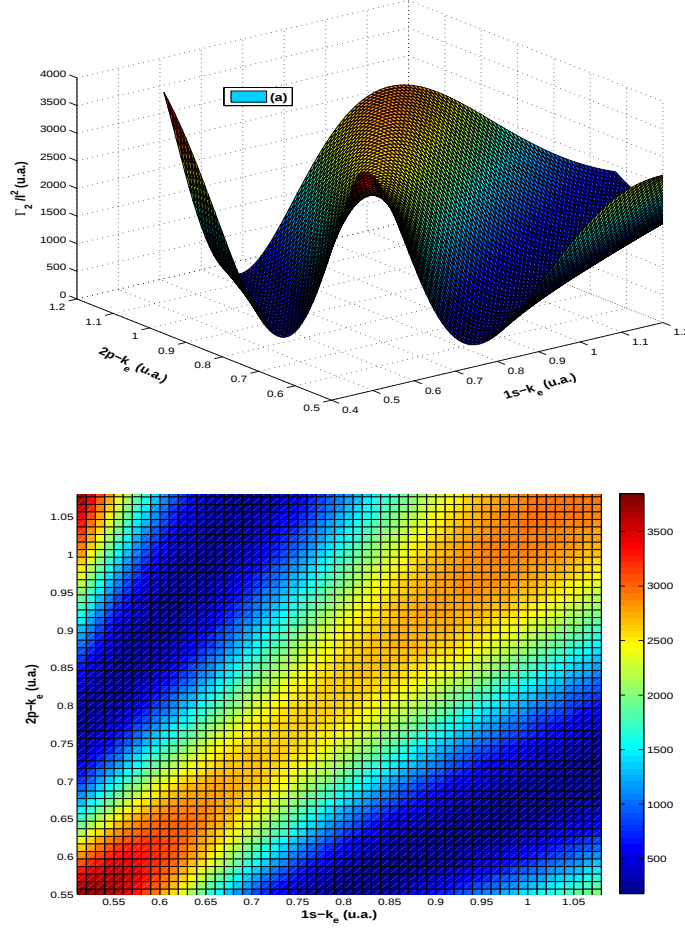


FIGURE 5.17 – Calcul matrice J du taux de transition $2\pi|\langle\Psi_{\vec{k}_e,2p}^-|V_+|\Psi_{\vec{k}'_e,1s}^- \rangle|^2\rho(E)$ ($10^{10}u.a.$) en fonction des énergies des électrons éjectés dans les voies intermédiaire ($\vec{k}'_e, 1s$) et finale ($\vec{k}_e, 2p$). Les parties angulaires des deux voies ont été fixées à $\theta = 60^\circ$ et $\phi = \pi$. (a) courbe 3d; (b) Vue de dessus de la courbe (a).

l'équation (5.18), on obtient quatre termes

$$A_{(\vec{k}'_e,1s)\rightarrow(\vec{k}_e,2p)} = \sum_{i=1}^4 A_{(\vec{k}'_e,1s)\rightarrow(\vec{k}_e,2p)}^{(i)}, \quad (5.19)$$

dont les trois premiers sont en général faciles à calculer. Ce sont ceux qui impliquent toujours au moins une fonction de la zone interne (les termes

ayant $b_j^\Gamma(E, \hat{k}_e)$) dont le rôle est de tronquer la série et de la faire converger. Enfin, le quatrième terme est celui impliquant les deux coefficients de la zone asymptotique $f_{n_{lf}}^{\Gamma_f \Gamma'_f}(E_f, \hat{k}_e)$ et $f_{n_{lint}}^{\Gamma_{lint} \Gamma'_{lint}}(E_{int}, \hat{k}'_e)$ (avec n_{lf} et n_{lint} qui varie de N à l'infini). C'est le terme de couplage entre deux fonctions du continuum. Nous obtenons en principe une distribution à cause du couplage des contributions asymptotiques de ces fonctions du continuum ($A_{(\vec{k}'_e, 1s) \rightarrow (\vec{k}_e, 2p)}^{(4)}$ de la relation (5.19)). Toutefois, le calcul est délicat et ne peut être mené dans l'état actuel des choses car il nécessite une étude minutieuse de la convergence en fonction du nombre de sturmiennes. Ce qui conduit à des calculs très lourds. En fait avec le nombre de fonctions sturmiennes que nous pouvons considérer (70 maximum), nous n'obtenons pas de convergence pour $k_e = k'_e$ même en faisant appel aux algorithmes d'accélération de convergence (approximants de Padé). Les résultats présentés sur la figure (5.17) sont obtenus pour 20 sturmiennes. Ils suggèrent que l'élément de matrice (5.19) présente bien un maximum prononcé lorsque $k_e = k'_e$.

En conclusion, nous pouvons dire que dans le cadre d'un calcul perturbatif à l'ordre le plus bas et indépendant du temps, les résonances de coeur se manifestent dans tous les canaux d'excitation de l' He^+ . *Insistons sur le fait que la notion de section efficace généralisée n'est vraie que dans une approche perturbative. De plus, nous avons travaillé en basse intensité où sont absentes les oscillations de Rabi. Ces oscillations sont dues au couplage entre deux états discrets (par exemple entre les niveaux 1s et 2p dans He^+) suite à l'absorption et à l'émission d'un photon d'énergie qui correspond à la transition dipolaire. Remarquons qu'en haute intensité, les oscillations de Rabi contribuent, influençant du coup l'électron qui est éjecté puisque le potentiel coulombien est à portée infinie.* Par contre, la question de savoir si ces résonances subsistent dans un calcul non perturbatif reste ouverte. Toutefois, soulignons qu'à la résonance et dans un calcul non-perturbatif, la notion de section efficace généralisée perd tout son sens et on ne peut plus séparer les transitions séquentielle et directe. Par ailleurs, si on procède par analogie à la double ionisation à deux photons, on s'attend à ce que la présence éventuelle de ces résonances provienne du processus au cours duquel chaque électron absorbe son photon.

Chapitre 6

Etude du processus d'ionisation-excitation de l'hélium par impact d'électrons dans l'approximation de Born

6.1 Introduction

Dans ce chapitre, il est question d'analyser le rôle des corrélations électroniques lors de l'ionisation sans excitation et avec excitation de l'atome d'hélium par impact d'électrons rapides. Ainsi nous évaluons les sections efficaces différentielles triples (TDCS) dudit processus dans l'approximation de Born. Pour ce faire, nous utilisons dans un premier temps les fonctions de Byron et Joachain (BYWF) [9] et le produit symétrisé d'une fonction coulombienne et d'une fonction liée (PSCB) pour effectuer de nombreux tests analytiques et numériques afin de valider les algorithmes utilisés et les résultats obtenus. Ensuite, nous remplaçons la fonction d'onde BYWF par la fonction d'onde générée à l'aide d'une méthode IC (ICWF) [7], et la fonction d'onde PSCB par la fonction d'onde matrice J (SCWF) pour décrire respectivement les états initial et final du processus ($e, 2e$) sans et avec excitation. Dans le cas de l'ionisation sans excitation, nous utilisons aussi la fonction d'onde PSCB pour décrire l'état final. Enfin, nous avons entamé un calcul du second Born. Les calculs analytiques et tous les tests effectués qui s'y rapportent se trouvent dans l'**annexe D**. Cependant, le calcul numérique du terme du second-ordre est très lourd et requiert des ressources informatiques importantes dont nous ne

disposons pas encore. Nous terminons par une étude comparative entre nos résultats et certains résultats théoriques et expérimentaux existants dans la littérature. Mais avant de présenter notre approche théorique, faisons un bref rappel des données expérimentales et des autres approches théoriques existantes.

6.2 Quelques données expérimentales

Nous classifions ces données en deux groupes. Le premier regroupe les expériences faites il y a plusieurs années et il s'agit entre autres des données de Dupré *et al.* [19], Stefani *et al.* [20, 121, 122], Rouvellou *et al.* [13] et Dogan *et al.* [21]. Le second groupe quant à lui concerne les expériences récentes qui ont été réalisées par Bellm *et al.* [22, 23], par Dürr *et al.* [24], par deHarak *et al.* [25]. Les auteurs du premier groupe ont donné les sections efficaces pour l'ionisation de l'atome d'hélium laissant l'ion résiduel dans les états $n = 1$ et $n = 2$, et ce uniquement dans la géométrie coplanaire asymétrique. En plus, Dupré *et al.* [19] a aussi étudié les canaux $n = 3, 4$. Dans le cas $n = 2$, les états $2s$ et $2p$ étant non résolus font que la section efficace mesurée tient compte des contributions des voies $2s$ et $2p$. Puisque l'expérience est absolue, elle doit donc fournir des données qui permettent de tester les différents modèles théoriques existants. Parmi les auteurs du second groupe, Bellm *et al.* ont mesuré le rapport des sections efficaces différentielles triples (TDCS) pour l'ionisation simple sans et avec excitation. Par ailleurs, les mesures de deHarak *et al.* [25] et de Dürr *et al.* [24] sur l'ionisation respectivement sans et avec excitation ($n = 2$) sont de l'hélium à noter. Notons que pour les cinématiques de ces deux récentes expériences, les canaux qui conduisent à l'autoionisation de l'hélium sont ouverts. Dans toutes ces expériences, l'angle de l'électron diffusé θ_f est fixé et la mesure de la TDCS se fait en fonction de l'angle θ_e de l'électron éjecté ayant une énergie $E_e = k_e^2/2$. Focalisons nous d'abord sur les expériences du premier groupe.

Les données expérimentales de Dupré *et al.*

Dans les expériences de Dupré *et al.* [19], l'énergie $E_f = k_f^2/2$ de l'électron diffusé est fixée à 5500 eV et les mesures sont faites pour les énergies de l'électron éjecté E_e égales à 5 eV, 10 eV et 75 eV, et pour des angles de diffusion fixés respectivement à 0.35°, 0.32° et 1°. Cette cinématique s'accorde parfaitement avec la situation que nous envisageons dans notre

approche théorique c'est-à-dire une collision à grand paramètre d'impact. L'acceptance en angle $\Delta\Omega_f$ du détecteur pour un électron diffusé est de $3 \times 10^{-5} sr$. Ce qui correspond à un cône de demi-angle au sommet de 0.18° lequel est très proche ou du même ordre de grandeur que les angles de l'électron diffusé 0.35° et 0.32° pour les énergies $E_e = 5 eV$ et $E_e = 10 eV$. L'acceptance en angle $\Delta\Omega_e$ du détecteur pour l'électron éjecté est de $3 \times 10^{-2} sr$, correspondant à un cône de demi-angle au sommet de 5.6° . La résolution en énergie du détecteur ΔE_e , pour l'électron éjecté vaut $5 eV$, tandis que celle ΔE_f pour l'électron diffusé vaut $8 eV$ pour des mesures avec $E_e = 5 eV$ et $E_e = 10 eV$, et vaut $12 eV$ pour la mesure avec $E_e = 75 eV$. Quant à la résolution en énergie pour la détection en coïncidence ΔE_c , elle vaut $4.2 eV$ pour $E_e = 5 eV$ et $E_e = 10 eV$, et vaut $4.6 eV$ pour $E_e = 75 eV$. Nous notons que les résolutions en énergie ΔE_e et ΔE_c sont du même ordre que les énergies éjectés pour les deux cinématiques $E_e = 5 eV$ et $E_e = 10 eV$. D'une part, lorsque $E_e = 5 eV$, l'état du continuum $\{e^-(\vec{k}_e) + He^+\}$ possède une énergie de $70.4 eV$ au dessus du fondamental de l'hélium. Dans le voisinage des $70 eV$, il existe une série de résonances de l'hélium associées au seuil $He^+(n=3)$ de l'ion résiduel qui peuvent se dépeupler vers les états finaux $He^+(n=2)$. D'autre part, le cas $E_e = 10 eV$ correspond à un état du continuum d'énergie $75.4 eV$ au dessus du fondamental de He. Cette énergie se trouve entre les seuils $n=3$ et $n=4$ de He^+ où se trouvent des états autoionisants, en particulier les états doublement excités ($4lnl'$). Les résultats de Dupré *et al.* [19] ont été désommés pour éliminer la contribution de l'ionisation simple sans excitation qui domine largement. Par ailleurs, Dupré *et al.* [19] font remarquer que la mesure à $E_e = 5 eV$ avec une résolution énergétique qui est du même ordre ($\Delta E_e = 5 eV$) va moyennner très fortement l'effet des états autoionisants. C'est la raison pour laquelle, à l'exception de Fang et Bartschat [123], aucune des approches théoriques existantes ne tient compte des effets des canaux impliquant des états autoionisants. Nous pouvons citer les travaux de Marchalant *et al.* [94, 12], de Bartschat *et al.* [124] et de Kheifets *et al.* [17]. Toutefois, si on veut comparer la théorie avec l'expérience, la seule approche rigoureuse est de convoluer les résultats théoriques avec la fonction de réponse de l'analyseur. C'est cette approche que Fang et Bartschat [123] ont suivie dans le cas où l'électron est éjecté avec une énergie de $10 eV$. Toutefois, ils ont convolué leurs résultats du second Born avec une gaussienne de largeur beaucoup plus faible que l'incertitude sur l'énergie de l'électron éjecté. Leurs résultats ainsi que ceux des autres approches théoriques [94, 12, 17] restent en

désaccord avec les données expérimentales de Dupré *et al.* [19]. Dans le cas présent, notre approche théorique fondée sur la théorie de la matrice de Jacobi, prend en compte précisément le couplage du canal d'entrée avec tous les autres canaux ouverts et fermés, en particulier ceux qui impliquent des états autoionisants.

Les données expérimentales de Stefani *et al.*

Les données de Stefani *et al.* [20, 121, 122] pour l'ionisation avec excitation ($n = 2$) et sans excitation ($n = 1$) de l'hélium ont été faites pour des énergies de l'électron diffusé E_f , de l'électron éjecté E_e , et de l'angle de diffusion θ_f égales à : (a) $E_f = 1500 \text{ eV}$, $E_e = 20 \text{ eV}$, $\theta_f = 4^\circ$; (b) $E_f = 570 \text{ eV}$, $E_e = 10 \text{ eV}$, $\theta_f = 4^\circ$; (c) $E_f = 570 \text{ eV}$, $E_e = 40 \text{ eV}$, $\theta_f = 4^\circ$. Bien que ces mesures aient été réalisées pour des énergies d'impact faibles comparées à celles des expériences de Dupré *et al.*, la cinématique considérée s'accorde bien avec les considérations et hypothèses théoriques que nous avons faites. Passons à présent aux expériences du second groupe.

Les données expérimentales du second groupe

Passons à présent aux données du second groupe qui ont permis d'améliorer les résultats expérimentaux. Très récemment, Bellm *et al.* [22, 23] ont présenté une nouvelle approche de la mesure des processus $(e, 2e)$ avec une grande précision. En utilisant un spectromètre électronique toroïdal très sensible, Bellm *et al.* ont mesuré les rapports entre la section efficace de la transition laissant l'ion dans son état fondamental et les sections efficaces pour des transitions laissant l'ion résiduel de l'hélium dans les trois premiers états excités. Ces rapports sont insensibles aux problèmes de normalisation des données [22, 23]. Ces derniers ont traité aussi bien le cas de la géométrie coplanaire asymétrique que symétrique et ils ont pu fournir des résultats pour des états excités supérieurs à $n = 2$ notamment $n = 3$ et $n = 4$. Les données ont été faites dans les géométries coplanaires asymétrique et symétrique. L'avantage de mesurer directement les rapports est qu'il permet de faire une comparaison directe entre les théories et l'expérience sans devoir renormaliser les données expérimentales.

Par la suite, deHarak *et al.* [25] ont fait des mesures de la TDCS d'ionisation sans excitation de l'hélium par impact d'électrons d'énergie égale à 488 eV avec une diffusion à 20.5° et un électron éjecté avec une énergie

de 34.1 eV. Dans ce cas précis, les canaux autoionisants notamment les états doublement excités $(2s^2)^1S$, $(2p^2)^1D$ et $(2s2p)^1P$ sont ouverts.

Dans la continuité, Dürre *et al.* [24] ont fait des mesures pour l'ionisation avec excitation ($n = 2$) de l'atome d'hélium pour une énergie d'impact électronique égale à 105 eV, un angle de diffusion de $10 \pm 2^\circ$ et $20 \pm 5^\circ$, un électron éjecté avec 7.5 eV. Notons que dans cette cinématique précise, les canaux qui conduisent à l'autoionisation de l'hélium sont ouverts notamment ceux qui sont très proches du seuil $n = 3$.

6.3 Quelques approches théoriques

La plupart des calculs du processus $(e, 2e)$ avec excitation ont été menés dans le cadre de la théorie des perturbations c'est-à-dire à l'aide des deux premiers termes de la série de Born. Il faut toutefois noter qu'il existe un calcul non perturbatif qui traite ce processus avec excitation à savoir celui de Pindzola *et al.* [125]. Ils ont résolu l'équation de Schrödinger dépendant du temps (TDCC) pour un système de trois électrons et ils en ont extrait les résultats en négligeant les corrélations dans la voie finale. Parmi les méthodes perturbatives traitant de l'ionisation-excitation, nous pouvons citer entre autres la méthode de la matrice R avec pseudo-états ("R matrix with pseudostates" (RMPS)) [124, 126, 127, 15] de Bartschat *et al.*, le "convergent close-coupling" (CCC) [128, 129] de Bray *et al.*, de Kheifets *et al.* [17] et de Marchalant *al.* [94, 12]. Les calculs du second ordre ont été effectués par Marchalant *al.* [94, 12], Fang et Bartschat [124], Kheifets *et al.* [17], Chen *et al.* [14], etc... Toutes les théories du second ordre ont nécessité certaines approximations. Tous les calculs existants se fondent sur l'approximation de fermeture [94, 14, 12] ou sur une de ses variantes [124]. A celà, s'ajoute la description de l'état final qui dans certains cas n'est pas très précise [94, 14, 12]. Enfin, notons qu'en plus de l'approximation de fermeture, Kheifets *et al.* [130] se sont limités aux transitions dipolaires. Notons que les données expérimentales de deHarak *et al.* [25] et de Dürre *et al.* [24] ont été comparées aux seules prédictions théoriques du premier et du second Born de Bartschat. Pour la cinématique des mesures de deHarak *et al.* [25], on ne s'attend pas à ce que l'ionisation sans excitation de l'He via les états doublement excités ($2l2l'$) ait une contribution dominante par rapport au mécanisme direct puisque ce processus est peu corrélé. Par contre, ils subsistent toujours un grand écart entre théorie du second Born et expérience de Dürre *et*

al. [24] pourtant on s'attend à ce que les effets du second-ordre soient importants. L'échec dans la prédiction de la TDCS par Bartschat nous permet de tirer les conclusions suivantes : soit les effets du troisième ordre contribuent elles aussi, ou soit le second Born calculé dans l'approximation de fermeture n'est pas assez précis pour reproduire l'expérience de Dürr *et al.*.

6.4 Sections efficaces du processus $(e, 2e)$ sans excitation dans l'approximation de Born

Pour des énergies très élevées de l'électron incident d'impulsion $\vec{k}_i$ et une énergie de l'électron éjecté très faible d'impulsion $\vec{k}_e$, nous nous attendons à ce que la première approximation de Born reste valable. Dans ce cas, si la cible d'hélium est initialement dans état fondamental Θ_i , l'amplitude de transition pour le processus $(e, 2e)$ correspondant à un état final Θ_f s'écrit

$$T_{fi}^{(1)} = \left\langle \Phi_f \left| -\frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} \right| \Phi_i \right\rangle, \quad (6.1)$$

avec $\vec{r}_i$ qui est la coordonnée relative au noyau de l'électron i et $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. En s'inspirant du **chapitre** 4, la relation (6.1) peut encore s'écrire sous la forme

$$T_{fi}^{(1)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| -\frac{Z}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle, \quad (6.2)$$

où $\vec{k}_f$ est l'impulsion de l'électron diffusé. En utilisant la relation de Bethe [104, 131] pour mener l'intégration sur la variable $\vec{r}_1$, il vient que

$$T_{fi}^{(1)} = \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{K^2} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| -1 + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle, \quad (6.3)$$

et $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ est l'impulsion transférée au cours de la collision. Comme nous l'avons déjà souligné, il est très difficile en pratique de construire des fonctions d'onde exactes. Nous avons vérifié que la fonction d'onde produit symétrisé de la fonction coulombienne et de la fonction liée 1s (PSCB) n'est pas orthogonale à la fonction d'onde ICWF du fondamental de He. Par ailleurs, il a été bon de constater que le produit scalaire entre la fonction d'onde matrice J SCWF et la fonction d'onde ICWF est de

l'ordre de 10^{-6} pour une base correspondant à 30 sturmiennes et 4 couples de moments angulaires. Ceci nous conforte dans l'idée que les fonctions matrice J SCWF sont assez précises. Dans le cadre des tests, nous avons fait des calculs en utilisant le théorème de Gram Schmidt pour fabriquer une fonction d'onde finale orthogonale à celle initiale

$$\Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) - \langle \Theta_i | \Theta_f \rangle \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3). \quad (6.4)$$

Nous renvoyons le lecteur dans l'**annexe D** pour plus de précision. Dans tout ce qui suit, nous utilisons la relation (6.3).

6.4.1 Calcul de la matrice de transition

Cette sous-section est réservée au calcul de la matrice de transition du processus $(e, 2e)$ sans excitation de l'hélium dans l'approximation de Born. L'amplitude du premier Born donnée la relation (6.1) s'écrit

$$T_{fi}^{(1)} = T_1 + T_2 + T_3, \quad (6.5)$$

où

$$T_1 = \left\langle \Phi_f \left| -\frac{Z}{r_1} \right| \Phi_i \right\rangle, \quad T_2 = \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Phi_i \right\rangle, \quad T_3 = \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{r_{13}} \right| \Phi_i \right\rangle. \quad (6.6)$$

En substituant les relations (3.1) et (4.36) ou (4.15) dans la relation (6.5), on obtient

$$T_1 = \frac{-Z}{(2\pi)^3} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| \int d^3\vec{r}_1 \left(\frac{1}{r_1} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) \right) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle, \quad (6.7)$$

$$T_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| \int d^3\vec{r}_1 \left(\frac{1}{r_{12}} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) \right) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle, \quad (6.8)$$

et

$$T_3 = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| \int d^3\vec{r}_1 \left(\frac{1}{r_{13}} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) \right) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle. \quad (6.9)$$

En utilisant la relation de Bethe [104, 131]

$$\int d\vec{r}_1 \frac{1}{r_{1j}} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_1) = \frac{4\pi}{K^2} \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_j), \quad j = 0, 2, 3, \quad (6.10)$$

il vient que

$$T_1 = -\frac{Z}{2\pi^2 K^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \quad (6.11)$$

$$T_2 = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| \left(\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) \right) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle, \quad (6.12)$$

$$T_3 = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| \left(\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_3) \right) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle. \quad (6.13)$$

Puisque les fonctions initiale et finale sont symétriques par rapport aux variables positions, on en déduit que $T_2 = T_3$; ce qui réduit immédiatement le calcul de la matrice de transition à $T_{fi} = T_1 + 2T_2$. La présence de T_1 est due au fait que les fonctions d'onde utilisées ne sont pas exactes.

Calcul de la matrice de transition dans le cas où l'état final est décrit par le PSCB

En portant les expressions des fonctions initiale et finale PSCB dans la relation (6.7), on obtient facilement

$$\begin{aligned} T_1 = & \frac{-Z}{2\pi^2 K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3 \mu_3} b_{\nu_3 \lambda_3}^*(k_3) Y_{\lambda_3 \mu_3}^*(\hat{k}_3) a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3} \int d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \\ & \times \mathcal{A} \left(\frac{S_{\nu_3 \lambda_3}^\kappa(r_3)}{r_3} Y_{\lambda_3 \mu_3}^*(\hat{r}_3) \frac{S_{\nu_2 \lambda_2}^\kappa(r_2)}{r_2} Y_{\lambda_2 \mu_2}^*(\hat{r}_2) \right) \\ & \times \mathcal{A}' \left(\frac{S_{n_3 l_3}^\kappa(r_3)}{r_3} \Lambda_{l_1 l_2}^{L_i M_i}(\hat{r}_2 \hat{r}_3) \frac{S_{n_2 l_2}^\kappa(r_2)}{r_2} \right), \end{aligned} \quad (6.14)$$

où

$$|l_2 - l_3| \leq L_i \leq |l_2 + l_3|, \quad -L_i \leq M_i \leq L_i, \quad n_2 \geq l_2 + 1, \quad n_3 \geq l_3 + 1, \quad (6.15)$$

et

$$\begin{aligned} |\lambda_2 - \lambda_3| & \leq L_f \leq |\lambda_2 + \lambda_3|, \quad -L_f \leq M_f \leq L_f, \\ \nu_2 & \geq \lambda_2 + 1, \quad \nu_3 \geq \lambda_3 + 1, \quad \lambda_3 \leq \mu_3 \leq \lambda_3. \end{aligned} \quad (6.16)$$

L'action des deux operateurs de symétrisation dans l'équation (6.14) conduit à quatre termes $T_1 = T_{11} + T_{12} + T_{13} + T_{14}$. Après intégration relative aux deux variables $\vec{r}_2$ et $\vec{r}_3$, il vient que

$$\begin{aligned} T_{11} = & -\frac{Z}{4\pi^2 K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ \mu_2 & -\mu_2 & 0 \end{pmatrix} b_{\nu_3 l_3}^*(k_3) Y_{l_3 - \mu_2}(\hat{k}_3) \\ & \times \langle S_{\nu_3 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle \langle S_{\nu_2 l_2}^\kappa | S_{n_2 l_2}^\kappa \rangle \delta_{\lambda_3 l_3} \delta_{\lambda_2 l_2} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$T_{12} = -\frac{Z}{4\pi^2 K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ -\mu_2 & \mu_2 & 0 \end{pmatrix} b_{\nu_3 l_2}^*(k_3) Y_{l_2 - \mu_2}(\hat{k}_3) \\ \times \langle S_{\nu_3 l_2}^\kappa | S_{n_2 l_2}^\kappa \rangle \langle S_{\nu_2 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle \delta_{\lambda_3 l_2} \delta_{\lambda_2 l_3} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \quad (6.18)$$

$$T_{13} = -\frac{Z}{4\pi^2 K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ -\mu_2 & \mu_2 & 0 \end{pmatrix} b_{\nu_3 l_2}^*(k_3) Y_{l_2 \mu_2}(\hat{k}_3) \\ \times \langle S_{\nu_2 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle \langle S_{\nu_3 l_2}^\kappa | S_{n_2 l_2}^\kappa \rangle \delta_{\lambda_2 l_3} \delta_{\lambda_3 l_2} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \quad (6.19)$$

$$T_{14} = -\frac{Z}{4\pi^2 K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{L_i M_i} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ \mu_2 & -\mu_2 & 0 \end{pmatrix} b_{\nu_3 l_3}^*(k_3) Y_{l_3 - \mu_2}(\hat{k}_3) \\ \times \langle S_{\nu_2 l_2}^\kappa | S_{n_2 l_2}^\kappa \rangle \langle S_{\nu_3 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle \delta_{\lambda_3 l_3} \delta_{\lambda_2 l_2} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}. \quad (6.20)$$

Soulignons que $T_{14} = T_{11}$ et $T_{13} = T_{12}$. Ainsi le calcul de T_1 se réduit à deux termes et on a $T_1 = 2(T_{11} + T_{12})$. Quant au calcul de T_2 , si nous suivons la même procédure que précédemment, on obtient

$$T_2 = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{L_i M_i} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3 \mu_3} b_{\nu_3 \lambda_3}^*(k_3) Y_{\lambda_3 \mu_3}(\hat{k}_3) a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3} \int d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 \\ \times \mathcal{A} \left(\frac{S_{n_3 l_3}^\kappa(r_3)}{r_3} Y_{\lambda_3 \mu_3}^*(\hat{r}_3) \frac{S_{n_2 l_2}^\kappa(r_2)}{r_2} Y_{\lambda_2 \mu_2}^*(\hat{r}_2) \right) \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) \\ \times \mathcal{A}' \left(\frac{S_{n_3 l_3}^\kappa(r_3)}{r_3} \Lambda_{l_1 l_2}^{L_i M_i}(\hat{r}_2 \hat{r}_3) \frac{S_{n_2 l_2}^\kappa(r_2)}{r_2} \right). \quad (6.21)$$

En utilisant la décomposition en ondes partielles d'une onde plane [95]

$$\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(Kr_2) Y_{lm}^*(\hat{K}) Y_{lm}(\hat{r}_2), \quad (6.22)$$

et si nous posons $T_2 = T_{21} + T_{22} + T_{23} + T_{24}$, il s'en suit que

$$T_{21} = \frac{1}{2\pi^{3/2} K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{m_2} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \sum_l i^l (-1)^{\mu_2} b_{\nu_3 l_3}^*(k_3) \\ \times [\lambda_2, l, l_2] \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ m_2 & -m_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_2 \\ -\mu_2 & \mu_2 - m_2 & m_2 \end{pmatrix} \\ \times Y_{l, \mu_2 - m_2}^*(\hat{K}) Y_{l_3, -m_2}(\hat{k}_3) \langle S_{\nu_3 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle I_{\lambda_2 l l_2}^{\nu_2 n_2}(\kappa_2, K, \kappa) \delta_{\lambda_3 l_3} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \quad (6.23)$$

$$\begin{aligned}
 T_{22} = & \frac{1}{2\pi^{3/2}K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{m_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \sum_l i^l (-1)^{\mu_2} b_{\nu_3 l_2}^*(k_3) \\
 & \times [\lambda_2, l, l_3] \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ -m_3 & m_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_3 \\ -\mu_2 & \mu_2 - m_3 & m_3 \end{pmatrix} \\
 & \times Y_{l, \mu_2 - m_3}(\hat{K}) Y_{l_2, -m_3}(\hat{k}_3) \langle S_{\nu_3 l_2}^\kappa | S_{n_2 l_2}^\kappa \rangle I_{\lambda_2 l l_3}^{\nu_2 n_3}(\kappa_2, K, \kappa) \delta_{\lambda_3 l_2} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \quad (6.24)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T_{23} = & \frac{1}{2\pi^{3/2}K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{m_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \sum_{lm} i^l (-1)^{m - \mu_2} b_{\nu_3 \lambda_3}^*(k_3) \\
 & \times [\lambda_3, l, l_2] \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ -\mu_2 & \mu_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l & l_2 \\ -m & \mu_2 & m - \mu_2 \end{pmatrix} \\
 & \times Y_{l, m}(\hat{K}) Y_{\lambda_3, m - \mu_2}(\hat{k}_3) \langle S_{\nu_2 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle I_{\lambda_3 l l_3}^{\nu_3 n_2}(\kappa, K, \kappa) \delta_{\lambda_2 l_3} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \quad (6.25)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T_{24} = & \frac{1}{2\pi^{3/2}K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_{\lambda_3 \nu_3} \sum_{lm} i^l (-1)^{m - \mu_2} b_{\nu_3 \lambda_3}^*(k_3) \\
 & \times [\lambda_3, l, l_2] \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ \mu_2 & -\mu_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l & l_3 \\ -m & \mu_2 & m - \mu_2 \end{pmatrix} \\
 & \times Y_{l, m}^*(\hat{K}) Y_{\lambda_3, m - \mu_2}(\hat{k}_3) \langle S_{\nu_2 l_2}^{\kappa_2} | S_{n_2 l_2}^\kappa \rangle I_{\lambda_3 l l_3}^{\nu_3 n_3}(\kappa, K, \kappa) \delta_{\lambda_2 l_2} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}, \quad (6.26)
 \end{aligned}$$

avec

$$\langle S_{n_j l_j}^{\kappa_j} | S_{n_i l_i}^{\kappa_i} \rangle = \int_0^\infty dr S_{n_j l_j}^\kappa(r) S_{n_i l_i}^\kappa(r), \quad (6.27)$$

$$I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i) = \int_0^\infty dr S_{n_j l_j}^{\kappa_j}(r) j_l(Kr) S_{n_i l_i}^{\kappa_i}(r). \quad (6.28)$$

Les symboles de Raccah [52] $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ présents dans les expressions de T_1 et T_2 sont tels que $j_1 \leq j_3 \leq j_2$, $m_1 + m_2 + m_3 = 0$ et $(j_1 + j_2 + j_3)$ paire si $m_1 = m_2 = m_3 = 0$.

Calcul de la matrice de transition dans le cas où l'état final est décrit par le SCWF

En portant les expressions des fonctions initiale ICWF et finale SCWF dans la relation (6.7), on obtient facilement

$$T_1 = -\frac{Z}{2\pi^2 K^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \quad (6.29)$$

dont la valeur numérique du recouvrement des fonctions d'onde initiale et finale vaut 10^{-5} . Quant au second terme T_2 ,

$$T_2 = \frac{1}{2\pi^2 K^2} \left\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \left| \left(\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) \right) \right| \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \right\rangle, \quad (6.30)$$

un calcul simple et similaire au cas précédent nous donne

$$\begin{aligned} T_{21} = & \frac{1}{2\pi^{3/2} K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{\lambda_2, \lambda_3} \sum_{\nu_2, \nu_3} \sum_{l_2, l_3} \sum_{n_2, n_3} \sum_{l=0}^{L_f} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} b_{\nu_2, \nu_3}^{\lambda_2, \lambda_3 \Gamma^*} (-1)^{\lambda_2} i^l Y_{l M_f}^*(\hat{K}) \\ & \times [\lambda_2, l, L_f] \begin{pmatrix} \lambda_2 & \lambda_3 & L_f \\ M_f + m_2 & -m_2 & -M_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_2 \\ -M_f - m_2 & M_f & m_2 \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{\lambda_2 l l_2}^{\nu_2 n_2}(\kappa, K, \kappa) \langle S_{\nu_3 l_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle \delta_{\lambda_3 l_3} \delta_{l_3 l_2} a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

De plus les trois autres termes se déduisent de ce terme ci-dessus

$$T_{22} = T_{21}(l_2 \rightleftharpoons l_3, m_2 \rightleftharpoons m_3); \quad T_{23} = T_{21}(\lambda_2 \rightleftharpoons \lambda_3, \mu_2 \rightleftharpoons \mu_3), \quad (6.32)$$

et

$$T_{24} = T_{21}(\lambda_2 \rightleftharpoons \lambda_3, \mu_2 \rightleftharpoons \mu_3; l_2 \rightleftharpoons l_3, m_2 \rightleftharpoons m_3). \quad (6.33)$$

Il convient de souligner que les coefficients $b_{\nu_2, \nu_3}^{\lambda_2, \lambda_3 \Gamma^*}$ sont ceux de la zone *interne* dans la méthode de la matrice de Jacobi. La dépendance angulaire de la matrice de transition y est cachée et notons aussi que nous utilisons l'axe de quantification $\vec{k}_e$ pour faire tous les calculs numériques dans la suite.

Pour le calcul numérique, il est utile d'écrire l'élément de matrice T_{2i} sous la forme d'un produit vecteur-matrice-vecteur. Cette présentation est valide pour toutes les autres amplitudes quelles que soient les fonctions d'onde utilisées. Ainsi, pour $i = 1, 2, 3, 4$ on peut mettre T_2 sous la forme

$$T_{2i} = \frac{1}{2(\pi)^{3/2} K^2} \sum_{L_f M_f} \sum_{\lambda_2 \lambda_3} \sum_{\nu_2 \nu_3} \sum_{l_2 l_3} \sum_{n_2 n_3} \sum_j b_{\nu_2 \nu_3 j}^{\lambda_2 \lambda_3 L_f M_f^*} [\mathcal{M}_{2i}] a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3 L_i M_i}, \quad (6.34)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{21} = & \sum_{l=|\lambda_2-l_2|}^{\lambda_2+l_2} \sum_{m=-l}^l \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (-1)^{\lambda_2} i^l Y_{lm}^*(\hat{K}) [\lambda_2, l, L_f] \langle S_{\nu_3 \lambda_3}^\kappa | S_{n_3 l_3}^\kappa \rangle \\ & \times \begin{pmatrix} \lambda_2 & \lambda_3 & L_f \\ m+m_2 & -m_2 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_2 \\ -m-m_2 & m & m_2 \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} \lambda_2 & l & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{\lambda_2 l l_2}^{\nu_2 n_2}(\kappa, K, \kappa) \delta_{\lambda_3 l_3}, \end{aligned} \quad (6.35)$$

avec

$$\mathcal{M}_{22} = \mathcal{M}_{21}(l_2 \rightleftharpoons l_3, m_2 \rightleftharpoons m_3); \quad \mathcal{M}_{23} = \mathcal{M}_{21}(\lambda_2 \rightleftharpoons \lambda_3, \mu_2 \rightleftharpoons \mu_3), \quad (6.36)$$

et

$$\mathcal{M}_{24} = \mathcal{M}_{21}(\lambda_2 \rightleftharpoons \lambda_3, \mu_2 \rightleftharpoons \mu_3; l_2 \rightleftharpoons l_3, m_2 \rightleftharpoons m_3), \quad (6.37)$$

où $b_{\nu_2 \nu_3 j}^{\lambda_2 \lambda_3 L_f M_f}$ sont les composantes du vecteur de l'état final $[b]$, $a_{n_2 n_3}^{l_2 l_3 L_i M_i}$ celles du vecteur de l'état initial $[a]$ et $\mathcal{M}_{2j}$ les matrices correspondantes. Notons que sur le plan numérique, nous utilisons les routines BLAS pour faire cette opération.

Les intégrales radiales (6.27) et (6.28) contenant des fonctions sturmiennes et une fonction de Bessel sphérique sont en général très difficiles à évaluer exactement car les fonctions de Bessel oscillent fortement pour la gamme de paramètres considérée. Ces intégrales radiales sont utilisées dans les calculs des éléments de matrice présentés précédemment. On retient que la méthode de la quadrature de Gauss-Laguerre avec prolongement analytique converge bien et donne satisfaction (minimum 9 chiffres entre ce résultat et celui issu du calcul analytique) dans le cas où $l = 0$ et ceci quelle que soit la valeur du transfert d'impulsion K . Par contre, cette méthode ne donne satisfaction que pour des grandes valeurs de K lorsque l est supérieur à zéro en général. Pour être plus précis, cette méthode n'est pas suffisamment précise pour $l = 1$ et $K \leq 10^{-7}$, pour $l = 2$ et $K \leq 10^{-3}$, pour $l = 3, 4$ et $K \leq 10^{-2}$, pour $l = 5, 6$ et $K \leq 10^{-1}$. La non-convergence de cette méthode pour des cas $l \geq 1$ et des faibles transferts d'impulsions est due au signe du coefficient de décomposition β_{nl} donné par la relation (D.43) qui alterne. Ainsi, si deux termes consécutifs sont proches en valeur absolue et de signe contraire, une somme conduit à une perte significative de la précision sur le plan numérique. Pour résoudre ce problème dans le cas des K faibles, nous

faisons appel au développement en série de la fonction de Bessel sphérique pour Kr petit [49]. Ensuite, nous le combinons à la technique de quadrature de Gauss-Laguerre qui donne satisfaction. Nous invitons le lecteur à lire l'**annexe D** où il peut trouver toutes les précisions sur cette étude notamment toutes les autres méthodes numériques utilisées et les différents calculs analytiques.

6.4.2 Calcul numérique de sections efficaces du processus $(e, 2e)$ sans excitation dans l'approximation de Born

Dans cette section, nous présentons et discutons les résultats concernant la TDCS pour le processus $(e, 2e)$ sans excitation, sections calculées à l'aide de la première approximation de Born. La direction de l'impulsion de l'électron incident est prise suivant l'axe oz et l'énergie incidente E_i est telle que sa valeur est supérieure au potentiel d'ionisation de l'hélium. De la zone de collision, émergent deux électrons d'énergies respectives E_f et E_3 . Les géométries considérées sont les géométries coplanaires asymétrique et symétrique. Elles sont telles que les impulsions des électrons incident, diffusé et éjecté sont toutes dans le même plan (zox). La direction (θ_f, ϕ_f) de l'électron diffusé est fixée et celle de l'électron éjecté est variable. Pour ϕ_3 égale à 0 resp. π , nous avons respectivement $0 \leq \theta_3 \leq \pi$ et $\pi \leq \theta_3 \leq 2\pi$. Pour tous les spectres angulaires que nous donnons dans cette partie, il s'agit de regarder la variation de la TDCS en fonction de l'angle de l'électron éjecté $\theta_e = 2\pi - \theta_3$.

Test de validation du premier Born sans excitation

Avant de présenter nos résultats et les comparer aux résultats existants dans la littérature, nous commençons par faire un test crucial qui permet de valider notre code numérique. Ainsi, nous considérons le cas simple du processus $(e, 2e)$ sans excitation dans lequel l'état initial est décrit par la fonction de Byron et Joachain BYWF, et l'état final par le produit symétrisé d'une fonction coulombienne et de la fonction liée $1s$ de l' He^+ (PSCB). Nous pouvons alors calculer les TDCS de ce processus analytiquement. En outre, nous pouvons également calculer la TDCS numériquement en développant les fonctions d'onde des états initial et final sur la base sturmienne. La comparaison (voir figure **D.1**) entre ces deux résultats analytique et numérique nous permet de vérifier la sta-

bilité du code numérique qui est utilisé dans ce chapitre pour traiter complètement les processus électroniques. Tous les détails sur ce test important sont présentés en **annexe D**. Notons que si on substitue la BYWF (**D.53**) par la fonction d'onde corrélée ICWF, cette figure **D.1** nous montre un effet important des corrélations angulaires dans la voie initiale (un facteur 3 pour le pic binaire et 1 pour le pic de recul). Dans toute la suite, nous décrivons l'état fondamental de l'atome d'hélium par la fonction ICWF.

Interprétations et discussions

Dans cette partie, nous présentons nos résultats du premier Born du processus d'ionisation laissant l'ion résiduel He^+ dans l'état $n = 1$ dans les cas où l'état final est décrit par le PSCB ou décrit par le SCWF. Ensuite, nous comparons nos résultats aux données expérimentales existantes dans la littérature et interprétons ces résultats. Les figures **6.1** et **6.2** représentent la variation de la TDCS partielle en unités atomiques en fonction du moment angulaire total dans la voie finale L_f et de l'angle d'éjection de l'électron $\theta_e = 2\pi - \theta_3$. La géométrie étant coplanaire, les paramètres cinématiques des deux figures sont asymétriques et valent respectivement $E_i = 500 \text{ eV}$, $E_e = E_3 = 5 \text{ eV}$ et $\theta_f = 3.5^\circ$ ($E_i = 200 \text{ eV}$, $E_e = E_3 = 10 \text{ eV}$ et $\theta_f = 11^\circ$). Ces figures présentent deux pics symétriques situés dans la direction du transfert d'impulsion. De plus ces deux pics sont selon l'ordre d'apparition appelés *pic binaire* et *pic de recul*. Rappelons que le premier pic est appelé *pic binaire* parce que l'ion résiduel reste spectateur durant la collision contrairement au *pic de recul* où l'ion contribue car son impulsion de recul est non négligeable. A titre d'exemple, dans le cas de la figure **6.1**, on a le pic binaire à $\theta_{e1} \simeq 61.7^\circ$ et le pic de recul $\theta_{e2} \simeq 241.7^\circ = 180^\circ + \theta_{e1}$. De plus, la contribution isotrope $L_f = 0$ et les autres contributions $L_f \geq 2$ sont très faibles devant la contribution principale $L_f = 1$. Le processus de la figure **6.1** est plus probable (au moins un facteur 8) que le processus de la figure **6.2** puisque le transfert d'impulsion associé à la figure **6.1** est plus petit que celui associé à la figure **6.2**. Ces deux figures nous permettent de confirmer le fait que l'ionisation par impact électronique dans le cas des faibles transferts d'impulsion, est une généralisation de l'ionisation par impact de 1 photon où la règle de selection restreint les contributions des moments angulaires totaux de l'état final à $L_f = 1$ uniquement. Comme dans le cas du processus électronique, il n'existe aucune restriction sur L_f , ces

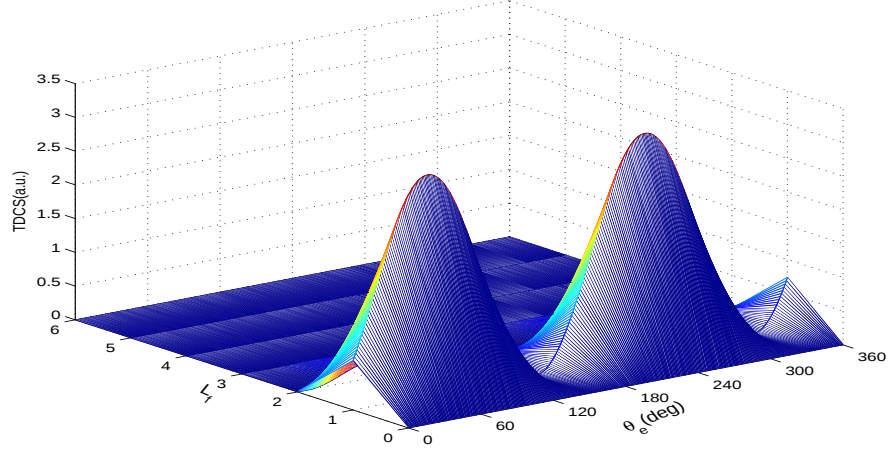


FIGURE 6.1 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction du moment angulaire total L_f et de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 500$ eV, $E_e = 5$ eV et $\theta_f = 3.5^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

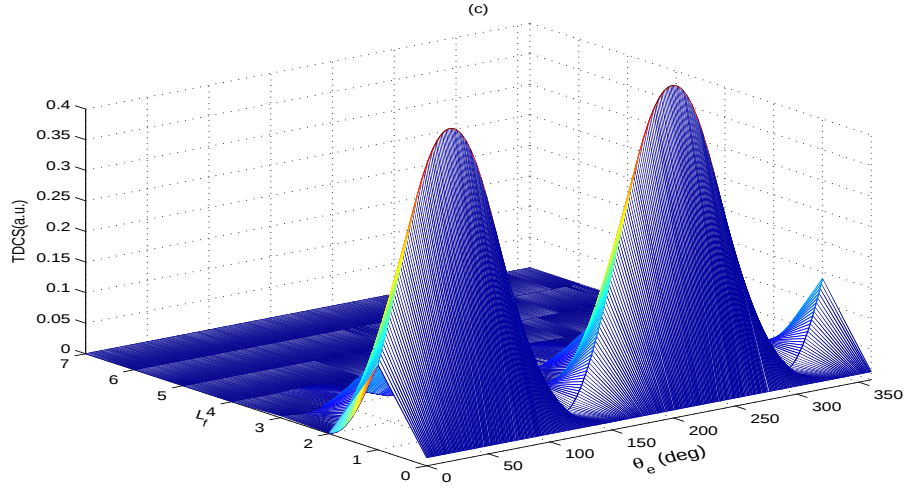


FIGURE 6.2 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction du moment angulaire total L_f et de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 200$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 11^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

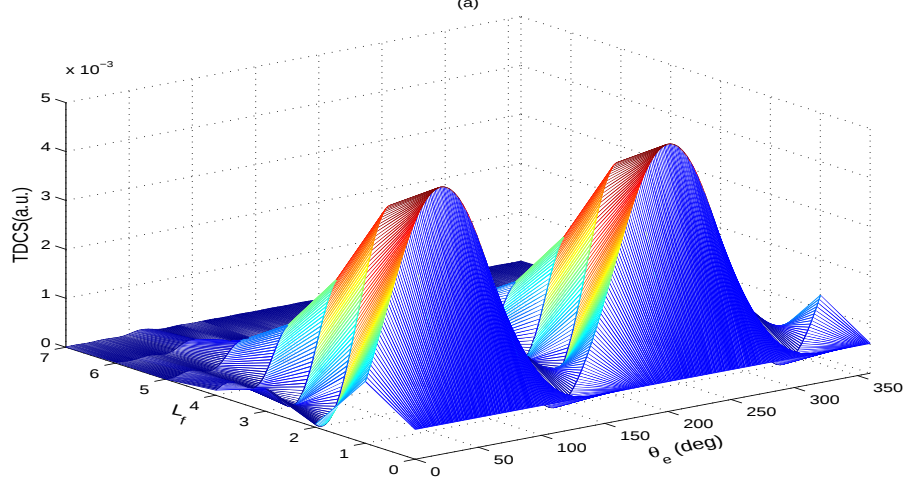


FIGURE 6.3 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction du moment angulaire total L_f et de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 268.6$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire asymétrique.

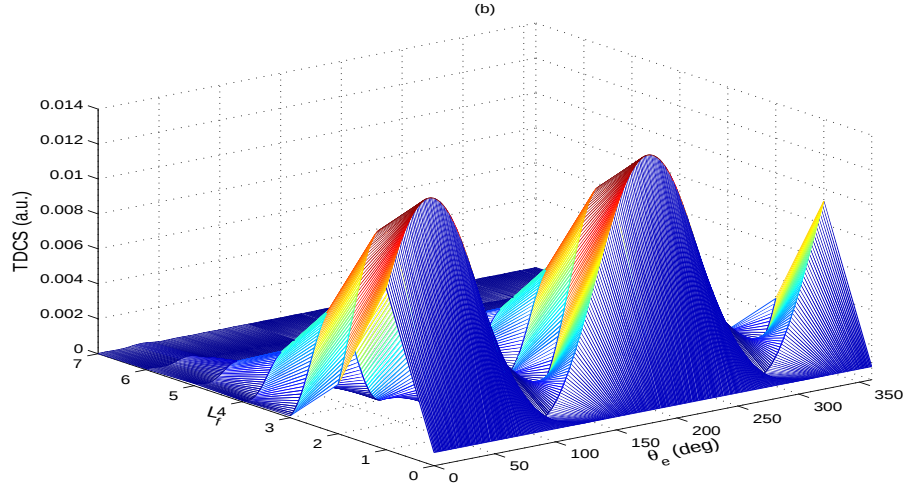


FIGURE 6.4 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction du moment angulaire total L_f et de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 112.6$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire symétrique.

deux figures montrent que prendre $L_{max} = 7$ est largement suffisant pour faire converger nos résultats de la TDCS.

Tout comme les figures 6.1 et 6.2, les figures 6.3 et 6.4 présentent les mêmes structures sauf qu'elles sont données soit pour des grandes énergies éjectés, soit pour des grands angles de diffusion. Ce qui induit des grands transferts d'impulsion au cours de la collision. La géométrie est toujours coplanaire mais la cinématique de la figure 6.3 est asymétrique tandis que celle de la figure 6.4 est symétrique car on a un partage égal d'énergie entre les deux électrons sortant de la zone de collision $E_f = E_e = 44 \text{ eV}$. Il est clair que faire des calculs à l'aide de la première

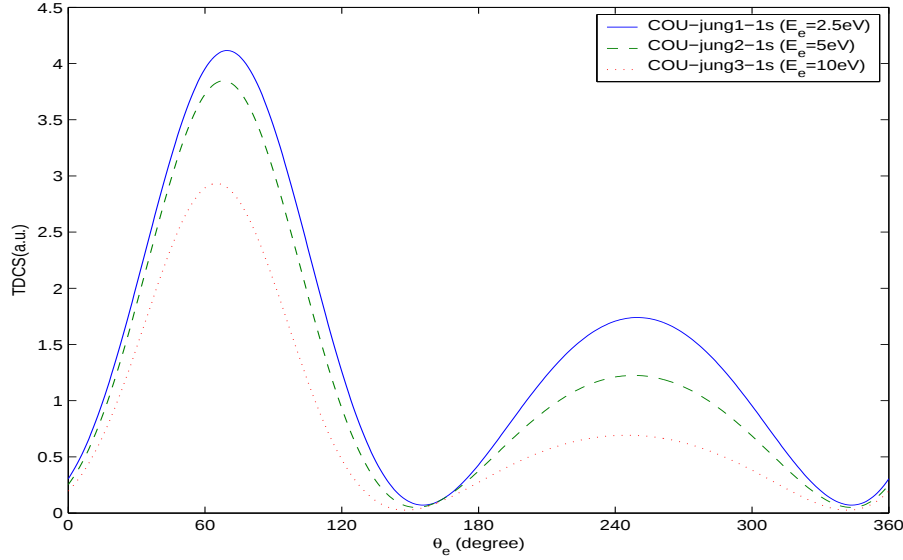


FIGURE 6.5 – *TDCS (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 600 \text{ eV}$ et $\theta_f = 4^\circ$. En trait fort continu, les résultats PSCB pour $E_e = 2.5 \text{ eV}$; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $E_e = 5 \text{ eV}$; et enfin en trait pointillé, les résultats PSCB pour $E_e = 10 \text{ eV}$. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est toujours faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.*

approximation de Born dans de tels paramètres n'est plus indiqué. En outre, les deux figures nous montrent que les contributions provenant de $L_f = 2, 3, 4, 5, 6$ sont aussi importantes que la contribution $L_f = 1$. De plus comme on pouvait s'y attendre, les processus des figures 6.3 et 6.4 sont moins probables que les processus 6.1 et 6.2 car les collisions sont à

petit paramètre d'impact dans ces deux derniers. La figure 6.5 exprime la variation de la TDCS (u.a.) du processus d'ionisation sans excitation (sommée sur toutes les contributions de L_f allant de 0 à 7) en fonction de l'angle d'éjection de l'électron $\theta_e(deg)$ pour une énergie d'impact $E_i = 600 \text{ eV}$. En trait continu, nous avons la TDCS pour $E_e = 2.5 \text{ eV}$; en trait court interrompu, la TDCS pour $E_e = 5 \text{ eV}$ et enfin en trait pointillé, la TDCS pour $E_e = 10 \text{ eV}$. Les pics ne sont plus symétriques

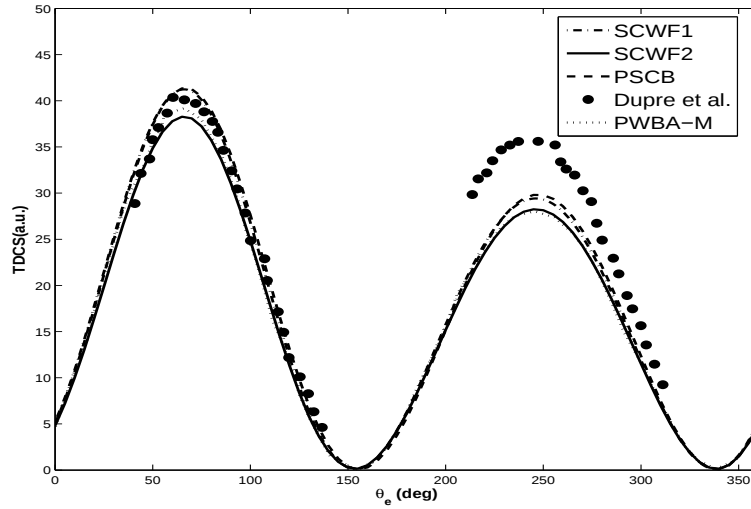


FIGURE 6.6 – TDCS (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500 \text{ eV}$, $E_e = 5 \text{ eV}$ et $\theta_f = 0.35^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait mixte, les résultats SCWF1 pour $\kappa = 2$ et 1 couple de moment angulaire; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (PWBA-M) de Marchalant et al. [94]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dupré et al. [19]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

puisque le pic binaire est chaque fois plus élevé que le pic de recul. Cette asymétrie des lobes vient des interférences constructives et destructives des contributions des $L_f \geq 2$ à la section efficace différentielle triple. Sur les figures 6.6, 6.7 et 6.8, nous comparons nos résultats (dans les cas où l'état final est décrit par le PSCB et le SCWF) de l'ionisation sans excitation avec ceux de Dupré *et al.* [19] dans les trois cas de paramètres suivants : (a) $E_f = 5500 \text{ eV}$, $E_e = 5 \text{ eV}$ et $\theta_f = 0.35^\circ$; (b) $E_f = 5500 \text{ eV}$,

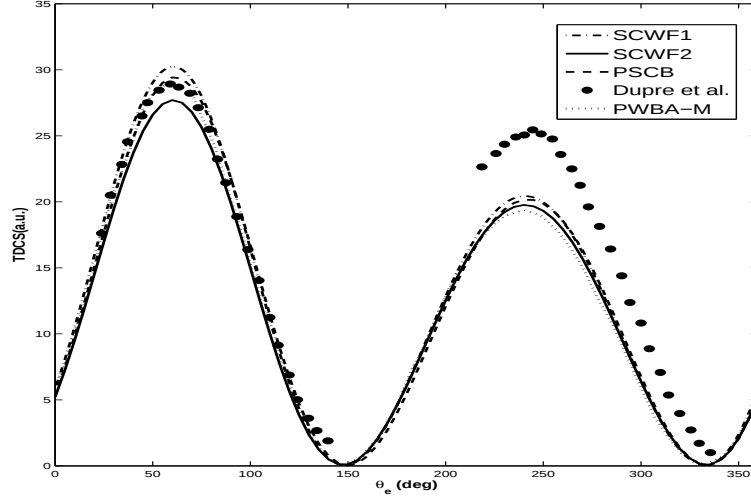


FIGURE 6.7 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 0.32^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait mixte, les résultats SCWF1 pour $\kappa = 2$ et 1 couple de moment angulaire; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (PWBA-M) de Marchalant et al. [94]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dupré et al. [19]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

$E_e = 10$ eV et $\theta_f = 0.32^\circ$; (c) $E_f = 5500$ eV, $E_e = 75$ eV et $\theta_f = 1^\circ$. Le nombre de sturmiennes utilisé est de $N = 30$. En trait continu, nous avons nos résultats de la TDCS sans excitation générés à l'aide de la méthode de la matrice J pour $\kappa = 2$ et pour un seul couple de moment angulaire notés SCWF1; en trait mixte, nos résultats de la TDCS sans excitation générés à l'aide de la méthode de la matrice J pour $\kappa = 1$ et pour 4 couples de moments angulaires notés SCWF2; en trait interrompu court, nos résultats générés à l'aide de la PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats du premier Born de Marchalant et al. [94] notés PWBA-M; et enfin en cerle plein, les données expérimentales de Dupré et al. [19]. Tout comme la figure 6.5, les figures 6.6, 6.7 et 6.8 illustrent bien le fait que pour un projectile rapide, plus l'énergie de l'électron éjecté croît, plus la TDCS décroît. Cette remarque reste aussi vraie lorsque l'angle de diffusion croît. Pour

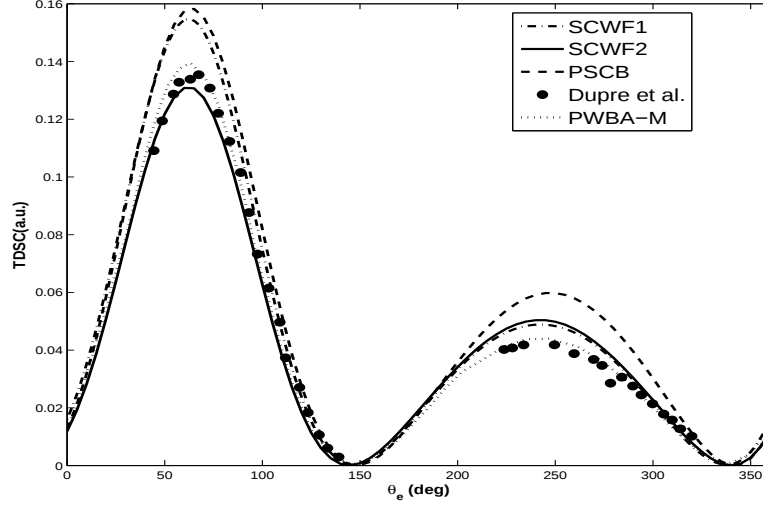


FIGURE 6.8 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV, $E_e = 75$ eV et $\theta_f = 1^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait mixte, les résultats SCWF1 pour $\kappa = 2$ et 1 couple de moment angulaire; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (PWBA-M) de Marchalant et al. [94]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dupré et al. [19]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

$E_e = 5$ eV et $E_e = 10$ eV, on constate que nos deux résultats PSCB et SCWF1 se recouvrent bien. De plus, pour reproduire le même résultat SCWF avec un seul couple de moments c'est-à-dire SCWF1, on a besoin de plusieurs couples de moments angulaires dans la PSCB. Ceci tient au fait que la *zone interne* de l'hélium étant compact, le fondamental de He est bien décrit dans la méthode matrice J (car $\kappa = 2$) même si on a qu'un seul couple de moments angulaires (base à 30 sturmiennes). Par contre, dans la méthode avec le PSCB, comme $\kappa = 1$, il faut une grande base pour reproduire ces résultats avec un grand nombre de couples de moments angulaires (4) et 20 sturmiennes. Dans le cas où $E_e = 75$ eV, cette remarque tient toujours mais le recouvrement baisse surtout au niveau des lobes. Rappelons que nous avons montré dans le **chapitre 4** que les contributions de l'ISE et de l'IAE sont respectivement non nulle et nulle lorsqu'on débranche la corrélation électronique dans la cible de l'He.

On constate ici qu'en général, les résultats d'ionisation sans excitation de l'hélium par impact d'électrons rapides obtenus avec la SCWF et le PSCB sont très peu différents. Donc le branchement de la corrélation a un effet moins important pour l'ionisation sans excitation comparativement à l'ionisation avec excitation. Ce point est clarifié dans la section suivante dans le cadre de l'étude de l'ionisation avec excitation.

Dans les cas $E_e = 5 \text{ eV}$ et $E_e = 10 \text{ eV}$, l'accord entre ces résultats SCWF1 et PSCB ; et l'expérience, ou avec les résultats de Marchalant et al. [12] est assez bon en général. D'une part, nos prédictions théoriques sont légèrement plus élevées que l'expérience pour le lobe binaire. Quant au lobe de recul, nos résultats qui sont sensiblement au dessus de ceux PWBA-M, sont en dessous de l'expérience. D'autre part, lorsqu'on garde κ toujours égal à 2 dans la méthode de la matrice J et que l'on augmente le nombre de couples de moments à 4, on constate qu'au niveau des lobes, nos résultats SCWF2 s'abaissent beaucoup trop jusqu'à ce que l'écart précédent au niveau du lobe binaire devienne plus petit mais ils rejoignent les résultats PWBA-M. De plus, la même remarque s'applique au niveau du lobe de recul sauf que cette fois-ci, les deux résultats théoriques sont très loin en dessous des données expérimentales. Par contre, le cas $E_e = 75 \text{ eV}$ est celui où le recouvrement entre nos résultats SCWF2, ceux PWBA-M et les données expérimentales est excellent. *Le fait qu'il existe un écart considérable entre les résultats du premier Born et les données expérimentales a été attribué par Dupré et al. [19] à l'absence des effets des processus post-collisionnels dans le premier Born. Il est important à ce stade de clairement spécifier ce qu'on entend par processus post-collisionnel. Nous pensons que si la fonction d'onde décrivant l'état final du système est exacte, tous les processus possibles sont bien décrits et il n'y a pas lieu d'invoquer une quelconque interaction post-collisionnelle. Dans notre cas, les interactions entre les particules qui composent la cible sont très bien décrites dans le cas de la méthode de la matrice J. Quant à l'interaction du projectile avec la cible, elle est prise en compte dans le cadre de la théorie des perturbations (première approximation de Born dans notre cas) à travers l'interaction V. Passer au second ordre améliore la description de cette interaction projectile-cible. Si on s'en tient à une théorie du premier ordre, prendre en compte des interactions post-collisionnelles revient à améliorer la fonction d'onde de l'état final (lorsque l'élément de matrice de transition [95] considéré est sous la forme "prior" $\langle \Psi_f^{(-)} | V_i | \Phi_i \rangle$). C'est cette forme qui est utilisée dans ce travail et notons que la fonction d'onde SCWF a un*

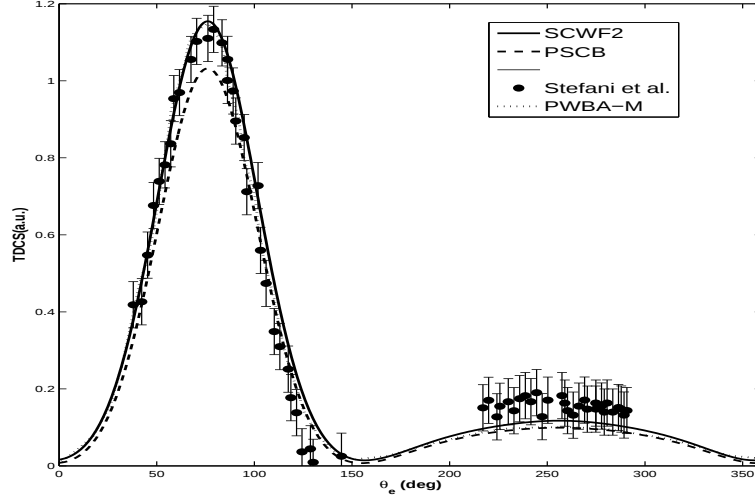


FIGURE 6.9 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 1500$ eV, $E_e = 20$ eV et $\theta_f = 4^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (PWBA-M) de Marchalant et al. [94]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Avaldi et al. [20, 121, 122]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

comportement asymptotique en onde entrante pour les canaux ouverts de simple ionisation et en exponentielle décroissante pour les canaux fermés. Par contre, si on travaille au second ordre, toute correction de l'approximation de la fonction d'onde finale par un produit onde plane-fonction d'onde de la cible peut mener à une redondance puisque l'interaction de l'électron diffusé avec la cible est prise en compte cette fois-ci au premier ordre $\langle \Phi_f | V_i + V_f G V_i | \Phi_i \rangle$. Tout comme Fang et Bartschat [124], Kheifets et al. [17], Marchalant et al. [94] ont développé le second Born dans l'approximation de fermeture (PWB2-M). Ils ont obtenu des résultats bons qui sont légèrement supérieurs à ceux du premier Born, l'écart avec les données expérimentales reste toujours considérable surtout au niveau du pic de recul. Toutefois, il faut souligner que comme tous les autres calculs du second ordre, ceux-ci dépendent d'un paramètre arbitraire qui est l'énergie moyenne des états intermédiaires. A notre connaissance, aucune

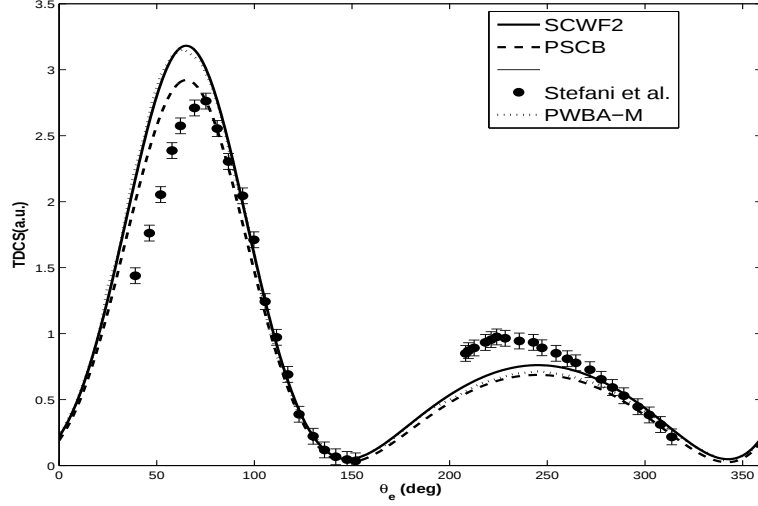


FIGURE 6.10 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 570$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 4^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (PWBA-M) de Marchalant et al. [94]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Avaldi et al. [20, 121, 122]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

théorie n'a jamais présenté une étude claire de la stabilité des résultats du second ordre en fonction de ce paramètre arbitraire.

Les figures 6.9, 6.10 et 6.11 permettent de comparer les résultats issus de notre modèle théorique à ceux des expériences réalisées par Stefani *et al.* [20, 121, 122]. Sur la figure 6.9, on a un excellent accord entre nos résultats SCWF2 (qui sont très proches de ceux PWBA-M) et l'expérience. Par contre, nos résultats PSCB sont légèrement plus bas au niveau des deux lobes mais ils sont quasiment tangents aux limites inférieures des barres d'incertitudes des données expérimentales. Quant à la figure 6.10, nous notons un moins bon accord comparé à la cinématique précédente surtout au niveau des lobes. Au niveau du premier lobe, les différents modèles théoriques prédisent un pic décalé de 10° par rapport à ce qui est observé dans l'expérience. De plus, on remarque que nos résultats PSCB sont plus proches des données expérimentales que nos

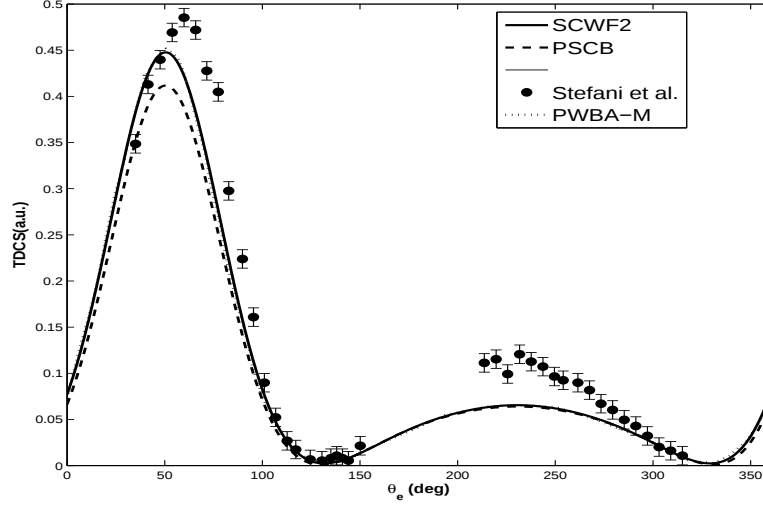


FIGURE 6.11 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 570$ eV, $E_e = 40$ eV et $\theta_f = 4^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait interrompu court, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (PWBA-M) de Marchalant et al. [94]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Avaldi et al. [20, 121, 122]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

résultats SCWF2 et les résultats PWBA-M. L'écart entre le pic expérimental et le pic théorique (nos résultats SCWF2 et ceux PWBA-M) est de plus de 14%. Par contre, les résultats PWB2-M [12] corrigent à la fois le décalage et l'intensité du pic binaire. Quant à la figure 6.11, les remarques sont les mêmes que celles émises pour la figure 6.10 sauf que dans ce cas, l'accord entre la théorie et l'expérience se détériore encore plus. Contrairement à la figure 6.10, les intensités des TDCS dans ce cas sont plutôt plus bas de 8% que celles des données expérimentales au niveau du pic binaire. Dans la zone du pic de recul, les différentes théories sont très proches pour la figure 6.10 et quasiment identiques pour la figure 6.11. Mais l'écart entre ces théories et l'expérience est probablement dû à des effets d'ordre supérieur tout comme celà l'est dans le cas des paramètres cinématiques des expériences de Dupré *et al.* [19].

Toujours dans le cas de l'ionisation sans excitation, la figure 6.12

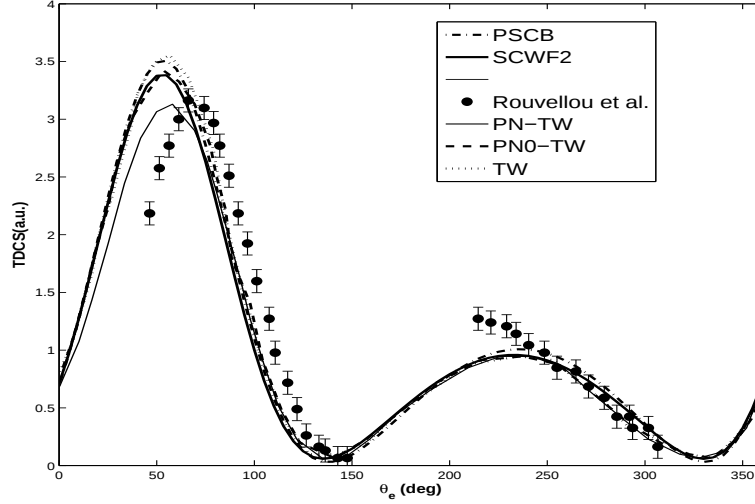


FIGURE 6.12 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 291.2$ eV, $E_e = 9.25$ eV et $\theta_f = 4.5^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait mixte, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats de Tweed et al. [13] sans polarisation et sans le facteur N_{ee} ; en trait interrompu court, les résultats de Tweed avec seulement la polarisation; en trait continu de couleur magenta, les résultats de Tweed avec polarisation et avec le facteur N_{ee} ; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Rouvellou et al. [13]. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

compare les données expérimentales de Rouvellou *et al.* [13] à plusieurs résultats théoriques parmi lesquels se trouvent nos résultats SCWF2. Ces données étant relatives, elles ont été normalisées de manière à avoir le meilleur accord avec les différentes théories [13]. En trait fort sur cette figure, on a nos résultats SCWF2; en trait mixte, nos résultats PSCB obtenu pour $\kappa = 1, 4$ couples de moments angulaires et 30 sturmiennes; en trait pointillé, les résultats de Tweed et al. [13] (TW sur la figure 6.12) sans prise en compte de la polarisation (action du projectile via un champ électrique sur une cible) en α/r^4 et sans le facteur de Gamow N_{ee} qui prend en compte les effets "post-collisionnels" liés à la répulsion entre les deux électrons sortants; en trait interrompu, les résultats de Tweed et al. [13] (PN0-TW) avec prise en compte de la polarisation; en trait

continu magenta, les résultats de Tweed et al. [13] ($PN-TW$) avec prise en compte de la polarisation et du facteur de Gamow N_{ee} ; et enfin en cercle plein, les données expérimentales de Rouvellou *et al.* [13]. Nos résultats

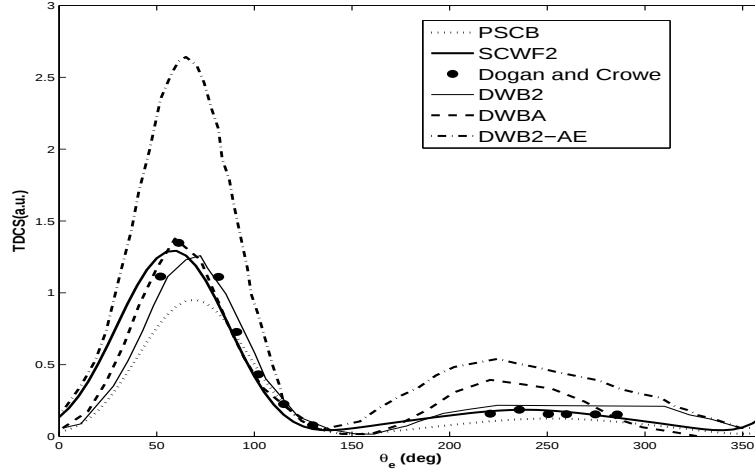


FIGURE 6.13 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 200$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 11^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats PSCB pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait mixte, les résultats (DWB2-AE) du second Born dans l'approximation de fermeture de Chen et al. [14]; en trait interrompu court, les résultats (DWBA) du premier Born de Chen et al. [14]; en trait continu de couleur magenta, les résultats (DWB2) du second Born de Chen et al. [14]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dogan et Crowe [21]. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

PSCB sont identiques à ceux TW sans prise en compte de la polarisation et du facteur de Gamow. Nos résultats SCWF2 sont identiques à ceux $PN0-TW$ avec prise en compte de la polarisation. L'énergie du projectile $E_i = 325$ eV dans la figure 6.12 est plus ou moins du même ordre (pratiquement la moitié) que les énergies des deux dernières données expérimentales d'Avaldi *et al.* (604.6 eV), nous pouvons qualifier cette gamme "d'énergies intermédiaires". Dans cette gamme, tout comme précédemment dans les deux derniers cas de Avaldi, on note que le lobe binaire expérimental est shifté de 15° par rapport aux directions $+\vec{K}$ et $-\vec{K}$ du transfert d'impulsion. Ces décalages de lobes peuvent être interpré-

tés comme une conséquence de l'absence des processus post-collisionnels dans le premier Born. L'inclusion du facteur de Gamow N_{ee} (qui prend en compte les effets du processus post-collisionnel dans son formalisme) a tout simplement eu pour conséquence de rabaisser la TDCS du lobe binaire vers celle des données expérimentales mais sans que ce lobe ne soit déplacé. Dans ce cas, un calcul du second ordre est nécessaire. Par contre, en ce qui concerne le problème de l'écart existant entre les intensités des lobes de recul théoriques et expérimentaux dans les expériences de Dupré *et al.*, les résultats *PWB2-M* ont montré que les processus post-collisionnels n'apportent qu'une très faible contribution.

Sur la figure **6.13**, une comparaison entre nos résultats *SCWF2*, ceux de Chen *et al.* [14] avec les données expérimentales de Dogan *et al.* [21] est faite pour une énergie incidente $E_i = 200 \text{ eV}$ beaucoup plus faible que celles du régime intermédiaire considéré précédemment. Dans les théories du premier Born (*DWBA*) et du second Born (*DWB2*), ils ont utilisé un potentiel ionique avec distorsion pour décrire les électrons diffusé et éjecté. De plus, ils ont aussi fait un calcul du second Born dans l'approximation de fermeture *DWB2-AE*. En trait continu, nos résultats *SCWF2*; en trait pointillé, nos résultats PSCB pour $\kappa = 1, 4$ couples de moments angulaires et 30 sturmiennes; en trait continu magenta, les résultats *DWBA*; en trait interrompu, les résultats *DWB2*; et enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dogan *et al.* [21] qui sont relatives et qui ont été normalisées de manière à ce que l'accord avec le *DWB2* soit excellent (fit). Il est clair que nos résultats PSCB sont moins bons en général comparés aux autres résultats mais son lobe binaire est positionné au même endroit que celui du premier Born de Chen *et al.* *DWBA*. Par contre, nos résultats *SCWF2* présentent un lobe binaire à la même position que celui obtenu à l'aide des second Born *DWB2* et *DWB2-AE* bien que le décalage avec les deux théories précédentes est très faible. Mais notons que la position des lobes expérimentaux coïncide avec nos résultats *SCWF2*. Les résultats *DWB2-AE* sont imprécis dans cette gamme de paramètres car l'écart avec les autres résultats est très grand surtout au niveau du lobe binaire. Certes, les données expérimentales n'ont pas de barres d'erreurs, mais nous pouvons remarquer que nos résultats *SCWF2* sont en excellent accord avec l'expérience surtout au niveau du lobe de recul où tous les autres résultats théoriques sont imprécis sauf *DWBA*. Le fait que notre théorie avec matrice J donne satisfaction en intensité et en décalage des lobes pour cette cinématique témoigne de la qualité de notre approche. De plus, cet accord montre que

les effets du second ordre dans cette gamme sont faibles et c'est ce qui justifie le faible décalage du lobe binaire.

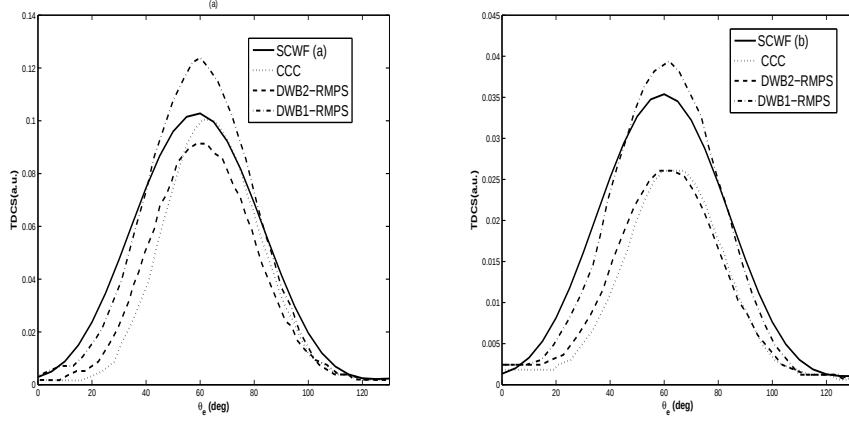


FIGURE 6.14 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 268.6$ eV, $E_e = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$ et (b) 32° . La géométrie est coplanaire et asymétrique.

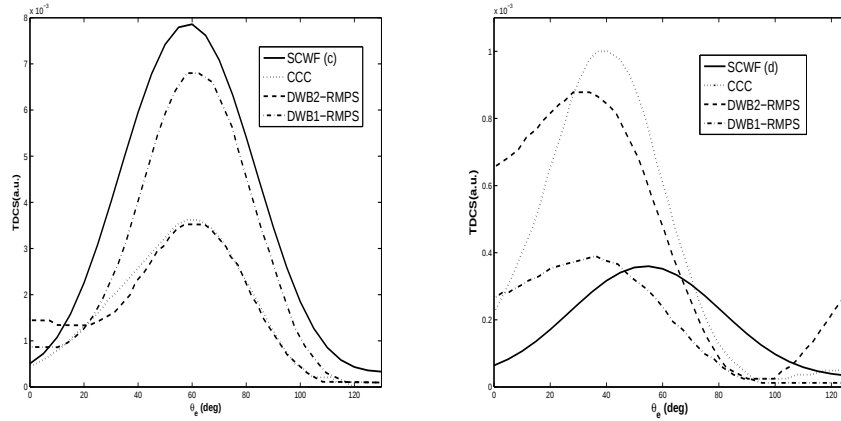


FIGURE 6.15 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 268.6$ eV, $E_e = 44$ eV et (c) 40° et (d) 56° . La géométrie est coplanaire et asymétrique.

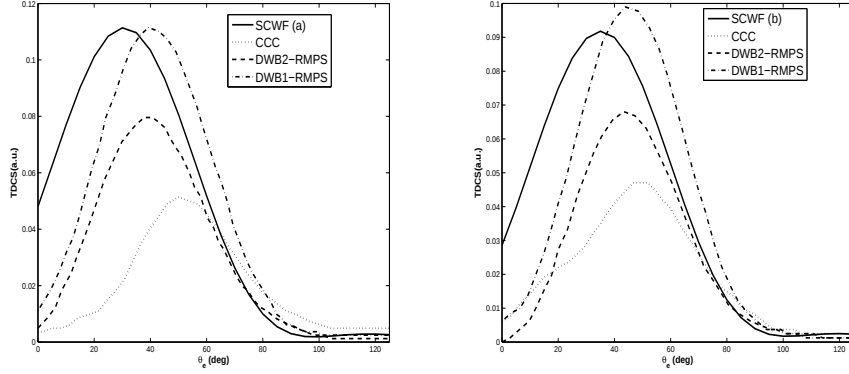


FIGURE 6.16 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 112.6$ eV, $E_e = E_f = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$ et (b) 32° . La géométrie est coplanaire et symétrique.

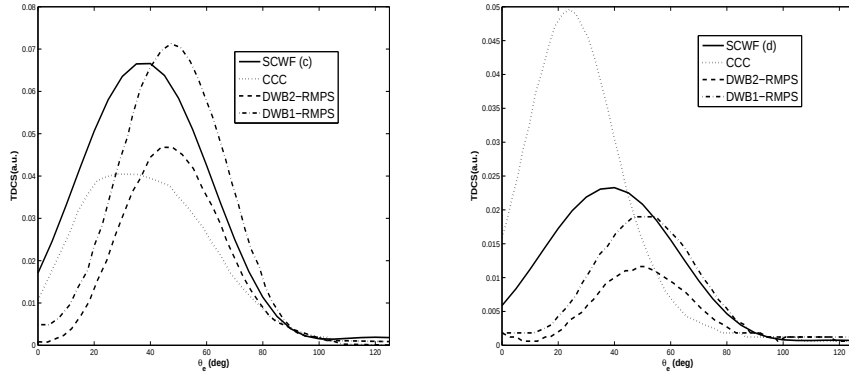


FIGURE 6.17 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation sans excitation dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 112.6$ eV, $E_e = E_f = 44$ eV et (c) 40° et (d) 56° . La géométrie est coplanaire et symétrique.

Si nous restons dans la gamme d'énergie relativement faible plus précisément $E_i = 268.6$ eV, les figures **6.14** et **6.15** nous permettent de comparer nos résultats *SCWF2* pour $\kappa = 1, 4$ couples de moments angulaires et 30 sturmiennes à ceux des résultats théoriques du premier (*DWB1-RMPS*) et du second Born (*DWB2-RMPS*) de Bartschat *et al.*

[15], et des résultats (*CCC*) [16] de Bray *et al.*. Les paramètres cinématiques utilisés pour étudier l'ionisation laissant l'ion résiduel He^+ dans l'état $1s$ sont une énergie incidente $E_i = 268.6 \text{ eV}$ qui permet d'avoir deux électrons sortant de la zone de collision avec les énergies diffusée $E_f = 200 \text{ eV}$ et éjectée $E_e = 44 \text{ eV}$. En général et comme l'ont noté Bartschat *et al.* [15], il existe un accord remarquable entre les résultats *CCC* et les résultats du second Born *DWB2-RMPS* dans la zone $[0^\circ, 120^\circ]$ du lobe binaire pour tous les angles d'éjection relativement moins élevés (inférieurs ou égaux à 40°). Nous pouvons noter que l'accord quantitatif entre nos résultats *SCWF2* et ceux de la méthode *CCC* d'une part, et du second Born d'autre part est en général bon pour les faibles angles de diffusion notamment celui de 24° . Pour $\theta_e = 32^\circ$, nos résultats *SCWF2* restent encore meilleurs que ceux du *DWB1-RMPS*. Quant aux angles de diffusion plus élevés, on assiste à une détérioration de nos résultats et ceux du *DWB1-RMPS*. Ce qui est dû à une incapacité des modèles du premier Born à prédire les résultats dans le régime où la collision est à petit paramètre d'impact.

Les figures 6.16 et 6.17 nous donnent les résultats correspondant au cas de la géométrie coplanaire symétrique où les deux électrons sortants partagent la même énergie $E_f = E_e = 44 \text{ eV}$ avec une énergie incidente de $E_i = 112.6 \text{ eV}$. Les modèles hybrides [15] y compris notre modèle, ne prennent pas en compte les effets d'échanges entre les deux électrons sortants. Ainsi, ils échouent à la prédiction de ce processus et ceci, indépendamment de l'ordre dans lequel on décrit l'interaction projectile-cible. Par contre, nous étudions ce cas juste pour avoir une banque de données qui servira plus tard à extraire des TDCS d'ionisation avec excitation à partir des rapports de données expérimentales. Les effets du second ordre sont importants car la collision est à petit paramètre d'impact.

6.5 Sections efficaces du processus $(e, 2e)$ avec excitation dans l'approximation de Born

Comme processus hautement corrélé, l'ionisation-excitation par impact électronique, en particulier dans le cas où les canaux des états résonnants autoionisants sont ouverts, représente un véritable défi tant pour les expérimentateurs que les théoriciens. Bien que les résonances $(2l2l')$ sous les seuils pour l'ionisation laissant l'ion résiduel dans les états dégénérés $2s$ et $2p$ ont été étudiés il y a une dizaine d'années par Lower et Weigold

[132], McDonald et Crowe [133], toutes les études du processus $(e, 2e)$ avec excitation faites jusqu'en 2001 [123] ont toujours ignoré les effets de ces résonances dans la comparaison entre les données expérimentales et les prédictions théoriques. Une analyse du spectre de He^+ révèle que ces résonances pourraient avoir des effets importants pour le paramètre cinématique $E_e = 5 \text{ eV}$ de Dupré *et al.* [19], et les cas $E_e = 10 \text{ eV}$ des expériences de Dupré *et al.* [19], de Stefani *et al.* [20, 121, 122], et enfin $E_e = 9.25 \text{ eV}$ de Rouvellou *et al.* [13]. Dans le cas où l'ion résiduel dans reste l'état $n = 2$, ces résonances sont en dessous des seuils $n = 3$ et $n = 4$ de He^+ . En particulier, pour $E_e = 10 \text{ eV}$, les voies des états autoionisants $(4nl')$ sont ouvertes rendant possible la désintégration de tels états vers les états $n = 2$ de He^+ . Ces résonances ont été étudiées par Fang et Bartschat [123]. Dans le problème correspondant de la photoionisation, ces résonances ont été étudiées par Menzel *et al.* [134]. Par ailleurs, Bartschat *et al.* [25] ont étudié les effets des canaux autoionisants $(2s^2)^1S$, $(2p^2)^1D$ et $(2s2p)^1P$ lors de l'ionisation sans excitation de l'hélium par impact d'électrons d'énergie égale à 488 eV avec une diffusion à 20.5° et un électron éjecté avec une énergie de 34.1 eV . Quant à Dürr *et al.* [24], ils ont fait des mesures pour l'ionisation avec excitation ($n = 2$) de l'atome d'hélium pour une énergie d'impact électronique égale à 105 eV , un angle de diffusion de $10 \pm 2^\circ$ et $20 \pm 5^\circ$, un électron éjecté avec 7.5 eV . Comme pour cette cinématique précise, les canaux conduisant à l'autoionisation de l'hélium sont ouverts, Bartschat [26] a étudié les effets de ces résonances en moyennant les prédictions théoriques du premier et du second Born sur une fenêtre de $\pm 0.5 \text{ eV}$. En comparant ses résultats à ceux de l'expérience de Dürr *et al.* [24], il en ressort que les prédictions du premier et du second Born respectivement sous-estime et surestime la TDCS. Il est clair que pour cette cinématique, les effets du second ordre sont importants mais seulement le calcul de Bartschat n'est pas assez précis puisqu'il repose sur l'approximation de fermeture.

6.5.1 Ionisation-excitation vers le niveau $\text{He}^+(n = 2)$

Dans cette sous-section, nous présentons nos résultats du processus d'ionisation de l'atome d'hélium dans le cas où l'ion résiduel He^+ reste dans les deux premiers états excités. Nous utilisons le même formalisme que celui utilisé pour étudier l'ionisation sans excitation de l'hélium. Dans un premier temps, nous comparons nos résultats SCWF à ceux de certaines théories d'une part, et aux données expérimentales de Dupré *et al.* [19],

de Avaldi *et al.* [20, 121, 122], de Rouvellou *et al.* [13] et enfin de Dogan *et al.* [21]. Dans un second temps, pour les cinématiques $E_e = 5 \text{ eV}$ et $E_e = 10 \text{ eV}$ de Dupré *et al.* [19], nous traitons complètement l'effet des canaux de sortie conduisant à l'autoionisation de l'hélium à travers les convolutions en énergie et en angle. Dans un troisième temps, pour des paramètres cinématiques du régime d'énergie d'impact dit "relativement faible", nous utilisons notre modèle pour générer les rapports des TDCS de simple ionisation avec ou sans excitation. Ces derniers résultats sont comparés aux données expérimentales de Bellm *et al.* [22, 23]. Enfin dans ce même régime, nous comparons nos résultats de l'ionisation avec excitation à ceux de Bartschat *et al.* [15].

Comparaison entre théories et expérience

Sur les figures **6.18**, **6.19** et **6.20**, nous donnons les résultats du premier Born de l'ionisation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour les paramètres cinématiques $E_f = 5500 \text{ eV}$, $E_e = 5 \text{ eV}$ et $\theta_f = 0.35^\circ$; $E_f = 5500 \text{ eV}$, $E_e = 10 \text{ eV}$ et $\theta_f = 0.32^\circ$; $E_f = 5500 \text{ eV}$, $E_e = 75 \text{ eV}$ et $\theta_f = 1^\circ$ respectivement. Ensuite, nous comparons ces résultats aux données expérimentales de Dupré *et al.* [19], aux résultats théoriques (*MWW*) de Marchalant *et al.* [12], (*RMPS23*) de Bartschat *et al.* [17], (*CCC38*) de Kheifets *et al.* [17], et de Zaytsev *et al.* [18] pour la dernière cinématique.

Sur la figure **6.18**, nos résultats *SCWF2* sont pondérés par un facteur multiplicatif 0.33 pour une question de commodité dans la comparaison des résultats. Nous observons qu'à l'exception de nos résultats *SCWF2* à l'échelle vraie grandeur, tous les autres résultats théoriques sont dans le même ordre de grandeur et sont plus bas que ces données expérimentales. Nos résultats bien qu'ayant les lobes bien positionnés dans les directions $+\vec{K}$ et $-\vec{K}$ sont plus grands que ces données d'un facteur 3.

Dans le cas de la figure **6.19** où $E_e = 10 \text{ eV}$, on remarque que nos résultats *SCWF2* sont en excellent accord avec l'expérience dans la région du lobe binaire et sont beaucoup plus grands dans la zone du lobe de recul. Le meilleur résultat théorique dans ce cas est le *MWW* qui présente plutôt un bon accord dans la région du lobe de recul mais des résultats plus bas dans la zone du lobe binaire. L'écart entre théorie et expérience observé dans ces deux cinématiques est lié à deux faits majeurs : (i) pour $E_e = 5 \text{ eV}$ et $E_e = 10 \text{ eV}$, les canaux des états autoionisants qui sont des états résonnants sous les seuils d'excitation $n = 3$ et $n = 4$ de

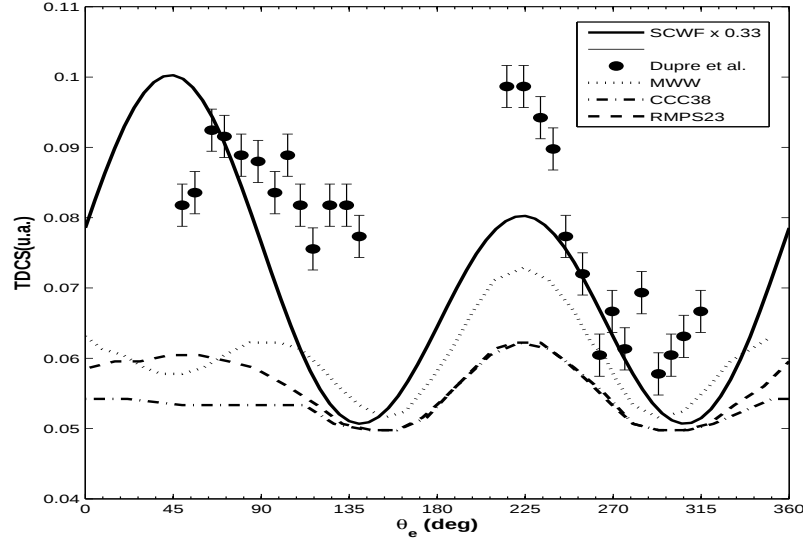


FIGURE 6.18 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV, $E_e = 5$ eV et $\theta_f = 0.35^\circ$. En trait continu gras, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (MWW) de Marchalant et al. [94]; en trait interrompu court, les résultats (RMPS23) de Bartschat et al. [17]; en trait mixte, les résultats (CCC38) de Kheifets et al. [17]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dupré et al. [19]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique. Les canaux des états autoionisants sont ouverts pour ces paramètres cinématiques. Contrairement aux autres résultats, notre approche prend en compte (via le couplage des voies) la contribution des états autoionisants. Les corrélations à travers les états autoionisants font croître la TDCS d'un facteur environ 3 par rapport aux autres résultats.

He^+ sont ouverts; (ii) les fonctions d'onde de l'état final de ces théories ne prennent pas en compte les canaux de résonances qui sont ouverts pour $E_e = 5$ eV et $E_e = 10$ eV. Dupré et al. [19] ont affirmé que le fait qu'à $E_e = 5$ eV, la résolution ΔE_e soit du même ordre de l'énergie de l'électron éjecté va moyenner et annihiler l'influence des canaux de résonances. C'est certainement pour cette raison qu'à l'exception de Fang et Bartschat [123], les théories existantes n'ont pas pris en compte ces effets de résonance. En conclusion, la comparaison entre nos résultats et ceux des autres approches théoriques (qui ne prennent pas en compte les effets des canaux résonnants) met en évidence les effets importants

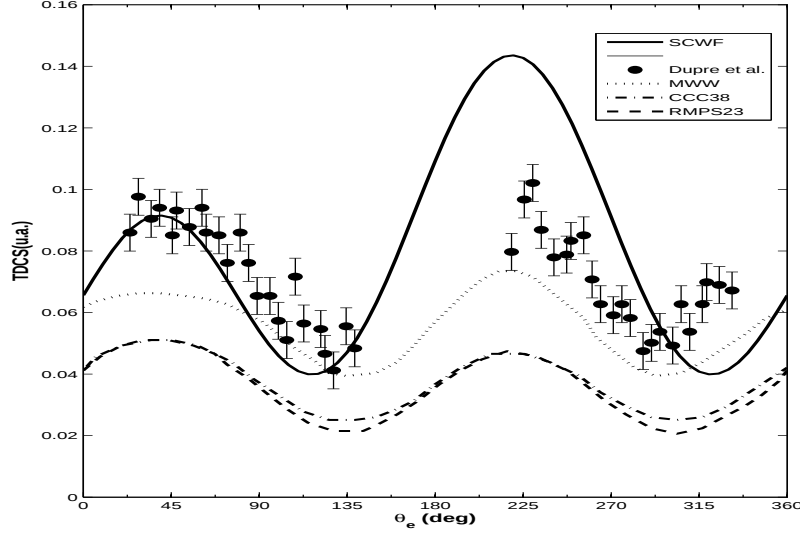


FIGURE 6.19 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 0.32^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

des états autoionisants. Ce qui permet donc d'affirmer que l'ionisation-excitation de He par impact électronique est très sensible à la corrélation électronique puisque c'est cette dernière qui est à l'origine de ces états résonnants.

Le cas $E_e = 75$ eV de Dupré *et al.* [19] (voir figure 6.20) est celui où nous avons un bon accord entre presque toutes les approches théoriques du premier ordre (notamment les résultats de Zaytsev *et al.* [18], les *MWW*, les *SCWF2*, les *RMPS23*, les *CCC38*) et l'expérience. En effet, aucun canal impliquant les états doublement excités n'est accessible. Il faut juste souligner que nos résultats *SCWF2* semblent être les meilleurs résultats théoriques. De plus, comme on pouvait s'y attendre, les effets d'ordre supérieur sont négligeables.

Sur les figures 6.21, 6.22 et 6.23, nous donnons les résultats du premier Born de l'ionisation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour les paramètres cinématiques $E_f = 1500$ eV, $E_e = 20$ eV et $\theta_f = 4^\circ$; $E_f = 570$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 4^\circ$; $E_f = 570$ eV, $E_e = 40$ eV

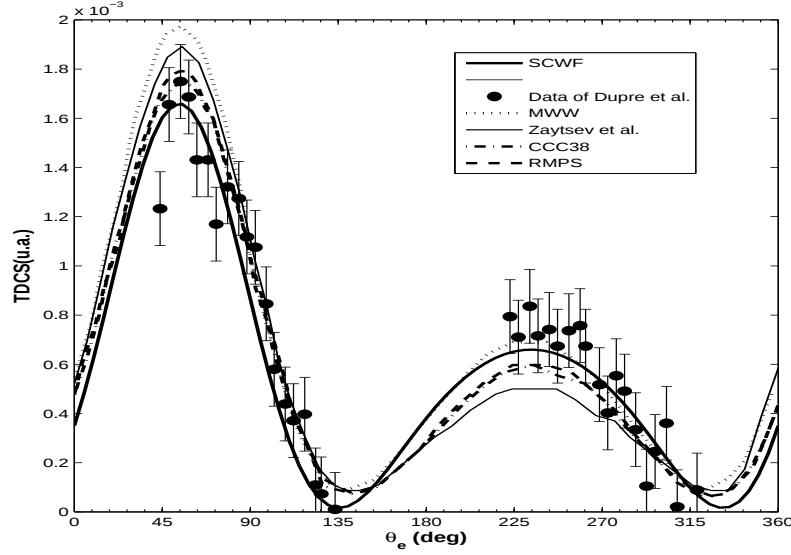


FIGURE 6.20 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV, $E_e = 75$ eV et $\theta_f = 1^\circ$. En trait mixte, les résultats de Zaytsev et al. [18]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

et $\theta_f = 4^\circ$ respectivement. Nous comparons ces résultats ensuite aux données expérimentales d'Avaldi *et al.* [20, 121, 122] et aux mêmes résultats théoriques précédents. En cercle plein, les données expérimentales d'Avaldi *et al.*.

Sur la figure 6.21, la cinématique $E_f = 1500$ eV correspond à un régime des hautes énergies d'impact avec un faible transfert d'impulsion. Ainsi, on s'attend à ce que les calculs du premier Born soient précis. Il y a un bon accord entre les résultats théoriques et l'expérience. Notons que nos résultats *SCWF2* semblent être meilleurs que ceux de *MWW* au niveau du lobe binaire mais sont moins élevés au niveau du lobe de recul. Par contre, les autres résultats théoriques *RMPS23* et *CCC38* sont beaucoup moins bons.

Dans la figure 6.22, l'énergie de l'électron diffusé vaut 570 eV et celle de l'électron éjecté vaut $E_e = 10$ eV. Ce qui correspond au régime des énergies d'impact intermédiaires avec un transfert d'impulsion faible, les canaux des états autoionisants sont accessibles. Comme on pouvait s'y

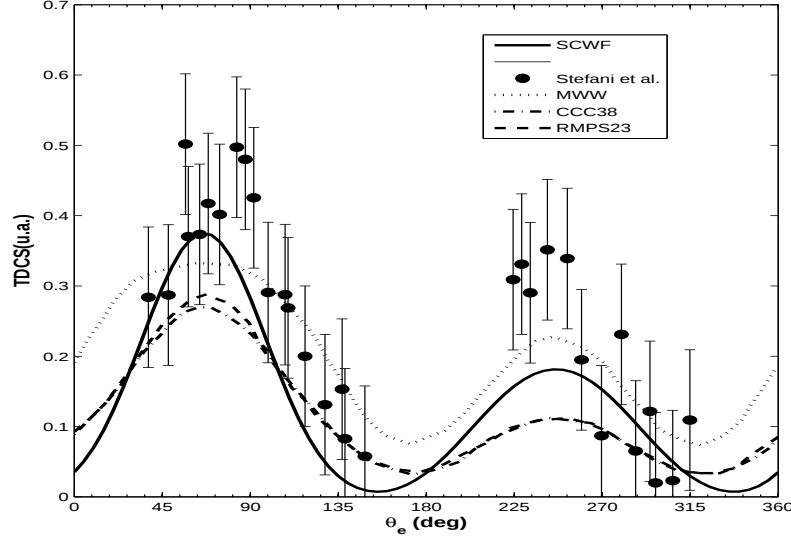


FIGURE 6.21 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 1500$ eV, $E_e = 20$ eV et $\theta_f = 4^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats (MWW) de Marchalant et al. [94]; en trait interrompu court, les résultats (RMPS23) de Bartschat et al. [17]; en trait continu de couleur magenta, les résultats (CCC38) de Kheifets et al. [17]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Avaldi et al. [20, 121, 122]. L'énergie d'impact est dans le régime des hautes énergies, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

attendre, le lobe binaire expérimental est décallé de 15° par rapport aux prédictions théoriques du premier Born sauf le cas de MWW. Les résultats MWW dans la zone du pic binaire de la figure 6.22 sont spéciaux puisqu'ils présentent un minimum (déplacement du pic binaire trop important) lorsque les autres théories présentent leur maximum mais l'accord entre ses résultats et l'expérience dans la zone du pic de recul est notable. Par ailleurs, en terme d'intensité des pics, nos résultats SCWF2 sont meilleurs que les deux autres résultats RMPS23 et CCC38.

Enfin le cas où l'énergie de diffusion vaut 570 eV mais avec un électron qui est éjecté avec 40 eV (quatre fois plus grand que celui de la figure 6.22) est présenté dans la figure 6.23. Notons que l'on est toujours dans le régime des énergies d'impact intermédiaires mais avec un transfert d'impulsion plus grand que celui de la figure 6.22. Les canaux qui conduisent

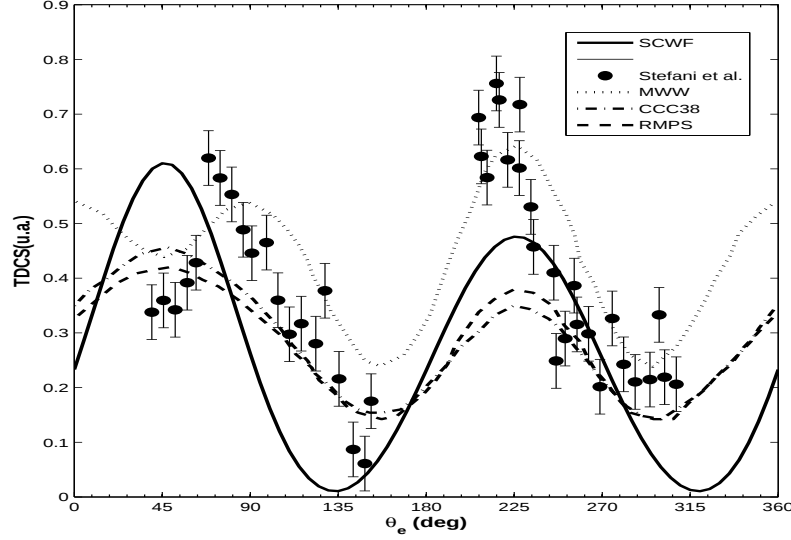


FIGURE 6.22 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 570$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 4^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies intermédiaires, le transfert d'impulsion est faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

à l'autoionisation de l'hélium sont fermés. De manière globale, nous assistons à un accord moins marqué entre les résultats théoriques (qui sont du premier ordre) et l'expérience avec un déplacement du pic binaire. Quant aux intensités au niveau des deux lobes, les résultats *MWW* sont les plus précis. Ensuite, au niveau du lobe binaire, les *SCWF2* sont légèrement en dessous des *MWW*. Il est indéniable que les effets d'ordre supérieur sont importants pour cette cinématique.

La figure 6.24 exprime la variation angulaire de la TDCS lors de l'ionisation-excitation ($n = 2$) de l'hélium par impact d'électrons d'énergie 365.8 eV. Suite à l'impact, le projectile est dévié de 4.5° sur sa trajectoire incidente et l'effet de cette collision est d'éjecter un électron avec une énergie de 9.25 eV. Tout comme dans les deux expériences précédentes, la cinématique $E_e = 9.25$ eV correspond à un état final qui est tel que les canaux résonnants ouverts ont des effets importants. Les cercles pleins sont les données expérimentales de Rouvellou *et al.* [13]. Le régime étant celui des énergies d'impact intermédiaires, on note un déplacement du

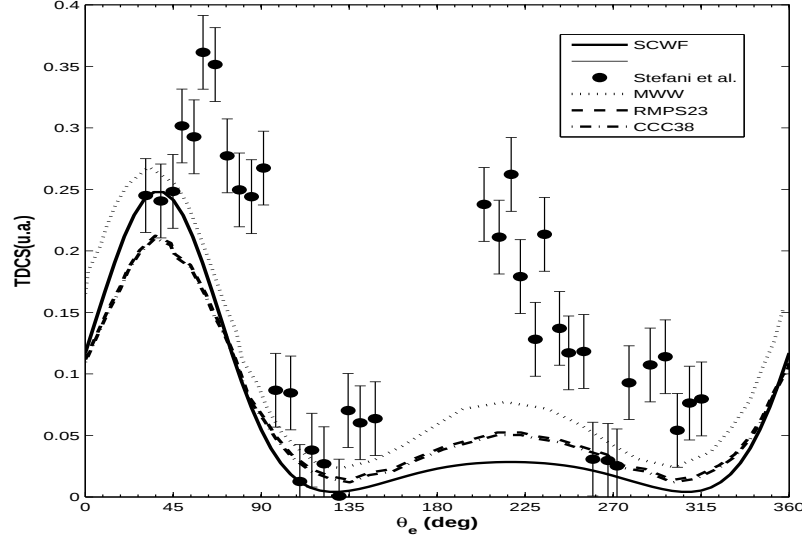


FIGURE 6.23 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 570$ eV, $E_e = 40$ eV et $\theta_f = 4^\circ$. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies intermédiaires, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

lobe binaire expérimental par rapport au lobe théorique qui est dans la direction prévisible $+\vec{K}$. Dans la zone du pic principal, tous les résultats théoriques de Tweed *et al.* [13] sont plus grands que les données expérimentales. Par contre, nos résultats *SCWF2* sont plus bas que ces données. Par ailleurs, nos résultats *SCWF2* malgré le déplacement, sont plus proches des données expérimentales dans la zone du lobe binaire que toutes les théories. Notons aussi que comme dans le cas de l'ionisation sans excitation, l'inclusion du facteur de Gamow qui prend en compte les effets du processus post-collisionnel abaisse bien le lobe principal sans toutefois le déplacer vers le lobe binaire expérimental. Notons que pour décrire le décalage du pic binaire, il faut inclure les effets du second ordre car la théorie du premier Born prédit nécessairement un pic binaire dans la direction du transfert d'impulsion quelles que soient les fonctions d'onde initiale et finale utilisées. Quant au lobe de recul, toutes les théories ont le même comportement mais l'intensité du pic reste un réel problème.

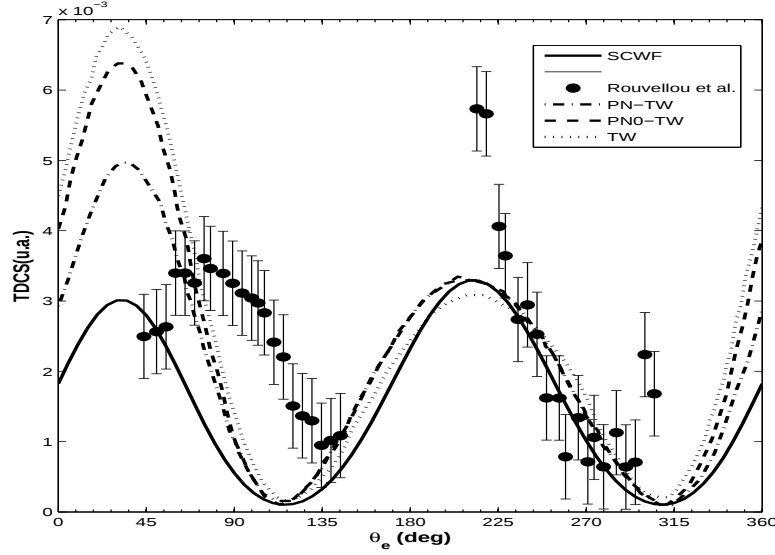


FIGURE 6.24 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 291.2$ eV, $E_e = 9.25$ eV et $\theta_f = 4.5^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait pointillé, les résultats de Tweed et al. [13] sans polarisation et sans le facteur N_{ee} ; en trait interrompu court, les résultats de Tweed avec seulement la polarisation; en trait continu de couleur magenta, les résultats de Tweed avec polarisation et avec le facteur N_{ee} ; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Rouvellou et al. [13]. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

Sur la figure 6.25, nous comparons nos résultats SCWF2 avec ceux (DWBA, DWB2 et DWB2-AE) de Chen *et al.* [14] d'une part, et avec les données expérimentales d'autre part dans le cas de l'ionisation avec excitation de l'hélium laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$. Les cercles pleins sont les données expérimentales de Dogan *et al.* [21]. L'énergie d'impact étant de $E_i = 200$ eV où un électron est éjecté avec 10 eV, il est clair que nous sommes dans un régime intermédiaire relativement faible en énergie dans lequel les effets dus aux canaux résonnants jouent un rôle important. On note la présence du décalage du pic binaire expérimental par rapport à tous les autres résultats théoriques, second Born compris. Ce qui tend à montrer que les approximations faites dans leurs calculs ne sont pas bien contrôlées. Tous les résultats de Chen *et al.* [14] dans la

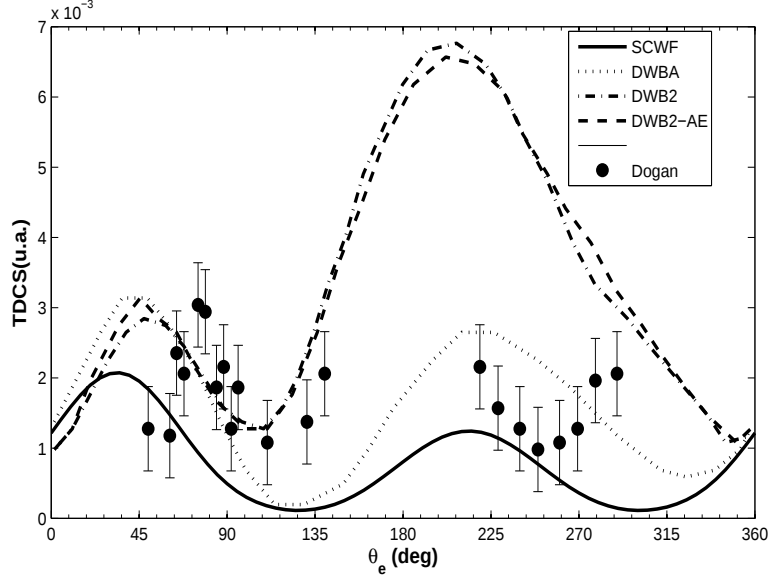


FIGURE 6.25 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . Les paramètres cinématiques considérés sont $E_i = 200$ eV, $E_e = 10$ eV et $\theta_f = 11^\circ$. En trait fort continu, les résultats SCWF2 pour $\kappa = 1$ et 4 couples de moments angulaires; en trait interrompu court, les résultats (DWB2-AE) du second Born dans l'approximation de fermeture de Chen et al. [14]; en trait pointillé, les résultats (DWBA) du premier Born de Chen et al. [14]; en trait mixte, les résultats (DWB2) du second Born de Chen et al. [14]; enfin en cercle plein, les données expérimentales de Dogan et Crowe [21]. L'énergie d'impact est dans le régime des énergies relativement faibles, le transfert d'impulsion n'est pas faible et la géométrie est coplanaire et asymétrique.

zone du lobe binaire sont plus élevés que les notres. De plus ils sont plus proches des données expérimentales malgré le déplacement. Par contre, dans la région du lobe de recul, tous les résultats du second Born de Chen *et al.* sont très loin des données expérimentales tandis que les résultats du premier Born DWBA et SCWF semblent plus raisonnables.

Cinématiques 5 eV et 10 eV de Dupré *et al.* : Etude des effets des états autoionisants

Après la comparaison entre différentes théories du premier ordre et expériences, il ressort que lorsque l'électron est éjecté avec une énergie comprise entre 5 eV et 13.59 eV, les canaux conduisant à l'autoionisation

de l'hélium sont ouverts. Pour être précis, il s'agit des deux premières cinématiques de Dupré *et al.* [19], de la deuxième cinématique de Stefani *et al.* [20], des cinématiques de Rouvellou *et al.* [13] et de Dogan *et al.* [21]. Dans ce qui suit, nous allons nous focaliser sur ces deux premières cinématiques et étudier l'effet de ces résonances pour deux raisons particulières : (i) nous avons des précisions sur les résolutions en énergie et angle dans les expériences de Dupré *et al.* [19], (ii) pour ces cinématiques, notre modèle du premier ordre devrait suffire à prédire les TDCS si nous nous référons à l'excellent accord obtenu entre théorie et expérience pour la cinématique $E_e = 75 \text{ eV}$. Fang et Bartschat [123] ont été les premiers à mener une étude théorique des effets des résonances $(4lnl')$ dans le processus $(e, 2e)$ de He laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour un électron éjecté avec 10 eV . Ils ont utilisé dans leur modèle de la matrice R de la fonction d'onde finale, 13 pseudo-états pour décrire le simple continuum de l'hélium où le couplage via l'interaction entre les électrons des états doublement excités avec le continuum est pris en compte. Dans notre cas, le nombre de pseudo-états est de quelques centaines. Dans ce qui suit, nous faisons une étude de ces effets qui sont très importants dans la comparaison des données expérimentales et des résultats théoriques pour certains paramètres cinématiques précis.

Les figures **6.26** et **6.27** nous donnent la dépendance angulaire et énergétique (pour l'électron éjecté) de la TDCS pour l'ionisation de He. Suite à l'impact électronique, l'ion résiduel He^+ reste les états $n = 2$ tandis qu'un électron est éjecté avec une énergie autour de 5 eV (figure **6.26**) et 10 eV (figure **6.27**). Ces résultats ont été obtenus par notre modèle SCWF. Pour les cinématiques $(E_f = 5500 \text{ eV}, \theta_f = 0.35^\circ)$ et $(E_f = 5500 \text{ eV}, \theta_f = 0.32^\circ)$ de Dupré *et al.* [19], les résultats sont représentés respectivement dans le voisinage de $E_e = 5 \text{ eV}$ et $E_e = 10 \text{ eV}$. Pour identifier une résonance, la procédure est la suivante : (i) faire varier le moment angulaire total final L_f et repérer la valeur de L_f qui donne cette résonance ; (ii) soient I^{++} et I_n^+ le seuil de double ionisation et le n -ième seuil de simple ionisation en (eV) respectivement ; (iii) soit E_e^r la position en (eV) d'une résonance que l'on désire identifier pour un angle d'éjection fixé, l'opération

$$[-I^{++} + (E_e^r + I_n^+)]/27.2116, \quad (6.38)$$

permet d'obtenir la valeur de l'énergie en unités atomiques qui correspond (ou qui est proche) à un état doublement excité de la table **6.5.1**. Rappelons que $I^{++} = 79 \text{ eV}$ et que le deuxième seuil de simple ionisa-

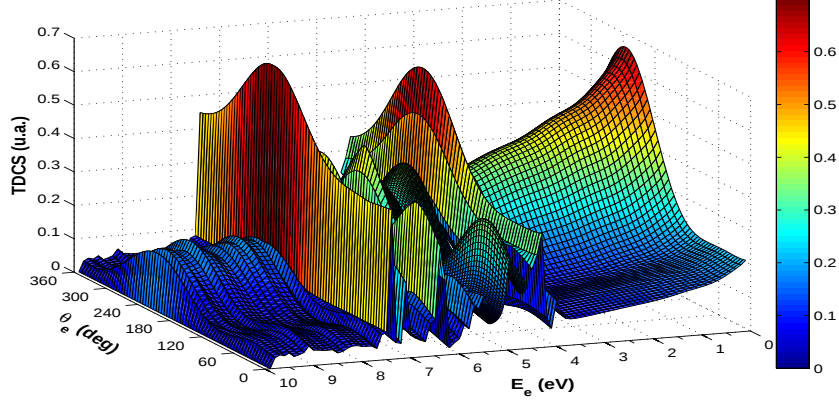


FIGURE 6.26 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle θ_e et de l'énergie E_e (eV) $\in [0.1, 9.9]$ de l'électron éjecté. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV et $\theta_f = 0.35^\circ$. Notons que l'énergie incidente a été prise égale à $E_i = 5570$ eV.

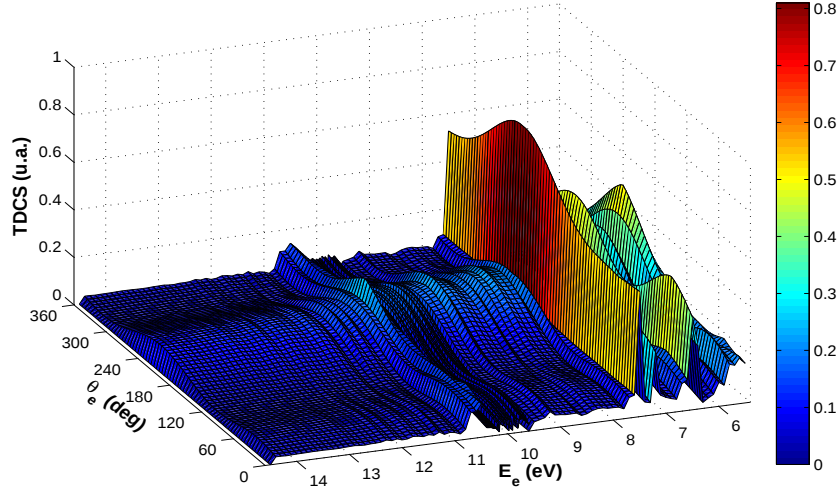


FIGURE 6.27 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'angle θ_e et de l'énergie E_e (eV) $\in [5.4, 14.6]$ de l'électron éjecté. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV et $\theta_f = 0.32^\circ$. Notons que l'énergie incidente a été prise égale à $E_i = 5575$ eV.

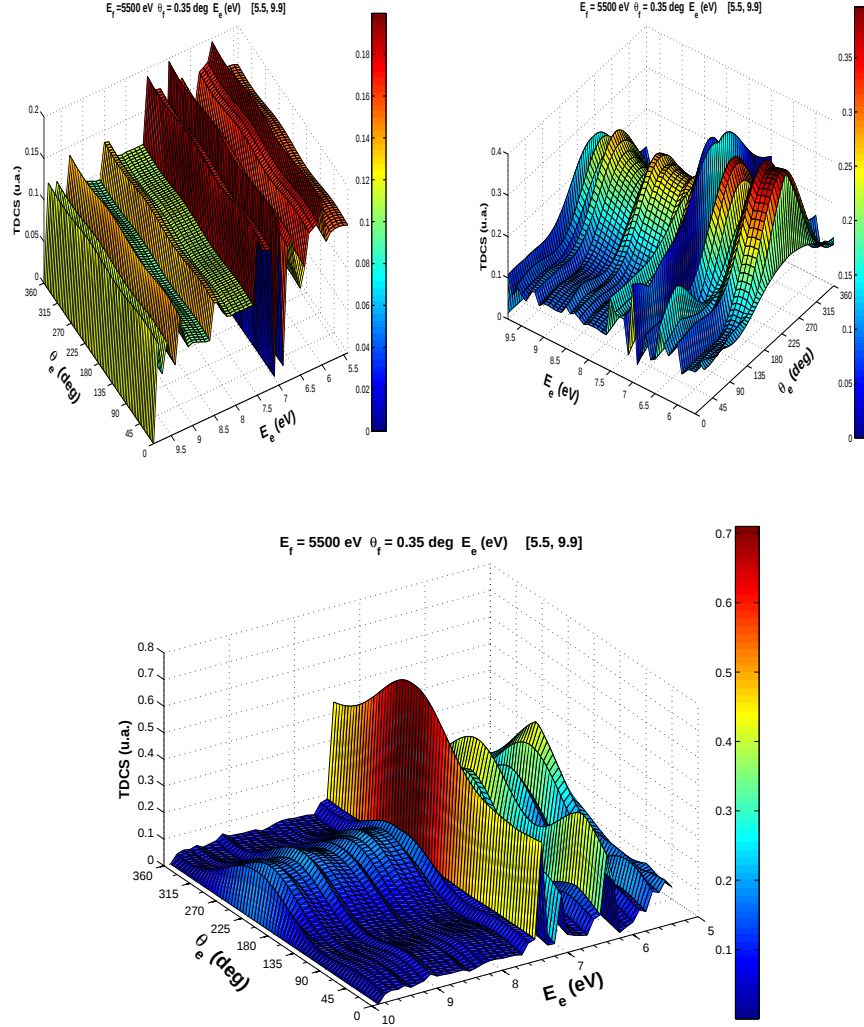


FIGURE 6.28 – Cinématique $E_e = 5$ eV. Variation bidimensionnelle de la TDCS (u.a.) en fonction de l'angle θ_e et de l'énergie de l'électron éjecté $E_e \in [5.5 \text{ eV}, 9.9 \text{ eV}]$ pour $L_f = 0$, $L_f = 0.1$ et $L_f = 0.2$. La forte résonance présente en $E_e = 7.5$ eV provient de $L_f = 2$ et correspond au seuil $n = 3$.

tion est $I_2^+ = 65.41 \text{ eV}$ pour l'hélium. Sur la figure 6.26, les résonances situées en $E_e = 0.1 \text{ eV}$ et $E_e = 7.5 \text{ eV}$ correspondent respectivement aux seuils $n = 2$ et $n = 3$ tandis que celle située entre $E_e = 4.4 \text{ eV}$ et

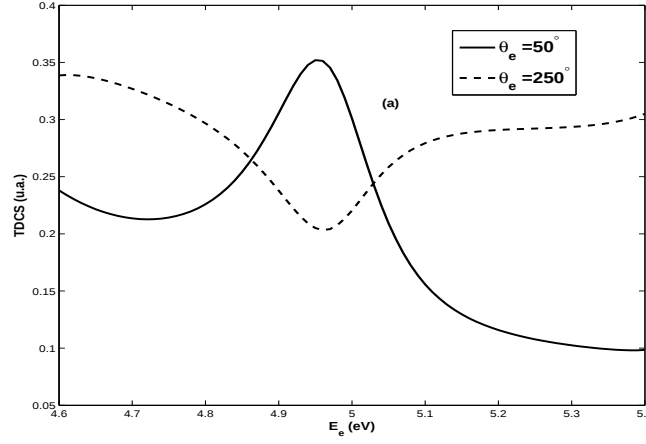


FIGURE 6.29 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'énergie de l'électron éjecté E_e (dans le voisinage de $E_e = 5$ eV) pour $\theta_e = 50^\circ, 250^\circ$. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV et $\theta_f = 0.35^\circ$.

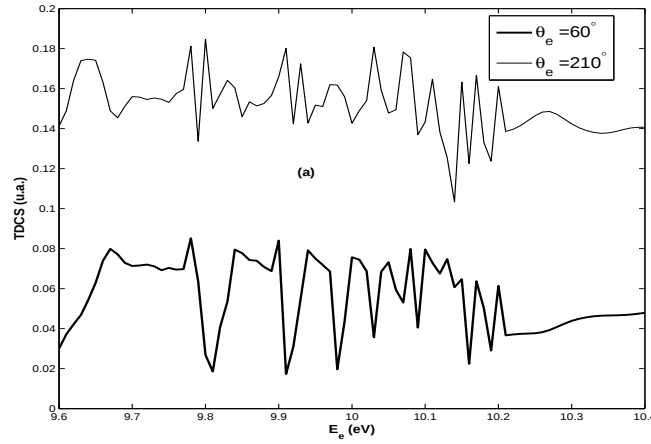


FIGURE 6.30 – $TDCS$ (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) dans le FBA en fonction de l'énergie de l'électron éjecté E_e (dans le voisinage de $E_e = 10$ eV) pour $\theta_e = 60^\circ$ (en trait continu gras), 210° (en trait continu fin). Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV et $\theta_f = 0.32^\circ$.

$E_e = 7.5$ eV proviennent de la contribution des états doublement exci-

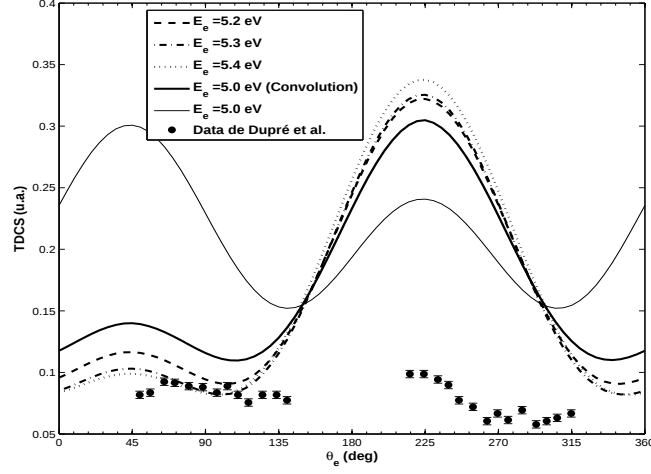


FIGURE 6.31 – Distribution angulaire de TDCS (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) pour des valeurs fixées de E_e autour de 5 eV. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV et $\theta_f = 0.35^\circ$.

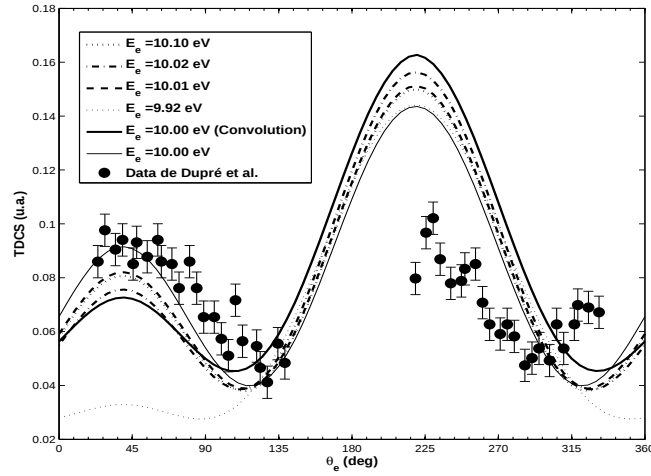


FIGURE 6.32 – Distribution angulaire de TDCS (u.a.) d'ionisation avec excitation ($n = 2$) pour des valeurs fixées de E_e autour de 10 eV. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 5500$ eV et $\theta_f = 0.32^\circ$.

tés en dessous du seuil $n = 3$. De plus, sur les figures **6.26** et **6.27**, les résonances définies par $E_e > 7.5 \text{ eV}$ proviennent des états doublement excités ($4lnl'$).

Dans les deux cinématiques, on remarque qu'une légère variation de l'énergie théorique E_e peut avoir des effets significatifs sur la forme et sur l'amplitude de la TDCS. Par conséquent, l'effet potentiel des résonances dans une expérience avec une résolution énergétique finie ne devrait pas être ignoré [123]. Pour illustrer ce point de vue, nous avons étudié la variation de la TDCS en fonction de l'énergie de l'électron éjecté dans le voisinage de 5 eV et 10 eV pour deux valeurs fixées de l'angle d'éjection. Les distributions angulaires qui sont données dans les figures **6.29** et **6.30** ont été étudiées proches des lobes binaire et de recul. Tout comme dans le cas de l'ionisation sans excitation, le terme dipolaire correspondant à $L_f = 1$ a la contribution dominante. La large résonance des états autoionisants présente sur la figure **6.29** est centrée à 4.95 eV . Elle a un profil gaussien de largeur à mi-hauteur sensiblement égale à 140 meV . Pour une énergie de $E_e = 5 \text{ eV}$ avec une résolution énergétique de 5 eV , suite à l'impact électronique, l'atome d'hélium peut se trouver dans un état doublement excité He^{**} avec une énergie $70.41 \text{ eV} \pm 5 \text{ eV}$. Dans ces conditions, les états doublement excités de durée de vie finie qui sont concentrés dans la plage $[4.6 \text{ eV}, 5.1 \text{ eV}]$ et qui contribuent sont principalement les états DE ($3l3l'$) pour les états S, P, D et F de la table **6.5.1** dont l'énergie est strictement supérieure à -0.5 u.a. . La figure **6.30** montre la présence des états autoionisants de 9.75 eV à 10.25 eV soit sur une plage de 500 meV autour 10 eV .

Par ailleurs, les figures **6.31** et **6.32** qui sont respectivement les distributions angulaires des TDCS($n=2$) pour $E_e = 5 \text{ eV}$ et $E_e = 10 \text{ eV}$, nous montrent clairement les effets substantiels des résonances car on voit qu'une légère variation de E_e affecte l'amplitude et la forme de la TDCS. Mais, le changement de forme est beaucoup plus marqué dans le cas $E_e = 5 \text{ eV}$. Le meilleur résultat dans ce cas précis est celui avec une énergie $E_e = 5.4 \text{ eV}$ où on assiste à un accord notable avec l'expérience au niveau du pic binaire mais à un écart maximal au niveau du pic de recul. Ce cas ressemble étrangement au cas $E_e = 10 \text{ eV}$ (avec $E_i = 5575.41 \text{ eV}$) de la figure **6.32** qui est le meilleur résultat pour cette dernière cinématique. Il est donc clair que la présence de ces états autoionisants et la forme des profils ont un effet important pour de telles cinématiques dans une réaction $(e, 2e)$ de He. Nous avons convolué nos résultats de la TDCS par la fonction de réponse en énergie de l'analy-

TABLE 6.1 – *Etats doublement excités de He pour $L_f = 0-3$. (a) Valeurs en unités atomiques de l'énergie (seconde colonne) et la largeur de l'état DE (troisième colonne) obtenues par les calculs de Scrinzi et Piraux [135]. (b) Valeurs en unités atomiques de l'énergie (quatrième colonne) et la largeur de l'état DE (cinquième colonne) prises dans [137] pour $L \leq 2$ et dans [136] pour $L > 2$.*

(n_1, n_2)	(a)		(b)	
L=0				
(2,2)	-0.777879	4.55×10^{-3}	-0.777868	4.53×10^{-3}
(2,2)	-0.621926	2.156×10^{-4}	-0.6219275	2.156×10^{-4}
(2,3)	-0.589892	1.37×10^{-3}	-0.589895	1.35×10^{-3}
(2,3)	-0.548085	6.8×10^{-5}	-0.5480855	7.8×10^{-3}
(3,3)	-0.353517	2.98×10^{-4}	-0.353537	3.004×10^{-4}
(3,3)	-0.317511	6.9×10^{-3}	-0.317455	6.67×10^{-3}
L=1				
(2,2)	-0.6931347	1.366×10^{-3}	-0.6931349	1.3773×10^{-3}
(2,3)	-0.5970738	3.857×10^{-6}	-0.59707381	3.84399×10^{-6}
(2,3)	-0.5640865	2.93×10^{-4}	-0.56408514	3.01057×10^{-4}
(3,3)	-0.335611	6.92×10^{-3}	-0.3356269	7.023×10^{-3}
(3,3)	-0.2862	3.04×10^{-4}	-0.28595074	3.409×10^{-5}
(3,3)	-0.282855	1.63×10^{-3}	-0.28282897	1.46208×10^{-3}
L=2				
(2,2)	-0.701938	2.360×10^{-3}	-0.7019457	2.3622×10^{-3}
(2,3)	-0.56925	6.9×10^{-4}	-0.569221	5.55×10^{-4}
(2,3)	-0.55640	3.6×10^{-4}	-0.5564303	2.01×10^{-5}
(3,3)	-0.34309	5.174×10^{-3}	-0.343173	5.155×10^{-3}
(3,3)	-0.31545	4.14×10^{-3}	-0.31553	4.305×10^{-3}
L=3				
(2,3)	-0.5582830	1.297×10^{-5}	-0.558828	1.28×10^{-5}
(2,3)	-0.5322936	3.50×10^{-5}		
(3,3)	-0.3042474	3.24×10^{-3}	-0.30424	3.24×10^{-3}
(3,3)	-0.2780025	9.58×10^{-5}		

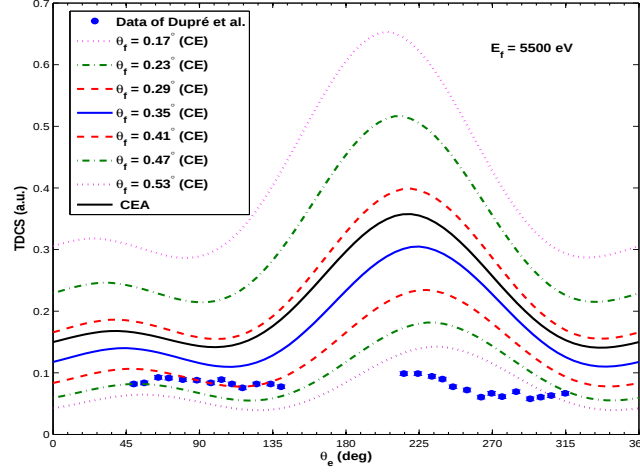


FIGURE 6.33 – Cinématique $E_e = 5 \text{ eV}$. Effet de l'angle de diffusion sur la distribution angulaire de la TDCS, convolution en énergie et en angle de la TDCS à l'aide d'une gaussienne de largeur 4.2 eV et 0.18° respectivement.

seur (voir les courbes en trait continu gras sur les figures 6.31 et 6.32). Pour la cinématique $E_e = 5 \text{ eV}$, une convolution en angle de diffusion des TDCS convoluées en énergie a été faite à l'aide d'une gaussienne de largeur à mi-hauteur égale à 0.18° . Ce résultat est présenté sur la figure 6.33. Il est représenté par CEA dans la légende de cette figure et c'est ce résultat qui doit être comparé en toute rigueur avec l'expérience de Dupré *et al.* [19]. Il en ressort qu'il subsiste toujours un écart important entre le résultat doublement convolué et l'expérience (intensité des lobes et décalage du lobe binaire). Insistons sur le fait que seul le lobe binaire est accessible avec une grande précision dans une expérience $(e, 2e)$. Par contre, sur la figure 6.33, le meilleur résultat est celui convolué en énergie avec un angle de diffusion égal à 0.41° où on note d'une part, un mouvement du pic binaire théorique vers le pic binaire expérimental, et d'autre part, le rabaissement de l'intensité de la TDCS théorique vers la valeur expérimentale. Ce qui est compréhensible car le transfert d'impulsion et son angle polaire augmente avec θ_f .

Nous avons montré dans le **chapitre 4** que la contribution de l'ionisation avec excitation (IAE) est nulle dans le modèle non-corrélé des électrons de la cible. Compte tenu du bon accord global entre nos résultats et les données expérimentales, il est clair que la prise en compte

précise des corrélations électroniques dans la cible est cruciale pour décrire le processus de simple ionisation avec excitation.

Comparaison entre théories et expériences de Bellm *et al.*

Suite aux comparaisons que nous venons de faire, il ressort qu'il est difficile d'avoir un excellent accord entre les théories et l'expérience pour le processus $(e, 2e)$ en général et ceci quelle que soit la cinématique considérée. Comme nous l'avons déjà évoqué, il existe plusieurs raisons qui

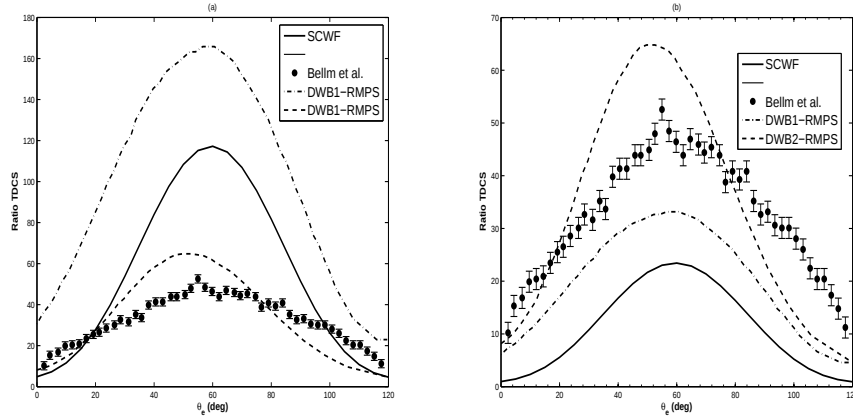


FIGURE 6.34 – *TDCS pour l'ionisation sans excitation ($n = 1$) divisée par la TDCS correspondante pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$. Le facteur d'échelle des deux résultats FBA est de 1 pour la figure (a) et de 0.2 pour la figure (b). De plus, la géométrie est coplanaire et asymétrique. En trait continu, les résultats en terme de ratio SCWF; en trait mixte, les résultats en terme de ratio DWB1-RMPS du FBA de Bartschat et al. [23]; en trait interrompu court, les résultats en terme de ratio DWB2-RMPS du second Born de Bartschat et al. [23]; et enfin en cercle plein, les données expérimentales de Bellm et al. [23].*

expliquent ce fait et en particulier le problème de la normalisation des données expérimentales. Pour s'en affranchir, Bellm *et al.* [22, 23] ont plutôt fait des mesures du rapport des TDCS de l'ionisation pour une excitation $n \geq 2$ sur la TDCS de l'ionisation sans excitation. Bartschat *et al.* [23] ont généré des rapports (premier et second Born) relatifs à ce processus et ils ont comparé leurs résultats aux données de Bellm *et al.* [22, 23]. Enfin, dans plusieurs expériences, les énergies de l'électron éjecté sont souvent de l'ordre de 5 et 10 eV. Cet ordre de grandeur

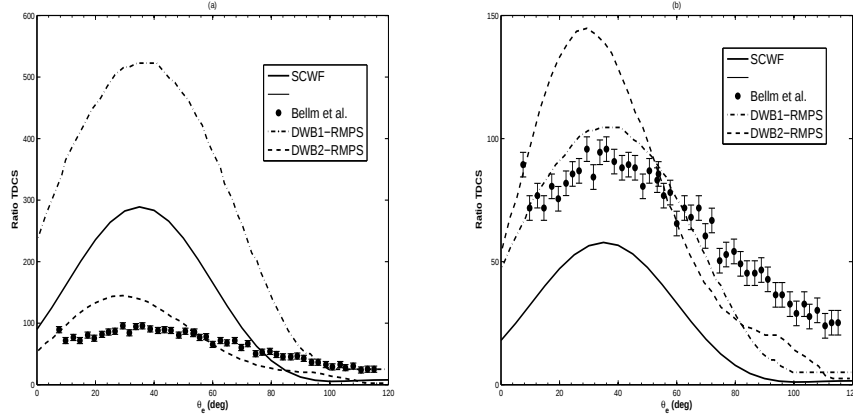


FIGURE 6.35 – $TDCS$ pour l'ionisation sans excitation ($n = 1$) divisée par la $TDCS$ correspondante pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$. Le facteur d'échelle des deux résultats FBA est de 1 pour la figure (a) et de 0.2 pour la figure (b). De plus, la géométrie est coplanaire et symétrique. En trait continu, les résultats en terme de ratio SCWF; en trait mixte, les résultats en terme de ratio DWB1-RMPS du FBA de Bartschat et al. [23]; en trait interrompu court, les résultats en terme de ratio DWB2-RMPS du second Born de Bartschat et al. [23]; et enfin en cercle plein, les données expérimentales de Bellm et al. [23].

est problématique car il est associé aux états de résonances doublement excités $n = 3$ et $n = 4$ de l'hélium, rendant donc quasi-impossible la comparaison entre les théories rigoureuses et l'expérience. C'est ainsi que nous avons donc calculé ces rapports des sections efficaces d'ionisation avec excitation $n = 2$ par rapport aux sections efficaces d'ionisation sans excitation $n = 1$ en utilisant notre approche théorique. Le but est de comparer (voir figures 6.34 pour la cinématique asymétrique et 6.35 pour la cinématique symétrique) nos résultats de rapports à ceux théoriques de Bartschat *et al.* [23] et expérimentaux de Bellm *et al.* [23]. Sur la figure 6.34, sont représentés nos résultats SCWF2 (en trait continu), les résultats du premier Born de Bartschat *et al.* DWB1-RMPS (en trait interrompu), les résultats du second Born de Bartschat *et al.* DWB2-RMPS (en trait mixte), et enfin les données expérimentales de Bellm *et al.* (en cercle plein). Les paramètres cinématiques sont $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$ pour la figure 6.34; et $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$ pour la figure 6.35. Les figures 6.34(a) et 6.35(a) donnent les résultats sans le facteur multiplicatif. Ces derniers montrent clairement que

les théories du premier Born sont en désaccord avec l'expérience. Dans le cas d'une cinématique asymétrique, notre approche prédit un rapport élevé d'un facteur de plus de deux tandis que les résultats *DWB1-RMPS* en prédisent un ratio plus grand d'un facteur de plus de trois. Dans les figures **6.34(a)** et **6.35(a)**, comme dans l'article de Bellm *et al.* [23], nous avons multiplié les résultats du premier Born par le facteur d'échelle 0.2 afin de mieux apprécier les résultats. On note la bonne reproduction des modèles du premier ordre de la dépendance angulaires des ratios quand ces derniers sont pondérés par ce facteur. Ces résultats du premier Born pondérés sont bel et bien en accord avec les résultats des modèles observés par Sakhelashvili *et al.* [138] qui avait vivement suggéré qu'il faut à tout prix normaliser les données expérimentales pour avoir un accord avec les théories du premier Born. Les résultats du premier Born fournissent un aperçu de l'importance, ou de l'absence de certains effets particuliers qui sont souvent abordés dans les théories. Par contre, les calculs du second Born *DWB2-RMPS* reproduisent les données expérimentales avec une meilleur précision dans la cas de la cinématique asymétrique que dans le cas de la cinématique symétrique. En regardant les contributions individuelles des TDCS au rapport, la mauvaise prédiction des rapports des sections efficaces est plus liée aux résultats d'ionisation avec excitation plutôt qu'aux résultats d'ionisation sans excitation.

Comparaison avec les données de Bartschat/Bellm

La méthode CCC [16] est une méthode connue pour sa précision dans l'étude de l'ionisation sans excitation de l'hélium par impact électronique quel que soit le type de géométrie et de cinématique considérées. Bartschat *et al.* [15] ont utilisé les rapports expérimentaux de Bellm *et al.* [23] pour extraire les TDCS avec excitation $n = 2$ et $n = 3$ qui peuvent être qualifiées d'absolues compte tenu du degré de précision des méthodes CCC. Nous avons comparé ces données absolues à nos résultats du premier Born *SCWF2* d'une part, ceux du premier Born *DWB1-RMPS* et du second Born *DWB2-RMPS* de Bartschat *et al.* pour le processus d'ionisation-excitation ($n = 2$). Sur les figures **6.36**, **6.37**, **6.38** et **6.39**, nous avons en trait continu, nos résultats *SCWF2* pour $\kappa = 1, 4$ couples de moments angulaires et 30 sturmiennes; en trait mixte, les résultats *DWB1-RMPS*; en trait interrompu court, les résultats *DWB2-RMPS*; et enfin en cercle plein, les données expérimentales absolues extraites par Bartschat *et al.* [15] de l'article de Bellm *et al.* [23]. Sur les figures **6.36** et

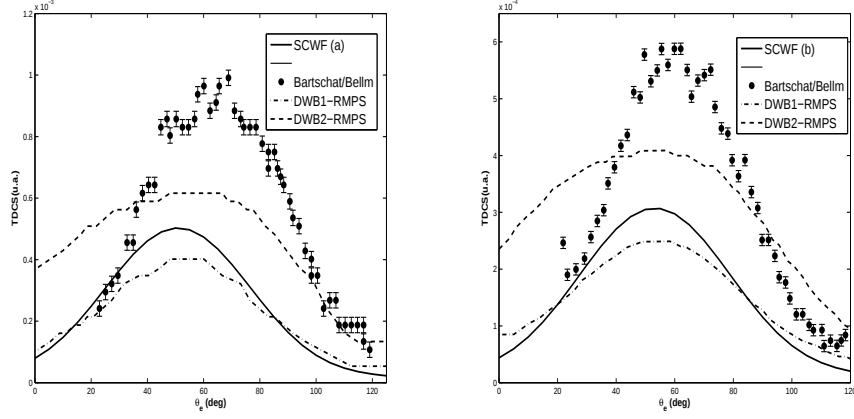


FIGURE 6.36 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$ et (b) 32° . La géométrie est coplanaire et asymétrique.

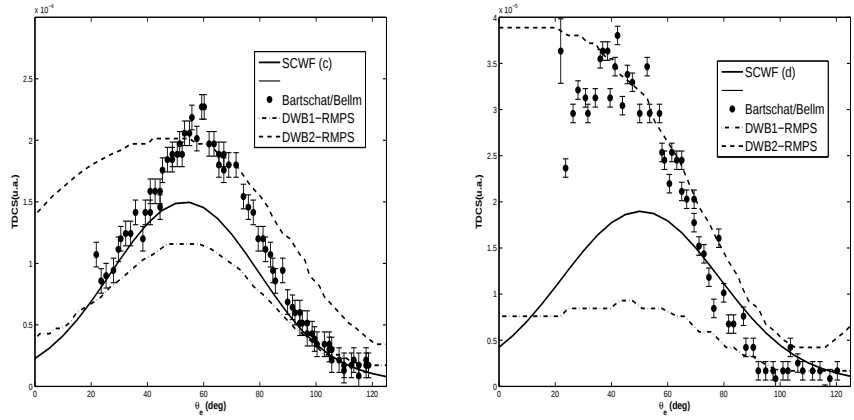


FIGURE 6.37 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et (c) 40° , (d) 56° . La géométrie est coplanaire et asymétrique.

6.37 où la cinématique est asymétrique et le régime d'énergie d'impact est intermédiaire, on constate déjà que le problème de déplacement du lobe binaire a carrément disparu quel que soit l'angle de diffusion. De plus, les résultats *DWB2-RMPS* sont les plus proches des données absolues. Ensuite, viennent nos résultats *SCWF2* qui sont toujours plus précis

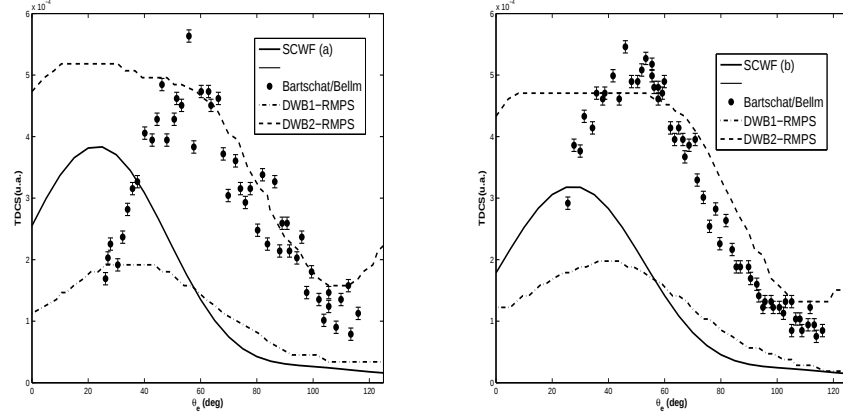


FIGURE 6.38 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$ et (b) 32° . La géométrie est coplanaire et symétrique.

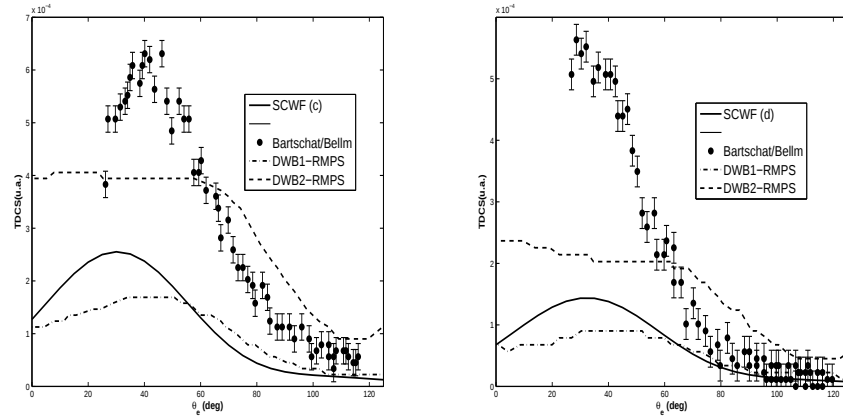


FIGURE 6.39 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et (c) 40° , (d) 56° . La géométrie est coplanaire et symétrique.

que ceux $DWB1-RMPS$. Il faut noter tout de même le cas $\theta_f = 56^\circ$ où il existe un grand écart entre les théories du premier Born et l'expérience. En conclusion, nous sommes assez satisfaits de la qualité des résultats de notre premier Born dans cette cinématique. Sur les figures 6.38 et 6.39 concernant la cinématique symétrique des figure, l'accord entre les théo-

ries du premier Born et l'expérience disparaît pratiquement. Ce qui était prévisible puisque dans notre géométrie, le paramètre d'impact est faible nécessitant des traitements d'ordre supérieur incluant l'échange des deux électrons éjectés. Néanmoins, l'accord entre le second Born (approché) et l'expérience s'est aussi détérioré. Enfin, le décalage du pic binaire qui avait disparu dans le cas asymétrique est à nouveau présent.

6.5.2 Ionisation-excitation vers le niveau $\text{He}^+(n = 3)$

Les figures 6.40 et 6.41 donnent les rapports des sections efficaces d'ionisation sans excitation par rapport à l'ionisation avec excitation vers les niveaux $n = 3$. Ces figures nous permettent donc de comparer nos

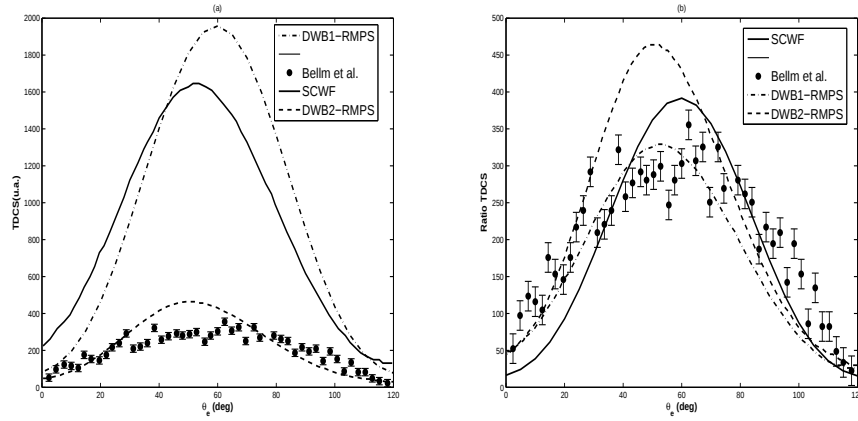


FIGURE 6.40 – $TDCS$ pour l'ionisation sans excitation ($n = 1$) divisée par la $TDCS$ correspondante pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 3$. Les paramètres cinématiques considérés sont $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$. Le facteur d'échelle des deux résultats FBA est de 1 pour la figure (a) et de 0.2 pour la figure (b). De plus, la géométrie est coplanaire et asymétrique. En trait continu, les résultats en terme de ratio SCWF; en trait mixte, les résultats en terme de ratio DWB1-RMPS du FBA de Bartschat et al. [23]; en trait interrompu court, les résultats en terme de ratio DWB2-RMPS du second Born de Bartschat et al. [23]; et enfin en cercle plein, les données expérimentales de Bellm et al. [23].

résultats $SCWF2$ (en trait continu), aux résultats du premier Born de Bartschat *et al.* $DWB1-RMPS$ (en trait mixte), aux résultats du second Born de Bartschat *et al.* $DWB2-RMPS$ (en trait interrompu court), et enfin aux données expérimentaux de Bellm *et al.* (en cercle plein). Les paramètres cinématiques sont $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$ pour la

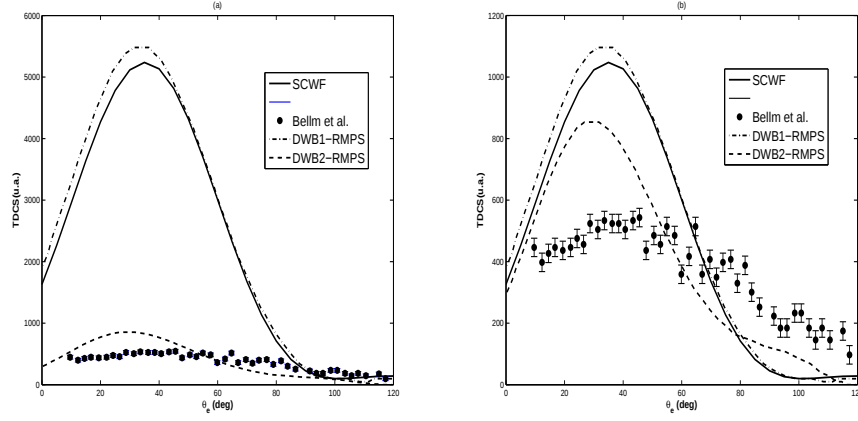


FIGURE 6.41 – Figure (6.40) dans le cas d'une géométrie coplanaire symétrique définie par $E_f = E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$.

figure 6.40 ; et $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et $\theta_f = 32^\circ$ pour la figure 6.41. En analysant les figures 6.34, 6.35, 6.40 et 6.41, on note que le rapport des sections efficaces croît rapidement lorsque l'indice des états excités n croît. Ceci indique donc que la section efficace d'ionisation avec excitation va diminuer très rapidement avec n . Ainsi l'expérience montre que pour les paramètres cinématiques considérés, la transition de $n = 1$ vers les états $n = 2$ compte pour environ 1% de la probabilité de transition. La transition de $n = 1$ vers les états $n = 3$ compte pour environ 0.5%, et enfin la transition de $n = 1$ vers les états $n = 4$ compte pour environ 0.1% de la probabilité de transition. Les remarques sont les mêmes que celles faites dans le cas des figures 6.34 et 6.35 à savoir l'incapacité des modèles du premier Born à bien décrire la collision. Quant au second Born, on constate que l'accord avec les données expérimentales se détériore au fur et à mesure que n croît. Les figures 6.42, 6.43, 6.44 et 6.45 donnent les résultats expérimentaux absolues extraites par Bartschat *et al.* des expériences de Bellm *et al.* [23] pour le processus d'ionisation-excitation ($n = 3$) de l'hélium.

Les paramètres cinématiques sont $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$, (b) 32° , (c) 40° , (d) 56° . Ceci correspond à un régime d'énergie d'impact intermédiaire. On note d'entrée de jeu que les courbes du premier Born dans le cas de la cinématique asymétrique sont presque plates. Mais on réussit toutefois à identifier la position du lobe binaire qui coïncide avec celle du lobe binaire expérimental. Les résultats du second Born

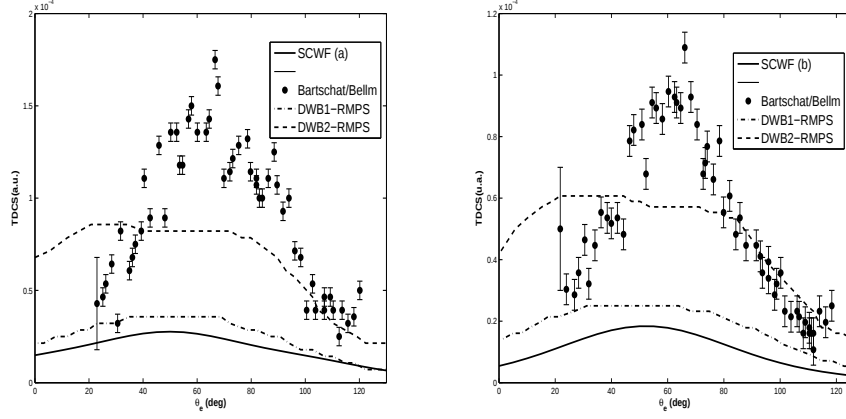


FIGURE 6.42 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 3$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$ et (b) 32° . La géométrie est coplanaire et asymétrique.

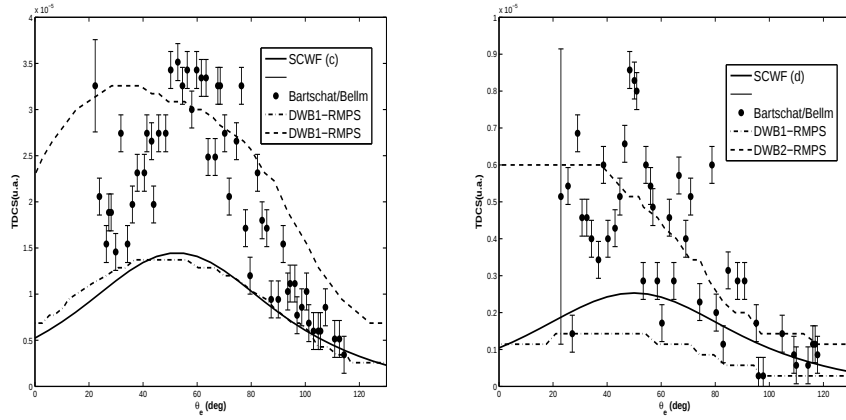


FIGURE 6.43 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 3$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 200$ eV, $E_e = 44$ eV et (c) 40° et (d) 56° . La géométrie est coplanaire et asymétrique.

reste "meilleurs". De plus, on note toujours que notre modèle du premier Born reste plus précis que celui de Bartschat *et al.* [15]. Le mauvais accord à 56° dans le cas $n = 2$ est retrouvé dans le cas $n = 3$. Par contre, le bon accord pour des petits angles de diffusion dans le cas précédent $n = 2$ se détériore pour $n = 3$. Les figures 6.44 et 6.45 concernent les

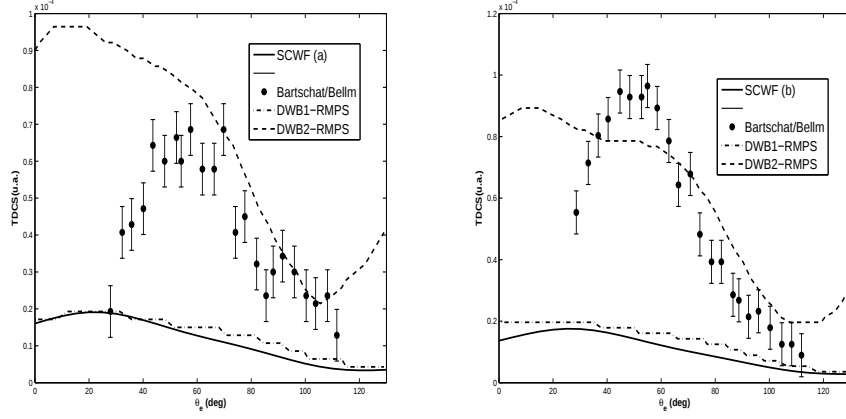


FIGURE 6.44 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 3$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et (a) $\theta_f = 24^\circ$ et (b) 32° . La géométrie est coplanaire et symétrique.

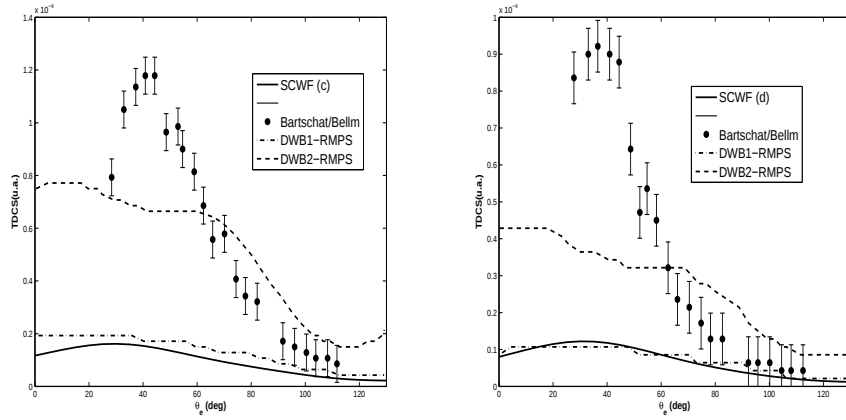


FIGURE 6.45 – $TDCS(u.a.)$ pour l'ionisation avec excitation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 3$ pour des paramètres cinématiques $E_f = 44$ eV, $E_e = 44$ eV et (c) 40° et (d) 56° . La géométrie est coplanaire et symétrique.

cinématiques symétriques. Comme dans le cas asymétrique, les courbes des résultats du premier Born sont toutes plates et on assiste à un décalage du pic principal expérimental. Comme précédemment, dans le cas de l'ionisation laissant l'ion résiduel dans l'état $n = 2$, toutes les observations restent valables pour ce processus $n = 3$ mais le meilleur accord

avec l'expérience se fait aux angles de diffusion inférieurs à 40° .

6.6 Conclusion

Nous avons décrit un formalisme permettant d'améliorer les résultats du premier Born du processus $(e, 2e)$ d'ionisation laissant l'ion résiduel He^+ dans les états $n = 1, 2, 3$. Cette méthode a consisté dans un premier temps à utiliser le PSCB pour décrire l'état final. Ce modèle décrit mal la corrélation électronique de l'état final en se limitant aux effets d'écran. Dans un second temps, nous avons amélioré la description de l'état final en utilisant des fonctions du simple continuum SCWF de l'hélium générées à l'aide de la matrice de Jacobi. Notons que dans les deux cas, l'état fondamental a été décrit par les fonctions corrélées, générées par une méthode spectrale de type interaction de configuration ICWF. Des tests analytiques et numériques ont été faits en utilisant les fonctions BYWF et PSCB pour valider la mise en oeuvre du code et sa stabilité. Le formalisme a été appliqué à l'étude de l'ionisation sans excitation d'une part, et de l'ionisation avec excitation $n = 2, 3$ d'autre part. Nous avons étudié deux régimes suivant la valeur de l'énergie du projectile : (i) le régime de hautes énergies d'impact ($E_f = 1500 \text{ eV}$ et $E_f = 5500 \text{ eV}$), (ii) le régime des énergies d'impact intermédiaires (entre $E_i = 112.6$ et $E_i = 640 \text{ eV}$).

La comparaison des différents résultats théoriques aux données expérimentales met en lumière les points suivants : (i) Dans le cadre de la série de Born, la description précise de l'état final de la cible joue un rôle capital. En particulier, la fonction d'onde de cet état final doit être multicanaux. Parmi ces canaux, ceux qui conduisent à l'autoionisation ont une contribution significative. (ii) Pour les énergies incidentes intermédiaires et pour les cinématiques symétriques, les résultats expérimentaux mettent en évidence des signatures des effets d'ordre supérieur. Parmi ces signatures, les déplacements des lobes binaire et de recul sont les plus significatifs. Toutefois, tous les calculs du second Born existants reposent sur plusieurs approximations parmi lesquelles l'approximation de fermeture et ses variantes, la description de l'état initial et final de la cible, l'échange des électrons, etc... Dans ce cadre, la question du contrôle de ces approximations reste ouverte et ne permet pas d'établir des conclusions claires quant à la contribution réelle de ce terme du second ordre. (iii) Dans le cas de l'ionisation sans excitation, pour une cinématique symétrique, il est bien connu [139] que seul un petit nombre d'états intermédiaires joue un rôle dominant (petit paramètre d'impact $\Rightarrow$ collision

élastique fort probable entre le projectile et le noyau de la cible). Dans ce cas, la contribution des ces états doivent être pris en compte exactement empêchant tout recours à l'approximation de fermeture. Dans le cas de la cinématique asymétrique, le problème est beaucoup plus compliqué car plusieurs états intermédiaires sont importants et en particulier les états P qui tiennent compte de la polarisation de la cible par le projectile.

Chapitre 7

Conclusion et perspectives

L'objectif de ce travail est d'étudier le rôle des corrélations électroniques lors de l'ionisation-excitation de l'hélium d'une part, par absorption de deux photons XUV et d'autre part, par impact électronique. Ces processus qui sont hautement corrélés ont donné lieu à de nombreuses controverses dans la littérature et plusieurs questions restent ouvertes.

Considérons tout d'abord le processus d'ionisation-excitation de l'hélium par absorption de deux photons XUV. Ce problème est soit direct ou séquentiel. Le cas séquentiel qui est très bien compris, est résonnant si l'énergie des photons coïncide avec les énergies des transitions $1s \rightarrow np$ dans He^+ . Dans ce cas, les corrélations électroniques jouent un rôle mineur. Pour le processus direct, nous avons vu qu'il est important de clarifier le rôle des résonances de coeur. Nos calculs se fondent sur une approche Floquet perturbative à l'ordre le plus bas. Nous avons utilisé des fonctions d'onde des états initial et final qui prennent en compte les corrélations électroniques de manière rigoureuse. Les résultats confirment la présence des résonances de coeur dans les sections efficaces partielles et totales d'ionisation-excitation par absorption de deux photons XUV et ce, en accord avec les deux autres prédictions théoriques de Feng et Van Der Hart [6] et de Shakeshaft [5]. En outre, contrairement au cas séquentiel, les résonances sont également présentes dans les sections efficaces partielles correspondant aux canaux d'excitation nl avec $l \neq 1$ même si les canaux np dominant. Ceci provient du mélange Stark des états nl ($l \neq 1$) avec les états np de He^+ produit par le champ électrique de l'électron éjecté. L'origine précise de ces résonances n'est pas encore clairement élucidée. Sur le plan théorique, et dans le cadre de notre calcul perturbatif, ces résonances ne correspondent pas à un pôle de la fonction

de Green, en présence du champ, dans le plan complexe des énergies. Le comportement résonnant provient du couplage dipolaire de deux états du simple continuum en l'occurrence les états $(|1s, \vec{k}'_e\rangle)$ et $(|2p, \vec{k}_e\rangle)$. Lorsque $k'_e = k_e$, c'est-à-dire lorsque l'énergie du photon correspond aux énergies de transitions $1s \rightarrow np$ dans He^+ , l'élément de matrice impliqué est très "piqué". En l'absence des corrélations électroniques, cet élément de matrice est une distribution (fonction delta de Dirac $\delta(\vec{k}'_e - \vec{k}_e)$). Pour résoudre définitivement cette question de résonance de coeur, il est nécessaire de mener un calcul Floquet non perturbatif pour s'assurer que ces résonances subsistent, et si c'est le cas, voir si elles sont associées à des pôles de la matrice S . Ce calcul représente une perspective de ce travail. Sur le plan expérimental, aucune expérience n'a été menée jusqu'ici. Une des difficultés provient du fait qu'on ne peut séparer les processus directs des séquentiels. Si une expérience est menée, elle devra nécessairement étudier les populations des états excités de $l \neq 1$ de He^+ en fonction de la fréquence.

Considérons à présent le processus d'ionisation-excitation par impact électronique. Dans ce cas, il subsiste des désaccords importants entre les différentes prédictions théoriques d'une part, d'autre part entre les prédictions théoriques et les données expérimentales. Sur le plan théorique, il s'agit d'un processus d'interaction coulombienne à quatre corps. L'approche suivie ici se fonde sur la première approximation de Born. Pour éviter toute ambiguïté d'interprétation, nous avons calculé l'amplitude correspondante de la manière la plus précise possible c'est-à-dire en utilisant des fonctions d'onde précises des états initial et final qui prennent en compte correctement les corrélations électroniques générées par la répulsion coulombienne des électrons de la cible. Cela signifie en particulier que la fonction d'onde de l'état final doit être multicanaux en incluant des canaux conduisant à l'autoionisation de la cible. Nous avons montré que pour certaines cinématiques asymétriques, ces canaux jouent un rôle crucial et rendant difficile la comparaison théorie-expérience. Une analyse similaire fondée sur un calcul précis du second Born est à priori nécessaire, en particulier pour les cinématiques symétriques. Ce calcul qui fait appel à des ressources informatiques très importantes est en cours. Toutefois, vu la lourdeur de ces calculs et le fait que les effets d'ordre 3 (et plus) ne peuvent être exclus à priori, il semble légitime d'aborder le calcul des sections efficaces à l'aide d'une approche dépendante du temps. Cette dernière a l'avantage d'inclure tous les ordres du calcul perturbatif. Ce dernier calcul constitue aussi une perspective de ce travail.

Deuxième partie

Effets d'anomalie du moment
magnétique de l'électron dans la
diffusion de Mott en champ
laser intense dans
l'approximation coulombienne.

Résumé

Nous étudions les effets de l'anomalie du moment magnétique (AMM) de l'électron dans la diffusion relativiste de Mott assistée par champ laser ultra intense pour lequel l'énergie pondéromotrice de l'électron est de l'ordre de la masse invariante de l'électron. A cet effet, nous utilisons les fonctions d'onde de Coulomb-Dirac-Volkov et de Dirac-Volkov avec AMM pour décrire respectivement les états initial et final. Nous calculons dans la première approximation de Born, les sections efficaces différentielles du processus de bremsstrahlung induit et inverse pour un champ laser polarisé linéairement et circulairement. Les calculs numériques sont effectués pour plusieurs paramètres cinématiques (angle de diffusion, charge du noyau, fréquence du photon, champ électrique) et ils sont comparés à ceux de Li *et al.* [*J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **37**, 653 (2004)]. Nous trouvons que pour les paramètres cinématiques utilisés dans ce travail, le principal effet de la prise en compte de l'anomalie du moment magnétique de l'électron dans les états initial et final est d'augmenter de manière significative les sections efficaces différentielles et ce, quelque soit la géométrie de la collision.

Mots clés : Diffusion de Mott, AMM, champ laser ultra intense, distorsion coulombienne, états de Volkov, sections efficaces différentielles.

Abstract

We investigate the influence of the electron's anomalous magnetic moment on the process of relativistic Mott scattering in a powerful electromagnetic plane wave for which the ponderomotive energy is of the order of the magnitude of the electron's rest mass. For this purpose, we use the Coulomb-Dirac-Volkov and the Dirac-Volkov functions with the electron's anomaly to describe the initial and final states respectively. First-order Born differential cross sections of induced and inverse bremsstrahlung are obtained for linearly and circularly polarized laser light. Numerical calculations are carried out for various parameters values, (i.e. scattering angle, the nucleus charge, photon energy, electrical field) and are compared with results obtained by Li *et al.* [*J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **37**, 653 (2004)]. It is found that for parameters used in the present work, incorporating the anomaly of the electron in the initial and final states yields cross sections which are strongly modified whatever the scattering geometry as compared to the outcome of the previous treatment.

Keywords : Mott scattering, AMM, ultra intense laser field, Coulomb distortion, Volkov states, differential cross sections.

TABLE 7.1 – *Liste des abréviations de la partie II.*

Sigle	Signification
AMM	Anomalie du moment magnétique de l'électron
DV	Section efficace différentielle de Dirac-Volkov
DVA	Section efficace différentielle de Dirac-Volkov avec AMM
CDV	Section efficace différentielle de Coulomb-Dirac-Volkov
CDVA	Section efficace différentielle de Coulomb-Dirac-Volkov avec AMM
DVF	Fonction d'onde de Dirac-Volkov
CVF	Fonction d'onde de Coulomb-Volkov
TDSE	Equation de Schrödinger dépendant du temps
KFR	Keldysh-Faisal-Reiss
SFA	Approximation des champs forts
WFA	Approximation des champs faibles
SMR	Sommerfeld-Maue-Volkov

Chapitre 8

Introduction générale

Récemment, d'importants progrès remarquables dans la construction des sources laser de puissance ont conduit à la réalisation de faisceaux ultra intenses, (i.e $I \geq 10^{18} \text{ Wcm}^{-2}$) [158]-[161]. Avec de tels faisceaux, l'étude des effets relativistes lorsqu'ils sont assistés par champ laser est d'un intérêt fondamental. Parmi ceux-ci, on peut citer, la diffusion de Compton non linéaire [162]-[166], la génération d'harmoniques d'ordre élevé [167], la diffusion d'un électron par un potentiel de type Coulomb-Yukawa [168]-[170] ou coulombien [171, 172]. Une réinvestigation de ce dernier processus appelé "diffusion assistée de Mott" a été faite récemment par Szymanowski *et al.* [173] et par Li *et al.* [174] dans le cas d'un champ laser d'intensité intermédiaire, polarisé respectivement circulairement et linéairement. Ces auteurs ont calculé l'expression analytique de la section efficace non polarisée en spin en utilisant les fonctions d'onde standard de Dirac-Volkov (DV) [175]-[177] pour décrire l'électron sous l'influence simultanée du noyau et du champ laser intense. Cependant, le potentiel coulombien étant à longue portée, l'électron habillé par le champ laser le ressent même pour $r \rightarrow \infty$ dans les voies d'entrée et de sortie. Ainsi, les fonctions d'onde (DV) doivent être modifiées de manière à prendre en compte les corrections dues aux effets coulombiens.

En physique des champs laser non relativiste, de telles fonctions d'onde d'interpolation, bien connues sous le nom de fonctions d'onde de Coulomb-Volkov (CVF) ont été proposées pour la première fois par Jain et Tzoar [178] et Cavaliere *et al.* [179]. Elles ont été utilisées de manière standard pendant plusieurs années pour des études théoriques dans les domaines telles que la diffusion assistée par laser [180], l'ionisation multiphotonique [181]-[186], la recombinaison radiative stimulée, la génération des rayons

X [187], etc. Comme résultat, il est apparu que le champ nucléaire joue un rôle significatif dans ces différents processus et que les CVFs produisent des bons résultats. Par exemple, Duchateau *et al.* [181] ont introduit une simple approche non perturbative de l'ionisation de l'hydrogène assistée par champ laser basée sur les états de Coulomb-Volkov dans laquelle le potentiel coulombien nucléaire est pris en compte dans les voies initiale et finale, mais pas dans la dynamique de l'ionisation durant l'interaction laser-atome. Dans l'approximation soudaine et jusqu'aux amplitudes du champ laser comparables au champ coulombien du noyau, ces auteurs ont montré que les distributions en énergie des électrons éjectés sont en bon accord avec les résultats obtenus par un traitement complètement numérique de l'équation de Schrödinger dépendant du temps (TDSE) en décomposant la fonction d'onde totale dans la base des B-splines sphériques. En outre, la méthode des CVFs a prouvé son efficacité par des prédictions précises avec un temps machine raisonnable dans des domaines où les calculs TDSE deviennent si lents qu'ils finissent par ne pas converger. S'agissant de l'ionisation au-dessus du seuil, il convient de souligner que les effets coulombiens sont nécessaires pour générer une distribution angulaire des électrons dans un champ laser comme l'ont démontré Basile *et al.* [188], De Bohan [189], Mau *et al.* [190] en utilisant les CVFs de Gordon [191, 175]. Par ailleurs, relevons que Kornev et Zon [192] ont appliqué la généralisation du théorème de Siegert pour tester la précision des CVFs.

Une tentative récente d'incorporation des effets coulombiens dans le régime relativiste a été faite par Liu et Kelly [193]. Ils ont amélioré la version relativiste de l'approximation du champ fort (SFA) faite par Reiss [194] de la théorie KFR [195]-[197] qui consiste à négliger l'interaction entre les photoélectrons et le potentiel de l'ion résiduel. Utilisant un traitement similaire à celui de la solution CV de l'équation de Schrödinger [198, 199], ils ont introduit l'approximation de Sommerfeld-Maue-Volkov (SMV) et ont étudié facilement plusieurs quantités physiques importantes de l'ionisation multiphotonique dans un large domaine d'intensités laser. Pour des intensités intermédiaires, Li *et al.* [200] ont étudié récemment la diffusion de Mott en présence d'un champ laser polarisé linéairement. Ces auteurs ont utilisé une autre variante de la fonction de Coulomb-Dirac-Volkov, pour prendre en compte à la fois les effets relativistes et coulombiens. Nous désignons cette approximation par CDV. Cependant, remarquons que ces travaux antérieurs ont considéré que le rapport gyromagnétique g de l'électron est égal à 2. Or l'expérience [201] et les calculs

sophistiqués [202] des corrections radiatives de l'électrodynamique quantique à l'ordre trois de la constante α/π incluant près de 900 diagrammes de Feynman [205], ont mis en évidence une anomalie du moment magnétique (AMM) $\kappa = (g - 2)/2$ et s'accordent sur une valeur d'environ $\kappa = 1159652188.4 \times 10^{-12}$. Cette circonstance nous a conduits à poser la question suivante : quels sont les effets de l'AMM sur ledit processus de diffusion. Dans le but d'améliorer les travaux de Li *et al.* [200], nous avons incorporé dans les fonctions d'onde initiale et finale la contribution de la dynamique de l'électron due à l'interaction entre son moment magnétique anormal (AMM) [202, 203] et le champ laser. Nous désignons cette approche par CDVA.

Cette deuxième partie de la thèse est organisée comme suit : dans le **chapitre 1**, nous dérivons les fonctions d'onde de Coulomb-Dirac-Volkov qui prennent en compte la totalité du moment magnétique de l'électron. Le **chapitre 2** est consacré à l'étude de la diffusion d'un faisceau d'électrons non polarisés assistée par champ laser ultra intense. Il est question de calculer analytiquement et numériquement les sections efficaces de ce processus et de les comparer aux résultats de Li *et al.* [200] d'une part et de Attaourti *et al.* [204] d'autre part. Nous terminons par la conclusion générale et les perspectives. Le système d'unités atomiques non relativiste $m = e = \hbar = 1$, $c = 1/\alpha = 137$ est utilisé dans ce travail.

Chapitre 9

Etats de Coulomb-Dirac-Volkov avec anomalie du moment magnétique de l'électron

9.1 Introduction

Les avancées considérables dans la technologie laser ont permis de produire des intensités relativistes. Le seuil de ce régime est caractérisé [170] par le paramètre fondamental $\mu(u.a.) = E/\omega c$. Lorsque le champ électrique atteint la valeur critique $E_c(u.a.) = \omega c$, le paramètre $\mu(u.a.)$ est égal à 1. Ce qui correspond à une intensité critique $I_c(u.a.) = \omega^2 c^2$ et à une énergie pondéromotrice $U(u.a.) = c^2/4$ de l'ordre de l'énergie de masse de l'électron. Dans ces conditions, et même si le champ laser est de basse fréquence (e.g. infrarouge), il est nécessaire de tenir compte du caractère fermionique $s = 1/2$ de l'électron au moyen de l'équation de Dirac. De nombreuses études ont été menées dans ce contexte pour des énergies incidentes excédant la masse invariante de l'électron. Par comparaison aux traitements simplifiés de Schrödinger et Klein-Gordon, elles ont par exemple permis d'évaluer et de comprendre les effets spin-orbit, spin-laser et coulombien dans la diffusion de Mott assistée par laser infrarouge ultra intense. Toutefois, aucune de ces investigations n'a tenu compte de la totalité du moment magnétique de l'électron. Il est donc légitime de s'interroger sur les effets de l'anomalie du moment magnétique (AMM) de l'électron sur le processus de diffusion de Mott assistée par champ laser dans l'approximation coulombienne. C'est pour répondre à cette importante question que nous nous attelons dans ce chapitre à dé-

river une fonction d'onde approchée décrivant l'état d'un électron doué d'une AMM qui est sous l'influence simultanée du potentiel coulombien d'un noyau de charge élevée et de l'onde plane d'un champ laser ultra intense.

9.2 Equation de Dirac pour l'électron dans un champ électromagnétique

L'objet de cette section est de présenter les équations qui décrivent les ondes relativistes de Coulomb-Dirac-Volkov avec AMM qui sont utilisées dans le prochain chapitre pour calculer les sections efficaces de diffusion d'un électron en présence d'un champ laser intense et du champ coulombien d'un noyau.

L'équation de Dirac du premier ordre pour un électron libre de quadri-impulsion p^μ s'écrit [206]

$$(i \not{\partial} - c) \psi = 0, \quad (9.1)$$

où ψ est la fonction d'onde bispinorielle qui décrit le mouvement de l'électron et $\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) est la notation de Feynman. La convention d'Einstein sur les indices répétés en position covariante et contravariante est en vigueur ici. γ^μ désigne les matrices de Dirac et ∂_μ est le quadri-gradient. Les règles de manipulation des matrices de Dirac sont basées sur la relation d'anticommutation $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$, où $g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ est la métrique de Minkowski.

En présence d'un champ électromagnétique $A^\mu = (V, \vec{A})$, le principe du couplage minimal prescrit la substitution $i \not{\partial} \rightarrow i \not{D} = i \not{\partial} + \not{A}/c$. De la sorte, le vecteur d'état de l'électron obéit à l'équation de Dirac avec couplage

$$(i \not{D} - c) \psi = 0. \quad (9.2)$$

Les solutions de cette équation sont déterminées [207] à partir de la forme du second ordre que l'on obtient par application de l'opérateur $i \not{D} + c$

$$\left[\left(p^\mu + \frac{1}{c} A^\mu \right) \left(p_\mu + \frac{1}{c} A_\mu \right) - c^2 - \frac{1}{2c} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \right] \psi(x) = 0, \quad (9.3)$$

où $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ et $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ représentent respectivement le spin et le tenseur électromagnétique de Faraday. Il convient de relever qu'en comparaison avec l'équation de Klein-Gordon avec couplage, le

terme nouveau $\frac{1}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = S^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ représente l'interaction entre le spin de l'électron et le champ électromagnétique. Il n'a pas d'analogue classique et sa contribution est négligeable dans les conditions de validité de l'approximation classique.

Considérons maintenant que l'électron est doué d'une anomalie magnétique. Dans ce cas, il faut renoncer au principe du couplage minimal en opérant plutôt la substitution $i\partial \rightarrow i\mathcal{D} + a\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ [203]. Ainsi l'équation de Dirac du premier ordre avec couplage non minimal pour un électron possédant une AMM s'écrit

$$(i\mathcal{D} - c + a\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu})\psi(x) = 0, \quad a = \kappa/4. \quad (9.4)$$

9.3 Etats de Coulomb-Dirac-Volkov avec anomalie du moment magnétique de l'électron

9.3.1 Fonctions d'onde de Dirac-Volkov

Considérons tout d'abord le cas où l'électron est habillé par une onde électromagnétique plane $A^\mu = (0, \vec{A})$. Appliquons l'opérateur $i\mathcal{D} + c$ à l'équation (9.4) pour obtenir l'équation de Dirac du second ordre avec AMM

$$\left[\left(p^\mu + \frac{1}{c}A^\mu \right) \left(p_\mu + \frac{1}{c}A_\mu \right) - c^2 - \frac{1}{2c}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} + a(i\mathcal{D} + c)\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \right] \psi = 0. \quad (9.5)$$

Utilisant l'algèbre de Clifford [211], le développement des différents termes dans cette équation conduit à

$$\left\{ -\partial^2 - \frac{2i}{c}(A\partial) + \frac{A^2}{c^2} - c^2 - \frac{i}{c}\not{A}' + a \left[-4\not{A}'(k\partial) + 4\not{k}(A'\partial) - 2\not{A}'\not{\partial} + \frac{2}{c}\not{A}\not{A}' + 2ic\not{A}' \right] \right\} \psi(x) = 0, \quad (9.6)$$

où $A'_\nu = dA_\nu/d\varphi$ et $\varphi = (kx)$.

Cherchons les solutions de cette équation (9.6) sous la forme

$$\psi(x) = F(\varphi) \exp(-i(px)), \quad F(\varphi) = B(p)u, \quad (9.7)$$

où $B(p)$ est la constante de normalisation. Substituant l'expression (9.7) dans la relation (9.6) et en faisant un simple développement, il vient que F vérifie

$$\frac{dF}{F} = i \left[\frac{(pA)}{c(kp)} + \frac{A^2}{2c^2(kp)} \right] + \left[- \left(\frac{1}{2c} + ac \right) \frac{\not{k}}{(kp)} - 2a + \frac{a \not{k} \not{p}}{(kp)} + \frac{a \not{k} \not{A}}{c(kp)} \right] \times \not{A}' d\varphi. \quad (9.8)$$

La solution de cette équation différentielle du premier ordre est donnée par

$$F(\varphi) = \frac{u}{\sqrt{2QV}} \exp \left(- (\alpha \not{k} + \beta \not{A} + \nu \not{k} \not{A} + \delta \not{k} \not{A} \not{p}) \right) \times \exp \left(-i(px) - i \int_{-\infty}^{kx} \left[\frac{(pA)}{c(kp)} - \frac{A^2}{2c^2(kp)} \right] d\varphi \right), \quad (9.9)$$

où les coefficients α , β , ν et δ sont donnés par

$$\alpha = -a \left(\frac{A^2}{2(kp)c} + \frac{2(pA)}{(kp)} \right), \quad \beta = 2a, \quad \nu = -\frac{1}{2(kp)} \left(\frac{\kappa c}{2} - \frac{1}{c} \right), \quad \delta = \frac{a}{(kp)}. \quad (9.10)$$

Notons que u est le bispineur libre et il est normalisé par $\bar{u}u = 2c^2$ avec $\bar{u} = u^\dagger \gamma^0$. La notation suivante (ab) est le produit scalaire quadridimensionnel $a^\nu b_\nu$. Quant à la quadri-impulsion moyennée $q^\mu = (Q/c, \vec{q})$ de la particule dans le champ laser de quadri-vecteur d'onde $k^\mu = (\omega/c, \vec{k})$, elle s'écrit

$$q^\mu = p^\mu - \frac{\overline{A^2}}{2c^2(kp)} k^\mu. \quad (9.11)$$

Leurs carrés respectifs sont tels que $(kk) = 0$ et $(qq) = m^{*2}c^4$. Notons aussi que les quadri-vecteurs k^μ et A^μ sont transverses $(kA) = 0$. $m^* = (1 - \overline{A^2}/c^4)^{1/2}$ est la masse effective de l'électron dans le champ habillant. $\overline{A^2}$ représente la moyenne sur une période du champ laser du carré du quadri-potentiel. Notons que cette masse effective augmente lorsque le potentiel vecteur $\vec{A}$ croît. En effet dans le cas de la polarisation linéaire, cette moyenne est égale à $\overline{A^2} = -|\vec{A}|^2/2$, tandis qu'en polarisation circulaire elle est $\overline{A^2} = -|\vec{A}|^2$. Remarquons enfin que le second terme du facteur entre parenthèse de l'équation (9.9) représente le couplage spin-champ laser puisque $\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = 2 \not{k} \not{A}'$.

Dans l'approximation des champs faibles (WFA) i.e. au voisinage du seuil du régime relativiste [203], les solutions d'énergie positive de l'équa-

tion (9.6) que nous cherchons sont données par

$$\begin{aligned} \psi(x) &\simeq \frac{u}{\sqrt{2VQ}} [1 - (\alpha \not{k} + \beta \not{A} + \nu \not{k} \not{A} + \delta \not{k} \not{A} \not{p}')] \\ &\times \exp \left(-i(qx) - i \int_{-\infty}^{(kx)} \frac{(pA)}{c(kp)} d\varphi \right). \end{aligned} \quad (9.12)$$

9.3.2 Fonction d'onde de Coulomb-Dirac du spectre continu

On considère ici que l'électron n'est soumis qu'au potentiel coulombien $A^\mu = (V, \vec{0})$ avec $V(r) = -Z/r$. Dans ce cas, les solutions de l'équation (9.3) sont non séparables en coordonnées paraboliques et ne peuvent être calculées exactement que sous forme d'une série infinie. Ces solutions furent construites approximativement par Furry [208], Sommerfield et Maue [209] et sont présentées dans les références [207, 208]. Pour les énergies positives, elles peuvent prendre les formes approximatives ci-dessous comprenant une onde plane et une onde sphérique en onde sortante ou entrante

$$\psi^{(+)} = N \frac{u}{\sqrt{2EV}} e^{-i(px)} \left[1 - \frac{ic}{2E} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right] {}_1F_1 [i\eta, 1, i(pr - \vec{p} \cdot \vec{r})], \quad (9.13)$$

$$\psi^{(-)} = N^* \frac{u}{\sqrt{2EV}} e^{-i(px)} \left[1 - \frac{ic}{2E} \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} \right] {}_1F_1 [-i\eta, 1, -i(pr + \vec{p} \cdot \vec{r})], \quad (9.14)$$

avec

$$N = e^{\pi\eta/2} \Gamma(1 - i\eta), \quad \eta = zE/p, \quad z = \alpha Z, \quad \alpha = 1/c, \quad \vec{\alpha} = \gamma^0 \vec{\gamma}. \quad (9.15)$$

$\vec{p}$ est l'impulsion de l'électron à grande distance et ${}_1F_1$ est la fonction hypergéométrique confluyente. Ces fonctions d'onde sont normalisées de sorte que, l'onde plane dans sa limite asymptotique, corresponde à une particule dans le volume V .

9.3.3 Approximation coulombienne des états de Dirac-Volkov

Pour décrire l'état d'un électron qui interagit simultanément avec un noyau de charge Z et un champ laser interne, nous nous appuyons sur

les travaux de Jain et Tzoar [178]. Ainsi, pour un électron avec AMM plongé simultanément dans un potentiel coulombien nucléaire attractif et dans un champ laser intense $A^\mu = (V, \vec{A})$, aucune solution exacte du problème n'est disponible. S'inspirant de l'interpollation faite dans le cas non relativiste [178, 179] et de l'extension de la fonction d'onde coulombienne dans le cas relativiste de Li *et al.* [200], nous proposons la fonction d'onde sortante d'interpollation

$$\begin{aligned} \psi^{(+)} = & N {}_1F_1(i\eta, 1, i(qr - \vec{q} \cdot \vec{r})) [1 - (\alpha \not{k} + \beta \not{A} + \nu \not{k} \not{A} + \delta \not{k} \not{A} \not{p})] \\ & \times \frac{u}{\sqrt{2QV}} \exp \left(-i(qx) - i \int_{-\infty}^{(kx)} \frac{(pA)}{c(kp)} d\varphi \right), \end{aligned} \quad (9.16)$$

où la correction du gradient n'est pas prise en compte. En analysant l'équation (9.16), nous notons que l'AMM est présent dans les coefficients α , β , δ et une partie de ν . En effet, si on néglige l'AMM, i.e. en posant $a = 0$, tous ces coefficients s'annulent sauf ν qui se réduit à $\nu = 1/2c(kp)$, et par suite la relation (9.16) conduit facilement à la fonction d'onde de Volkov-Dirac dans l'approximation coulombienne proposée par Li *et al.* [200]

$$\begin{aligned} \psi^{(+)} = & N {}_1F_1(i\eta, 1, i(qr - \vec{q} \cdot \vec{r})) \left[1 - \frac{\not{k} \not{A}}{2c(kp)} \right] \frac{u}{\sqrt{2QV}} \\ & \times \exp \left[-i(qx) - i \int_{-\infty}^{(kx)} \frac{(pA)}{c(kp)} d\varphi \right]. \end{aligned} \quad (9.17)$$

L'interaction spin-laser est consignée dans le terme entre parenthèses carrées. De plus, en annulant l'AMM, si on fait un passage à la limite non relativiste de la relation (9.16), on obtient facilement la fonction d'onde d'interpollation proposée par Jain et Tzoar dans le régime non relativiste [178]

$$\begin{aligned} \psi \simeq & N {}_1F_1[i\eta, 1, i(pr - \vec{p} \cdot \vec{r})] \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r} - iEt) \\ & \times \exp \left(-\frac{i}{c} \int_0^\tau \vec{p} \cdot \vec{A} d\tau - \frac{i}{2c^2} \int_0^\tau A^2 d\tau \right). \end{aligned} \quad (9.18)$$

A ce niveau, nous disposons de l'ingrédient de base pour calculer les sections efficaces de diffusion d'un électron avec AMM par un potentiel coulombien en présence d'un champ électromagnétique extérieur.

Chapitre 10

Diffusion d'un faisceau d'électrons non polarisés assistée par champ laser ultra intense

10.1 Introduction

Dans ce chapitre, il est question de calculer dans la première approximation de Born les sections efficaces différentielles avec AMM pour la diffusion de Mott assistée par champ laser ultra intense. Nous présentons d'abord de manière succincte l'expression covariante de la matrice S de Dirac sous les formes *prior* et *post* [197]. Ensuite, nous utilisons des fonctions d'onde du chapitre précédent pour calculer les sections efficaces différentielles en question. Enfin, nous terminons ce travail par quelques exemples numériques qui permettent de montrer clairement les effets dus à l'AMM dans le processus collisionnel.

10.2 Matrice S de Dirac

Rappelons tout d'abord la définition fondamentale de la matrice S [211, 212, 214]

$$S_{fi} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \Phi_f | \Psi_i^{(+)} \rangle, \quad \lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_i^{(+)} = \Phi_i, \quad (10.1)$$

pour la forme "*post*" (ou *directe*) et

$$S_{fi} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_f^{(-)} | \Phi_i \rangle, \quad \lim_{t \rightarrow +\infty} \Psi_f^{(-)} = \Phi_f, \quad (10.2)$$

pour la forme "*prior*" (ou *inverse dans le temps*). Dans ces expressions, les états Ψ prennent en compte toutes les interactions dans le processus collisionnel, tandis que les états Φ sont affranchis de l'interaction provoquant la transition. $\Psi^{(+)}$ et $\Psi^{(-)}$ sont respectivement des états sortant et entrant. La relation (10.1) donne l'amplitude que $\Psi_i^{(+)}$ qui était dans un passé lointain dans l'état Φ_i transite vers l'état Φ_f dans un futur lointain. Tout comme Φ_i , Φ_f n'interagit qu'avec le potentiel V responsable de la transition dans le processus considéré. Les équations (10.1) et (10.2) peuvent être réécrites sous la forme

$$(S - I)_{fi} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \Phi_f | \Psi_i^{(+)} \rangle - \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Phi_f | \Psi_i^{(+)} \rangle, \quad (10.3)$$

et

$$(S - I)_{fi} = - \left\{ \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \Psi_f^{(-)} | \Phi_i \rangle - \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_f^{(-)} | \Phi_i \rangle \right\}. \quad (10.4)$$

A partir de ces considérations générales, on montre sans peine que les équations (10.3) et (10.4) s'écrivent respectivement en terme d'intégrale de surface dans le quadri-espace [197]

$$(S - I)_{fi} = \int_{\Sigma} d\sigma_{\mu} \bar{\Phi}_f \gamma^{\mu} \Psi_i^{(+)}, \quad \Sigma \rightarrow \infty, \quad (10.5)$$

et

$$(S - I)_{fi} = - \int_{\Sigma} d\sigma_{\mu} \bar{\Psi}_f^{(-)} \gamma^{\mu} \Phi_i, \quad \Sigma \rightarrow \infty. \quad (10.6)$$

Le théorème de la divergence dans le quadri-espace permet de passer de l'intégrale de surface à l'intégrale dans le volume limité par Σ

$$(S - I)_{fi} = \int d^4x \partial_{\mu} \left(\bar{\Phi}_f \gamma^{\mu} \Psi_i^{(+)} \right), \quad (10.7)$$

et

$$(S - I)_{fi} = - \int d^4x \partial_{\mu} \left(\bar{\Psi}_f^{(-)} \gamma^{\mu} \Phi_i \right). \quad (10.8)$$

Afin de faciliter l'écriture de l'expression recherchée, posons que $A^{\mu} = (0, \vec{A})$ représente le quadri-potentiel du champ laser et $V(r) = -Z/r$ le

potentiel provoquant la transition. Considérons maintenant l'équation du mouvement correspondant à la fonction d'onde Ψ

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{1}{c}\gamma^\mu A_\mu - \frac{1}{c}\gamma^0 V - c)\Psi = 0, \quad (10.9)$$

son adjoint est donné par

$$\bar{\Psi}(i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu + \frac{1}{c}\gamma^\mu A_\mu + \frac{1}{c}\gamma^0 V + c) = 0, \quad \bar{\Psi}_f = \Psi^\dagger \gamma^0. \quad (10.10)$$

Celles de Φ s'écrivent

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - \frac{1}{c}\gamma^\mu A_\mu - c)\Phi = 0, \quad (10.11)$$

et

$$\bar{\Phi}(i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu + \frac{1}{c}\gamma^\mu A_\mu + c) = 0. \quad (10.12)$$

Nous avons introduit la flèche sur l'opérateur $\overleftarrow{\partial}_\mu$ pour préciser son sens d'action. En multipliant par $\bar{\Phi}_f$ à gauche de l'équation (10.9) relative à l'état initial d'une part, puis par $\Psi_i^{(+)}$ à droite de l'équation (10.12) relative à l'état final d'autre part, et en faisant la somme membre à membre des deux équations ainsi obtenues, il vient que

$$\bar{\Phi}_f \left(i\gamma^\mu \partial_\mu + i\gamma^\mu \overleftarrow{\partial}_\mu + \frac{1}{c}\gamma^0 V \right) \Psi_i^{(+)} = 0, \quad (10.13)$$

qui peut être réécrit sous la forme

$$\partial_\mu \left(\bar{\Phi}_f \gamma^\mu \Psi_i^{(+)} \right) = -\frac{i}{c} \bar{\Phi}_f \gamma^0 V \Psi_i^{(+)}. \quad (10.14)$$

Substituant (10.14) dans (10.7), on a finalement pour la matrice S dans la forme "post"

$$S_{fi}^{post} = \delta_{fi} - \frac{i}{c} \int d^4x \bar{\Phi}_f \gamma^0 V \Psi_i^{(+)}. \quad (10.15)$$

Une procédure analogue avec les équations (10.10) et (10.11) conduit à la matrice S dans la forme "prior"

$$S_{fi}^{prior} = \delta_{fi} - \frac{i}{c} \int d^4x \bar{\Psi}_f^{(-)} \gamma^0 V \Phi_i. \quad (10.16)$$

Dans la suite, nous utilisons la forme "post" de la matrice S .

10.3 Sections efficaces différentielles

La section efficace différentielle de diffusion de Mott avec AMM assistée par champ laser dans l'approximation coulombienne est donnée par [173, 200, 215]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{|S_{fi}|^2}{T} \left(\frac{V|\vec{q}_f|^2 d|\vec{q}_f|}{(2\pi)^3} \right) \left(\frac{Q_i V}{c^2 |\vec{q}_i|} \right), \quad (10.17)$$

T est la durée d'interaction, Ω_f est l'angle solide de diffusion et S_{fi} la matrice de transition

$$S_{fi} = i \frac{Z}{c} \int d^4x \bar{\Phi}_f(x) \gamma^0 \frac{1}{r} \psi_i^{(+)}(x). \quad (10.18)$$

L'état initial est décrit par

$$\begin{aligned} \psi_i^{(+)} = & N_i {}_1F_1(i\eta_i, 1, i(q_i r - \vec{q}_i \cdot \vec{r})) [1 - (\alpha_i \not{k} + \beta_i \not{A} + \nu_i \not{k} \not{A} + \delta_i \not{k} \not{A} \not{p}_i)] \\ & \times \frac{u_i}{\sqrt{2Q_i V}} \exp \left(-i(q_i x) - i \int_{-\infty}^{(kx)} \frac{(p_i A)}{c(kp_i)} d\varphi \right), \end{aligned} \quad (10.19)$$

et l'état final par

$$\begin{aligned} \Phi_f = & [1 - (\alpha_f \not{k} + \beta_f \not{A} + \nu_f \not{k} \not{A} + \delta_f \not{k} \not{A} \not{p}_f)] \frac{u_f}{\sqrt{2Q_f V}} \\ & \times \exp \left(-i(q_f x) - i \int^{(kx)} \frac{(p_f A)}{c(kp_f)} d\varphi \right). \end{aligned} \quad (10.20)$$

Dans ce qui suit, nous calculons les expressions analytiques des sections efficaces pour la diffusion de Mott avec AMM dans l'approximation coulombienne. Pour être complet, nous rappelons les expressions des sections efficaces sans AMM du même processus en polarisation linéaire et circulaire.

10.3.1 En champ laser polarisé linéairement

Dans ce cas [200, 215], le champ laser est défini par le quadri-potentiel

$$A = A_z \cos(\varphi), \quad A_z = (0, 0, 0, |\vec{A}|). \quad (10.21)$$

Substituant les ondes de Volkov avec AMM des équations (10.19) et (10.20) dans la relation (10.18), on peut écrire la matrice de transition

comme la somme de quatre termes

$$S_{fi} = i \frac{Z}{c} \int d^4x \frac{1}{2V \sqrt{Q_f Q_i}} (S_1 + S_2 + S_3 + S_4) \exp(i\phi), \quad (10.22)$$

avec

$$S_1 = \bar{u}_f [1 - \nu_f \not{A} \not{k}] \frac{\gamma^0}{r} [1 - \nu_i \not{k} \not{A}] u_i, \quad (10.23)$$

$$S_2 = \bar{u}_f [1 - \nu_f \not{A} \not{k}] \frac{\gamma^0}{r} [-(\alpha_i \not{k} + \beta_i \not{A} + \delta_i \not{k} \not{A} \not{p}_i)] u_i, \quad (10.24)$$

$$S_3 = \bar{u}_f [-(\alpha_f \not{k} + \beta_f \not{A} - \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k})] \frac{\gamma^0}{r} [1 - \nu_i \not{k} \not{A}] u_i, \quad (10.25)$$

$$S_4 = \bar{u}_f [-(\alpha_f \not{k} + \beta_f \not{A} - \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k})] \frac{\gamma^0}{r} [-(\alpha_i \not{k} + \beta_i \not{A} + \delta_i \not{k} \not{A} \not{p}_i)] u_i, \quad (10.26)$$

$$\phi = (q_f - q_i)x + i \int_0^{(kx)} \left[\frac{(p_f A)}{c(kp_f)} - \frac{(p_i A)}{c(kp_i)} \right] d\varphi \equiv (q_f - q_i)x - i\xi \sin(kx), \quad (10.27)$$

$$\xi = -\frac{1}{c} \left[\frac{(p_f A)}{(kp_f)} - \frac{(p_i A)}{(kp_i)} \right]. \quad (10.28)$$

Après quelques développements au moyen de l'algèbre de Clifford, les termes relatifs aux relations (10.23)-(10.26) s'expriment en fonction du $\cos(\varphi)$ et de son carré. Utilisant ensuite les identités bien connues de Jacobi-Angers [216, 217] concernant les fonctions de Bessel ordinaires $J_n(\xi)$, on a

$$\begin{Bmatrix} 1 \\ \cos(\varphi) \\ \cos^2(\varphi) \end{Bmatrix} e^{-i\xi \sin(\varphi)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \begin{Bmatrix} B_n(\xi) \\ B_{n1}(\xi) \\ B_{n2}(\xi) \end{Bmatrix} e^{-in\varphi}, \quad (10.29)$$

avec

$$\begin{Bmatrix} B_n(\xi) \\ B_{n1}(\xi) \\ B_{n2}(\xi) \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} J_n(\xi) \\ \frac{1}{2} [J_{n+1}(\xi) + J_{n-1}(\xi)] \\ \frac{1}{4} [J_{n+2}(\xi) + 2J_n(\xi) + J_{n-2}(\xi)] \end{Bmatrix}. \quad (10.30)$$

Ainsi, les quatre termes précédents se réécrivent comme

$$S_j = \bar{u}_f F_j u_i, \quad j = 1, 2, 3, 4, \quad (10.31)$$

avec

$$F_1 = \gamma^0 B_n(\xi) - [\nu_i \gamma^0 \not{A} + \nu_f \gamma^0 \not{A} \not{k}] B_{n1}(\xi) + \nu_f \nu_i (\bar{u}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{A} \bar{u}_i) \times B_{n2}(\xi), \quad (10.32)$$

$$F_2 = -(\alpha_i \gamma^0 \not{k}) B_n(\xi) - [\beta_i \gamma^0 \not{A} - \delta_i \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i + \nu_f \alpha_i \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k}] \times B_{n1}(\xi) + [\nu_f \beta_i \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{A} + \nu_f \delta_i \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i] B_{n2}(\xi), \quad (10.33)$$

$$F_3 = -(\alpha_f \not{k} \gamma^0) B_n(\xi) + [-\beta_i \not{A} \gamma^0 + \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 + \nu_i \alpha_f \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A}] \times B_{n1}(\xi) + [\nu_i \beta_i \not{A} \gamma^0 \not{k} \not{A} + \nu_i \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A}] B_{n2}(\xi), \quad (10.34)$$

$$F_4 = (\alpha_f \alpha_i \not{k} \gamma^0 \not{k}) B_n(\xi) + [\alpha_f \beta_i \not{k} \gamma^0 \not{A} + \delta_i \alpha_f \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i + \beta_f \alpha_i \not{A} \gamma^0 \not{k} - \delta_f \alpha_i \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k}] B_{n1}(\xi) + [\beta_i^2 \beta_i \not{A} \gamma^0 \not{A} + \beta_f \delta_i \not{A} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i + \delta_f \beta_i \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{A} - \delta_f \delta_i \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i] B_{n2}(\xi). \quad (10.35)$$

Nous pouvons maintenant décomposer l'élément de matrice **(10.18)** par ses composantes de Fourier spatiale et temporelle. L'intégration sur le temps conduit à la conservation de l'énergie $Q_f = Q_i + n\omega$, soit

$$E_f = E_i - \frac{\bar{A}^2}{2c^2} \left[\frac{1}{(kp_f)} - \frac{1}{(kp_i)} \right] + n\omega, \quad (10.36)$$

où $E_i = T_i + c^2$ et $E_f = T_f + c^2$ sont les énergies relativistes incidente et après la diffusion. L'expression de la section efficace différentielle dudit processus peut s'écrire comme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma_n}{d\Omega_f}, \quad \frac{d\sigma_n}{d\Omega_f} = |N_i|^2 |\tilde{I}_n|^2 \frac{d\sigma_n^{(0)}}{d\Omega_f}, \quad (10.37)$$

avec

$$\tilde{I}_n = \frac{q^2}{4\pi} I_n, \quad I_n = \int d^3\vec{r} \frac{e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}}{r} {}_1F_1(i\eta_i, 1, i(q_i r - \vec{q}_i \cdot \vec{r})), \quad (10.38)$$

$$\frac{d\sigma_n^{(0)}}{d\Omega_f} = \frac{4Z^2}{c^2} \frac{q_f}{q_i} \frac{M_n}{q^4}, \quad \vec{q} = \vec{q}_i - \vec{q}_f + n\vec{k}. \quad (10.39)$$

$d\sigma_n^{(0)}/d\Omega_f$ est la section efficace différentielle du processus non linéaire de diffusion d'ordre n assisté par champ laser et sans la distorsion coulombienne représentée par $\tilde{I}_n$. n représente le nombre de photons échangés entre le système de collision et le champ laser. Pour $n < 0$ et $n > 0$, on parle respectivement de bremsstrahlung induit et de bremsstrahlung inverse. L'évaluation du facteur coulombien I_n donné dans la relation (10.38) se fait en suivant la procédure indiquée par Bess [219], on obtient alors

$$I_n = \left(\frac{D}{q^2}\right)^{-i\eta_i}, \quad D = (\vec{q}_f - n\vec{k})^2 - q_i^2, \quad N_i = e^{\pi\eta_i/2} \Gamma(1 - i\eta_i). \quad (10.40)$$

Nous considérons ici des faisceaux d'électrons non polarisés. Dans le calcul de la section efficace, il faut donc moyenner sur les états initiaux et sommer sur les états finaux de polarisation en spin [173, 218]. Les éléments de matrice non linéaires M_n sont ainsi donnés par

$$M_n = \frac{c^2}{2} \sum_i \sum_f |\mathcal{N}_{fi}|^2 \Big|_{Q_f=Q_i+n\omega} = \frac{c^2}{2} \sum_i \sum_f |\bar{u}_f (\Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3) u_i|^2, \quad (10.41)$$

avec

$$\Lambda_1 = [\gamma^0 - \alpha_i \gamma^0 \not{k} - \alpha_f \not{k} \gamma^0 + \alpha_i \alpha_f \not{k} \gamma^0 \not{k}] B_n(\xi), \quad (10.42)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_2 = & [-\nu_i \gamma^0 \not{k} \not{A} - \nu_f \not{A} \not{k} \gamma^0 - \delta_i \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i + \nu_f \alpha_i \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} + \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \\ & + \alpha_f \nu_i \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} + \alpha_f \beta \not{k} \gamma^0 \not{A} + \alpha_f \delta_i \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i + \beta \alpha_i \not{A} \gamma^0 \not{k} \\ & - \alpha_i \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k}] B_{n1}(\xi), \end{aligned} \quad (10.43)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_3 = & [\beta^2 \not{A} \gamma^0 \not{A} + \beta \delta_i \not{A} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i - \beta \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{A} - \delta_i \delta_f \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i \\ & + \beta \nu_i \not{A} \gamma^0 \not{k} \not{A} - \delta_f \nu_i \not{p}_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} + \nu_f \beta \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{A} + \nu_f \delta_i \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A} \not{p}_i \\ & + \nu_i \nu_f \not{A} \not{k} \gamma^0 \not{k} \not{A}] B_{n2}(\xi). \end{aligned} \quad (10.44)$$

Utilisons la relation ci-après qui réduit le calcul des éléments de matrice en un calcul de traces de produit des matrices γ

$$\sum_{i,f} |\bar{u}' \dots \gamma \dots u|^2 = Tr[\dots \gamma \dots (u' \bar{u}') \dots \gamma \dots (u \bar{u})]. \quad (10.45)$$

La normalisation des bispineurs u étant telle que $(u\bar{u}) = \not{p}c + c^2$, la relation (10.41) au facteur $c^2/2$ près devient

$$\sum_i \sum_f |\mathcal{N}_{fi}|^2 = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_j (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_k]. \quad (10.46)$$

Nous avons maintenant à évaluer les traces suivantes

$$\mathcal{N}_1 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_1 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_1], \quad (10.47)$$

$$\mathcal{N}_2 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_1 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_2], \quad (10.48)$$

$$\mathcal{N}_3 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_1 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_3], \quad (10.49)$$

$$\mathcal{N}_4 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_2 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_1], \quad (10.50)$$

$$\mathcal{N}_5 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_2 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_2], \quad (10.51)$$

$$\mathcal{N}_6 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_2 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_3], \quad (10.52)$$

$$\mathcal{N}_7 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_3 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_1], \quad (10.53)$$

$$\mathcal{N}_8 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_3 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_2], \quad (10.54)$$

$$\mathcal{N}_9 = \text{Tr}[(\not{p}_f c + c^2) \Lambda_3 (\not{p}_i c + c^2) \bar{\Lambda}_3]. \quad (10.55)$$

Faisant le regroupement $K_1 = \mathcal{N}_1$, $K_2 = \mathcal{N}_5$, $K_3 = \mathcal{N}_9$, $K_4 = \mathcal{N}_2 + \mathcal{N}_4$, $K_5 = \mathcal{N}_3 + \mathcal{N}_7$, $K_6 = \mathcal{N}_6 + \mathcal{N}_8$, et en utilisant les identités remarquables des traces de produit des matrices γ , on obtient les termes qui sont donnés dans la première section de l'**annexe F**. Après examen des relations (F.7)-(F.12), on note que la dépendance en AMM est inscrite dans les coefficients ν_i , ν_f , α_i , α_f , β_i , β_f , δ_i , δ_f . Par ailleurs, l'argument de la fonction de Bessel ξ donné par (10.28) est indépendant de l'AMM ; en clair celle-ci n'influence pas les coupures des spectres de bremsstrahlung.

Si on ne tient pas compte de l'AMM, i.e. si on pose $a = 0$ dans les équations (F.7)-(F.12), l'expression (10.37) se réduit bien à celle de Li *et al.* [200] avec M_n qui est donné par

$$\begin{aligned} M_n = & c^2 [\Delta_0^2 + 4(\Delta_1 \Delta_2 - \Delta_0 \Delta_3) A^2 k_0^2] + \Delta_0^2 (2p_{i0} p_{f0} - \vec{p}_i \cdot \vec{p}_f) \\ & + \Delta_1^2 \{2A^2 [(kp_i)(kp_f) - 2k_0 p_{f0} (kp_i)]\} + \Delta_2^2 \{2A^2 [(kp_i)(kp_f) \\ & - 2k_0 p_{i0} (kp_f)]\} + \Delta_3^2 [8A^4 k_0^2 (kp_i)(kp_f)] + 2\Delta_0 \Delta_1 [2k_0 p_{f0} (Ap_i) \\ & + (kp_i)(Ap_f) - (kp_f)(Ap_i)] + 2\Delta_0 \Delta_2 [2k_0 p_{i0} (Ap_f) + (kp_f)(Ap_i) \\ & - (kp_i)(Ap_f)] + 2\Delta_0 \Delta_3 \{2A^2 k_0 [k_0 (p_i p_f) - p_{i0} (kp_f) - p_{f0} (kp_i)]\} \\ & + 2\Delta_1 \Delta_2 \{4k_0^2 (Ap_i)(Ap_f) + 2A^2 [k_0 p_{i0} (kp_f) + k_0 p_{f0} (kp_i) - k_0^2 (p_i p_f) \\ & - (kp_i)(kp_f)]\} + 2\Delta_1 \Delta_3 [-4A^2 k_0^2 (kp_i)(Ap_f)] + 2\Delta_2 \Delta_3 [-4A^2 k_0^2 (kp_f)(Ap_i)], \end{aligned} \quad (10.56)$$

où

$$\Delta_0 = J_n(\xi), \quad \Delta_1 = -\frac{nJ_n(\xi)}{2c(kp_i)\xi}, \quad \Delta_2 = -\frac{nJ_n(\xi)}{2c(kp_f)\xi}, \quad (10.57)$$

$$\Delta_3 = \frac{J_{n-2}(\xi) + 2J_n(\xi) + J_{n+2}(\xi)}{16c^2(kp_i)(kp_f)}. \quad (10.58)$$

En outre, si on néglige la distorsion coulombienne en posant $\eta_i = 0$, on retrouve aussi l'expression de Li *et al.* [174].

10.3.2 En champ laser polarisé circulairement

Pour la polarisation circulaire [173, 204, 215], le champ laser est défini par

$$A = A_x \cos(\varphi) + A_y \sin(\varphi), \quad (10.59)$$

avec les composantes du potentiel vecteur qui sont données par

$$A_x = (0, |\vec{A}|, 0, 0), \quad A_y = (0, 0, |\vec{A}|, 0), \quad A_z = (0, 0, 0, 0). \quad (10.60)$$

Substituant les ondes de Volkov avec AMM des équations (10.19) et (10.20) dans la relation (10.18), on obtient

$$\bar{u}_f \bar{D}_f \gamma^0 D_i u_i = \bar{u}_f [E_0 + E_1 \cos(\varphi) + E_1 \sin(\varphi)] u_i, \quad (10.61)$$

où

$$D_i = 1 - \alpha_i \not{k} - [\beta_i \not{A}_x + \nu_i \not{k} \not{A}_x + \delta_i \not{k} \not{A}_x \not{p}_i] \cos(\varphi) \\ - [\beta_i \not{A}_y + \nu_i \not{k} \not{A}_y + \delta_i \not{k} \not{A}_y \not{p}_i] \sin(\varphi), \quad (10.62)$$

$$E_0 = (1 - \alpha_f \not{k}) \gamma^0 (1 - \alpha_i \not{k}), \quad (10.63)$$

$$E_1 = [\beta_f \not{A}_x + \nu_f \not{k} \not{A}_x - \delta_f \not{p}_f \not{A}_x \not{k}] \gamma^0 [\beta_i \not{A}_x + \nu_i \not{k} \not{A}_x + \delta_i \not{k} \not{A}_x \not{p}_i], \quad (10.64)$$

$$E_2 = [\beta_f \not{A}_y + \nu_f \not{k} \not{A}_y - \delta_f \not{p}_f \not{A}_y \not{k}] \gamma^0 [\beta_i \not{A}_y + \nu_i \not{k} \not{A}_y + \delta_i \not{k} \not{A}_y \not{p}_i]. \quad (10.65)$$

Ainsi, la matrice de transition devient

$$S_{fi} = \frac{iZ}{c} \int d^4x \frac{1}{2Q_i V} \frac{1}{2Q_f V} \bar{u}_f [E_0 + E_1 \cos(\varphi) + E_1 \sin(\varphi)] u_i \\ \times \exp[i(q_f - q_i)x - i\zeta \sin(\varphi - \phi_0)]. \quad (10.66)$$

De même que plus haut, on a que

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \cos(\varphi) \\ \sin(\varphi) \end{pmatrix} e^{-i\zeta \sin(\varphi - \phi_0)} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \begin{pmatrix} B_n(\zeta) \\ B_{nx}(\zeta) \\ B_{ny}(\zeta) \end{pmatrix} e^{-in\varphi}, \quad (10.67)$$

avec

$$\begin{pmatrix} B_n(\zeta) \\ B_{nx}(\zeta) \\ B_{ny}(\zeta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_n(\zeta) e^{in\phi_0} \\ \frac{1}{2} [J_{n+1}(\zeta) e^{i(n+1)\phi_0} + J_{n-1}(\zeta) e^{i(n-1)\phi_0}] \\ \frac{1}{2i} [J_{n+1}(\zeta) e^{i(n+1)\phi_0} - J_{n-1}(\zeta) e^{i(n-1)\phi_0}] \end{pmatrix}, \quad (10.68)$$

et

$$\zeta_x = \frac{(p_i A_x)}{c(kp_i)} - \frac{(p_f A_x)}{c(kp_f)}, \quad \zeta_y = \frac{(p_i A_y)}{c(kp_i)} - \frac{(p_f A_y)}{c(kp_f)}, \quad \zeta = \sqrt{\zeta_x^2 + \zeta_y^2}, \quad (10.69)$$

$$\cos(\phi_0) = \frac{\zeta_x}{\zeta}, \quad \sin(\phi_0) = \frac{\zeta_y}{\zeta}, \quad \dot{A} = A_x \cos(\phi_0) + A_y \sin(\phi_0). \quad (10.70)$$

Procédant comme en polarisation linéaire, il s'en suit que

$$\begin{aligned} M_n = & \mathcal{C}_1 J_n^2(\zeta) + \mathcal{C}_2 (J_{n+1}^2(\zeta) + J_{n-1}^2(\zeta)) + \mathcal{C}_3 (J_{n+1}(\zeta) J_{n-1}(\zeta)) \\ & + \mathcal{C}_4 J_n(\zeta) (J_{n+1}(\zeta) + J_{n-1}(\zeta)), \end{aligned} \quad (10.71)$$

où les $\mathcal{C}_i$ sont donnés dans la seconde section de l'**annexe F**.

Lorsque l'on annule l'AMM, on retrouve le résultat de Attaourti *et al.* [204] (obtenu par un calcul formel au moyen du logiciel REDUCE) au facteur $|N_i|^2 |\tilde{I}_n|^2$ de distorsion coulombienne près

$$\begin{aligned} M_n = & \mathcal{U}_1 J_n^2(\zeta) + \mathcal{U}_2 (J_{n+1}^2(\zeta) + J_{n-1}^2(\zeta)) + \mathcal{U}_3 (J_{n+1}(\zeta) J_{n-1}(\zeta)) \\ & + \mathcal{U}_4 J_n(\zeta) (J_{n+1}(\zeta) + J_{n-1}(\zeta)). \end{aligned} \quad (10.72)$$

où les coefficients $\mathcal{U}_i$ pour $i = 1, 2, 3, 4$ sont donnés par

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_1 = & [(q_f q_i) - c^2] \left[\frac{A^2 \omega^2}{c^4 (kq_f)(kq_i)} - 1 \right] - \frac{A^2}{2c^2} \left[\frac{(kq_f)}{(kq_i)} + \frac{(kq_i)}{(kq_f)} \right] \\ & + \frac{(A^2 \omega)^2}{c^6 (kq_f)(kq_i)} + \frac{2Q_i Q_f}{c^2} + \frac{A^2 \omega}{c^4} (Q_f - Q_i) \left[\frac{1}{(kq_i)} - \frac{1}{(kq_f)} \right], \end{aligned} \quad (10.73)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_2 = & -\frac{(A^2\omega)^2}{2c^6(kq_f)(kq_i)} + \frac{\omega^2}{2c^4} \left[\frac{(A_x q_f)(A_x q_i)}{(kq_f)(kq_i)} + \frac{(A_y q_f)(A_y q_i)}{(kq_f)(kq_i)} \right] \\
& - \frac{A^2}{2c^2} \left[\frac{(kq_f)}{(kq_i)} + \frac{(kq_i)}{(kq_f)} \right] + \frac{A^2}{4c^2} + \frac{A^2\omega}{2c^4} (Q_f - Q_i) \left[\frac{1}{(kq_f)} - \frac{1}{(kq_i)} \right] \\
& - \frac{A^2\omega^2}{2c^4(kq_f)(kq_i)} [(q_f q_i) - c^2], \tag{10.74}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_3 = & \frac{\omega^2}{c^4(kq_f)(kq_i)} [\cos(2\phi_0) \{ (A_x q_f)(A_x q_i) - (A_y q_f)(A_y q_i) \} \\
& + \sin(2\phi_0) \{ (A_x q_f)(A_y q_i) + (A_x q_i)(A_y q_f) \}], \tag{10.75}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_4 = & \frac{1}{2c} \left[(\tilde{A}q_i) + (\tilde{A}q_f) - \frac{(kq_f)}{(kq_i)} (\tilde{A}q_i) - \frac{(kq_i)}{(kq_f)} (\tilde{A}q_f) \right] \\
& + \frac{\omega}{c^3} \left[\frac{Q_i(\tilde{A}q_f)}{(kq_f)} + \frac{Q_f(\tilde{A}q_i)}{(kq_i)} \right]. \tag{10.76}
\end{aligned}$$

Comme Attaourti *et al.* [204] l'ont relevé, l'expression dérivée par Szymanowski *et al.* [173] dans ce cas est différente de la nôtre. Il est donc clair que les résultats présentés ici sont la correcte généralisation relativiste avec AMM du traitement de Bunkin et Fedorov [221].

10.4 Résultats numériques

Les effets de l'AMM sur les sections efficaces différentielles en polarisation rectiligne sont présentés ici en rapport avec le choix des paramètres cinématiques de la collision. Les couplages spin-laser, spin-orbite et la distorsion coulombienne ont déjà été discutés de manière détaillée par Szymanowski *et al.* [173] et Li *et al.* [200, 174] en comparaison avec les approches simplifiées sans spin et non relativiste. Nous ne revenons pas sur leur influence dans cette section.

10.4.1 Cinématique de la collision

Introduisons le repère $(\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ dont l'origine coïncide avec le noyau diffuseur, et relativement auquel on a les directions ci-contre de l'impulsion de l'électron incident $\vec{p}_i/\vec{e}_z$ (i.e. $\theta_i = \phi_i = 0$), du vecteur d'onde du

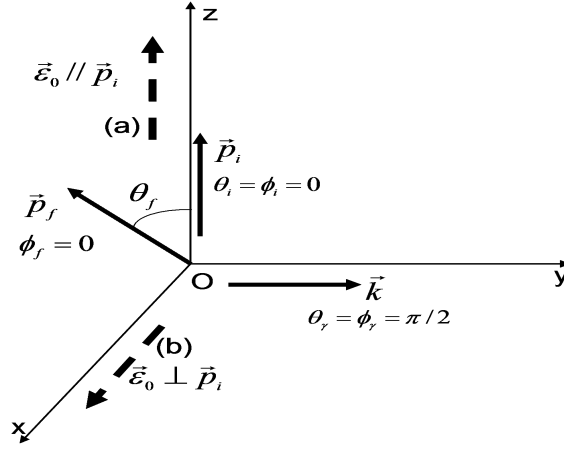


FIGURE 10.1 – Géométrie de la collision en polarisation rectiligne.

champ laser $\vec{k}/\vec{e}_y$ (i.e. $\theta_\gamma = \phi_\gamma = \pi/2$), et l'impulsion $\vec{p}_f$ de l'électron diffusé tel que $\phi_f = 0, \pi$. Deux orientations sont considérées en polarisation rectiligne dans le plan (ozx) à savoir (a) : $\vec{\epsilon}_0 // \vec{p}_i$ et (b) : $\vec{\epsilon}_0 \perp \vec{p}_i$. Nous avons choisi comme fréquence angulaire typique $\omega = 0.043 \text{ u.a.}$ celle du laser Nd :YAG et comme champ électrique la valeur critique $\omega c = 5.89 \text{ u.a.}$ correspondant au potentiel vecteur $c^2 = 18769 \text{ u.a.}$ et à l'intensité relativiste $I = 1.2 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$. En raison de la très forte pression de radiation dans la direction $\vec{e}_y$, l'énergie cinétique incidente est $T_i = c^2$. Ce choix des paramètres de la collision fixe toutes les autres quantités qui interviennent dans le calcul numérique de les sections efficaces différentielles.

10.4.2 Exemples numériques

La section efficace différentielle prédite par l'équation générale (10.37) est représentée dans la **figure 10.2** pour des paramètres collisionnels choisis. Le spectre est constitué d'une enveloppe de pics de transfert d'énergie de photons dont les hauteurs sont déterminées par les oscillations des fonctions de Bessel. Un nombre considérable de photons peut être échangé en émission (bremsstrahlung induit) et en absorption (bremsstrahlung inverse). Les lignes de coupure du spectre de bremsstrahlung dépendent des paramètres de la collision, notamment du champ électrique et de l'angle de diffusion. Pour le champ critique $E_c = 5.89 \text{ u.a.}$ utilisé

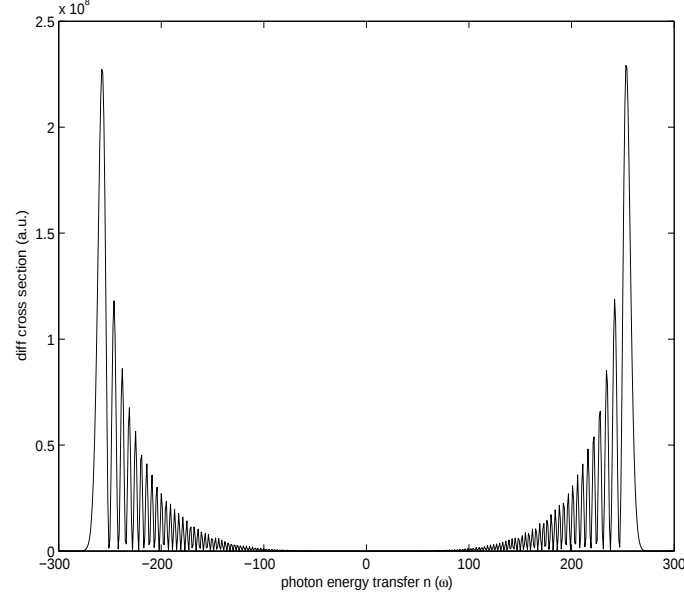


FIGURE 10.2 – Enveloppe de la section efficace différentielle de bremsstrahlung DVA en u.a. en fonction du transfert d'énergie n en unité ω dans la géométrie (a) de polarisation du laser. La charge du noyau diffuseur est $Z = 40$, l'angle de diffusion est $\theta_f = 2^\circ$, le champ électrique est $E = 5.89$ u.a., l'énergie du photon est $\omega = 0.043$ u.a. et l'énergie cinétique incidente est $T_i = c^2$.

dans ce travail et pour un angle de diffusion $\theta_f = 2^\circ$, le nombre maximum de photons est d'environ 275. Par contre, pour $\theta_f = 90^\circ$, correspondant à une collision à petit paramètre d'impact, le nombre maximum de photons échangés avoisine 500 000. Notons par ailleurs que la position des coupures n'est pas influencée par l'AMM puisque l'argument des fonctions de Bessel ne dépend pas de celle-ci. Elle est déterminée par la conservation de l'énergie et les fonctions de Bessel. Pour étudier le comportement des sections efficaces différentielles en fonction des paramètres de la collision, il convient d'accumuler les lignes de bremsstrahlung dans une fenêtre d'observation.

Dans les **figures 10.3 à 10.5**, les résultats CDVA sont représentés en trait continu, les DVA en trait mixte, les CDV en tiret et les DV en pointillé. La **figure 10.3** montre les sections efficaces différentielles sommées sur de ± 5000 lignes autour du pic élastique en fonction de l'angle de diffusion θ_f pour la géométrie (a) de polarisation laser. Qualitative-

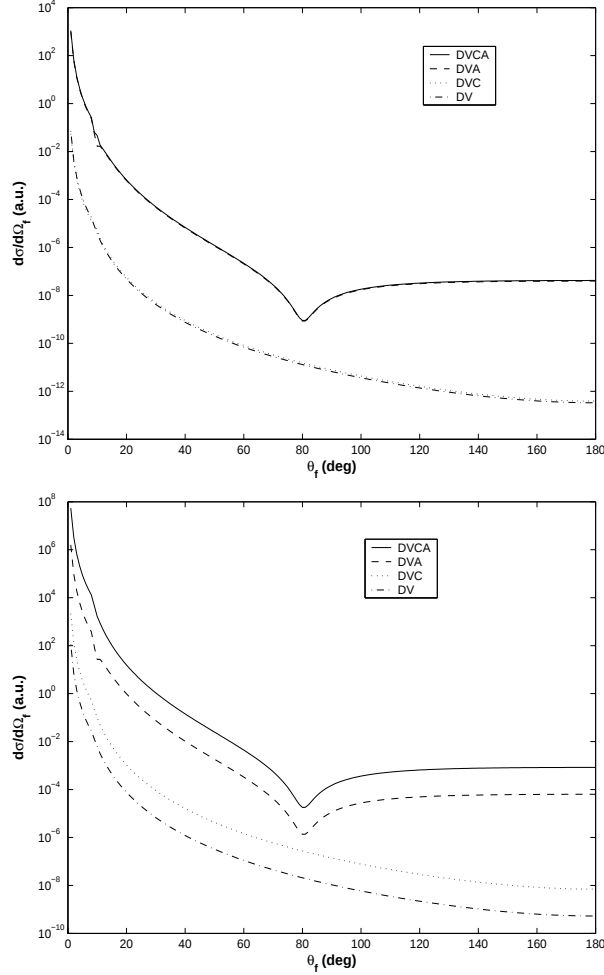


FIGURE 10.3 – Sections efficaces différentielles en u.a. sommées (± 5000 lignes de bremsstrahlung autour du pic élastique) en fonction de l'angle de diffusion θ_f dans la géométrie (a) de la polarisation du laser. Le champ électrique est $E = 5.89$ u.a., l'énergie du photon est $\omega = 0.043$ u.a. et l'énergie cinétique incidente est $T_i = c^2$. La charge du noyau diffuseur est respectivement $Z = 1$ à gauche et $Z = 40$ à droite.

ment, les approches CDVA et DVA dans lesquelles l'AMM est incorporée présentent le même profil comportant un minimum autour de $\theta_f = 80^\circ$. Quant à CDV et DV, elles exhibent une décroissance lisse dans tout le domaine angulaire. Quantitativement, les sections efficaces différentielles sommées CDVA et DVA sont largement supérieures (de deux ordres de grandeur environ) aux résultats CDV et DV quelque soit l'angle de dif-

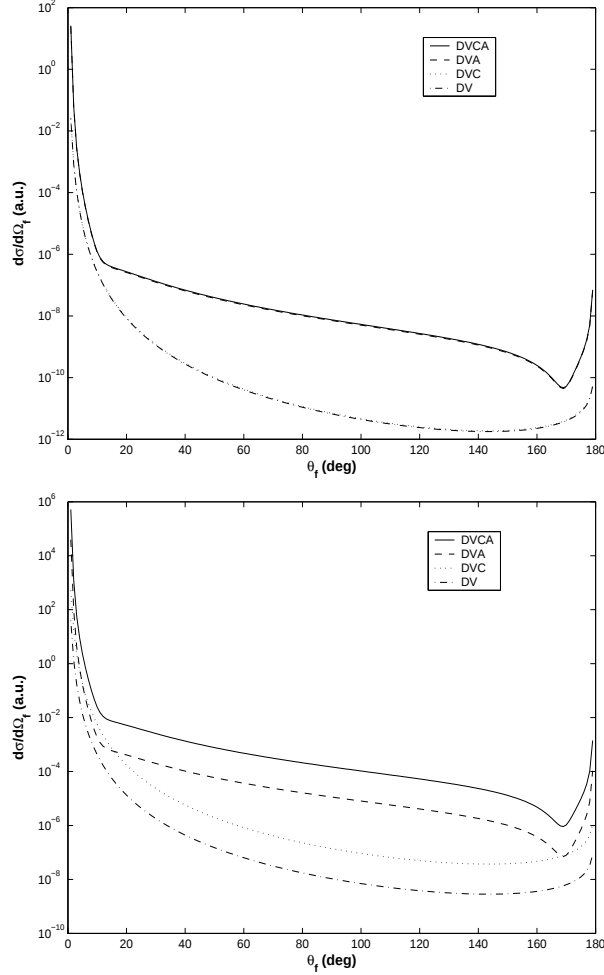


FIGURE 10.4 – Sections efficaces différentielles en u.a. sommées (± 5000 lignes de bremsstrahlung autour du pic élastique) en fonction de l'angle de diffusion θ_f dans la géométrie (b) de la polarisation du laser. Le champ électrique est $E = 5.89$ u.a., l'énergie du photon est $\omega = 0.043$ u.a. et l'énergie cinétique incidente est $T_i = c^2$. La charge du noyau diffuseur est respectivement $Z = 1$ à gauche et $Z = 40$ à droite.

fusion. Ceci montre clairement que les effets de l'anomalie du moment magnétique de l'électron sont importants pour de tels champs laser. L'influence de la charge du noyau est conforme à ce qui est attendu.

Une comparaison analogue peut être faite avec les résultats dans la géométrie (b) dans la **figure 10.4**. On observe globalement les mêmes

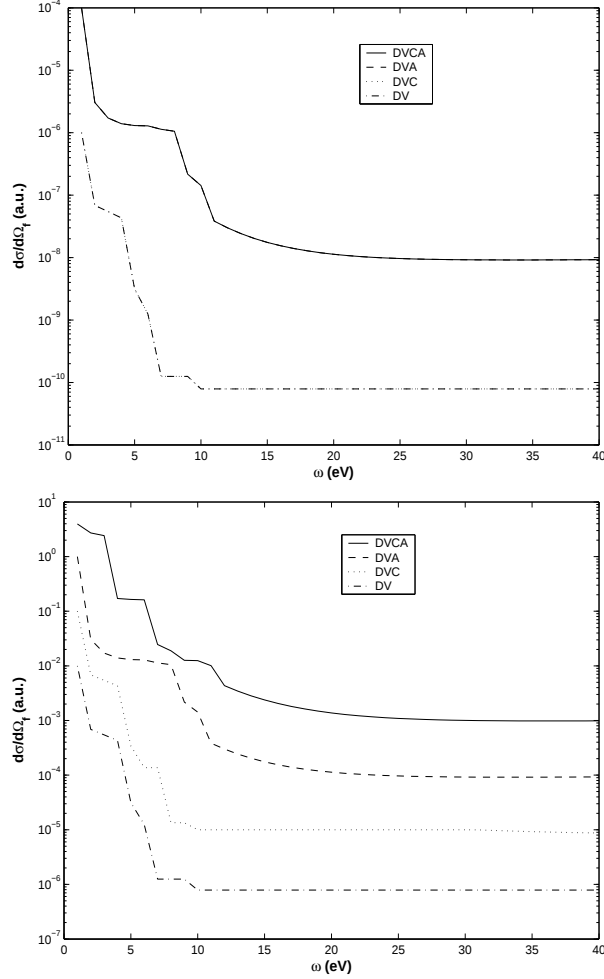


FIGURE 10.5 – Sections efficaces différentielles en u.a. sommées (± 5000 lignes de bremsstrahlung autour du pic élastique) en fonction de la fréquence laser ω (eV) dans la géométrie (a) de la polarisation du laser. Le champ électrique est $E = 5.89$ u.a., l'angle de diffusion $\theta_f = \pi/2$ et l'énergie cinétique incidente est $T_i = c^2$. La charge du noyau diffuseur est respectivement $Z = 1$ à gauche et $Z = 40$ à droite.

tendances à l'exception du minimum qui est déplacé au voisinage de 170° . Dans la **figure 10.5**, le comportement relatif des sections efficaces différentielles accumulées CDVA, DVA et CDV, DV est similaire à ce qui a été relevé précédemment.

Pour illustrer davantage les effets de la prise en compte de l'AMM

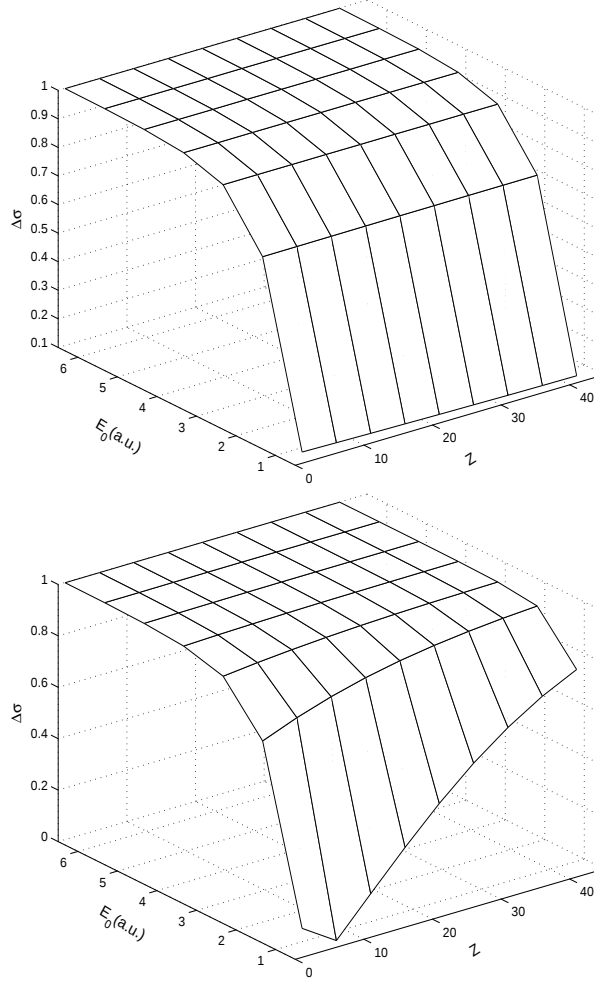


FIGURE 10.6 – Déviations normalisées des sections efficaces différentielles CDV (à gauche) et DV (à droite) par rapport à celles de référence CDVA en fonction du champ électrique et de la charge nucléaire dans la géométrie (a) de polarisation du laser. L'angle de diffusion est $\theta_f = \pi/2$.

de l'électron dans notre approche théorique, considérons la quantité $\Delta\sigma$ définie par la relation

$$\Delta\sigma = \frac{|d\sigma_a/d\Omega_f - d\sigma_b/d\Omega_f|}{d\sigma_a/d\Omega_f + d\sigma_b/d\Omega_f} \quad (10.77)$$

qui mesure la différence entre $d\sigma_a/d\Omega_f$ et $d\sigma_b/d\Omega_f$. Cette différence normalisée (i.e $0 \leq \Delta\sigma \leq 1$) introduite par Panek *et al.* [170] permet une re-

présentation bidimensionnelle des effets de l'AMM. Les résultats CDVA sont les valeurs de référence. Les déviations normalisées des approches DV et CDV en fonction du champ électrique et de la charge nucléaire sont représentées dans la **figure 10.6**. On note une influence forte et rapide de l'AMM en dessous du seuil relativiste si bien que les déviations normalisées sont saturées lorsque le champ atteint la valeur critique $E_c = 5.89 \text{ u.a.}$.

Chapitre 11

Conclusion et perspectives

L'objectif de ce travail était d'évaluer les effets de l'anomalie du moment magnétique (AMM) de l'électron sur la diffusion de Mott assistée par champ laser ultra intense dans l'approximation coulombienne. A cet effet, nous avons tout d'abord construit les fonctions d'onde approchées avec AMM des états initial et final du système collisionnel. Ensuite, nous avons calculé dans la première approximation de Born (forme *post* de la matrice S de Dirac) les sections efficaces différentielles dudit processus pour un faisceau d'électrons non polarisés. Les expressions analytiques que nous avons obtenues sont, dans le contexte relativiste, la généralisation de la théorie de Bunkin et Fedorov [221] pour les polarisations du laser considérées dans ce travail. Au plan numérique, nous avons utilisé un ensemble de paramètres collisionnels nécessaires à l'évaluation des sections efficaces différentielles : une fréquence angulaire typique infrarouge $\omega = 0.043 \text{ u.a.}$, un champ électrique $E = 5.89 \text{ u.a.}$, une énergie incidente $T_i = 18769 \text{ u.a.}$, une charge nucléaire Z du noyau diffuseur dans la gamme $1 - 40$, et une anomalie $\kappa = 1159652188.4 \times 10^{-12}$. Deux géométries de la polarisation linéaire du champ laser ont été considérées, à savoir $\vec{\varepsilon}_0 // \vec{p}_i$ et $\vec{\varepsilon}_0 \perp \vec{p}_i$. Les résultats obtenus ont été comparés à ceux de Li *et al.* [200]. Ils montrent invariablement que l'effet de l'AMM est d'augmenter de manière significative les sections efficaces différentielles. On peut cependant s'interroger sur l'influence d'un certain nombre de termes négligés dans les fonctions d'onde utilisées. Pour y répondre, il faudrait aller au-delà de l'approximation des champs faibles dans la dépendance spin-laser et prendre en compte la correction du gradient dans la distorsion coulombienne. Un autre aspect qu'il serait important d'étudier dans ce régime concerne le cas des faisceaux d'électrons polarisés. Soulignons toutefois

qu'en l'absence de calcul *ab initio* et de données expérimentales, cette étude constitue une description préliminaire du processus concerné.

Annexe A

Systèmes d'unités Gaussien, SI et Atomiques

La question des unités et des dimensions en électricité et en magnétisme a été pendant longtemps une préoccupation d'un grand nombre de physiciens et d'ingénieurs. En effet, il existe des unités fondamentales et des unités dérivées. Les unités fondamentales sont des quantités indépendantes. Par contre, les unités dérivées sont des quantités qui se définissent à l'aide des unités fondamentales. En général, la tradition exige que la *masse* (m), la *longueur* (l) et le *temps* (t) soient considérés comme unités fondamentales. Mais, cette tradition n'a pas toujours fait l'unanimité dans tous les domaines des sciences [140]. Nous pouvons citer entre autres, la quantité intensité du courant en électricité qui n'est pas une dérivée ces unités fondamentales, et qui à l'époque s'exprimait en masse d'argent déposée par unité de temps. Toutes ces études ont permis de définir les cinq unités fondamentales électromagnétiques suivantes : *unités électrostatiques* (*esu*), *unités électromagnétiques* (*emu*), *unités Gaussien*, *unités de Heaviside-Lorentz* et *système international d'unités* (*SI*). Dans la suite, nous faisons un bref rappel des *équations* et ces *unités électromagnétiques*. Ensuite, nous passerons aux unités atomiques qui est un système privilégié dans les études théoriques.

A.1 Unités et équations électromagnétiques

L'idée de base est le choix des quantités rationnelles *masse* (m), *longueur* (l) et *temps* (t) comme dimensions fondamentales indépendantes. De plus, nous partons de la définition bien connue de l'intensité du cou-

rant électrique c'est-à-dire la variation de la charge au cours du temps $I = dq/dt$. Ce qui signifie que la dimension du ratio charge-courant est un temps. Il s'en suit donc l'équation de continuité entre la densité de courant $\vec{j}$ et la densité de charge

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (\text{A.1})$$

Pour des raisons de simplicité, nous travaillons dans un espace libre sauf en présence de charges et de courants. Par ailleurs, la force électrostatique entre deux charges immobiles q et q' séparées par une distance r est donnée par la loi de Coulomb

$$F_1 = k_1 \frac{qq'}{r^2} \quad (\text{A.2})$$

où la constante k_1 est un coefficient de proportionnalité. Sa dimension et sa valeur dépendent de celles de la charge (selon qu'on travaille en unité de charge ou pas). Dans cette logique, ce qui est connu c'est la dimension de la quantité $k_1 qq'$ qui est le ml^3t^{-2} . De plus, si nous souhaitons dériver le champ électrique $\vec{E}$, nous pouvons le déduire de la relation (A.2) avec la même constante de proportionnalité k_1 en le définissant comme la force électrique par unité de charge

$$E = k_1 \frac{q}{r^2}. \quad (\text{A.3})$$

En revanche, la loi d'Ampère nous permet d'avoir la force d'induction magnétique par unité de longueur entre deux fils infiniment long et parallèles distants de d , qui sont parcourus par des courants d'intensités I et I'

$$\frac{dF_2}{dl} = 2k_2 \frac{II'}{d}. \quad (\text{A.4})$$

Notons que la constante k_2 est proportionnelle à la constante k_1 car il existe un lien entre le courant présent dans la relation (A.4) et la charge qui est dans la relation (A.2). En effet, en faisant ainsi le rapport des équations (A.2) et (A.4), on montre facilement que le rapport k_1/k_2 a la dimension du carré d'une vitesse l^2t^{-2} . Ensuite, si on fait une expérience où des charges et des intensités de courant sont connus, et que l'on mesure et compare les forces F_1 et F_2 , on obtient une valeur numérique du ratio k_1/k_2 très proche du carré de la célérité de la lumière dans le vide

$$\frac{k_1}{k_2} = c^2. \quad (\text{A.5})$$

Tout comme on a déduit le champ $\vec{E}$ de la force électrique F_1 , on peut déduire aussi le champ d'induction magnétique $\vec{B}$ de la force F_2 et on trouve numériquement que

$$B = 2k_2\beta\frac{I}{d} \quad (\text{A.6})$$

où la dimension de la constante de proportionnalité β peut être choisie de manière adéquate. En utilisant les relations (A.1), (A.3), (A.5) et (A.6), la dimension du rapport E/B est donnée par $lt^{-1}\beta^{-1}$. D'autre part, la troisième relation spécifique aux *unités et dimensions électromagnétiques* est la loi de Faraday de l'induction qui permet de connecter les phénomènes électriques et magnétiques à travers l'une des quatre équations de Maxwell. Il s'agit de la relation de Maxwell-Faraday qui est telle que la force électromotrice induite autour d'un circuit électrique est égale à la vitesse de variation du flux magnétique

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} + k_3 \frac{\partial B}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.7})$$

où k_3 est la constante de proportionnalité. Puisque la dimension du rapport E/B est établie, on peut déduire celle de k_3 en utilisant la relation (A.7). Ce qui d'avoir $[k_3] = \beta^{-1}$. Par ailleurs, en utilisant l'invariance de la transformation de Galilée, on trouve que $k_3 = \beta^{-1}$. Mais la meilleure façon de vérifier cette égalité est d'écrire les 4 équations de Maxwell [140]

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 4\pi k_1 \rho \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{B} = 4\pi k_2 \beta \vec{j} + \frac{k_2 \beta}{k_1} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{A.9})$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} + k_3 \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{A.11})$$

En combinant les deux équations (A.9) et (A.10), on obtient une équation qui est type équation de propagation de la composante magnétique du champ électromagnétique

$$\nabla^2 \vec{B} - k_3 \frac{k_2 \beta}{k_1} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0. \quad (\text{A.12})$$

Cette équation de propagation nous permet de faire le lien entre les constantes et le carré de la célérité de la lumière dans le vide c

$$\frac{k_1}{k_3 k_2 \beta} = c^2. \quad (\text{A.13})$$

En combinant avec la relation (A.5), on obtient facilement

$$k_3 = \frac{1}{\beta} \quad (\text{A.14})$$

faisant que cette égalité tienne en dimension et en intensité.

A.2 Différents types de systèmes d'unités électromagnétiques

Les différents types de *systèmes d'unités électromagnétiques* diffèrent uniquement par le choix des dimensions et des intensités des quatre constantes (k_1, k_2, β, k_3) introduites dans la section précédente. Par ailleurs, les relations (A.5) et (A.14) réduisent cet ensemble de quatre constantes à deux. Ce qui signifie par exemple que (k_2, k_3) peut être choisi arbitrairement. Mais il est bon de présenter dans une table (voir table A.1) toutes les quatres constantes pour tous les systèmes d'unités. Dans cette table, on note que les unités *emu* sont similaires aux unités *SI* à la seule différence d'un facteur 10^{-7} . D'autre part, le système *Gaussien* qui est un mélange des systèmes CGS en électrostatique et en électromagnétisme diffère du système de *Heaviside-Lorentz* par le facteur 4π .

Le lien [141] entre le système d'unité SI (MKSA) et le système d'unité Gaussien (CGS) se fait via la relation entre les quantités ε_0 et μ_0 qui est donnée par

$$\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = \kappa^2 \quad (\text{A.15})$$

où κ est un paramètre dépendant du système d'unité. Dans le système rationnel MKSA (unité SI), on a $\kappa = 1$. Ce qui permet d'avoir la relation

$$\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = 1, \quad (\text{A.16})$$

et la permittivité du vide est

$$\varepsilon_0 = 8.85419 \times 10^{-12} \text{Fm}^{-1}. \quad (\text{A.17})$$

De même, la perméabilité du vide est

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{Hm}^{-1}. \quad (\text{A.18})$$

Pour un champ électromagnétique défini par les composantes électrique

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(kz - \omega t + \phi) \quad (\text{A.19})$$

TABLE A.1 – *Différents systèmes d'unités électromagnétiques. Les 4 premières unités utilisent le CGS c'est-à-dire centimètre, gramme, seconde comme unités fondamentales. Le système SI utilise plutôt le MKSA c'est-à-dire mètre, kilogramme, seconde et ampère comme unités fondamentales. Ces unités sont données en fonction de la vitesse de la lumière dans le vide qui vaut $c \simeq 2.998 \times 10^{10} \text{ cm/s}$.*

Système	k_1	k_2	β	k_3
esu	1	$c^{-2}(t^2l^{-2})$	1	1
emu	$c^2(l^2t^{-2})$	1	1	1
Gaussien	1	$c^{-2}(t^2l^{-2})$	$c(lt^{-1})$	$c^{-1}(tl^{-1})$
Heaviside-Lorentz	$\frac{1}{4\pi}$	$\frac{1}{4\pi c^2}$	$c(lt^{-1})$	$c^{-1}(tl^{-1})$
SI	$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 10^{-7}c^2$ $(ml^3t^{-4}A^{-2})$	$\frac{\mu_0}{4\pi} \equiv 10^{-7}$ $(mlt^{-2}A^{-2})$	1	1

et magnétique

$$\vec{B} = \vec{B}_0 \cos(kz - \omega t + \phi), \quad (\text{A.20})$$

le vecteur de poynting et l'intensité du champ s'écrivent dans ce système

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu_0}(\vec{E} \wedge \vec{B}), \quad I = \frac{1}{2}\epsilon_0 c E_0^2 = \frac{1}{2}\epsilon_0 c \omega^2 A_0^2. \quad (\text{A.21})$$

D'autre part, dans le système Gaussien, on a $\kappa = c$, ce qui permet d'avoir

$$\epsilon_0 = \frac{1}{4\pi}, \quad \mu_0 = 4\pi, \quad (\text{A.22})$$

et le vecteur de poynting et l'intensité du champ s'écrivent

$$\vec{S} = \frac{c}{4\pi}(\vec{E} \wedge \vec{B}), \quad I = \frac{c}{8\pi} E_0^2 = \frac{\omega^2 A_0^2}{8\pi c}. \quad (\text{A.23})$$

A.3 Unités atomiques

Dans le système d'unité atomique (système de Hartree), les équations de base de la physique atomique et moléculaire (utilisant la mécanique quantique) se simplifient considérablement car ce dernier se définit par

$m = \hbar = e = a_0 = 1$. De plus, si $\kappa = 1$ c'est-à-dire que nous partons du MKSA, alors on a

$$c = \frac{1}{\alpha} = 137.036 \text{ u.a.}, \quad \varepsilon_0 = \frac{1}{4\pi} \text{ u.a.}, \quad \mu_0 = \frac{4\pi}{c^2} = 4\pi\alpha^2 \text{ u.a.} \quad (\text{A.24})$$

où α est la constante de structure fine. Nous pouvons maintenant définir les autres grandeurs intéressantes dans le système des unités atomiques telles que l'unité de temps, d'énergie, de champ électrique (amplitude et intensité). Ce sont ces unités qui permettent de faire la conversion du système u.a. à d'autres systèmes d'unités. Les autres quantités omises se trouvent dans le livre de Joachain [141].

TABLE A.2 – *Grandeurs de conversion en unités atomiques avec leur signification physique et leur valeur.*

Dimensions	Expression	Signification physique	Valeur
Masse	m ou m_e	Masse d'un electron	9.10953×10^{-31} kg
Charge	e	valeur absolue de la charge d'un electron	1.60219×10^{-19} C
Moment angulaire	$\hbar$	Constante de Planck divisée par 2π	1.05459×10^{-34} J s
Longueur	a_0	Rayon de Bohr	5.29177×10^{-11} m
Vitesse	$v = \alpha c$	Vitesse d'un electron sur la 1 ^{ere} orbite de Bohr	2.18769×10^6 m.s ⁻¹
Temps	$\frac{a_0}{v_0}$	Temps mis par l'electron pour parcourir un rayon de Bohr	2.41889×10^{-17} s
Energie	$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0}$	Deux fois le potentiel d'ionisation de H	4.35981×10^{-18} J = 27.2116 eV.
Champ électrique (amplitude)	$\frac{e}{4\pi\epsilon_0 a_0^2}$	Champ ressenti par l'electron sur la 1 ^{ere} orbite de bohr de H	5.42225×10^{11} V.m ⁻¹
Intensité			3.5095×10^{20} w.m ⁻²

Annexe B

Méthode de la matrice de Jacobi généralisée

B.1 Introduction

Le problème coulombien à plus de deux corps reste un des problèmes les plus complexes de la physique atomique car l'équation de Schrödinger pour ces systèmes n'est pas soluble analytiquement. De plus, le comportement asymptotique exact des continua multiples n'est pas connu et reste un sujet d'actualité de la théorie des diffusions. Si les calculs des résonances sont maîtrisés actuellement, le calcul des probabilités et sections efficaces dépendent fortement du degré de précision des fonctions du continuum qui doivent avoir un comportement asymptotique correct. Dans ce travail, pour résoudre ces problèmes, nous avons recours à des approximations dans la résolution numérique de l'ESS sur une base finie de fonctions de carré sommable. Pour les systèmes à deux électrons que nous étudions dans ce travail, cette résolution entraîne trois conséquences majeures :

1. La finitude de la base de fonctions de carré sommable empêche la reproduction du vrai comportement asymptotique des fonctions du continuum.
2. Les états propres associées aux valeurs propres positives sont des combinaisons linéaires des vrais états du continuum. Ce ne sont donc pas de vrais états du continuum et c'est la raison pour laquelle on a coutume de les appeler les *pseudo-états* du continuum.

3. les continua sont dégénérés en énergie car à une même valeur propre positive E , peut correspondre un état du simple continuum ou un état du double continuum.

Pour extraire les informations physiques relatives à la simple et à la double ionisation, il faut trouver une technique qui permettra de séparer ces deux contributions. C'est ainsi que nous faisons appel à la méthode de la matrice Jacobi (matrice J) qui est particulièrement efficace pour la construction des fonctions d'onde multivoies du simple continuum. À l'aide de cette technique, on peut construire des fonctions d'onde à deux électrons qui ont un comportement asymptotique correct c'est-à-dire un électron lié et un autre dans le continuum. Dans la suite, selon le nombre de zones considérées, nous présentons la méthode de construction des fonctions du simple continuum [142, 143, 144] avec dépendance angulaire. Notons que la méthode à deux régions a été utilisée entre autres par Broad *et al.* [99] pour traiter les processus photoniques, par Fomouo *et al.* [8, 10, 11] pour calculer les probabilités de simple ionisation des processus photoniques qui leur ont permis d'en extraire la contribution des probabilités de double ionisation. Par contre, dans les expressions des fonctions du simple continuum données par ces deux auteurs, la dépendance angulaire est omise. C'est la raison pour laquelle, nous avons dérivé cette fonction avec dépendance angulaire. Ensuite, nous l'avons utilisé pour évaluer la TDCS du processus $(e, 2e)$ dans le **chapitre 6** et l'**annexe E**.

B.2 Construction des fonctions SCWF à deux et à trois régions

La méthode que nous allons présenter ici a été développée par Gersbacher et Broad [99]. Elle est analogue à la méthode de la matrice R mais la fonction d'onde du système est développée sur une base des fonctions de carré sommable. L'idée de base de cette technique consiste à séparer l'espace des fonctions de deux zones : une zone *interne* et une zone dite *asymptotique*. Certains problèmes physique nécessite l'introduction d'une zone *intermédiaire* [97]. Dans la zone *interne*, le hamiltonien du système

$$H = \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{Z}{r_1} \right\} + \left\{ -\frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z-1}{r_2} \right\} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (\text{B.1})$$

où

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{-1}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{B.2})$$

est résolu exactement. Le développement multipolaire (9.10) nous permet de définir une *zone intermédiaire* et une *zone asymptotique* suivant l'ordre de troncature de ce dernier. Ainsi, si nous tronquons la série à l'ordre 2 ,

$$\frac{1}{r_{12}} \simeq \frac{1}{r_2} + \frac{4\pi}{3} \frac{r_1}{r_2^2} \sum_{m=-1}^1 Y_{1m}^*(\hat{r}_1) Y_{1m}(\hat{r}_2), \quad (\text{B.3})$$

et à l'ordre 1

$$\frac{1}{r_{12}} \simeq \frac{1}{r_2}, \quad (\text{B.4})$$

alors le potentiel $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ nous permettra donc de décrire la *zone intermédiaire* et la *zone asymptotique* respectivement. De plus, nous notons que $1/r_{12}$ a un comportement asymptotique en $1/r_2^2$, ce qui introduit une dégénérescence en $2s$, $2p$ due à ce potentiel à longue portée. C'est ainsi que la *zone intermédiaire* est décrite par un hamiltonien contenant l'approximation (B.3)

$$H = \left\{ -\frac{p_1^2}{2} - \frac{Z}{r_1} \right\} + \left\{ -\frac{p_2^2}{2} - \frac{Z-1}{r_2} \right\} + \frac{4\pi}{3} \frac{r_1}{r_2^2} \sum_{m=-1}^1 Y_{1m}^*(\hat{r}_1) Y_{1m}(\hat{r}_2). \quad (\text{B.5})$$

et la *zone asymptotique* est décrite par un hamiltonien contenant l'approximation (B.4)

$$H = \left\{ -\frac{p_1^2}{2} - \frac{Z}{r_1} \right\} + \left\{ -\frac{p_2^2}{2} - \frac{Z-1}{r_2} \right\}. \quad (\text{B.6})$$

D'une part, dans la *zone intermédiaire*, la fonction d'onde doit être construite de manière à bien décrire l'état où les deux électrons sont encore tout proche. C'est l'état avant l'éjection de l'un des électrons dans le continuum. D'autre part, dans la *zone asymptotique*, la fonction d'onde doit être construite de manière à reproduire le comportement asymptotique exact d'une fonction de simple ionisation : on considère qu'un des électrons (celui décrit par $\vec{r}_1$) est lié et reste proche du noyau tandis que l'autre, supposé dans un état du continuum et décrit par $\vec{r}_2$, est très loin du noyau. Dans les développements qui vont suivre, on négligera les termes d'échange dans la *zone asymptotique*. Cette approximation est justifiée par le fait que les deux électrons sont traités différemment dans

cette zone : l'un est proche du noyau et l'autre est très éloigné du noyau, donc les possibilités d'échange des deux électrons sont quasi nulles. La fonction d'onde de simple ionisation s'écrit

$$\begin{aligned}\Theta_{\Gamma}^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) &= \Theta_{\Gamma}^{inn,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) + \Theta_{\Gamma}^{int,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) \\ &+ \Theta_{\Gamma}^{asy,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E).\end{aligned}\quad (B.7)$$

Déterminons à présent les expressions des fonctions d'onde dans les trois zones. Dans la zone *interne*, le problème aux valeurs propres du système à deux électrons est résolu exactement sur une base dont la partie radiale est décrite par les fonctions sturmiennes et la partie angulaire par les harmoniques sphériques bipolaires. Pour une symétrie L donnée et sa projection M sur l'axe de quantification z , les états liés et les *pseudo-états* du continuum se présentent sous la forme

$$\Psi_j^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{l_1 \leq l_2} \sum_{n_1, n_2} \psi_{n_1, n_2, j}^{l_1, l_2, L, M} F_{n_1, n_2}^{l_1, l_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2), \quad (B.8)$$

où les $F_{n_1, n_2}^{l_1, l_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ sont les fonctions de base définies par

$$F_{n_1, n_2}^{l_1, l_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{A} \left(S_{\tilde{n}_1, l_1}^{\kappa}(r_1) S_{\tilde{n}_2, l_2}^{\kappa}(r_2) \Lambda_{l_1, l_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \right). \quad (B.9)$$

avec $n_1, n_2 = 1, 2, \dots, N$ et le symétriseur $\mathcal{A} = (1 + \epsilon P_{21})/\sqrt{2}$. Après avoir diagonalisé le hamiltonien du système sur cette base, les valeurs propres inférieures au premier seuil de simple ionisation $E \leq -2 \text{ u.a.}$ sont attribuées aux états liés. Au dessus de ce premier seuil, tous les autres états sont des *pseudo-états* du continuum normalisés à 1 alors que les vrais états du continuum sont normalisés sur des fonctions delta soit dans l'espace des impulsions $\vec{k}$

$$\int \psi_{c, \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{c, \vec{k}_2}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \quad (B.10)$$

ou l'espace des énergies

$$\int \psi_{c, \vec{k}_1}^*(\vec{r}) \psi_{c, \vec{k}_2}(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(\epsilon_1 - \epsilon_2) \delta(\Omega_1 - \Omega_2), \quad (B.11)$$

avec $\epsilon_i = k_i^2/2$, $\Omega_i = (\theta_i, \phi_i)$, $i = 1, 2$. Ω_1 et Ω_2 sont les coordonnées angulaires des deux électrons dans l'espace des impulsions. La *zone interne* de la fonction de simple ionisation s'écrit

$$\Theta_{\Gamma}^{inn,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) = \sum_j b_{j, \Gamma}^{L, M}(E) \Psi_j^{L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2). \quad (B.12)$$

Pour avoir une bonne description des parties *intermédiaire* et *asymptotique*, il est nécessaire de faire une approximation sur les états de l'ion résiduel He^+ étant donné que l'état final du système est équivalent à celui d'un processus de diffusion d'un électron par l'ion He^+ . On sait que dans un processus de diffusion, l'ion résiduel peut se retrouver soit sur l'état fondamental, soit dans un état excité, ou même être ionisé. Chaque état de l'ion résiduel définit *un canal d'ionisation*. En diagonalisant le hamiltonien de l'ion résiduel sur une base de fonctions sturmiennes, on obtient des états liés et les *pseudo-états* du problème à un électron. Il est important de souligner qu'à cause de la finitude de la base, seuls les premiers états seront décrits correctement. En outre, les valeurs propres porteront en plus de l'indice n associé au nombre quantique principal, l'indice l du moment angulaire car l'utilisation d'une base tronquée entraîne la levée de dégénérescence des états coulombiens. Pour obtenir une représentation correcte de l'électron du continuum, il est nécessaire de compléter la base des fonctions sturmiennes utilisées dans la zone *interne*. En clair, pour cette partie, on travaille avec les fonctions sturmiennes qui n'ont pas été utilisées dans la zone *interne*. Ainsi, dans la zone *intermédiaire*, les fonctions de base se présentent sous la forme

$$\Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{A} \left(\chi_{\tilde{n}_1, \tilde{l}_1}^\kappa(r_1) S_{\tilde{n}_2, \tilde{l}_2}^\kappa(r_2) \Lambda_{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \right) \quad (\text{B.13})$$

avec $\tilde{n}_1 \in [1, N]$ et $\tilde{n}_2 \in [N+1, N']$ où N' est la taille de la zone *intermédiaire*. De plus, on a la relation suivante qui est vérifiée

$$\int d\vec{r}_1 \chi_{\tilde{n}_1, \tilde{l}_1}^\kappa(\vec{r}_1) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr_1^2} + \frac{\tilde{l}_1(\tilde{l}_1+1)}{2r_1^2} - \frac{Z}{r_1} \right) \chi_{n_1, \tilde{l}_1}^\kappa(\vec{r}_1) = \varepsilon_{\tilde{n}_1, \tilde{l}_1} \delta_{\tilde{n}_1, n_1}. \quad (\text{B.14})$$

D'autre part, dans la zone *asymptotique*, les fonctions de base se présentent sous la forme

$$\Phi_{n_1, n_2}^{l_1, l_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mathcal{A} \left(\chi_{n_1, l_1}^\kappa(r_1) S_{n_2, l_2}^\kappa(r_2) \Lambda_{l_1, l_2}^{L, M}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) \right). \quad (\text{B.15})$$

où $\chi_{n_1, l_1}^\kappa(r_1)$ est une fonction propre de He^+ obtenue avec la base tronquée de $N-1$ sturmiennes de la zone *interne*

$$\chi_{n_1, l_1}^\kappa(r_1) = \sum_{\mu=1}^{N'} D_{\mu, n_1}^{l_1} S_{\mu, l_1}^\kappa(r_1). \quad (\text{B.16})$$

Remarquons ici que $n_1 \in [1, N']$ et $n_2 \in [N'+1, \infty[$. Par conséquent, la condition $l_1 \leq l_2$ qu'il faut respecter dans l'expression (B.8) afin d'éviter

les redondances n'a plus de sens car les deux fonctions radiales sont complètement différentes dans ces deux zones externes. La fonction d'onde décrivant cette *zone intermédiaire* est donnée par

$$\Theta_{\Gamma}^{int,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) = \sum_{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2} \sum_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2} d_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, j}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(E) \Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{B.17})$$

où les $d_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, j}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(E, \hat{k}_e)$ sont les coefficients de décomposition sur la base $\Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}$. La partie *asymptotique* de la fonction est alors

$$\Theta_{\Gamma}^{asy,L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) = \sum_{\Gamma'} \sum_{n'_2=N}^{\infty} f_{n'_2, l'_2}^{\Gamma' \Gamma}(E) \Phi_{n'_1, n'_2}^{l'_1, l'_2, L', M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{B.18})$$

où les Γ sont les canaux d'ionisation décrits par un ensemble de cinq nombres quantiques : $\Gamma = (n'_1, l'_1, l'_2; L', M')$ et les $f_{n'_2, l'_2}^{\Gamma' \Gamma}$ sont les coefficients de couplage entre les voies. Finalement, la fonction représentant l'état final du système sera cherchée sous la forme

$$\begin{aligned} \Theta_{\Gamma}^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) &= \sum_j b_{j, \Gamma}^{L,M}(E) \Psi_j^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &+ \sum_{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2} \sum_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2} d_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, j}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(E) \Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\ &+ \sum_{\Gamma'} \sum_{n'_2=N}^{\infty} f_{n'_2, l'_2}^{\Gamma' \Gamma}(E) \Phi_{n'_1, n'_2}^{l'_1, l'_2, L', M'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

où les coefficients $b_{j, \Gamma}^{L,M}(E)$, $d_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, j}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M}(E)$ et $f_{n'_2, l'_2}^{\Gamma' \Gamma}(E)$ sont à déterminer. Pour ce faire, on suppose que la fonction d'onde (B.19) est solution de l'équation de Schrodinger dans tout l'espace.

$$\{H - E\} \Theta_{\Gamma}^{L,M}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, E) = 0. \quad (\text{B.20})$$

B.2.1 Développement des ondes coulombiennes sur la base sturmienne

Dans le cas du potentiel coulombien, la solution régulière de l'équation radiale

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{2Z}{r} + k^2 \right] R_l(r) = 0 \quad (\text{B.21})$$

qui décrit la partie radiale d'un électron dans le continuum, est donnée par

$$R_l(k, r) = \frac{2^l e^{\pi t/2} |\Gamma(l+1-it)|}{(2l+1)!} (kr)^{l+1} e^{ikr} {}_1F_1(l+1-it; 2l+2; -2ikr), \quad (\text{B.22})$$

avec Z qui est négatif comme dans l'article de Broad [44] et $t = Z/k$. Par ailleurs, les fonctions sturmiennes sont de carré sommable. De plus, la base sturmienne est complète. Dès lors, on peut développer la fonction régulière sur cette base :

$$R_l(r) = \sum_{n=0}^{\infty} s_{n,l}(\epsilon) S_{n+l+1,l}^{\kappa}(r). \quad (\text{B.23})$$

où $\epsilon = \frac{k^2}{2}$ et $s_{n,l}(\epsilon)$ les coefficients à déterminer. En multipliant à gauche l'équation (B.21) par $\langle \phi_{m,l} |$, on obtient

$$\langle \phi_{m,l} | H - \epsilon | R_l \rangle = 0, \quad (\text{B.24})$$

soit encore

$$\sum_{n=0}^{\infty} s_{n,l}(k) J_{mn} = 0, \quad (\text{B.25})$$

avec

$$\begin{aligned} J_{mn} &= \langle \phi_{m,l} | H - \frac{k^2}{2} | \phi_{n,l} \rangle \\ &= \int_0^{\infty} dr \phi_{m,l}(r) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{Z}{r} \right) \phi_{n,l}(r). \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

L'expression finale des J_{mn} est la suivante :

$$\begin{aligned} J_{nm} &= \frac{N_{\tilde{m}l}^{\kappa} N_{\tilde{n},l}^{\kappa}}{[2\kappa]^{(2l+2)}} \frac{\Gamma(n+2l+2)}{\Gamma(n+1)} \left(Z\delta_{n,m} - \frac{\kappa\eta}{2\sin\theta} [2x(n+l+1)\delta_{n,m} \right. \\ &\quad \left. - n\delta_{m,n-1} - (n+2l+2)\delta_{m,n+1}] \right), \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

où

$$x = \cos\theta = \frac{\eta^2 - \frac{1}{4}}{\eta^2 + \frac{1}{4}}, \quad \eta = k/2\kappa. \quad (\text{B.28})$$

Puisque la matrice J_{nm} est tridiagonale, l'équation (B.25) est une relation de récurrence à trois termes pour les coefficients $s_{n,l}(\epsilon)$. En suivant

la technique de résolution décrite dans [144], on obtient une équation différentielle pour ces coefficients qui peut être résolue par les techniques standards [145, 49]. La solution s'exprime en termes des fonctions hypergéométriques qu'on peut calculer facilement. Après quelques développements, on obtient finalement

$$s_{n,l}(\epsilon) = \frac{(2\kappa)^{l+1}}{N_{\tilde{n},l}^\kappa} \frac{2^l |\Gamma(l+1-it)|}{\Gamma(2l+2)} e^{[(\theta-\pi/2)t]} (\sin \theta)^{l+1} e^{-in\theta} \times {}_2F_1(-n, l+1-it, 2l+2, 1-e^{2i\theta}). \quad (\text{B.29})$$

En fonction des polynômes de Pollaczek [144, 102] définies par

$$P_n^{l+1} \left(\cos \theta, \frac{Z}{k}, \frac{-Z}{k} \right) = \frac{\Gamma(n+2l+2)}{n! \Gamma(2l+2)} e^{-in\theta} \times {}_2F_1(-n, l+1-it, 2l+2, 1-e^{2i\theta}), \quad (\text{B.30})$$

on obtient une autre expression pour les $s_{n,l}(k)$:

$$s_{n,l}(\epsilon) = \frac{(2\kappa)^{l+1}}{N_{\tilde{n},l}^\kappa} \frac{2^l n! \Gamma(l+1-it)}{\Gamma(n+2l+2)} e^{[(\theta-\pi/2)t]} (\sin \theta)^{l+1} e^{-in\theta} \times P_n^{l+1} \left(\cos \theta, \frac{Z}{k}, \frac{-Z}{k} \right). \quad (\text{B.31})$$

Interessons-nous à présent à la solution ayant le comportement asymptotique en cosinus. On sait que la solution irrégulière n'a pas les caractéristiques d'une bonne fonction d'onde, puisqu'elle diverge à l'origine. Pour reproduire le comportement asymptotique correct d'une fonction de diffusion, nous sommes dans l'obligation de construire une deuxième solution régulière, dont le comportement asymptotique est celui d'une solution irrégulière. Les coefficients du développement de cette fonction sur la base sturnienne vérifieront les mêmes relations de récurrence que ceux de la fonction régulière. Convenons d'appeler cette solution $\mathcal{C}(r)$. Il apparaît évident, compte tenu des remarques précédentes que $\mathcal{C}(r)$ ne peut pas être solution de l'équation de Schrödinger (B.21). Cependant, en choisissant $\mathcal{C}(r)$ telle que

$$\left\{ H - \frac{k^2}{2} \right\} \mathcal{C}(r) = -\beta \bar{\phi}_{0,l}(r), \quad \beta = \frac{W}{2R_0}. \quad (\text{B.32})$$

Non seulement la fonction $\mathcal{C}(r)$ est régulière à l'origine mais asymptotiquement, elle a le comportement de la fonction irrégulière [144]. W est

le wronskien des deux solutions indépendantes c'est-à-dire des solutions régulière et irrégulière. Pour le potentiel coulombien que nous utilisons ici,

$$W = -k e^{[(1+\varepsilon)\pi t]}, \quad \varepsilon = \begin{cases} -1 & \text{for } \theta \in [0, \pi] \\ 1 & \text{for } \theta \in [\pi, 2\pi]. \end{cases} \quad (\text{B.33})$$

Sur la base des fonctions sturmiennes, la fonction $\mathcal{C}(r)$ s'écrit alors

$$\mathcal{C}(r) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n,l}(\varepsilon) S_{n+l+1,l}^{\kappa}(r). \quad (\text{B.34})$$

Pour déterminer les coefficients $c_{n,l}(\varepsilon)$, on procède comme précédemment dans le cas de la fonction régulière et on obtient

$$\begin{aligned} c_{n,l}(\varepsilon) + i s_{n,l}(\varepsilon) &= -\frac{(2\kappa)^{l+1}}{N_{\tilde{n},l}^{\kappa}} \frac{n! e^{\pi t/2} e^{-\theta t}}{2^l \Gamma(n+l+2-it)(\sin \theta)^l} e^{[-i(n+1)\theta]} \\ &\times {}_2F_1(-n, l+1-it, 2l+2, e^{2i\theta}). \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Dans la zone *asymptotique*, les coefficients $f_{n_2,l_2}^{\Gamma\Gamma}(E)$ doivent être des combinaisons linéaires des coefficients $s_{n_2,l_2}(\varepsilon)$ du développement de la fonction régulière sur la base sturmienne et de ceux d'une fonction d'onde sortante $c_{n_2,l_2}(\varepsilon) + i s_{n_2,l_2}(\varepsilon)$

$$f_{n_2,l_2}^{\Gamma\Gamma}(E) = s_{n_2,l_2}(E - \varepsilon_{n_1,l_1}) \delta_{\Gamma\Gamma} - Q_{n_2,l_2}(E - \varepsilon_{n_1,l_1}) T_{\Gamma\Gamma} \quad (\text{B.36})$$

où

$$Q_{n_2,l_2}(\varepsilon) = c_{n_2,l_2}(\varepsilon) + i s_{n_2,l_2}(\varepsilon). \quad (\text{B.37})$$

Les nombres quantiques n_1, l_1, l_2 sont liés à la voie Γ . E est la valeur propre associée à la fonction (B.19). Lorsque $E - \varepsilon_{n_1,l_1} > 0$, on dit que la voie Γ est ouverte ou permise. Dans le cas contraire, elle sera fermée. Puisque le canal principal Γ est supposé ouvert, le premier terme de la relation (B.36) aura une contribution nulle pour les voies fermées. T est à un facteur près la matrice de transition que l'on rencontre couramment dans les problèmes de diffusion.

B.2.2 SCWF à deux régions

Si nous supposons que nous n'avons que deux régions c'est-à-dire la *zone interne* et la *zone asymptotique*, alors il faudra juste enlever la contribution de la *zone intermédiaire* et changer l'intervalle de variation de n'_1 et

n'_2 qui vérifie à présent les inégalités $n'_1 \in [1, N]$ et $n'_2 > N$. En projetant à gauche la relation (B.20) par les fonctions de base respectives des zones *interne* et *asymptotique*, on obtient après quelques développements les deux équations suivantes à deux inconnues

$$(E_j - E)b_{j,\Gamma}^{L,M}(E) + \sum_{\Gamma'} f_{N_{l'_2}, l'_2}^{\Gamma'\Gamma}(E) J_{N_{l'_2}-1, N_{l'_2}}^{\Gamma'} \Upsilon_j^{\Gamma'}, \quad (\text{B.38})$$

et

$$\sum_j b_{j,\Gamma}^{L,M}(E) \Upsilon_j^{\Gamma''} = f_{N_{l'_2}-1, l'_2}^{\Gamma''\Gamma}(E), \quad (\text{B.39})$$

avec

$$\begin{aligned} \Upsilon_j^{\Gamma'} &= \sum_{n_1=1}^{N_{l'_1}-1} \psi_{n_1, N_{l'_2}-1, j}^{l'_1, l'_2, L', M'} < S_{n_1, l'_1}^{\kappa} | \chi_{n'_1, l'_1}^{\kappa} > [1 + \epsilon \delta_{l'_1, l'_2} \delta_{n_1, N_{l'_2}-1}] \delta_{L, L'} \delta_{M, M'} \\ &\text{si } l'_1 \leq l'_2, \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

$$\Upsilon_j^{\Gamma'} = \delta_{L, L'} \delta_{M, M'} \sum_{n_1=1}^{N_{l'_1}-1} \psi_{N_{l'_2}-1, n_1, j}^{l'_2, l'_1, L', M'} < S_{n_1, l'_1}^{\kappa} | \chi_{n'_1, l'_1}^{\kappa} > \text{ si } l'_1 > l'_2. \quad (\text{B.41})$$

A partir de la relation (B.38), on peut écrire

$$b_{j,\Gamma}^{L,M}(E) = \sum_{\Gamma'} \frac{f_{N_{l'_2}, l'_2}^{\Gamma'\Gamma}(E) J_{N_{l'_2}-1, N_{l'_2}}^{\Gamma'} \Upsilon_j^{\Gamma'}}{(E_j - E)}. \quad (\text{B.42})$$

En substituant la relation (B.42) dans (B.39), on obtient

$$f_{N_{l'_2}-1, l'_2}^{\Gamma''\Gamma}(E) = \sum_{\Gamma'} K_{\Gamma'', \Gamma} J_{N_{l'_2}-1, N_{l'_2}}^{\Gamma'} f_{N_{l'_2}-1, l'_2}^{\Gamma'\Gamma}(E), \quad (\text{B.43})$$

où est $K_{\Gamma'', \Gamma}$ une matrice symétrique dont la taille est égale au nombre de voies considérées dans les calculs :

$$K_{\Gamma'', \Gamma} = \sum_j \frac{\Upsilon_j^{\Gamma''} \Upsilon_j^{\Gamma'}}{E - E_j} \quad (\text{B.44})$$

Si on remplace dans la relation (B.43) les coefficients $f_{N_{l'_2}-1, l'_2}^{\Gamma''\Gamma}(E)$ et $f_{N_{l'_2}-1, l'_2}^{\Gamma'\Gamma}(E)$ par leur expression définie en (B.36), on obtient un système d'équations dont les inconnues sont les éléments de matrice $T_{\Gamma\Gamma'}$:

$$[KRJR]_{\Gamma''\Gamma} = \sum_{\Gamma'} [KQJQ]_{\Gamma''\Gamma'} T_{\Gamma'\Gamma} \quad (\text{B.45})$$

avec

$$[KRJR]_{\Gamma''\Gamma} = [K_{\Gamma''\Gamma} R_{N_{l_2}, l_2}^\Gamma J_{N_{l_2}-1, N_{l_2}}^\Gamma - R_{N_{l_2}''-1, l_2}^{\Gamma''} \delta_{\Gamma''\Gamma}], \quad (\text{B.46})$$

et

$$[KQJQ]_{\Gamma''\Gamma'} = K_{\Gamma''\Gamma} Q_{N_{l_2}', l_2}^\Gamma J_{N_{l_2}'-1, N_{l_2}'}^{\Gamma'} - Q_{N_{l_2}'-1, l_2}^{\Gamma'} \delta_{\Gamma''\Gamma'}. \quad (\text{B.47})$$

Une fois le système (B.45) résolu, on détermine facilement les coefficients $b_{j,\Gamma}^{L,M}(E, \hat{k}_e)$ et $f_{n_2, l_2}^{\Gamma'\Gamma}(E, \hat{k}_e)$ en remplaçant les $T_{\Gamma\Gamma}$ dans les relations (B.42) et (B.36).

B.2.3 SCWF à trois régions

En projetant à gauche la relation (B.20) par les fonctions de base respectives des zones *interne*, *intermédiaire* et *asymptotique*, on obtient après quelques développements les trois équations suivantes à trois inconnues

$$(E_j - E) b_{j,\Gamma}^{LM}(E) + \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=N+1}^{N'} \sum_{l_1', l_2'} d_{n_1', N+1}^{l_1', l_2', L', M'}(E) g(n_1, n_2, l_1, l_2, L, M) = 0, \quad (\text{B.48})$$

$$\begin{aligned} \sum_j b_{j,\Gamma}^{LM}(E) K_1 + \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=N+1}^{N'} \sum_{l_1', l_2'} d_{n_1', N+1}^{l_1', l_2', L', M'}(E) K_2 \\ + \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=N'+1}^{\infty} \sum_{l_1', l_2'} \sum_{L', M'} f_{n_2', l_2'}^{\Gamma'\Gamma}(E) K_2 = 0, \end{aligned} \quad (\text{B.49})$$

$$\sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=N+1}^{N'} \sum_{l_1', l_2'} d_{n_1', N+1}^{l_1', l_2', L', M'}(E) R_2 + \sum_{n_1=1}^N \sum_{n_2=N'+1}^{\infty} \sum_{l_1', l_2'} \sum_{L', M'} f_{n_2', l_2'}^{\Gamma'\Gamma}(E) R_3 = 0 \quad (\text{B.50})$$

avec le facteur g qui est donné par

$$g = \langle \Psi_j^{L,M} | H - E | \Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M} \rangle. \quad (\text{B.51})$$

$$K_1 = \langle \Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M} | H - E | \Psi_j^{L,M} \rangle, \quad (\text{B.52})$$

avec $\tilde{n}_2 \in [N + 1, N']$ et

$$K_2 = \langle \Phi_{\tilde{n}_1, \tilde{n}_2}^{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2, L, M} | H - E | \Phi_{\tilde{n}'_1, \tilde{n}'_2}^{\tilde{l}'_1, \tilde{l}'_2, L', M'} \rangle, \quad (\text{B.53})$$

avec $\tilde{n}'_2 \in [N + 1, N']$, $\tilde{n}_2 \in [N + 1, N']$ qui peuvent aussi être bien calculés facilement. Les coefficients R_2 et R_3 sont du même type que K_1 et K_2 à la seule différence qu'ils font apparaître les fonctions de base de la zone *asymptotique*. Le calcul des coefficients K_1 , K_2 , R_2 , R_3 et g peuvent être fait facilement. La résolution du système algébrique nous donne les trois coefficients recherchés et par suite, l'expression de la fonction du simple continuum dans le cas où la correction de la zone *asymptotique* joue un rôle assez notable. Il est clair que cette méthode à trois régions est plus fastidieuse que celle à deux régions mais elle est plus réaliste et plus complète.

B.3 Construction des SCWF avec dépendance angulaire

D'après les calculs de Broad *et al.* [102] (utilisé par Fomouo pour calculer les sections efficaces totales de la photoionisation de He) dérivés dans le paragraphe précédent, la fonction d'onde à deux régions décrivant le simple continuum de l'hélium par la méthode de la matrice J à deux régions peut être déduite de la relation (B.20) et on obtient

$$\Theta_\Gamma(E, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \sum_{j=1}^{\dim j(L_f)} b_j^\Gamma(E) \phi_j^{L_f M_f}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) + \sum_{\Gamma'} \sum_{n'} f_{n'}^{\Gamma' \Gamma}(E) \Phi_{n'}^{\Gamma'}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \quad (\text{B.54})$$

où $b_j^\Gamma \equiv b_{j, \Gamma}^{LM}$ et $f_{n'}^{\Gamma' \Gamma} \equiv f_{n', \Gamma'}^{\Gamma' \Gamma}$. Cette relation fait apparaître une harmonique bipolaire qui est une base couplée des harmoniques sphériques. On peut remarquer que cette fonction d'onde ne contient pas la dépendance angulaire en impulsion $\hat{k}_e$ de l'électron éjecté. Comme ce travail fait appel uniquement aux distributions angulaires de la section efficace, il est donc impératif de corriger cette SCWF en dérivant les nouvelles fonctions SCWF avec dépendance angulaire en $\hat{k}_e$. Pour ce faire, il faut noter d'entrée de jeu que c'est la zone asymptotique qui fixe la voie dans la méthode de la matrice J. Ainsi, si nous traitons la zone asymptotique de la SCWF avec le produit symétrisé d'une fonction coulombienne et d'une

fonction d'état liée, on peut écrire

$$\begin{aligned} \Theta_{\Gamma}(E, \hat{k}_e, \vec{r}_2, \vec{r}_3) &= \sum_{j=1}^{dim j} b_j^{\Gamma}(E, \hat{k}_e) \phi_j^{L_f M_f}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) + \sum_{\nu' \lambda' \mu'} \sum_{n' l' m'} a_{n' l'}(k) \\ &\times \mathcal{A} \left(\frac{\chi_{\nu' \lambda'}(r_2)}{r_2} y_{\lambda' \mu'}(\hat{r}_2) y_{l' m'}(\hat{r}_3) y_{l' m'}^*(\hat{k}_e) \frac{S_{n' l'}(r_3)}{r_3} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

Notons qu'en terme d'harmoniques sphériques présentes dans la relation (B.55), nous sommes dans la base découplée. Passons ensuite de cette base découplée à la base couplée des harmoniques bipolaires, on a alors

$$y_{\lambda' \mu'}(\hat{r}_2) y_{l' m'}(\hat{r}_3) = \sum_{L_f M_f} \mathcal{C}_{\lambda' \mu' l' m'}^{L_f M_f} \Lambda_{\lambda' l'}^{L_f M_f}(\hat{r}_2, \hat{r}_3) \quad (\text{B.56})$$

où $\mathcal{C}_{\lambda' \mu' l' m'}^{L_f M_f}$ sont les coefficients de Clebsh Gordan. De plus, la définition d'un canal d'ionisation $\Gamma' \equiv (\nu', \lambda', l'; L_f M_f)$ nous permet de regrouper les indices et d'écrire

$$\begin{aligned} \Theta_{\Gamma}(E, \hat{k}_e, \vec{r}_2, \vec{r}_3) &= \sum_{j=1}^{dim j} b_j^{\Gamma}(E, \hat{k}_e) \phi_j^{L_f M_f}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \\ &+ \sum_{\Gamma'} \sum_{n'} \left\{ a_{n' l'}(E) \sum_{\mu' m'} \mathcal{C}_{\lambda' \mu' l' m'}^{L_f M_f} y_{l' m'}^*(\hat{k}_e) \right\} \Phi_{n'}^{\Gamma'}(\vec{r}_2, \vec{r}_3). \end{aligned} \quad (\text{B.57})$$

Immédiatement, en comparant les relations (B.54) et (B.57), il apparaît que le coefficient de couplage des voies dans la technique de la matrice J avec dépendance angulaire est donné par

$$f_{n'}^{\Gamma' \Gamma}(E, \hat{k}_e) = f_{n'}^{\Gamma' \Gamma}(E) \sum_{\mu' m'} \mathcal{C}_{\lambda' \mu' l' m'}^{L_f M_f} y_{l' m'}^*(\hat{k}_e) \quad (\text{B.58})$$

et le coefficient dans la zone interne

$$b_j^{\Gamma}(E, \hat{k}_e) = \sum_{\Gamma'} \frac{r_j^{\Gamma'}}{E - E_j} f_{n'}^{\Gamma' \Gamma}(E, \hat{k}_e) J_{N l' - 1, N l'}. \quad (\text{B.59})$$

Finalement, la fonction du SCWF utilisée pour décrire le processus $(e, 2e)$ est donnée par

$$\begin{aligned} \Theta_{\Gamma}(E, \hat{k}_e, \vec{r}_2, \vec{r}_3) &= \sum_{j=1}^{dimj} b_j^{\Gamma}(E, \hat{k}_e) \phi_j^{L_f M_f}(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \\ &+ \sum_{\Gamma'} \sum_{n'} f_{n'}^{\Gamma' \Gamma}(E, \hat{k}_e) \Phi_{n'}^{\Gamma'}(\vec{r}_2, \vec{r}_3). \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

Annexe C

Préconditionnement d'un système linéaire et Méthode des gradients biconjugués

C.1 Introduction

Un problème le plus souvent rencontré en analyse numérique est la résolution de systèmes linéaires du type

$$Ax = b \tag{C.1}$$

où A est une matrice régulière de dimension $N \times N$, x et b sont des vecteurs de dimension N . Notons que dans cet appendice, les vecteurs seront représentés par des lettres minuscules, les matrices par des lettres majuscules et les scalaires par des lettres grecques. Pour des système de petite taille, on a coutume d'utiliser des méthodes directes telles que la méthode du pivot de Gauss. Ces méthodes sont basées sur la décomposition LU de la matrice A . Cependant, en pratique, la taille du problème est souvent colossale faisant que cette approche directe devient très coûteux en terme de temps de calcul et de stockage. On est alors obligé de faire recours à d'autres méthodes dont l'efficacité dépendra de la structure de la matrice A . Notons que dans le cas des matrices creuses (tel est notre cas dans ce travail), l'utilisation des méthodes itératives qui ne font intervenir que des produits matrice-vecteur est très indiquée. Notons que ces méthodes là exploitent naturellement la structure spéciale des systèmes creux car un préconditionnement de ces systèmes est souvent nécessaire.

Les méthodes itératives sont des méthodes qui utilisent des approximations successives pour obtenir des solutions plus précises d'un système à chaque pas [146].

On distingue deux types de méthode itérative :

- Les méthodes itératives stationnaires où les itérations successives de la solution sont de la forme

$$x^{(k)} = Bx^{(k-1)} + C \quad (\text{C.2})$$

où ni B , ni C ne dépendent de l'ordre de l'itération (k). Les principales méthodes de ce type sont : la méthode de Jacobi, la méthode de Gauss-Seidel, la méthode SOR (successive overrelaxation method) et la SSOR (symmetric successive overrelaxation method) [147]. Ces méthodes sont très simples et s'implémentent facilement mais ne sont pas très efficaces en général. Elles diffèrent du choix du préconditionneur M et la convergence d'une méthode itérative beaucoup des propriétés spectrales de la nouvelle matrice $M^{-1}A$ améliorant celles de A . Nous allons faire une présentation succincte de cette notion dans la suite pour montrer ses nombreuses utilités dans la résolution des systèmes linéaires.

- Les méthodes itératives non-stationnaires qui diffèrent des précédentes par le fait que les calculs impliquent des informations qui changent à chaque itération. Typiquement, des constantes ont été calculées à partir de produits intérieurs de résidus ou d'autres vecteurs provenant de la méthode. Ces méthodes sont généralement beaucoup plus performantes que les méthodes stationnaires.

Parmi les méthodes non-stationnaires [146], on note :

- GMRES (generalized minimal residual method) qui requiert un stockage et un volume de calcul qui croît linéairement à chaque itération. Par conséquent, il est prohibitif d'utiliser la version complète de cette méthode et des redémarrages sont nécessaires, ce qui mène généralement à une convergence lente.
- QMR (quasi-minimal residual method)
- BiCG (biconjugate gradient method) qui génère deux séquences de vecteurs mutuellement orthogonales ou encore bi-orthogonales (elle est décrite en détail dans la suite de cet appendice). Elle utilise un

stockage limité et requiert une multiplication de vecteurs avec la matrice et sa transposée à chaque itération. Toutefois sa convergence peut être irrégulière.

- CGS (conjugate gradient squared method). C'est une variante du BiCG dont le taux de convergence devrait être idéalement doublé mais en pratique, la convergence peut être encore plus irrégulière que pour BiCG.
- BiCGSTAB-BiCGSTAB(l) (BiCG stabilized) qui sont d'autres variantes de BiCG et qui présentent des convergences beaucoup plus régulières.

Toutes ces méthodes s'appuient sur la méthode des sous-espaces de Krylov qui, dans certains cas (comme BiCG), se base sur le processus de Lanczos non-symétrique [148]. Dans une première partie, nous décrivons le principe de préconditionnement. Dans la seconde, nous exposons les méthodes de Krylov notamment le processus de Lanczos non-symétrique et nous montrons comment il mène à BiCG. Enfin, pour terminer, nous présentons une variante de BiCG qui est le BiCGSTAB.

Les systèmes linéaires que nous rencontrons dans notre travail font intervenir des matrices de grande taille ($N = 30000$) complexes qui possèdent une structure. Par exemple, toutes les trois matrices S , H_0 et U sont symétriques. De plus, les matrices S et H_0 ont la même structure dépendant de la valeur du moment angulaire total L . Ainsi, elles présentent la structure tri-bande et cactus si L vaut respectivement 0 et 1. Le cas $L = 2$ correspond à un mélange des couples de moments angulaires redondant et non redondant. Ainsi, il présente un mélange de ces deux structures suivant le bloc mis en jeu. Notons aussi que la matrice U est pleine tandis que les deux autres sont creuses. Mais il est très important de remarquer que les éléments extra structures tri-bande et cactus de la matrice U sont petits par rapport aux éléments appartenant à ces deux structures. C'est précisément cette remarque qui va nous amener à un préconditionnement du système et puis suivra l'utilisation d'une des méthode de Krylov notamment la méthode du BiCGSTAB pour résoudre ces systèmes linéaires de taille gigantesque.

C.2 Préconditionnement d'un système linéaire

C.2.1 Généralités

On peut montrer que le taux de convergence d'une méthode itérative dépend des propriétés spectrales de la matrice A du système linéaire [146]. Par conséquent, il est intéressant de transformer le système initial en un autre possédant la même solution mais dont les propriétés spectrales sont plus favorables. Un preconditionneur est une matrice M qui effectue une telle transformation.

Etant donné une matrice M inversible d'ordre N , le système

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (\text{C.3})$$

admet la même solution que le système (C.1) mais les propriétés spectrales de $M^{-1}A$ sont plus favorables. On dira que M est la matrice de preconditionnement associé au système preconditionné (C.3). Dans la pratique, on ne calcule pas la matrice inverse M^{-1} . En effet, dans les méthodes itératives de type Krylov, on a seulement besoin de connaître le produit matrice-vecteur. Lorsque le système est preconditionné, l'opération matrice-vecteur correspond à

$$w = M^{-1}Ax \Leftrightarrow Mw = Ax \quad (\text{C.4})$$

Par conséquent, il faut pouvoir résoudre facilement le système

$$Mw = c. \quad (\text{C.5})$$

Comment choisir le preconditionneur est une question fort délicate qui, à ce jour, n'a pas de solution universelle. Par contre, on peut donner quelques idées directives qui nous guideront dans l'élaboration d'un bon preconditionneur. Il y a deux cas extrêmes :

- $M = A$, dans ce cas, la convergence est immédiate mais peu utile car aussi difficile à résoudre que le problème original.
- $M = I$, dans ce cas, on ne fait rien. La convergence n'est pas accélérée.

De ces observations, on retiendra les faits suivants :

1. M doit être le plus près possible de A , c'est-à-dire que

- $Sp(M^{-1}A) \cong Sp(I)$
 - $\|M^{-1}A - I\| < \varepsilon$
2. On doit respecter la structure de la matrice, par exemple, le fait que A soit symétrique.
 3. Le stockage de M ne devrait pas excéder de beaucoup celui de A .
 4. D'après l'étude de la convergence des méthodes itératives de type Krylov, un bon choix d'un préconditionneur M doit satisfaire les conditions :
 - La matrice $M^{-1}A$ doit être presque normale,
 - Les valeurs propres de $M^{-1}A$ doivent être regroupées.

Préconditionnement à gauche

On dira que M est une matrice de preconditionnement à gauche si le système original (C.1) est transformé sous la forme

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (\text{C.6})$$

Préconditionnement à droite

De manière analogue, on dira que M est une matrice de preconditionnement à droite si le système (C.1) est transformé sous la forme

$$AM^{-1}y = b. \quad (\text{C.7})$$

Dans ce cas, la solution s'obtient en posant

$$x = M^{-1}y \quad (\text{C.8})$$

Préconditionnement à gauche et à droite

En principe, on peut combiner ces deux types de preconditionnement. Il s'agira d'avoir deux matrices inversibles M_G et M_D et d'écrire le système (C.1) sous la forme

$$M_G^{-1}AM_D^{-1}y = M_G^{-1}b. \quad (\text{C.9})$$

En général, on utilise un preconditionnement à gauche. Mais il y a un cas très important où ce type de preconditionnement est nécessaire.

Supposons que la matrice A soit symétrique et définie-positive. Dans cette éventualité, on voudrait utiliser la méthode du gradient conjugué qui est adaptée à cette situation. Mais, le choix d'un preconditionnement à gauche détruit cette propriété de symétrie. Dans ce cas, on construit de la manière suivante le preconditionneur. Soit M une matrice symétrique et définie-positive. Cette matrice admet une factorisation de Cholesky

$$M = CC^t. \quad (\text{C.10})$$

Le système original peut s'écrire

$$Ax = b \Leftrightarrow C^{-1}AC^{-t}C^tx = C^{-1}b \quad (\text{C.11})$$

$$\Leftrightarrow C^{-1}AC^{-t}y = C^{-1}b \quad (\text{C.12})$$

avec $y = C^tx$ ou encore $x = C^{-t}y$. Or il faut noter que la nouvelle matrice $C^{-1}AC^{-t}$ est aussi symétrique et définie-positive. De plus

$$C^{-1}AC^{-t} \sim C^{-1}C^{-t}A = M^{-1}A. \quad (\text{C.13})$$

Donc les spectres sont égaux :

$$Sp(C^{-1}AC^{-t}) = Sp(M^{-1}A). \quad (\text{C.14})$$

Selon le type de preconditionnement, il en existe deux sortes : le preconditionnement par les méthodes itératives et le preconditionnement par factorisation incomplète. Nous allons seulement présenter le premier type puisque la méthode utilisée dans ce travail qui est le BiCGSTAB est une méthode itérative.

C.2.2 Préconditionnement par les méthodes itératives

Supposons que la matrice A admet la décomposition suivante

$$A = M - N, \quad (\text{C.15})$$

où M est inversible. Le système linéaire $Ax = b$ peut s'écrire :

$$Mx = Nx + b \Leftrightarrow x = M^{-1}Nx + M^{-1}b \quad (\text{C.16})$$

$$\Leftrightarrow (I - M^{-1}N)x = M^{-1}b. \quad (\text{C.17})$$

Les méthodes itératives classiques telles que les méthodes de Jacobi, Gauss-Seidel et relaxation sont toutes basées sur ce type de décomposition et s'écrivent :

$$x_{k+1} = M^{-1}Nx_k + M^{-1}b \quad (\text{C.18})$$

ou encore

$$M(x_{k+1} - x_k) = b - Ax_k. \quad (\text{C.19})$$

Or $M^{-1}N = I - M^{-1}A$, par conséquent, ceci signifie qu'une méthode itérative classique converge vers la solution d'un problème preconditionné de la forme

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b. \quad (\text{C.20})$$

Autrement dit, la matrice M est un preconditionnement du système linéaire $Ax = b$.

Voici une liste de preconditionnement basée sur cette idée. On utilisera la décomposition $A = D - E - F$ telle que définie dans le chapitre sur les méthodes d'itérations classiques où D est une matrice diagonale constituée des éléments diagonaux de A , $-E = L$ qui est une matrice triangulaire formée des éléments de la partie triangulaire inférieure de A , et enfin $-F = U$ est une matrice triangulaire composée des éléments de la partie supérieure de A . Ainsi, si on a suivant les types de preconditionnement, les méthodes itératives de

1. Jacobi où $M = D$.
2. SOR où $M = D - wE$. On obtient le preconditionnement Gauss-Seidel avec $w = 1$. En général, si la matrice A est symétrique, la matrice M ne l'est pas. Pour cette raison, on préfère utiliser le preconditionnement SSOR.
3. SSOR où $M = (D - wE)D^{-1}(D - wF)$. On notera que, si A est symétrique, la matrice M l'est aussi car $F = E^t$. Donc, ce type de preconditionnement serait adapté à l'algorithme du gradient conjugué.
4. SGS : Ce type de preconditionnement est obtenu à partir de SSOR en posant $w = 1$.

Sous forme de remarques, notons que l'inversion de M se fait uniquement par des descentes et remontées triangulaires. Le preconditionnement SSOR peut aussi être interprété comme une étape de l'algorithme de relaxation dans le sens ordinaire suivi d'une étape de relaxation dans le sens contraire, i.e. $x_n, x_{n-1}, \dots, x_1$.

C.3 Méthodes des sous-espaces de Krylov

C.3.1 Introduction

Dans cette section, on va s'intéresser à des méthodes itératives du système linéaire de dimension N donné par la relation (C.1) où A est une matrice carré inversible, utilisant des projections dans des sous espaces particuliers, les espaces de Krylov. Les espaces de Krylov [149, 150, 151, 152, 153] permettent de construire, par de simples opérations de type produit matrice-vecteur, produit scalaire ou combinaison linéaire de vecteurs, des sous-espaces affines très pertinents pour chercher des approximations de la solution du système linéaire (C.1). Les méthodes que l'on va décrire peuvent s'appliquer à des matrices réelles ou complexes. Pour simplifier la présentation, on se placera dans le cas réel à priori sachant que les adaptations pour le cas de systèmes complexes ne présentent pas de difficultés.

C.3.2 Espaces de Krylov

Si x_0 est une valeur de départ approchée de la solution de l'équation (C.1), le vecteur résidu associé à x_0 vaut $g_0 = Ax_0 - b$.

Définition C.3.1. On appelle espace de Krylov d'ordre p , noté $\mathcal{K}_p$, l'espace vectoriel généré par g_0 et ses $p - 1$ produits par A : $\mathcal{K}_p = \text{Vect}\{g_0, Ag_0, A^2g_0, \dots, A^{p-1}g_0\}$.

Les espaces de Krylov forment évidemment une famille croissante de sous-espaces, nécessairement bornée. On va noter $p_{\max}$, la dimension maximale des espaces de Krylov, pour un x_0 donné.

Lemme C.3.1. Si $A^p g_0 \in \mathcal{K}_p$ alors $A^{p+q} g_0 \in \mathcal{K}_p$ pour tout $q > 0$.

La démonstration de ce théorème peut se faire par récurrence et très facilement.

Lemme C.3.2. La suite des espaces de Krylov $\mathcal{K}_p$ est strictement croissante de 1 à $p_{\max}$ puis stagne à partir de $p = p_{\max}$.

Ceci conduit au théorème fondamental suivant.

Théoreme C.3.1. La solution du système linéaire $Ax = b$ appartient à l'espace affine $x_0 + \mathcal{K}_{p_{\max}}$.

Les équivalences ci-dessus montrent aussi que, si $x \in x_0 + \mathcal{K}_p$, alors les vecteurs $(g_0, Ag_0, A^2g_0, \dots, A^p g_0)$ sont linéairement dépendants. D'après le lemme (C.3.2), cela signifie que la suite des espaces $\mathcal{K}_p$ a atteint son point de stagnation et donc $\mathcal{K}_p = \mathcal{K}_{p_{max}}$.

Construction de la base d'Arnoldi et de la base de Lanczos

En pratique, construire les espaces de Krylov revient à en déterminer des bases. La base naturelle $(g_0, Ag_0, A^2g_0, \dots, A^{p-1}g_0)$ ne peut en aucun cas être utilisée, du fait de sa dégénérescence numérique. En effet, si la matrice A est diagonalisable, avec m valeurs propres distinctes $\lambda_1, \dots, \lambda_m$, alors $g_0 = \sum_{i=1}^m \alpha_i v_i$ et $A^p g_0 = \sum_{i=1}^m \alpha_i \lambda_i^p v_i$. La suite $A^p g_0$ se comporte donc comme $\alpha_{max} \lambda_{max}^p v_{max}$, si λ_{max} est la plus grande valeur propre. Numériquement, dès que le facteur $\left(\frac{\alpha_{max}}{\alpha_i}\right) \left(\frac{\lambda_{max}}{\lambda_i}\right)^p$ dépasse l'ordre de grandeur 10^r , où r est le nombre de chiffres significatifs de la représentation des réels en machine, le terme $\alpha_i \lambda_i^p v_i$ disparaît complètement. Ce qui arrive très vite en pratique. Pour un rapport de 10 entre les valeurs propres, il suffit de 16 itérations pour la représentation classique des nombres réels en 64 bits. Les vecteurs $A^p g_0$ deviennent donc très rapidement colinéaires numériquement. On peut démontrer aisément le même phénomène pour n'importe quelle matrice, en utilisant la mise sous forme de Jordan. Par ailleurs, selon que les normes des valeurs propres sont inférieures ou supérieures à 1, les termes $\alpha_i \lambda_i^p v_i$ deviennent trop petits ou trop grands pour être représentables.

La solution pour éviter la dégénérescence numérique de la base naturelle de l'espace de Krylov consiste à mettre en oeuvre une procédure d'orthonormalisation. La base d'Arnoldi est ainsi construite par application de la méthode d'orthonormalisation de Gram-Schmidt modifiée aux vecteurs obtenus par produits successifs par la matrice, pour le produit scalaire euclidien.

- Initialisation de la base d'Arnoldi

$$\begin{aligned} g_0 &= A \times x_0 - b \\ v_1 &= \frac{g_0}{\|g_0\|} \end{aligned} \tag{C.21}$$

- Construction du vecteur numéro $j + 1$ de la base d'Arnoldi

$$\begin{aligned}
w &= A \times v_j \\
\textbf{for } i &= 1 \textbf{ to } j \textbf{ do} \\
\alpha_i &= (w.v_i) \\
w &= w - \alpha_i v_i \\
\textbf{end for} \\
v_{j+1} &= \frac{w}{\|w\|}
\end{aligned} \tag{C.22}$$

Si on note h_{ij} le coefficient d'orthogonalisation de Av_j par rapport à v_i et h_{j+1j} , la norme du vecteur w obtenu par orthogonalisation du vecteur Av_j par rapport aux vecteurs v_i , les formules de construction de la base d'Arnoldi s'écrivent :

$$Av_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{ij} v_i. \tag{C.23}$$

Soit V_p , la matrice rectangulaire à n lignes et à p colonnes, dont les colonnes sont les p premiers vecteurs de la base d'Arnoldi, alors, l'orthonormalité des vecteurs s'écrit matriciellement :

$$V_p^t V_p = I_p. \tag{C.24}$$

De même, l'équation (C.23) définissant les vecteurs d'Arnoldi s'écrit :

$$AV_p = V_{p+1} H_{p+1p} \tag{C.25}$$

où la matrice H_{p+1p} est une matrice à $p + 1$ lignes et p colonnes dont les coefficients h_{ij} sont les coefficients d'orthonormalisation de l'équation (C.23), pour $i \leq j + 1$, les autres coefficients étant nuls.

$$H_{p+1p} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \vdots & \vdots & h_{1j} & \vdots & h_{1p} \\ h_{21} & h_{22} & \vdots & \vdots & h_{2j} & \vdots & h_{2p} \\ 0 & h_{32} & \vdots & \vdots & h_{3j} & \vdots & h_{3p} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & h_{j+1j} & \vdots & h_{j+1p} \\ \vdots & & & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & h_{p+1p} \end{bmatrix} \tag{C.26}$$

Le bloc diagonal de H_{p+1p} est une matrice carrée de dimension p , notée h_p , qui, d'après les équations (C.24) et (C.25), vérifie :

$$H_p = V_p^t A V_p = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \vdots & \vdots & \vdots & h_{1p} \\ h_{21} & h_{22} & \vdots & \vdots & \vdots & h_{2p} \\ 0 & h_{32} & \vdots & \vdots & \vdots & h_{3p} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & h_{pp-1} & h_{pp} \end{bmatrix} \quad (\text{C.27})$$

Une telle matrice, dont la partie triangulaire inférieure est nulle, à l'exception des termes situés sur la première sous-diagonale, est dite de "forme Hessenberg" supérieure. L'équation (C.27) montre que la matrice H_p est la matrice, dans la base des vecteurs d'Arnoldi, de la projection dans l'espace de Krylov $\mathcal{K}_p$ de l'application linéaire associée à la matrice A .

D'après le cas particulier où la matrice A est symétrique, la matrice H_p l'est aussi d'après l'équation (C.27). Comme elle est aussi de forme Hessenberg supérieure, on en déduit immédiatement qu'elle est tri-diagonale symétrique. Ainsi, l'algorithme de construction de la base d'Arnoldi se simplifie alors énormément, puisque l'on sait que les coefficients h_{ij} sont nuls, si $i < j - 1$ et que le coefficient h_{j-1j} est égal à h_{jj-1} , précédemment calculé. L'algorithme de construction d'une base orthonormée des espaces de Krylov qui en découle s'appelle algorithme de Lanczos.

- Initialisation de la base de Lanczos

$$\begin{aligned} g_0 &= A \times x_0 - b \\ v_1 &= \frac{g_0}{\|g_0\|} \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$

- Construction du vecteur numéro $j + 1$ de la base de Lanczos

$$\begin{aligned} w &= A \times v_j \\ h_{jj-1} &= h_{j-1j} \\ w &= w - h_{j-1j} v_{j-1} \\ h_{jj} &= \|w\| \\ v_{j+1} &= \frac{w}{\|h_{j+1j}\|} \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

L'algorithme de Lanczos possède la propriété remarquable de permettre la construction d'une base orthonormée des espaces de Krylov à l'aide d'une récurrence courte. Il suffit en effet de disposer des seuls vecteurs v_{j-1} et v_j pour pouvoir calculer v_{j+1} et le coût de calcul est indépendant du numéro de l'itération.

Principe de la méthode des sous-espaces de Krylov

Plusieurs méthodes itératives dont le but est de résoudre un système linéaire appartiennent à la classe des méthodes impliquant des sous-espaces de Krylov : elles produisent des approximations x_n de $A^{-1}b$ de la forme :

$$x_n \in x_0 + \mathcal{K}_n(r_0, A) \quad n = 1, 2, \dots \quad (\text{C.30})$$

Ici, $x_0 \in \mathcal{C}^N$ est le candidat initial pour la solution de (C.1), $r_0 = b - Ax_0$ est le vecteur résiduel correspondant et $\mathcal{K}_n(r_0, A)$ est le n -ième sous-espace de Krylov généré par r_0 et A :

$$\mathcal{K}_n(r_0, A) = \{\phi(A)r_0 | \phi \in \mathcal{P}_{n-1}\} \quad (\text{C.31})$$

où

$$\mathcal{P}_{n-1} = \{\phi(\lambda) \equiv \sigma_0 + \sigma_1\lambda + \dots + \sigma_n\lambda^n | \sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_n \in \mathcal{C}\} \quad (\text{C.32})$$

est l'ensemble des polynômes complexes de degré n . En particulier, le vecteur initial correspondant à la n -ième itération de x_n peut s'exprimer en termes de polynômes :

$$r_n = b - Ax_n = P_n(A)r_0 \quad (\text{C.33})$$

où

$$P_n \in \mathcal{P}_n, P_n(0) = 1. \quad (\text{C.34})$$

Comme le montre (C.33), le but, en élaborant une méthode impliquant des sous-espaces de Krylov, est de choisir à chaque pas le polynôme P_n tel que, dans un certain sens, $r_n \approx 0$.

Un choix possible est de minimiser une norme du résidu r_n :

$$\begin{aligned} \|r_n\| &= \min \|b - Ax\|, \quad x \in x_0 + \mathcal{K}_n(r_0, A) \\ &= \min \|P(A)r_0\|, \quad P \in \mathcal{P}_n, P_0 = 1 \end{aligned} \quad (\text{C.35})$$

$\|\cdot\|$ est une norme vectorielle sur $\mathcal{C}^N$ qui peut éventuellement dépendre de l'itération n .

Une autre option est d'imposer que le résidu satisfasse une condition de type Galerkin :

$$s^H r_n = 0 \quad \forall s \in \mathcal{S}_n \quad (\text{C.36})$$

où $\mathcal{S}_n \subset \mathcal{C}^N$ est un sous-espace de dimension n et s^H est le complexe conjugué transposé de s .

C.3.3 Processus de Lanczos classique et BiCG

Soit $A \in \mathcal{C}^{N \times N}$ et posons $v_0, w_0 \in \mathcal{C}^N$ deux vecteurs non-nuls arbitraires. En partant de v_0 et w_0 , l'algorithme classique de Lanczos génère deux séquences de vecteurs $\{v_j\}$ et $\{w_j\}$ pour $j = 1, 2, \dots$ telles que, pour tout n ,

$$\begin{aligned} \text{span}\{v_0, v_1, \dots, v_n\} &= \mathcal{K}_{n+1}(v_0, A) \\ \text{span}\{w_0, w_1, \dots, w_n\} &= \mathcal{K}_{n+1}(w_0, A^T) \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

et que les deux séquences soient biorthogonales i.e. :

$$\begin{aligned} w_j^T v_k &= 0 \quad \text{si } j \neq k \\ &= \delta_k \neq 0 \quad \text{si } j = k \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

pour tout $j, k = 0, 1, \dots, n$.

L'algorithme proprement dit est le suivant :

choisir $v_0, w_0 \in \mathcal{C}^N$ avec $v_0, w_0 \neq 0$;

$v_{-1} = w_{-1} = 0$; $\delta_{-1} = 1$;

pour $n = 0, 1, \dots$

$$\begin{aligned} \delta_n &= w_n^T v_n; \\ \text{si } \delta_n &= 0, \text{ alors stop;} \\ \alpha_n &= \frac{w_n^T A v_n}{\delta_n}; \\ \beta_n &= \frac{\delta_n}{\delta_{n-1}}; \\ v_{n+1} &= A v_n - v_n \alpha_n - v_{n-1} \beta_n; \\ w_{n+1} &= A^T w_n - w_n \alpha_n - w_{n-1} \beta_n; \end{aligned}$$

fin

En pratique, on utilise une version normalisée des récurrences dans le but d'éviter des nombres trop grands ou trop petits. Un bon choix est d'imposer aux vecteurs de Lanczos une longueur l :

$$\|v_n\| = \|w_n\| = l \text{ pour tout } n. \quad (\text{C.39})$$

Les relations de récurrence de cet algorithme pour tous les vecteurs $\{v_j\}_{j=0}^{n+1}$ et $\{w_j\}_{j=0}^{n+1}$ peuvent être écrites sous une forme matricielle plus compacte :

$$\begin{aligned} AV_n &= V_n T_n + [0 \dots 0 v_{n+1}] \\ A^T W_n &= W_n T_n + [0 \dots 0 w_{n+1}] \end{aligned} \quad (\text{C.40})$$

où

$$V_n = [v_0 v_1 \dots v_n] \text{ et } W_n = [w_0 w_1 \dots w_n] \quad (\text{C.41})$$

sont des matrices dont les colonnes sont les vecteurs de Lanczos, et

$$T_n = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & & \dots & 0 \\ 1 & \alpha_1 & \ddots & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_n \\ 0 & \dots & & 1 & \alpha_n \end{bmatrix} \quad (\text{C.42})$$

est une matrice tridiagonale $(n+1) \times (n+1)$ dont les entrées sont calculées par l'algorithme.

Revenons maintenant au système linéaire $Ax = b$ avec $A \in \mathcal{C}^{N \times N}$, que nous souhaitons résoudre en calculant des solutions approchées de la forme :

$$x_n \in x_0 + \mathcal{K}_n(r_0, A) \text{ avec } n = 1, 2, \dots, \quad (\text{C.43})$$

où $x_0 \in \mathcal{C}^N$ est un candidat initial arbitraire pour (C.1) et $r_0 = b - Ax_0$, le vecteur résiduel associé. D'une manière générale, nous notons le vecteur résiduel de l'itération $n+1$:

$$r_{n+1} = b - Ax_{n+1}. \quad (\text{C.44})$$

Choisissons maintenant $v_0 = r_0$ et $w_0 \in \mathcal{C}^N$ arbitraire non-nul comme vecteurs de démarrage pour l'algorithme de Lanczos. Avec ce choix particulier :

$$\text{span}\{v_j\}_{j=0}^n = \mathcal{K}_{n+1}(r_0, A). \quad (\text{C.45})$$

Par conséquent, en utilisant la matrice V_n définie en (C.41), les solutions approchées (C.43) peuvent s'écrire :

$$x_n = x_0 + V_n z_n \text{ avec } z_n \in \mathcal{C}^{n+1}. \quad (\text{C.46})$$

Il nous reste à sélectionner le vecteur z_n . Un choix parmi tant d'autres consiste à prendre pour z_n la solution du système linéaire

$$T_n z_n = e_1 \text{ avec } e_1 = [1 \dots 0]^T \in \mathcal{R}^{n+1}. \quad (\text{C.47})$$

Pour motiver ce choix, nous remarquons que par (C.40), (C.44) et le choix fait pour v_0 , le vecteur résiduel correspondant à n'importe quelle itération satisfait :

$$r_{n+1} = -(z_n)_n v_{n+1} \quad (\text{C.48})$$

où $(z_n)_n$ est la première composante du vecteur z_n . On remarque que v_n , et par conséquent le vecteur résiduel r_{n+1} , satisfait à une condition de type Galerkin. En effet, vu les propriétés des vecteurs générés par l'algorithme de Lanczos, on a :

$$s^H r_n = 0 \text{ pour tout } s \in \mathcal{S}_n \quad (\text{C.49})$$

où

$$\mathcal{S}_n = \{s = \bar{w} | w \in \mathcal{K}_n(w_0, A^T)\}. \quad (\text{C.50})$$

On génère de cette manière une série de solutions approchées x_n , qui, en principe, convergent vers la solution exacte du problème. Cet algorithme s'appelle l'algorithme du gradient biconjugué (BiCG). Il se formule de la manière suivante où $(x, y) = x^H y$

choisir x_0 candidat initial arbitraire ;
 $r_0 = b - Ax_0$;
 choisir $\hat{r}_0$ vecteur arbitraire tel que
 $(\hat{r}_0, r_0) \neq 0$ par exemple $\hat{r}_0 = r_0$;
 $\rho_0 = 1$;
 $p_0 = \hat{p}_0 = 0$;
 pour $i = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned}
\rho_i &= (\hat{r}_{i-1}, r_{i-1}); \\
\beta_i &= \frac{\rho_i}{\rho_{i-1}}; \\
p_i &= r_{i-1} + \beta_i p_{i-1}; \\
\hat{p}_i &= \hat{r}_{i-1} + \beta_i \hat{p}_{i-1}; \\
v_i &= Ap_i; \\
\alpha_i &= \frac{\rho_i}{(\hat{p}_i, v_i)}; \\
x_i &= x_{i-1} + \alpha_i p_i; \\
\text{si } x_i &\text{ est suffisamment précis alors quitter;} \\
r_i &= r_{i-1} - \alpha_i v_i; \\
\hat{r}_i &= \hat{r}_{i-1} - \alpha_i A^T \hat{p}_i;
\end{aligned}$$

fin.

C.3.4 BiCGSTAB

Le point faible de BiCG est que sa convergence est parfois erratique avec des oscillations du résidu r_n que l'on peut qualifier d'"anarchiques". Comme $r_n = P_n(A)r_0$, on en déduit que les problèmes proviennent de $P_n(A)$ qui peut être vu comme un "réducteur" agissant sur r_0 . Une possibilité pour améliorer le réducteur est de prendre

$$r_n = Q_n(A)P_n(A)r_0 \quad (\text{C.51})$$

avec

$$Q_n(x) = (1 - w_1 x)(1 - w_2 x) \dots (1 - w_n x) \quad (\text{C.52})$$

et de sélectionner les w_n pour qu'à la n -ième itération, ils minimisent r_n avec la norme 2. On arrive à cette manière à l'algorithme BiCGSTAB de H. Van Der Vorst [154]. Il se formule de la manière suivante :

choisir x_0 candidat initial arbitraire ;
 $r_0 = b - Ax_0$;
 choisir $\hat{r}_0$ vecteur arbitraire tel que
 $(\hat{r}_0, r_0) \neq 0$ par exemple $\hat{r}_0 = r_0$;
 $\rho_0 = \alpha = w_0 = 1$;
 $p_0 = v_0 = 0$;

pour $i = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned}
 \rho_i &= (\hat{r}_{i-1}, r_{i-1}); \\
 \beta &= \frac{\rho_i \alpha}{\rho_{i-1} w_{i-1}}; \\
 p_i &= r_{i-1} + \beta p_{i-1}; \\
 \hat{p}_i &= \hat{r}_{i-1} + \beta(\hat{p}_{i-1} - w_{i-1} v_{i-1}); \\
 v_i &= A p_i; \\
 \alpha &= \frac{\rho_i}{(\hat{r}_0, v_i)}; \\
 s &= r_{i-1} - \alpha v_i; \\
 t &= A s; \\
 x_i &= x_{i-1} + \alpha p_i + w_i s; \\
 &\text{si } x_i \text{ est suffisamment précis alors quitter;} \\
 r_i &= s - w_i t;
 \end{aligned}$$

fin.

Gutnecht a proposé une version améliorée de BiCGSTAB : le BiCGSTAB2 [155], qui elle-même a été généralisée par Sleijpen : le BiCGSTAB(l) [156]. Ce domaine fait l'objet de nombreuses recherches. Les résultats excellents fournis par BiCGSTAB avec un préconditionneur nous ont conduits à ne pas essayer d'autres méthodes.

Annexe D

Tests de validation des résultats du premier et du second Born

D.1 Introduction

Dans cette annexe, nous présentons succinctement les différents tests analytiques et numériques qui ont permis de valider les résultats obtenus par notre modèle pour les processus d'ionisation de l'atome d'hélium par impact électronique dans la première et la seconde approximation de Born. Nous allons d'abord étudier la convergence de l'intégrale radiale de collision à l'aide de plusieurs méthodes. Ensuite, nous présenterons les tests qui ont permis de valider la stabilité de notre code numérique pour l'évaluation des sections efficaces du processus $(e, 2e)$ dans l'approximation de Born. Nous achevons cette partie par de nombreux tests qui garantissent la stabilité de notre mise en oeuvre du code pour le calcul du second Born dudit processus.

D.2 Méthodes numériques d'évaluation des intégrales radiales

Les intégrales radiales (6.27) et (6.28) contenant deux fonctions sturmiennes et une fonction de Bessel sphérique sont en général très difficiles à évaluer exactement car les fonctions de Bessel oscillent beaucoup pour la gamme des paramètres considérées. Ces intégrales radiales sont utilisées dans les calculs des éléments de matrice du processus $(e, 2e)$. Pour évaluer ces intégrales, nous faisons appel à plusieurs techniques telles que

la quadrature de Gauss-Laguerre associée à un prolongement analytique, la quadrature de Gauss-Laguerre associée aux approximants de Padé, la méthode de Butcher et enfin la méthode de Filon.

D.2.1 Quadrature de Gauss-Laguerre associée au prolongement analytique

En général les méthodes de quadrature de Gauss-Laguerre sont réputées pour leur grande précision, pour leur faible temps de calcul et aussi pour leur stabilité numérique. Cette méthode est basée sur la formule [49]

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx = \sum_{i=1}^m \omega_i f(x_i) + R_m, \quad (\text{D.1})$$

où les abscisses x_i sont les i^{ieme} zeros des polynômes de Laguerre $L_n(x) \equiv L_n^0(x)$. Les poids ω_i et le reste R_m sont données par

$$\omega_i = \frac{(m!)^2 x_i}{(m+1)^2 (L_{m+1}(x_i))^2}, \quad R_m = \frac{(m!)^2}{(2m)!} f^{(2m)}(\xi), \quad 0 \leq \xi < \infty. \quad (\text{D.2})$$

Il est évident que lorsque $f(x)$ est un polynôme, le reste R_m est identiquement nul si le nombre de points d'intégration m est supérieur à la moitié du degré du polynôme $f(x)$. Ainsi, dans ce cas d'espèce, la formule de cette quadrature est exacte.

Utilisant cette formule de quadrature (D.1) pour la première intégrale radiale (6.27), on obtient

$$\langle S_{n_j l_j}^{\kappa_j} | S_{n_i l_i}^{\kappa_i} \rangle = \frac{1}{\kappa_j + \kappa_i} \int_0^\infty dx e^{-x} T_{n_j l_j}^{\kappa_j} \left(\frac{x}{\kappa_j + \kappa_i} \right) T_{n_i l_i}^{\kappa_i} \left(\frac{x}{\kappa_j + \kappa_i} \right), \quad (\text{D.3})$$

et

$$\langle S_{n_j l_j}^{\kappa_j} | S_{n_i l_i}^{\kappa_i} \rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{\omega}_i T_{n_j l_j}^{\kappa_j}(\tilde{x}_i) T_{n_i l_i}^{\kappa_i}(\tilde{x}_i), \quad \tilde{\omega}_i = \frac{\omega_i}{\kappa_j + \kappa_i}, \quad \tilde{x}_i = \frac{x_i}{\kappa_j + \kappa_i}. \quad (\text{D.4})$$

où le polynôme $T_{nl}^\kappa(r)$ de degré n est donné par

$$S_{nl}^\kappa(r) = e^{-\kappa r} T_{nl}^\kappa(r). \quad (\text{D.5})$$

Pour que cette intégrale soit évaluée exactement, le nombre de points d'intégration N doit être supérieur à la moitié du degré du polynôme

$P(x) = T_{n_j l_j}^{\kappa_j}(x) T_{n_i l_i}^{\kappa_i}(x)$ c'est-à-dire $(n_i + n_j)/2$. Le fait que $T_{nl}^{\kappa}(r)$ soit un polynôme contribue à la grande précision de la quadrature de Gauss-Laguerre. De plus, le temps de calcul de cette méthode est très faible et ceci pour deux raisons. Premièrement, les abscisses et les poids sont calculés avec une grande précision et stockés pour usage futur par le code principale. Deuxièmement, cette méthode permet aussi le calcul les éléments de matrice correspondants à des couples de paramètres non linéaires différents.

Quant à la seconde intégrale (6.28), nous avons utilisé le développement en ondes planes de la fonction de Bessel sphérique

$$j_l(Kr) = 2\mathcal{R}_e \left(\sum_{\lambda=0}^l \frac{\alpha_{\lambda l}}{2(Kr)^{\lambda+1}} e^{-iKr} \right), \quad (\text{D.6})$$

avec

$$\alpha_{\lambda l} = \frac{(-1)^{\lambda+l+1} i^{\lambda-l-1} (\lambda+l)!}{\lambda! (l-\lambda)! 2^\lambda}, \quad (\text{D.7})$$

et nous avons fait un prolongement analytique de la quadrature de Gauss-Laguerre dans le plan complexe

$$I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i) = \mathcal{R}_e \left\{ \sum_{j=1}^{\bar{N}} \bar{\omega}_j T_{n_j l_j}^{\kappa_j}(\bar{x}_j) T_{n_i l_i}^{\kappa_i}(\bar{x}_j) \left(\sum_{\lambda=0}^l \frac{\alpha_{\lambda, l}}{(K\bar{x}_j)^{\lambda+1}} \right) \right\}, \quad (\text{D.8})$$

avec

$$\bar{N} > (n_j + n_i - \lambda - 1)/2, \quad \bar{\omega}_j = \frac{\omega_j}{\kappa_j + \kappa_i + iK}, \quad \bar{x}_j = \frac{x_j}{\kappa_j + \kappa_i + iK}. \quad (\text{D.9})$$

En général, cette méthode est précise pour de grand transfert d'impulsion K . Pour être plus précis, cette méthode marche bien pour toutes les valeurs de K et pour $l = 0$. Lorsque l'indice de la fonction de Bessel sphérique l augmente, il y a un problème de convergence lorsque K est inférieur à 0.1 *u.a.*. Dans ces cas, nous utilisons le développement asymptotique de $j_l(Kr)$ donné par

$$j_l(Kr) = \sum_{n=0}^5 \tilde{\alpha}_{nl}(Kr)^{l+2n}, \quad (\text{D.10})$$

avec

$$\tilde{\alpha}_{nl} = \frac{(-1)^n}{2^n n! (1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1) \prod_{k=1}^n (2l+2k+1))}, \quad (\text{D.11})$$

et si nous substituons les relations (D.10) et (D.10) dans la seconde intégrale radiale, il vient que

$$I_{l_j, l, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i) = \sum_{n=0}^5 \tilde{\alpha}_{nl} \int_0^\infty dr S_{n_j l_j}^{\kappa_j}(r) S_{n_i l_i}^{\kappa_i}(r) (Kr)^{l+2n}. \quad (\text{D.12})$$

Cette intégrale est facile à évaluer via la quadrature de Gauss-Laguerre.

D.2.2 Quadrature de Gauss-Laguerre associée aux approximants de Padé

Le principe de la méthode est d'utiliser la décomposition de la fonction de Bessel sphérique sur la base sturmienne

$$j_l(Kr) = \sum_{n=l+1}^{\infty} a_{nl}(K) S_{nl}^{\kappa}(r). \quad (\text{D.13})$$

L'intégrale en question peut donc se réécrire sous la forme sous la forme d'une somme infinie

$$I_{l_j, l, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i) = \sum_{n=l+1}^{\infty} a_{nl}(K) \int_0^\infty dr S_{n_j l_j}^{\kappa_j}(r) S_{nl}^{\kappa}(r) S_{n_i l_i}^{\kappa_i}(r). \quad (\text{D.14})$$

L'intégrale contenant les trois sturmiennes dans la relation (D.14) est évaluée à l'aide de la quadrature de Gauss-Laguerre et la somme infinie se fait au moyen des approximants de Padé pour accélérer la convergence. Cette méthode est assez précise mais lourde car la propagation se faisant sur toute la matrice, il faudrait choisir un nombre de points minimal pour assurer la convergence de tous les éléments de la matrice. Or il peut arriver que ce nombre minimal soit très grand comparé au minimum qui permet d'assurer la convergence d'un élément de matrice précis. Donc le problème criant ici est un manque d'optimisation de la méthode. De plus, la fixation de ce nombre minimal de points demande plusieurs tests rigoureux dépendant des paramètres considérés.

D.2.3 Méthode d'intégration de Butcher

L'intégrale radiale dont il est question d'évaluer peut être mise sous la forme

$$I = \int_a^b f(x) dx. \quad (\text{D.15})$$

Soit $F(x)$ une primitive de la fonction $f(x)$, alors on a

$$I = F(b) - F(a), \quad (\text{D.16})$$

et il s'en suit que la dérivée par rapport à la variable x est donnée par

$$\frac{dI}{dx} = F'(b) - F'(a) = f(b) - f(a). \quad (\text{D.17})$$

Ainsi calculer l'intégrale I revient à résoudre l'équation différentielle du premier ordre (**D.17**). La méthode de Butcher s'inscrit dans cette ligne de résolution des équation différentielles et c'est plus précisément la méthode de Runge-Kutta du septième ordre. Dans notre cas, la fonction f est le produit de deux sturmiennes et la fonction de Bessel sphérique. Cette méthode est précise mais elle est lourde compte tenu de la propagation des sept éléments constituant la discrétisation de chaque intervalle.

D.2.4 Méthode d'intégration de Filon

La formule d'intégration de Filon est donnée par [49] par les deux intégrales suivantes

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{2n}} f(x) \cos(tx) dx &= h[\alpha(th)(f_{2n} \sin(tx_{2n}) - f_0 \sin(tx_0)) \\ &\quad + \beta(th)C_{2n} + \gamma(th)C_{2n-1} + \frac{2}{45}th^4 S'_{2n-1}] - R_n, \end{aligned} \quad (\text{D.18})$$

et

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{2n}} f(x) \sin(tx) dx &= h[\alpha(th)(f_0 \sin(tx_0) - f_{2n} \sin(tx_{2n})) \\ &\quad + \beta(th)S_{2n} + \gamma(th)S_{2n-1} + \frac{2}{45}th^4 C'_{2n-1}] - \tilde{R}_n, \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

où d'une part on a

$$C_{2n} = \sum_{i=0}^n f_{2i} \cos(tx_{2i}) - \frac{1}{2}[f_{2n} \cos(tx_{2n}) + f_0 \cos(tx_0)], \quad (\text{D.20})$$

$$C_{2n-1} = \sum_{i=1}^n f_{2i-1} \cos(tx_{2i-1}), \quad (\text{D.21})$$

$$S'_{2n-1} = \sum_{i=1}^n f_{2i-1}^{(3)} \sin(tx_{2i-1}), \quad (\text{D.22})$$

et le reste est donné par

$$R_n = \frac{1}{90} nh^5 f^{(4)}(\xi) + \mathcal{O}(th^7), \quad (\text{D.23})$$

avec

$$\alpha(\theta) = \frac{1}{\theta} + \frac{\sin(2\theta)}{2\theta^2} - \frac{2\sin^2(\theta)}{\theta^3}, \quad (\text{D.24})$$

$$\beta(\theta) = 2 \left(\frac{1 + \cos^2(\theta)}{\theta^2} - \frac{\sin(2\theta)}{\theta^3} \right), \quad (\text{D.25})$$

$$\gamma(\theta) = 4 \left(\frac{\sin(\theta)}{\theta^3} - \frac{\cos(\theta)}{\theta^2} \right), \quad (\text{D.26})$$

et d'autre part, on a

$$S_{2n} = \sum_{i=0}^n f_{2i} \sin(tx_{2i}) - \frac{1}{2} [f_{2n} \sin(tx_{2n} + f_0 \sin(tx_0))], \quad (\text{D.27})$$

$$S_{2n-1} = \sum_{i=1}^n f_{2i-1} \sin(tx_{2i-1}), \quad (\text{D.28})$$

$$C'_{2n-1} = \sum_{i=1}^n f_{2i-1}^{(3)} \cos(tx_{2i-1}). \quad (\text{D.29})$$

La méthode d'intégration de Filon peut être utilisée dans notre cas parce que l'on peut décomposer la fonction de Bessel sphérique en terme de fonctions cosinus et sinus

$$\begin{aligned} j_l(Kr) &= (Kr)^{-1} [P(n + \frac{1}{2}, Kr) \sin(Kr - n\pi/2) \\ &\quad - Q(n + \frac{1}{2}, Kr) \cos(Kr - n\pi/2)], \end{aligned} \quad (\text{D.30})$$

avec

$$P(n + \frac{1}{2}, Kr) = \sum_{i=0}^{n/2} (-1)^i (n + 1/2, 2i) (2Kr)^{-2k}, \quad (\text{D.31})$$

et

$$Q(n + \frac{1}{2}, Kr) = \sum_{i=0}^{(n-1)/2} (-1)^i (n + 1/2, 2i + 1) (2Kr)^{-2k-1}. \quad (\text{D.32})$$

Notons que dans tous nos tests de la méthode de Filon, nous utilisons un pas faible 10^{-5} qui rend les termes correctifs $\frac{2}{45}th^4C'_{2n-1}$ ou $\frac{2}{45}th^4S'_{2n-1}$, et le reste R_n négligeable dans le cas où la variation de fonction $f(x)$ est douce. Tel n'est pas toujours le cas dans les tests et c'est la raison pour laquelle on remarquera que pour certains paramètres, la méthode de Filon est la moins précise.

D.2.5 Comparaison des résultats des différentes méthodes

Les tables **D.2** et **D.4** nous permettent de comparer le calcul de l'intégrale radiale $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ à l'aide des quatre méthodes ci-dessus dans le cas où la condition $l \leq (l_j + l_i + 2)$. Il en ressort que pour la condition

TABLE D.1 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $K = 0.407$, $l_i = l_j = 0$, $l = 1$ et $nmax_i = nmax_j = 15$*

n_i (n_j)	QGLPA	QGLP
1 (1)	0.09983609064936	0.09983609064939
1 (2)	-0.09778324118772	-0.097783241187702
1 (3)	0.029899492210699	0.029899492210712
2 (2)	0.192550524828448	0.19255052482896
2 (3)	-0.153664740716667	-0.15366474071665
3 (3)	0.271705458682057	0.27170546684556
3 (4)	-0.196590665913019	-0.196590665913
5 (5)	0.370513055587404	0.37051305558742
5 (10)	-0.001016321076387	-0.00101632107638
10 (10)	0.252029648497378	0.25202964849705
10 (15)	-0.003442415174255	-0.00344241517369
15 (15)	0.009896381415760	0.00989638185694

$l \leq (l_j + l_i + 2)$, l'intégrale radiale ci-dessus converge bien et on a au moins 7 chiffres de recouvrement entre les différentes méthodes. Compte tenu de la lourdeur du code du calcul des éléments de matrice de transition, la méthode de quadrature de Gauss-Laguerre avec prolongement analytique est la mieux indiquée et la plus stable car elle est basée sur

TABLE D.2 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $K = 0.407$, $l_i = l_j = 0$, $l = 1$ et $nmax_i = nmax_j = 15$*

n_i (n_j)	Butcher	Filon
1 (1)	0.099836090648	0.09983609053
1 (2)	-0.097783241189	-0.09778324107
1 (3)	0.0298994922096	0.029899492174
2 (2)	0.1925505248274	0.192550524598
2 (3)	-0.1536647407177	-0.1536647405
3 (3)	0.2717054586810	0.271705458357
3 (4)	-0.1965906659141	-0.196590665678
5 (5)	0.3705130555864	0.370513055144
5 (10)	-0.00101632107744	-0.0010163210753
10 (10)	0.2520296484963	0.252029648196
10 (15)	-0.0034424151753	-0.003442415170
15 (15)	0.0098963814147	0.009896381403

le prolongement analytique d'une quadrature réel qui est exacte puisque l'intégrand horsmis le poids gaussien, est un polynôme.

D.2.6 Traitement analytique de l'intégrale radiale et le cas limite où le transfert d'impulsion K est faible

Notons que l'évaluation de cette intégrale radiale peut dans certains cas être faite analytiquement en utilisant les formules de [141] pour une intégrale contenant une exponentielle, une puissance positive de la variable radiale r et une fonction de Bessel sphérique

$$\int_0^\infty dr e^{-ar} j_l(br) r^{l+1} = \frac{(2b)^l \Gamma(l+1)}{(a^2 + b^2)^{l+1}}, \quad R_e(a) > |Im(b)|, \quad (\text{D.33})$$

$$\int_0^\infty dr e^{-ar} j_l(br) r^{l+2} = \frac{2a(2b)^l \Gamma(l+2)}{(a^2 + b^2)^{l+2}}, \quad R_e(a) > |Im(b)|. \quad (\text{D.34})$$

Si nous considérons certains paramètres tels que les calculs analytiques soient faisables au moyen des formules (D.33) et (D.34), nous avons les

TABLE D.3 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $K = 0.407$, $l_i = 1$, $l_j = 2$, $l = 3$ et $nmax_i = nmax_j = 15$*

n_i (n_j)	QGLPA	QGLP
1 (1)	0.0029370422306073	0.00293704223104
1 (2)	-0.003008444658642	-0.00300844465799
1 (3)	0.0013138586873928	0.00131385868825
2 (2)	0.0097001636197842	0.00970016362038
2 (3)	-0.0076705636496949	-0.0076705636489
3 (3)	0.02083440973976695	0.020834409740333
3 (4)	-0.014283002574265	-0.0142830025734
5 (5)	0.054892809832335	0.0548928098337
5 (10)	-7.0153679266463(-5)	-7.01536754592(-5)
10 (10)	0.135868889315538	0.13586888932275
10 (15)	-0.001328240066005	-0.0013282400528
15 (15)	0.069839222833725	0.0698392170508

TABLE D.4 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $K = 0.407$, $l_i = 1$, $l_j = 2$, $l = 3$ et $nmax_i = nmax_j = 15$*

n_i (n_j)	Butcher	Filon
1 (1)	0.0029370422310	0.0029370422240
1 (2)	-0.0030084446580	-0.0030084446530
1 (3)	0.0013138586882	0.00131385868639
2 (2)	0.0097001636204	0.00970016360864
2 (3)	-0.0076705636489	-0.0076705636384
3 (3)	0.0208344097403	0.0208344097096
3 (4)	-0.0142830025734	-0.0142830025486
5 (5)	0.0548928098337	0.0548928097663
5 (10)	-7.01536754579(-5)	-7.01536763472(-5)
10 (10)	0.1358688893223	0.1358688891653
10 (15)	-0.0013282400528	-0.0013282400522
15 (15)	0.0698392228542	0.0698392227673

matrices suivantes pour $l_i = l_j = l = 0$, $n_i = n_j = 1$

$$I_{000}^{11}(\kappa, K, \kappa) = \frac{(2\kappa)^4 K}{(4\kappa^2 + K^2)^2}, \quad (\text{D.35})$$

et pour $l_i = l_j = 0$ et $l = 1$, $n_i = n_j = 1$

$$I_{010}^{11}(\kappa, K, \kappa) = \frac{(2\kappa)^3 K}{(4\kappa^2 + K^2)^2}, \quad (\text{D.36})$$

et pour $l_i = l_j = 1$ et $l = 2$, $n_i = n_j = 2$

$$I_{121}^{22}(\kappa, K, \kappa) = \frac{128\kappa^6 K^2}{(4\kappa^2 + K^2)^4}, \quad (\text{D.37})$$

et pour $l_i = l_j = 1$, $l = 3$, $n_i = n_j = 2$

$$I_{131}^{22}(\kappa, K, \kappa) = \frac{64\kappa^5 K^3}{(4\kappa^2 + K^2)^4}, \quad (\text{D.38})$$

et pour $l_i = l_j = 2$ et $l = 4$, $n_i = n_j = 3$

$$I_{242}^{33}(\kappa, K, \kappa) = \frac{4096\kappa^8 K^4}{3(4\kappa^2 + K^2)^6}, \quad (\text{D.39})$$

et pour $l_i = l_j = 2$ et $l = 5$, $n_i = n_j = 3$

$$I_{252}^{33}(\kappa, K, \kappa) = \frac{2048\kappa^7 K^5}{3(4\kappa^2 + K^2)^6}, \quad (\text{D.40})$$

et enfin pour $l_i = l_j = 3$ et $l = 6$, $n_i = n_j = 4$

$$I_{363}^{44}(\kappa, K, \kappa) = \frac{16384\kappa^{10} K^6}{(4\kappa^2 + K^2)^8}. \quad (\text{D.41})$$

On remarque que quelques soient les paramètres utilisés, **cette intégrale radiale varie en K^l** où l est l'indice de la fonction de Bessel sphérique. En faisant varier le transfert d'impulsion K , les tables **D.5** à **D.11** permettent de comparer le calcul analytique au calcul numérique de la quadrature de Gauss-Laguerre avec prolongement analytique dans le plan complexe dans chaque cas pour 15 sturmiennes. On constate que la méthode de la quadrature de Gauss-Laguerre avec prolongement analytique converge bien et donne satisfaction (minimum 9 chiffres entre ce résultat et celui issu du calcul analytique) dans le cas où $l = 0$ et ceci quelle que soit la valeur du transfert d'impulsion K . Par contre, cette méthode ne donne satisfaction que pour des grandes valeurs de K lorsque l est supérieur à zero en général. Pour être plus précis, cette méthode est imprécise pour $l = 1$ et $K \leq 10^{-7}$, pour $l = 2$ et $K \leq 10^{-3}$, pour

TABLE D.5 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = l = 0$*

K	QGLPA I_{000}^{11}	Analytique I_{000}^{11}
10.0	0.019024970273483	0.01902497041574
3.5	0.320776881509907	0.32077688151
2.0	0.640000000000000	0.640000000000000
1.0	0.885813148788928	0.885813148789
0.50	0.969467455621303	0.969467455621
0.1473	0.997290610968908	0.997290610969
10^{-2}	0.999987500117188	0.999987500117
10^{-6}	0.999999999999876	0.9999999999998
10^{-7}	1.000000000000000	0.99999999999999

TABLE D.6 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = 0$ et $l = 1$*

K	QGLPA I_{010}^{11}	Analytique I_{010}^{11}
3.5	0.280679771321169	0.280679771321
3.0	0.307200000	0.3072000000000
2.0	0.320000000	0.320000000000
1.0	0.221453287197234	0.221453287197
0.5	0.121183431952667	0.121183431953
10^{-1}	0.02496877927249799	0.0249687792725
10^{-2}	2.499968750605991(-3)	2.49996875029(-3)
10^{-4}	2.500001059419291(-5)	2.49999999687(-5)
10^{-6}	2.520306083830803(-7)	2.500000000(-7)
10^{-7}	4.3292(-8)	2.50000000000(-8)

$l = 3, 4$ et $K \leq 10^{-2}$, pour $l = 5, 6$ et $K \leq 10^{-1}$. La non-convergence de cette méthode pour des cas surcités est due au signe du coefficient de décomposition $\tilde{\alpha}_{nl}$ qui alterne. Ainsi, si deux termes consécutifs sont très proches, alors ceci va probablement altérer la précision des résultats.

Nous allons donc développer une nouvelle méthode de calcul de cette

TABLE D.7 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = 1$ et $l = 2$*

K	QGLPA I_{121}^{22}	Analytique I_{121}^{22}
10^0	0.09808254241943368	0.0980811682
10^{-1}	3.1171876543234(-3)	3.11719969179(-3)
10^{-2}	1.24997(-5)	1.249968750488275(-5)
10^{-3}	1.30431966(-7)	1.24999968750004(-7)

TABLE D.8 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = 1$ et $l = 3$*

K	QGLPA I_{131}^{22}	Analytique I_{131}^{22}
1.0	0.02452077920448632	0.0245207792052
10^{-1}	3.117125400778112(-5)	3.11719969179(-5)
10^{-2}	-3.660574680508334(-7)	3.12492187622(-8)

TABLE D.9 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = 2$ et $l = 4$*

K	QGLPA I_{242}^{33}	Analytique I_{242}^{33}
1.0	0.01448055242548870	0.0144805524256951
10^{-1}	2.073841300949497(-6)	2.0755378947340147(-5)
10^{-2}	-5.579471220178(-5)	2.0832552100422(-10)

intégrale radiale basée sur le développement en série de la fonction de

TABLE D.10 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = 2$ et $l = 5$*

K	QGLPA I_{252}^{33}	Analytique I_{252}^{33}
1.0	0.003620138082059356	0.0036201381064237
10^{-1}	-3.073841300949497(-6)	5.188844736(-8)

TABLE D.11 – *Evaluation de la matrice $I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i)$ pour les paramètres $\kappa_i = \kappa_j = 2.000$, $l_i = l_j = 3$ et $l = 6$*

K	QGLPA I_{363}^{44}	Analytique I_{363}^{44}
1.0	0.002405074445306206	0.00240507444513
10^{-1}	-1.41300949497(-8)	3.88677356(-9)

Bessel sphérique pour Kr petit [49]

$$j_l(Kr) = \sum_{n=0}^{\infty} \beta_{nl} (Kr)^{n+l}, \quad (\text{D.42})$$

avec

$$\beta_{nl} = \frac{(-1)^n}{2^n n! [1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2l+1) \Pi_{k=1}^n (2l+2k+1)]}. \quad (\text{D.43})$$

Ainsi, l'intégrale s'écrit ainsi sous la forme

$$I_{l_j, l_i}^{n_j, n_i}(\kappa_j, K, \kappa_i) = \sum_{n=0}^{\infty} \beta_{nl} \int_0^{\infty} dr S_{n_j l_j}^{\kappa}(r) (Kr)^{n+l} S_{n_i l_i}^{\kappa}(r), \quad (\text{D.44})$$

et comme $S_{n_i l_i}^{\kappa}(r)$ est de carré sommable, alors six termes de $j_l(Kr)$ suffisent pour évaluer l'intégrale en utilisant la quadrature de Gauss-Laguerre car $((Kr)^2/2)^5$ si $Kr \sim 10^{-1}$ est de l'ordre de 10^{-10} . Avec cette nouvelle méthode, nous avons résolu tous les problèmes relatifs à la

convergence de la méthode pour $l \geq 1$ et pour $K \leq 10^{-1}$ en général. Ainsi dans les codes utilisés pour calculer les sections efficaces différentielles triples, nous avons implémenté les deux techniques de calcul de cette intégrale.

D.3 Tests de validation du code numérique du premier Born

D.3.1 Introduction

Il s'agit de considérer le cas simple du processus d'ionisation sans excitation dans lequel l'état initial est décrit par la fonction de Byron, et l'état final est décrit par le PSCB. Ainsi, sachant que la fonction liée $1s$ peut être considérée comme la fonction d'onde du modèle hydrogénoïde, nous allons d'abord calculer les TDCS de ce processus analytiquement (nous avons utilisé les logiciels de calcul formel tels que Maple et Matlab pour avoir des valeurs numériques de ces calculs analytiques) en utilisant les expressions exactes de la fonction de Byron et la fonction coulombienne. Ensuite, nous allons refaire ce calcul numériquement dans le cas où ces deux fonctions sont décomposées sur la base sturmienne. Ensuite, nous ferons une comparaison entre ces deux résultats pour valider la mise en oeuvre du code numérique qui sera utilisé pour traiter complètement le processus considéré.

D.3.2 Calcul analytique du premier Born sans excitation

Sur le plan analytique, si nous définissons les quantités suivantes

$$\Delta(\eta, K) = -\frac{32}{\pi K^2} e^{\pi\eta/2} \Gamma(1 - i\eta), \quad (\text{D.45})$$

$$\Omega = K^2 + k_e^2 - 2Kk_e \cos(\widehat{\vec{k}_e, \vec{K}}), \quad \Gamma = k_e - K \cos(\widehat{\vec{k}_e, \vec{K}}), \quad (\text{D.46})$$

$$V(q) = (\Omega + q)^{-1} [\Omega + q^2 - 2\Gamma k_e - 2ik_e q], \quad (\text{D.47})$$

et

$$\gamma(q) = \frac{(q^3 - q^2 + \Omega q - 2\gamma q k_e + \Omega) + i(2\gamma q - 2k_e q^2)}{(\Omega + q^2 - 2\gamma k_e) - 2ik_e q}, \quad (\text{D.48})$$

et si nous utilisons la relation (4.7) de la fonction de Byron pour décrire l'état initial, et la relation (3.14) de la PSCB pour décrire l'état final, on obtient après quelques calculs [139] l'expression de la matrice de transition du processus d'ionisation sans excitation par impact électronique dans le première approximation de Born

$$\begin{aligned}
T_{fi}^{(1)} = & \left\{ \left[\frac{A\gamma(\alpha)}{(\Omega + \alpha^2)^2} e^{-i\eta \ln V(\alpha)} + \frac{B\gamma(\beta)}{(\Omega + \beta^2)^2} e^{-i\eta \ln V(\beta)} \right] \left[\frac{A}{(\alpha + 2)^3} \right. \right. \\
& + \left. \frac{B}{(\beta + 2)^3} \right] + \left[\frac{A\gamma_0(\alpha)}{(\Omega_0 + \alpha^2)^2} e^{-i\eta \ln V_0(\alpha)} + \frac{B\gamma_0(\beta)}{(\Omega_0 + \beta^2)^2} e^{-i\eta \ln V_0(\beta)} \right] \\
& \times \left[-8 \left(\frac{A}{(\alpha + 2)^3} + \frac{B}{(\beta + 2)^3} \right) \left(\frac{\alpha A^2}{(K^2 + 4\alpha^2)^2} + \frac{\beta B^2}{(K^2 + 4\beta^2)^2} \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{(\alpha + \beta)AB}{(K^2 + (\alpha + \beta)^2)^2} \right) + \frac{A(\alpha + 2)}{(K^2 + (\alpha + 2)^2)^2} + \frac{B(\beta + 2)}{(K^2 + (\beta + 2)^2)^2} \right] \Big\}. \tag{D.49}
\end{aligned}$$

Notons que les abréviations suivantes ont été utilisées

$$\Omega \equiv \Omega(K), \quad \Omega_0 \equiv \Omega(0), \quad V_0(q) \equiv V_{K=0}(q), \quad \gamma_0(q) \equiv \gamma_{K=0}(q). \tag{D.50}$$

D.3.3 Calcul numérique du premier Born sans excitation

Pour les paramètres $E_i = 500 \text{ eV}$, $E_e = 5 \text{ eV}$ et $\theta_f = 3.5^\circ$, nous pouvons alors utiliser la décomposition de la fonction de Byron sur la base sturmienne et la relation (4.36) de la décomposition de la fonction coulombienne sur la même base d'une part, et la relation (D.49) donnant la matrice de transition pour un calcul analytique d'autre part, pour calculer la TDCS du processus $(e, 2e)$ sans excitation. Ce calcul nous permet donc de comparer la qualité de la décomposition de la fonction de Byron et de la fonction coulombienne sur la base sturmienne faite dans le code numérique. La figure (D.1) nous donne la variation de la TDCS en unité atomique en fonction de l'angle d'éjection de l'électron arraché à la cible. Pour 7 couples de moments angulaires (décrivant l'état final) et 50 sturmiennes par électron, nous constatons que l'accord est remarquable entre le calcul analytique (trait continu) et le calcul numérique pour la fonction de Byron (trait interrompu court). Il convient de rappeler à ce niveau le fait que la fonction de Byron ne décrit que l'état s c'est-à-dire seule la contribution $\lambda = l = 0$ est prise en compte. Le tableau D.12

TABLE D.12 – Paramètres utilisés pour définir les états initial (Byron) et final du test effectué.

Etat	Initial	Final
L	$L_i = 0$	$L_f = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$
(λ, l)	$(l_2, l_3) = (0, 0)$	$(\lambda_2, \lambda_3) = \begin{cases} (0, 0) \Leftrightarrow L_f = 0 \\ (0, 1) \Leftrightarrow L_f = 1 \\ (0, 2) \Leftrightarrow L_f = 2 \\ (0, 3) \Leftrightarrow L_f = 3 \\ (0, 4) \Leftrightarrow L_f = 4 \\ (0, 5) \Leftrightarrow L_f = 5 \\ (0, 6) \Leftrightarrow L_f = 6 \end{cases}$
N	$nmax_1^i = nmax_2^i = 50$	$nmax_1^f = nmax_2^f = 50$
dim	$dim_i = 1275$	$dim_f = \begin{cases} 1275 \Leftrightarrow L_f = 0 \\ 2500 \Leftrightarrow L_f = 1 \\ 2500 \Leftrightarrow L_f = 2 \\ 2500 \Leftrightarrow L_f = 3 \\ 2500 \Leftrightarrow L_f = 4 \\ 2500 \Leftrightarrow L_f = 5 \\ 2500 \Leftrightarrow L_f = 6 \end{cases}$

recapitule les paramètres essentiels utilisés pour définir les états initial (Byron) et final du système. Lorsque nous substituons cette fonction par celle de Lagmago qui prend en compte les autres contributions (λ, l) qui se couplent pour donner $L_i = 0$, la même figure montre directement le poids (autour de 3 ordres de grandeurs pour le pic principal et de 1 ordre pour le pic de recul) qu'ont les corrélations angulaires dans la voie d'entrée d'un tel processus (résultat en trait mixte sur la figure **D.1**). Le choix des couples de moments angulaires (l_2, l_3) et (λ_2, λ_3) a été fait au moyen de la relation triangulaire et la relation de parité. Dans le cas de l'ionisation sans excitation où $(\lambda_2 = 0)$, nous avons toujours $\lambda_3 = L_f$. La conséquence est la réduction de l'hypermatrice à un seul bloc.

D.3.4 Conclusion

Puisque ce test a été concluant, nous avons utilisé ce code numérique pour générer toutes les TDCS du processus d'ionisation avec ou sans excitation de l'atome d'hélium par impact d'électrons rapides.

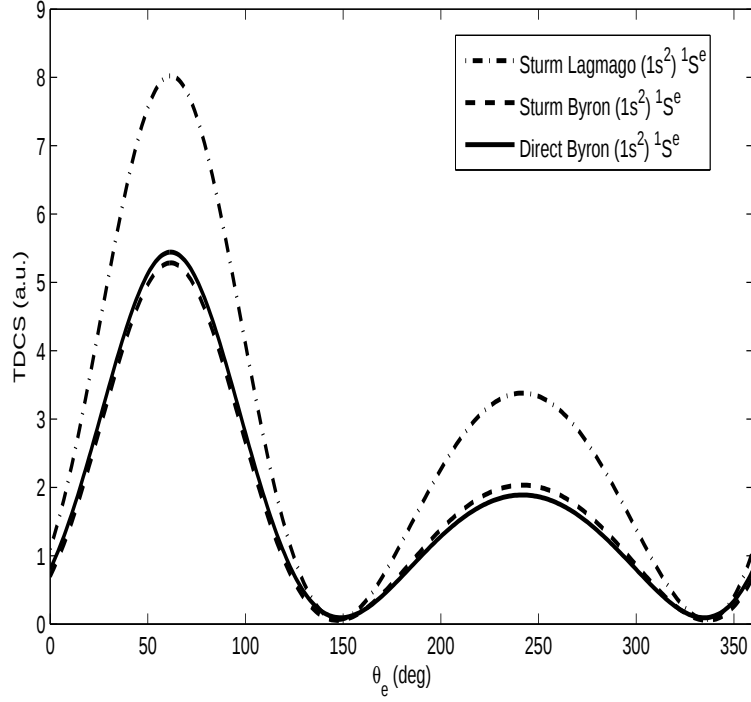


FIGURE D.1 — Section efficace différentielle triple (TDCS) en u.a. en fonction de l'angle de l'électron éjecté θ_e . En trait continu, nous avons le résultat du calcul analytique, en trait interrompu court, les résultats du calcul numérique (décomposition sur la base sturmiennne) pour la fonction de Byron, et en trait mixte, les résultats du calcul numérique pour le fondamental de Lagmago. L'angle de diffusion considéré est $\theta_f = 3.5^\circ$, les énergies incidente, diffusée et éjectée sont respectivement $E_i = 500$ eV, $E_f = 470.41$ eV et $E_e = 5$ eV. Le nombre de sturmiennes par électron utilisé est $N_{3f} = 50$ et notons que l'angle azimuthal de l'électron éjecté est $\phi_e = \pi, 0$.

D.4 Tests de validation du code numérique du second Born

D.4.1 Introduction

Dans cette partie, nous allons présenter d'abord les tests sur la stabilité des éléments de matrice (E.28). Ils consistent à comparer les résultats analytiques aux résultats numériques obtenus pour notre modèle théorique. Ensuite, la seconde partie sera consacrée à l'évaluation numérique de la partie imaginaire et la partie réelle de l'intégrale de Dalitz car il

existe un lien très pertinent entre cette intégrale et la matrice de transition du second Born. Enfin, la dernière partie sera réservée au calcul numérique de l'intégrale angulaire $I_\Omega(p)$ qui apparaît dans la matrice de transition du second Born. L'intégrand de cette intégrale contient celui de la partie imaginaire de Dalitz mais pondéré par des éléments de matrice du second Born.

D.4.2 Tests sur les éléments de matrice du second Born

Nous avons testé l'évaluation des éléments de matrice (E.28) en utilisant les expressions analytiques de la fonction de Byron et de la fonction coulombienne pour mener les calculs analytiques. D'autre part, nous avons mené ces calculs numériquement en utilisant les formes de ces fonctions décomposées sur la base sturmienne. Les tables D.13 et D.14 nous permettent de comparer les calculs analytique et numérique de cet élément de matrice en fonction des transferts d'impulsions partiels K_i et K_f . Il est clair que l'accord entre ces deux calculs est excellent (plus de 9 chiffres de recouvrement) pour des faibles valeurs des transferts d'impulsions partiels mais cet accord se dégrade (au moins 5 chiffres de recouvrement) au fur et à mesure que ces transferts d'impulsion croissent. La conclusion est donc que cet élément de matrice est stable numériquement.

D.4.3 Calcul numérique de l'intégrale de Dalitz

Test sur la partie imaginaire I_{2d}

1. **Calcul analytique de la partie imaginaire I_{2d}^{anal} :**

En comparant les relations (E.48) et (E.47), il vient que l'intégrale angulaire peut se déduire du calcul analytique qui est donné par la relation (E.27)

$$I_{2d}^{anal} = \int \frac{d\hat{q}}{K_i^2|_{q=p} K_f^2|_{q=p}} = \frac{2}{p\pi} \text{Im}(I_D), \quad (\text{D.51})$$

et pour la cinématique considérée de la voie 1s c'est-à-dire une énergie incidente $E_i = 500 \text{ eV}$, une énergie éjectée de 5 eV et un angle de l'électron diffusé de 3.5° ; ce qui correspond à $k_i = 6.06209803 \text{ u.a.}$, $k_f = 5.87998533 \text{ u.a.}$, $p = 5.91109402 \text{ u.a.}$ et $K = 0.407597247 \text{ u.a.}$, on trouve comme résultat du calcul analytique

$$I_{2d}^{anal} = 4.02061553. \quad (\text{D.52})$$

TABLE D.13 – Comparaison entre les parties réelles des calculs analytique et numériques de l'élément de matrice (E.28) en fonction de K_i et K_f .

K_i	K_f	$\langle \Theta_f e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Theta_i \rangle^A$	$\langle \Theta_f e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Theta_i \rangle^N$
10^{-5}	10^{-5}	0.162725973968	0.1627259739650
10^{-3}	10^{-3}	0.1627260311645	0.1627260311641
10^{-2}	10^{-2}	0.162731693772	0.162731693769
10^{-1}	10^{-1}	0.16329396541	0.163293965409
1	1	0.1835431607875	0.183543160784077
2	2	0.102690539168	0.102690538918
3	3	0.33340619	0.33340755
4	4	0.0099960572	0.009998380
6	6	0.00110573	0.00110361
8	8	0.000174362	0.000185465
10	10	0.0000369636	0.0000325977
12	12	0.98369×10^{-5}	0.87579×10^{-5}

2. Calcul numérique de la partie imaginaire I_{2d}^{num} :

Rappelons que l'élément d'angle solide $d\hat{q}$ en coordonnées sphériques est donnée par $d\hat{q} = \sin(\theta_q) d\theta_q d\phi_q$. De plus, nous posons dans la suite $x = \cos(\theta_q)$ et ne considérons que le cas de la géométrie coplanaire ($\phi_f = 0$). Ainsi dans ce système de coordonnées, les transferts d'impulsions partiels sont données par

$$K_i^2 = k_i^2 + q^2 - 2qk_i x, \quad (\text{D.53})$$

et

$$K_f^2 = k_f^2 + q^2 - 2qk_f \left[x \cos(\theta_f) + \sqrt{1 - x^2} \sin(\theta_f) \cos(\phi_q) \right]. \quad (\text{D.54})$$

En portant ces deux relations (D.53) et (D.54) dans (D.51), il vient que

$$I_{2d}^{num} = \int_0^\pi \frac{dx}{K_i^2|_{q=p}} \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_q}{K_f^2|_{q=p}} = \int_{-1}^{+1} \frac{dx}{K_i^2|_{q=p}} I_\phi(x), \quad (\text{D.55})$$

TABLE D.14 – Comparaison entre les parties imaginaires des calculs analytique et numériques de l'élément de matrice (E.28) en fonction de K_i et K_f .

K_i	K_f	$\langle \Theta_f e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Theta_i \rangle^A$	$\langle \Theta_f e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Theta_i \rangle^N$
10^{-5}	10^{-5}	0.0146450597562	0.0146450597560
10^{-3}	10^{-3}	0.0146450649038	0.0146450649035
10^{-2}	10^{-2}	0.0146455745289	0.0146455745286
10^{-1}	10^{-1}	0.014696178016	0.0146961780159
1	1	0.0165185710187	0.0165185710184
2	2	0.0092419731518	0.0092419731293
3	3	0.003000598	0.003000611
4	4	0.000899628	0.000899837
6	6	0.000099514	0.000099930
8	8	0.0000156922	0.0000166915
10	10	0.332666×10^{-5}	0.29337×10^{-5}
12	12	0.88530×10^{-6}	0.78819×10^{-6}

avec

$$I_\phi(x) = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi_q}{k_f^2 + p^2 - 2pk_f \Delta(x, \phi_q)}, \quad (\text{D.56})$$

où $\Delta(x, \phi_q) = [x \cos(\theta_f) + \sqrt{1-x^2} \sin(\theta_f) \cos(\phi_q)]$. En utilisant le fait que l'intégrand de l'équation (D.56) est pair, alors la relation (D.56) peut encore s'écrire sous la forme

$$I_\phi(x) = 2 \int_0^\pi \frac{d\phi_q}{k_f^2 + p^2 - 2pk_f \Delta(x, \phi_q)}. \quad (\text{D.57})$$

- *Calcul analytique de $I_\phi(x)$:*

Utilisons la table de Gradshteyn [104] pour évaluer $I_\phi(x)$. Ainsi, posons $A = p^2 + k_f^2 - 2pk_f x \cos(\theta_f)$, $B = -2pk_f \sqrt{1-x^2} \sin(\theta_f)$, on obtient facilement

$$I_\phi(x) = 2 \int_0^\pi \frac{d\phi_q}{(A + B \cos(\phi_q))} = \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - B^2}}, \quad (\text{D.58})$$

si $A^2 > B^2$.

- *Calcul numérique de $I_\phi(x)$:*

Comme la seule dépendance de K_f^{-2} en ϕ_q se fait via son cosinus, alors si nous posons $z = \cos(\phi_q)$ dans la relation (D.57), on obtient facilement que

$$I_\phi(x) = 2 \int_{-1}^{+1} \frac{dz}{\sqrt{1-z^2}} \frac{1}{k_f^2 + p^2 - 2pk_f \Delta(x, z)}. \quad (\text{D.59})$$

Directement on voit apparaître le poids de la quadrature de Chebyshev [49]. Si nous utilisons donc cette quadrature pour évaluer la relation (D.59), nous obtenons pour moins de 20 points de la discrétisation, un recouvrement d'au moins 10 chiffres entre les résultats analytiques et numériques. Donc nous pouvons conclure que l'intégrale $I_\phi(x)$ est bien calculée à l'aide de la quadrature de Chebyshev. Notons que le poids de cette quadrature est très intéressante car il dépend uniquement du nombre de points utilisé dans la procédure numérique. Par conséquent, il suit une rapide convergence de cette quadrature avec juste quelques points.

Passons à présent à l'intégration numérique sur la variable $x = \cos(\theta_q)$ de la relation (D.55). L'intégration sur x via la quadrature de Gauss-Legendre n'est pas stable car au voisinage de 1, nous avons une explosion de l'intégrand (puisque dans le cas $q = p$, on peut écrire $K_i^2 = 2pk_i(A - x)$ avec $A = (p^2 + k_i^2)/(2pk_i) \sim 1.000318$). C'est la raison pour laquelle nous avons scindé cette intégrale en deux parties

$$I_{2d}^{num} = \int_{-1}^{0.98} dx \frac{I_\phi(x)}{K_i^2} + \frac{1}{2pk_i} \int_{0.98}^{+1} dx \frac{I_\phi(x)}{A - x} \equiv I_1 + I_2. \quad (\text{D.60})$$

La première intégrale I_1 calculée via la quadrature de Gauss Legendre converge bien sur au moins 6 chiffres lorsque le nombre de points est au moins de 60 points d'intégration. Le résultat obtenu est de $I_1 \simeq 0.0650089376$. Quant à la deuxième intégrale I_2 , lorsqu'on effectue le changement de variable $x = A \cos^2(\alpha)$ et qu'ensuite, on utilise la quadrature de Gauss-Legendre, on remarque une convergence de ladite intégrale pour un nombre de points assez faible (10 points). Mais le résultat de cette intégrale bien qu'elle converge (mauvaise branche) est très petite et n'est pas bonne car ne perdons pas de vue que le résultat correct donné par le calcul

analytique est de $I_{2d}^{anal} = 4.02061553$. Dans le but d'adoucir cette singularité au voisinage de $x = 1$, multiplions et divisons I_2 par le poids de Chebyshev lorsque $a \leq x \leq b$, on obtient

$$I_2 = \frac{1}{2pk_i} \int_{0.98}^{+1} \frac{dx}{\sqrt{(x-0.98)(1-x)}} \frac{\sqrt{(x-0.98)(1-x)} I_\phi(x)}{A-x}. \quad (\text{D.61})$$

En utilisant la quadrature de Chebyshev généralisée pour l'intervalle $a \leq x \leq b$, on obtient

$$I_2 = \frac{1}{2pk_i} \sum_{i=1}^N \omega_i \frac{\sqrt{(y_i-0.98)(1-y_i)} I_\phi(y_i)}{A-y_i}, \quad (\text{D.62})$$

où $y_i = \left(\frac{1-0.98}{2}x_i + \frac{1+0.98}{2}\right)$. La table **D.15** nous renseigne sur les conditions de convergence pour $nleg = 60$ et remarquons que le calcul semi-numérique J est le cas où l'intégration sur ϕ_q a été faite analytiquement et celle sur $x = \cos(\theta_q)$, numériquement (deux régions aussi i.e la première via la quadrature de Legendre et la seconde via la quadrature de Chebyshev généralisée).

La table **D.15** montre que pour $nleg = 60$, $ncheb \geq 80$ le recouvrement entre le calcul analytique I_{2d}^{ana} et le calcul numérique I_{2d}^{num} est de 6 chiffres pour un nombre de points de la quadrature de Chebyshev généralisée N plus grand que 5000. De plus le recouvrement entre le calcul numérique I_{2d}^{num} et le calcul semi-numérique J est de 5 chiffres. Nous avons la même conclusion entre I_{2d}^{ana} et J .

3. Conclusion sur le calcul de la partie imaginaire :

Il ressort de ces analyses que l'intégrale sur $x = \cos(\theta_q)$ est bien calculée à condition de scinder les régions d'intégration en deux : la première ($-1 \leq x \leq 0.98$) calculée via la quadrature de Legendre et la seconde ($0.98 \leq x \leq 1$) calculée via la quadrature de Chebyshev généralisée. Notons que pour converger, l'intégration sur ϕ_q dans la deuxième région nécessite un grand nombre de points de la quadrature de Chebyshev $ncheb \geq 80$ et celle sur $x = \cos(\theta_q)$ nécessite un grand nombre de points N de la quadrature de Chebyshev généralisée (pour $ncheb = 80$, il faudrait que $N \geq 5000$ pour que le recouvrement entre les calculs analytique et numérique soit de 6 chiffres).

TABLE D.15 – *Evaluation de la partie imaginaire de l'intégrale de Dalitz pour $k_i = 6.06209803$ u.a., $k_f = 5.87998533$ u.a., $p = 5.91109402$ u.a. et $K = 0.407597247$ u.a.*

<i>ncheb</i>	<i>N</i>	I_1	I_2	$I_{2d}^{num} = I_1 + I_2$	<i>J</i>
20	10010	0.0650089376	3.90916022	3.97416916	4.02061709
20	18970	0.0650089376	3.90916016	3.97416909	4.02061703
40	10010	0.0650089376	3.95452951	4.01953845	4.02061709
40	18970	0.0650089376	3.95452945	4.01953839	4.02061703
60	10010	0.0650089376	3.95558011	4.02058905	4.02061709
60	18970	0.0650089376	3.95558005	4.02058898	4.02061703
80	50	0.0650089376	3.95619737	4.02120631	4.02061709
80	130	0.0650089376	3.95612237	4.0211313	4.02061703
80	1010	0.0650089376	3.95561582	4.02062475	4.02061709
80	5010	0.0650089376	3.95560764	4.020616258	4.02061703
80	10010	0.0650089376	3.95560738	4.02061632	4.02061709
80	18970	0.0650089376	3.95560732	4.02061626	4.02061703
80	90000	0.0650089376	3.95560730	4.02061624	4.02061701
90	18970	0.0650089376	3.95560796	4.02061690	4.02061703

Test sur la partie réelle I_{2d} **1. Partie réelle proprement dite :**

Il s'agit d'évaluer la partie principale suivante

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}e(I_D) &= \mathcal{P} \left(\int_0^\infty dq \frac{q^2}{q^2 - p^2} \int d\hat{q} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \right) \\
&= \mathcal{P} \left(\int_0^\infty dq \frac{q^2}{q^2 - p^2} I_{2d}(q) \right), \tag{D.63}
\end{aligned}$$

avec

$$I_{2d}(q) = \int d\hat{q} \frac{1}{K_i^2 K_f^2}. \tag{D.64}$$

Le calcul analytique prévoit que $\mathcal{R}e(I_D) = 0$ car nous sommes dans le cas $p \in]k_f, k_i[$. Avant de faire l'intégration sur q , rappelons que le calcul de (D.64) peut se déduire du calcul analytique donné par la relation (E.27). Dans ce cas, si nous utilisons la méthode de trapèze symétrique pour mener l'intégration sur q , le résultat est appelé $\mathcal{R}e(I_D)^{ana}$. Par contre, si nous calculons $I_{2d}(q)$ numériquement via

les quadratures de Legendre et Chebyshev (si $0 \leq q < 4$ et $q > 8$) et la technique utilisée précédemment pour calculer numériquement la partie imaginaire (si $4 \leq q \leq 8$), le résultat de l'intégration sur q appelé $\mathcal{Re}(I_D)^{num}$. Ce dernier est comparé à $\mathcal{Re}(I_D)^{ana}$ en fonction du nombre de points $nstep$ de la méthode de trapèze. Il convient de souligner que le choix des intervalles sur la variable radiale q c'est à dire $q \in [0, 4] \cup [4, 8] \cup [8, \infty[$ est lié au fait que la fonction $A(q)$ étant définie par $A(q) = (q^2 + k_i^2)/2qk_i$ entraîne que $A(4) = 1.0876810$, $A(8) = 1.038718691$. Ainsi, il s'en suit une explosion des facteurs $1/(A(4) - 1) = 11.4049$, $1/(A(8) - 1) = 25.8273$. Avec ce choix des intervalles de la variable q , les courbes de la variation de l'intégrand en fonction de q sont pratiquement identiques selon que l'intégrand soit analytique ou numérique.

TABLE D.16 – *Evaluation de la partie réelle de l'intégrale de Dalitz pour $k_i = 6.06209803$ u.a., $k_f = 5.87998533$ u.a., $p = 5.91109402$ u.a. et $K = 0.407597247$ u.a.*

$nstep$	$\mathcal{Re}(I_D)^{ana}$	$\mathcal{Re}(I_D)^{num}$
100	2.91094015	2.91096166
200	-3.31033841	-0.479821976
1000	0.129894427	0.813197031
5000	0.047643315	0.886915096
30.000	-0.00133	0.89556688
50.000	-0.00759100	0.896308342
500.000	-0.00335792	
50.000.000	-0.00430633	

2. Conclusion sur la partie réelle proprement dite :

Quand on regarde la première ligne de la table **D.16**, on constate qu'il y a un recouvrement de 4 chiffres entre les deux méthodes pour $nstep = 100$. Mais lorsque nous faisons croître le nombre de points, on est assez déçu car il ressort que la méthode de trapèze appliquée au calcul analytique de l'intégrale angulaire semble converger très lentement mais ce résultat qui est l'ordre de 10^{-2} est encore loin du bon résultat analytique qui est zéro (10^{-5} dans le cas numérique). Quant à la même méthode appliquée au calcul numérique de l'intégrale angulaire, un semblant de convergence se dessine mais ce

dernier est encore plus loin du bon résultat.

3. Partie réelle transformée :

La partie réelle de l'intégrale de Dalitz calculée précédemment par deux méthodes ne donnent pas satisfaction du fait que l'intégrand $1/K_i^2 K_f^2$ varie très lentement quand q tend vers ∞ . Alors, nous allons ajouter et retrancher la fonction $f(q)/K_i^2|_{q=p} K_f^2|_{q=p}$ avec $f(q)$ qui est une fonction dont le rôle serait de faire converger l'intégrale lorsque $q \rightarrow \infty$ et qui vaudrait 1 lorsque $q = p$. Dans ce cas ci, nous avons choisi $f(q) = (2p)^6/(q+p)^6$ qui vérifie bel et bien $f(p) = 1$. Ainsi la partie réelle de l'intégrale de Dalitz après transformation est

$$\mathcal{R}e(I_D) = \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{q^2 - p^2} \int d\hat{q} \left(\frac{1}{K_i^2 K_f^2} - \frac{f(q)}{K_i^2|_{q=p} K_f^2|_{q=p}} \right) + \tilde{C} I_{2d}(p) \quad (\text{D.65})$$

avec

$$\tilde{C} = \mathcal{P} \int_0^\infty dq \frac{q^2 f(q)}{q^2 - p^2}. \quad (\text{D.66})$$

Notons que le calcul de $\tilde{C}$ revient à calculer la partie principale ci-dessus. Le résultat trouvé est de $\tilde{C}_{ana} \simeq 79.6027328$. Elle a été aussi évaluée numériquement en utilisant la méthode de trapèze symétrique et on a trouvé un recouvrement de seulement deux chiffres après la virgule car $\tilde{C}_{num} \simeq 79.60$. En utilisant encore la méthode de trapèze pour mener l'intégration sur q et sachant que l'intégration sur $\hat{q}$ a été faite numériquement, on obtient en fonction du nombre de points $nstep$, les résultats suivants : (la table **D.17** donne les résultats de la partie réelle proprement dite et de la partie réelle dite transformée)

4. Conclusion sur la partie réelle dite transformée :

Il ressort clairement de cette table **D.17** que bien qu'ayant fait cette transformation, le résultat obtenu est encore moins bon que celui obtenu précédemment. Ce mauvais résultat est lié à la technique d'intégration utilisée c'est-à-dire la méthode de trapèze symétrique parce que l'intégrand est tronqué à partir d'une certaine valeur de q .

TABLE D.17 – *Evaluation de la partie réelle de l'intégrale de Dalitz par deux méthodes pour $k_i = 6.06209803$ u.a., $k_f = 5.87998533$ u.a., $p = 5.91109402$ u.a. et $K = 0.407597247$ u.a.*

$nstep$	$\mathcal{R}e(I_D)^{ana}$	$\mathcal{R}e(I_D)^{num}$	$\mathcal{R}e(I_D)^{transf}$
100	2.91094015	2.91096166	-290.310333
200	-3.31033841	-0.479821976	-293.692826
1000	0.129894427	0.813197031	-292.393155
5000	0.047643315	0.886915096	
30.000	-0.00133	0.89556688	
50.000	-0.00759100	0.896308342	
500.000	-0.00335792		
50.000.000	-0.00430633		

5. Partie réelle via la Symmetric Pairing Method :

On peut mettre la partie principale recherchée sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{dq}{q-p} \frac{q^2}{q+p} I_{2d}(q) &= \int_0^{k_f} \frac{dq}{q-p} f(q) + \int_{k_i}^\infty \frac{dq}{q-p} f(q) \\ &+ \mathcal{P} \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q), \end{aligned} \quad (\text{D.67})$$

avec

$$f(q) = \frac{q^2}{q+p} I_{2d}(q), \quad k_f < p < k_i. \quad (\text{D.68})$$

Le calcul numérique (intégration sur q) des deux premiers termes de la relation (D.67) se fait via la quadrature de Gauss-Legendre. Il faut noter que l'on doit opérer au préalable la transformation $t = 1/q$ pour le calcul du second terme de manière à ramener les bornes d'intégration de 0 à $1/k_i$. Quant au troisième terme, on peut le mettre sous la forme

$$\mathcal{P} \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left(\int_{k_f}^{p-\varepsilon} \frac{dq}{q-p} f(q) + \int_{p+\varepsilon}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q) \right). \quad (\text{D.69})$$

Définissons une intégrale nommée J par

$$J = \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q), \quad (\text{D.70})$$

qui se met sous la forme

$$J = \mathcal{P} \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q) + \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{dq}{q-p} f(q). \quad (\text{D.71})$$

Il s'en suit que

$$\mathcal{P} \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q) = J - \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{dq}{q-p} f(q). \quad (\text{D.72})$$

D'une part, le calcul de J se fait en utilisant la "Symmetric Pairing Method" c'est-à-dire

$$\begin{aligned} J = \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q) &= \int_0^m \frac{f(p+q) - f(p-q)}{q} dq \\ &+ \sigma \int_m^M \frac{f(p+\sigma q)}{q} dq, \end{aligned} \quad (\text{D.73})$$

avec

$$m = \min(p - k_f, k_i - p), \quad M = \max(p - k_f, k_i - p), \quad (\text{D.74})$$

$$\sigma = \begin{cases} +1 & p - k_f < k_i - p \\ -1 & p - k_f > k_i - p \end{cases}, \quad (\text{D.75})$$

et le calcul numérique des deux termes de la relation **(D.73)** se fait en utilisant la quadrature de Gauss-Legendre. D'autre part, le second terme de **(D.72)** peut encore s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{f(q)}{q-p} dq &= \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{f(q) - f(p)}{q-p} dq + f(p) \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{dq}{q-p} \\ &= \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{f(q) - f(p)}{q-p} dq + f(p) \ln \left| \frac{p+\varepsilon-p}{p-\varepsilon-p} \right| \\ &= \int_{p-\varepsilon}^{p+\varepsilon} \frac{f(q) - f(p)}{q-p} dq \\ &= 2\varepsilon f^{(1)}(p) + \frac{\varepsilon^3}{9} f^{(3)}(p) + \dots \end{aligned} \quad (\text{D.76})$$

En ne retenant que le premier terme de (D.76), on obtient

$$\mathcal{P} \int_{k_f}^{k_i} \frac{dq}{q-p} f(q) = \int_0^m \frac{f(p+q) - f(p-q)}{q} dq + \sigma \int_m^M \frac{f(p+\sigma q)}{q} dq - 2\varepsilon f^{(1)}(p), \quad \varepsilon \rightarrow 0^+, \quad (\text{D.77})$$

avec

$$f^{(1)}(p) = \frac{3}{4} I_{2d}(p) + \frac{p}{2} I_{2d}^{(1)}(p), \quad (\text{D.78})$$

où

$$I_{2d}^{(1)}(q) = \frac{d}{dq} I_{2d}(q) = \frac{\partial I_{2d}(q)}{\partial K_i} \frac{\partial K_i}{\partial q} + \frac{\partial I_{2d}(q)}{\partial K_f} \frac{\partial K_f}{\partial q}, \quad (\text{D.79})$$

et plus précisément

$$I_{2d}^{(1)}(q) = \int d\hat{q} \left(\frac{\partial K_i^{-2}}{\partial K_i} \frac{\partial K_i}{\partial q} \frac{1}{K_f^2} + \frac{K_f^{-2}}{\partial K_f} \frac{\partial K_f}{\partial q} \frac{1}{K_i^2} \right), \quad (\text{D.80})$$

et enfin

$$I_{2d}^{(1)}(q) = \int d\hat{q} \frac{-2(q - k_i \cos(\widehat{\vec{k}_i, \vec{q}}))}{K_i^4 K_f^2} + \frac{-2(q - k_f \cos(\widehat{\vec{k}_f, \vec{q}}))}{K_f^4 K_i^2}. \quad (\text{D.81})$$

Ainsi, en utilisant la "Symmetric Pairing Method" pour évaluer la partie réelle de l'intégrale de Dalitz pour les paramètres cinématiques surcrités et qui sont tels que la singularité K_f est proche des deux autres $q = p$ et K_i avec la condition $p \in]K_f, K_i[$, on a obtenu une valeur de l'ordre de 10^{-2} . Mais lorsque nous éloignons la singularité K_f des deux autres, cette valeur de la partie réelle diminue jusqu'à atteindre 10^{-5} . Ce qui est magnifique comme résultat car il ne faut pas perdre de vue que l'intégrale de Dalitz est une intégrale possédant de véritables singularités et il est d'autant plus difficile d'évaluer cette intégrale lorsque ces singularités sont toutes très proches. Compte tenu du lien avec le second Born, nous pouvons nous réjouir de cette méthode de calcul car dans le cas du second Born, nous n'avons pas de véritables singularités en K_i^{-2} et K_f^{-2} puisque lorsque $K_i \rightarrow 0$ ou $K_f \rightarrow 0$, l'intégrand du second Born étant proportionnel à K_i ou K_f , tue ces singularités. Ce fait rend donc la procédure de la partie réelle faisable sans souci majeur quelle que soit la gamme des paramètres cinématiques utilisée.

D.4.4 Test de convergence de l'intégrale angulaire $I_\Omega(p)$ dans le cadre de la contribution du fondamental comme état intermédiaire du second Born.

Introduction

Dans la relation (E.45), l'élément de matrice $\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | M | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle$ dépend de la valeur du moment angulaire total et final L_f . Ainsi, nous allons étudier la convergence de l'intégrale (E.45) pour divers valeurs de L_f et en fonction du nombre de points des quadratures de Chebyshev et de Legendre. Dans le paragraphe sur le calcul numérique de la partie imaginaire de l'intégrale de Dalitz, nous avons fait des remarques très importantes. C'est l'occasion pour nous de les rappeler.

TABLE D.18 – Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 0$ en fonction du nombre de points des quadratures de Legendre. Les paramètres utilisés sont $E_i = 500$ eV, $E_e = 5$ eV, $\theta_f = 3.5^\circ$, $\kappa = 2$, $N = 30$ sturmiennes, 4 couples de moments angulaires, le nombre de points de la quadrature de Chebyshev pour mener l'intégration sur ϕ_q est égal à $n_{cheb} = 20$

n_{leg}	$Re(QGL)$	$Im(QGL)$
40	3.0006629054 (-3)	2.700545523 (-4)
50	3.000662708 (-3)	2.70054534 (-4)
100	3.0006627272 (-3)	2.70054536 (-4)

Pour commencer, notons que les singularités présentes dans la partie imaginaire de l'intégrale de Dalitz sont plus fortes que celles présentes dans l'intégrale angulaire (E.45). Ce qui est responsable de l'adoucissement de ces singularités, c'est le comportement de l'élément de matrice $\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | M | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle$ lorsque K_i ou K_f tendent vers zero. Nous avons relevé le fait que pour évaluer l'intégrale sur la variable ϕ_q de $Im(I_D)$, il fallait utiliser la quadrature de Chebyshev pour un nombre de points assez élevé notamment $n_{cheb} \geq 80$. Mais compte tenu de l'adoucissement des singularités dans le cas réel étudié, les tests que nous avons effectués nous montrent que pour un nombre de points supérieur ou égal

TABLE D.19 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 0$ en fonction du nombre de points des quadratures de Chebyshev généralisée. Les paramètres utilisés sont ceux de la table D.18.*

$ncheb_{new}$	$Re(QGCG)$	$Im(QGCG)$
40	2.96297375 (-3)	2.666625932 (-4)
50	2.9768499 (-3)	2.679114248 (-4)
100	2.99480814 (-3)	2.69527634 (-4)
150	2.998068 (-3)	2.698210789 (-4)
200	2.9992051 (-3)	2.69923357 (-4)
300	3.0000154 (-3)	2.6999628 (-4)
400	3.0002987 (-3)	2.70021777 (-4)
500	3.00042985 (-3)	2.700335780 (-4)
700	3.00054398 (-3)	2.700438500 (-4)
1000	3.00060459 (-3)	2.70049304 (-4)
1500	3.00063695 (-3)	2.700522169 (-4)
2000	3.00064827 (-3)	2.700532353 (-4)
4000	3.00065918 (-3)	2.7005421 (-4)

à 20, on a toujours une convergence sur au moins 10 chiffres pour tout $L_f \neq 1$ et quelle que soit la valeur de K_i . Par contre, dans le cas $L_f = 1$ et si K_i faible, il faut utiliser $ncheb = 80$ pour avoir une convergence remarquable. Par contre, en ce qui concerne l'intégration sur la variable $x = \cos(\theta_q)$ de la partie imaginaire de l'intégrale de Dalitz, nous avons utilisé la quadrature de Chebyshev généralisée (qui consistait de manière astucieuse à multiplier et à diviser l'intégrand par le poids de cette quadrature) pour mener l'intégration. Ainsi, on avait trouvé que pour avoir 6 bons chiffres, il fallait un très grand nombre de points de la quadrature de Chebyshev généralisée notamment $ncheb_{new} \geq 5000$ si nous utilisons $ncheb = 80$ pour mener l'intégration sur ϕ_q . Compte tenu de la présence de l'élément de matrice, puisque le nombre de points $ncheb$ a diminué, nous allons refaire des tests pour déterminer, pour une valeur fixée de L_f , le nombre minimum de points de la quadrature de Chebyshev généralisée $ncheb_{new}$ qui assure une convergence acceptable (au moins 6 chiffres car ce n'est pas une valeur de sortie puisqu'elle sera encore impliquée dans l'opération d'intégration sur la variable radiale q). De plus, nous testerons la quadrature de Legendre dans ce cas bien qu'elle fut un échec dans

TABLE D.20 – Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 1$ en fonction du nombre de points des quadratures de Legendre. Les paramètres utilisés sont ceux de la table **D.18**.

n_{leg}	$Re(QGL)$	$Im(QGL)$
40	-2.188225808 (-2)	- 1.283030722 (-2)
50	-1.660789424650 (-2)	-1.99065386 (-2)
60	-1.5923112739 (-2)	-1.1970359558 (-2)
80	-1.7459453880 (-2)	-1.2379707920 (-2)
100	-1.72274722 (-2)	-1.21564334 (-2)
150	-1.730350776 (-2)	-1.2185562474 (-2)
200	-1.7278629520 (-2)	-1.219884414 (-2)
300	-1.722492627 (-2)	-1.22087019 (-2)
400	-1.720369406 (-2)	-1.22107949 (-2)
500	-1.71973532 (-2)	-1.22111188 (-2)
700	-1.719536415 (-2)	-1.22111147 (-2)

l'évaluation de l'intégrale de la partie imaginaire de Dalitz. Ces tests nous permettront de choisir la technique que nous utiliserons par la suite pour évaluer les intégrales angulaires.

Convergence de $I_\Omega(p)$ pour $L_f = 0$

Les tables **D.18** et **D.19** nous permettent d'étudier et de comparer pour $L_f = 0$ la convergence de l'intégrale sur $x = \cos(\theta_q)$ en fonction du nombre de points des quadratures de Legendre et de Chebyshev généralisée selon que l'une ou l'autre des techniques soit utilisée. Nous pouvons remarquer que la convergence de quadrature de Chebyshev généralisée (QGCG) est lente tandis que celle de la quadrature de Legendre (QGL) est rapide. En effet, il faudrait 4000 points de la QGCG pour avoir le même nombre de chiffres (5 chiffres à 10^{-3} pour la partie réelle et à 10^{-4} pour la partie imaginaire) avec la QGL. Lorsque nous augmentons le nombre de points de la quadrature de Chebyshev n_{cheb} pour l'intégration sur ϕ_q de 20 à 80, pour 100 points de la QGCG et la QGL, on constate qu'on a un recouvrement de 6 chiffres à 10^{-3} et à 10^{-4} pour les parties réelle et imaginaire respectivement par rapport aux résultats avec $n_{cheb} = 20$. Ce qui confirme la stabilité de l'intégrale angulaire

TABLE D.21 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 1$ en fonction du nombre de points des quadratures de Chebyshev généralisée. Les paramètres utilisés sont ceux de la table **D.18**.*

$n_{cheb_{new}}$	$Re(QGCG)$	$Im(QGCG)$
40	-1.55327649 (-2)	-1.1566285 (-2)
50	-1.54997055 (-2)	-1.180624 (-2)
60	-1.64009768 (-2)	-1.221179 (-2)
80	-1.8451933 (-2)	-1.2226040 (-2)
100	-1.65633821 (-2)	-1.214460 (-2)
150	-1.691767867 (-2)	-1.2193304 (-2)
200	-1.707421283 (-2)	-1.22028766 (-2)
300	-1.7176506096 (-2)	-1.2207943 (-2)
400	-1.719403 (-2)	-1.220989 (-2)
500	-1.719589 (-2)	-1.221061 (-2)
700	-1.7195469 (-2)	-1.2210940 (-2)
1000	-1.7195319 (-2)	-1.2211020 (-2)
2000	-1.71952806 (-2)	-1.2211072 (-2)
2300	-1.7195279 (-2)	-1.22110756 (-2)

TABLE D.22 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 2$ en fonction du nombre de points des quadratures de Legendre. Les paramètres utilisés sont ceux de la table **D.18**.*

n_{leg}	$Re(QGL)$	$Im(QGL)$
40	7.61583576 (-5)	- 3.49379673 (-5)
50	2.993405110 (-4)	-3.18780275 (-3)
60	2.78182471 (-4)	-3.180914390 (-3)
80	2.288041206 (-4)	-3.29623940 (-3)
90	2.0238620173 (-4)	-3.3058905343 (-3)
100	2.3509777784 (-4)	-3.26397746 (-3)
150	2.339178776 (-4)	-3.26905805 (-3)
200	2.348051107 (-4)	-3.2692444 (-3)
300	2.3629607271 (-4)	-3.26863582 (-3)

TABLE D.23 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 2$ en fonction du nombre de points des quadratures de Chebyshev généralisée. Les paramètres utilisés sont ceux de la table **D.18**.*

$ncheb_{new}$	$Re(QGCG)$	$Im(QGCG)$
40	2.9934051 (-4)	-2.9400398 (-3)
50	3.0139080 (-4)	-3.085887621 (-3)
60	2.66281996 (-4)	-3.2207876204 (-3)
80	2.004984336 (-4)	-3.288816389 (-3)
90	2.4514763631 (-4)	-3.236570662 (-3)
100	2.56318786 (-4)	-3.2324735 (-3)
150	2.44972647 (-4)	-3.2556514 (-3)
200	2.404782718 (-4)	-3.26253642 (-3)
300	2.376561999 (-4)	-3.266508693 (-3)
400	2.37161506 (-4)	-3.267461 (-3)
500	2.37096695 (-4)	-3.2677670 (-3)
700	2.370936761 (-4)	-3.2679788 (-3)
1000	2.370901608 (-4)	-3.268087684 (-3)
1500	2.370869641 (-4)	-3.2681464 (-3)

TABLE D.24 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 3$ en fonction du nombre de points des quadratures de Legendre. Les paramètres utilisés sont ceux de la table **D.18**.*

$nleg$	$Re(QGL)$	$Im(QGL)$
40	4.78477423 (-4)	-1.33006093 (-4)
100	4.89947134 (-4)	-1.2824135 (-4)
200	4.90111134 (-4)	-1.28811755 (-4)
300	4.908645521 (-4)	-1.28799398 (-4)
400	4.908775057 (-4)	-1.28790785 (-4)
500	4.908817558 (-4)	-1.28788389 (-4)

$I_\Omega(p)$ pour $L_f = 0$ et il est clair que c'est la QGL qui sera utilisée dans ce cas avec environ 40 à 50 points.

TABLE D.25 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 3$ en fonction du nombre de points des quadratures de Chebyshev généralisée. Les paramètres utilisés sont ceux de la table D.18.*

$n_{cheb_{new}}$	$Re(QGCG)$	$Im(QGCG)$
40	4.638643412 (-4)	-9.98983435 (-5)
100	4.903493399 (-4)	-1.2708208146 (-4)
400	4.908948866 (-4)	-1.287706789 (-4)
500	4.9089176410 (-4)	-1.2877888450 (-4)
600	4.9088997735 (-4)	-1.2878213741 (-4)

TABLE D.26 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 4$ en fonction du nombre de points des quadratures de Legendre. Les paramètres utilisés sont ceux de la table D.18.*

n_{leg}	$Re(QGL)$	$Im(QGL)$
40	7.60492 (-5)	- 1.014158 (-4)
100	7.907093082 (-5)	-1.036003510 (-4)
200	7.91316620 (-5)	-1.036144 (-4)
300	7.91319824 (-5)	-1.0361396 (-4)

Convergence de $I_\Omega(p)$ pour $L_f = 1$

Passons à présent au cas $L_f = 1$. C'est le cas le plus difficile à traiter par rapport aux autres valeurs de L_f car il fait intervenir la fonction de Bessel sphérique $j_1(Kr)$ qui est telle que $j_1(Kr) \propto Kr$ de manière à ce qu'on ait $j_1(K_i r)/K_i^2 \propto 1/K_i \sim 1/\sqrt{A-x}$ avec $A \simeq 1.0003$. Ainsi la singularité en K_i^{-2} est diminuée d'un ordre mais il reste à évaluer

$$I_\Omega(p) = \int_{-1}^1 dx \frac{f(x)}{\sqrt{1.0003-x}}. \quad (D.82)$$

Les tests pour cette valeur ont été consignés dans les tables D.20 et D.21. Une fois de plus, on constate que la QGL converge toujours plus vite que

TABLE D.27 – *Test sur la convergence de l'intégration sur $x = \cos(\theta_q)$ pour $L_f = 4$ en fonction du nombre de points des quadratures de Chebyshev généralisée. Les paramètres utilisés sont ceux de la table D.18.*

$ncheb_{new}$	$Re(QGCG)$	$Im(QGCG)$
40	7.8226617 (-5)	-1.0484437 (-4)
100	7.920565813 (-5)	-1.037246788 (-4)
200	7.91626183 (-5)	-1.036394250 (-4)
500	7.913730450 (-5)	-1.036175390 (-4)

la QGCG car il faut 2300 points de la QGCG pour avoir 5 chiffres à 10^{-2} de recouvrement avec 700 points de la QGL. Il faut déjà remarquer que le nombre de points de la QGL pour $L_f = 1$ qu'il faudra utiliser est d'environ 700 tandis qu'il n'était qu'autour de 40 pour $L_f = 0$. De plus, si nous augmentons $ncheb$ de 20 à 80, on constate que les convergences de la QGCG et de la QGL se rejoignent en terme de nombre de points. En effet, avec 700 points chacune, les deux techniques se recouvrent sur 4 chiffres à 10^{-2} . De plus, le recouvrement avec les résultats pour $ncheb = 20$ est cette fois de 2 chiffres à 10^{-2} . En conclusion, pour obtenir un résultat précis, il faudrait utiliser $ncheb = 80$ et la QGL dans le cas $L_f = 1$.

Convergence de $I_\Omega(p)$ pour $L_f \geq 2$

Les tables D.22, D.23, D.24, D.25, D.26 et D.27 nous montrent comment évolue la convergence entre les deux techniques d'intégration pour $L_f = 2, 3, 4$ respectivement. Notons que dans ces cas, la singularité en K_i^{-2} disparaît du fait de la proportionnalité en $(K_i r)^{L_f}$ de la fonction de Bessel sphérique. Il ressort aussi que la QGL converge vite par rapport à la QGCG. De plus, il est conseillé de prendre le nombre de points de la QGL au moins égal à 300 pour être sûr d'avoir une convergence sur au moins 5 chiffres si on travaille avec $ncheb = 20$.

D.4.5 Conclusion du test sur le second Born

Au vu de tous ces tests effectués dans le cadre de l'évaluation du second Born, il est clair que nous avons à présent tous les ingrédients pour pré-

parer les résultats du second Born du processus d'ionisation avec ou sans excitation de l'hélium par impact d'électron rapide.

Annexe E

Second Born pour un processus ($e, 2e$) de He

E.1 Introduction

Le chapitre 6 montre qu'il existe un écart relativement important entre l'expérience et les modèles théoriques dans l'approximation de Born. Ce qui nous laisse penser que les effets du second-ordre et même des ordres supérieurs peuvent avoir des effets très importants même aux grandes énergies d'impact. Ainsi, un calcul précis du second-ordre pourraient permettre de résoudre une majeure partie de ces problèmes. Le principe est le suivant : puisque dans le cas de la cinématique symétrique du processus ($e, 2e$), la collision se fait à petit paramètre d'impact, le projectile peut pénétrer dans la cible et donner lieu à une collision élastique avec le noyau de la cible. Ainsi, certains états intermédiaires en particulier le fondamental de la cible contribuent majoritairement. Il est donc question ici d'évaluer la contribution exacte de ces états intermédiaires sans toutefois se limiter à l'approximation de fermeture ($T_{fi}^{(2)AF}$). La contribution de l'état intermédiaire considéré ($T_{fi}^{(2)EIC}$) dans l'amplitude du second ordre est donnée par

$$T_{fi}^{(2)EIC} = T_{fi}^{(2)exact} - \left\{ T_{fi}^{(2)AF} - T_{fi}^{(2)EIC}(\bar{\omega} = \omega_n - \bar{\omega}_i) \right\}, \quad (\text{E.1})$$

où $T_{fi}^{(2)exact}$ est l'amplitude exact du second-ordre et $T_{fi}^{(2)EIC}(\bar{\omega})$ est l'amplitude du second ordre dans l'approximation de fermeture de l'état intermédiaire considéré. Nous commençons par présenter le second Born dans l'approximation de fermeture. Ensuite, il suit la question de l'im-

portance de la contribution de quelques états intermédiaires au calcul du second Born. Suite aux contraintes de temps impartis pour ces travaux de thèse et aux fortes exigences que requiert le calcul numérique (grande mémoire machine, techniques massives de "High Performance Computing"), nous avons juste effectué la mise en oeuvre des codes numériques et avons effectué de nombreux tests qui ont validé la faisabilité et la stabilité de ceux-ci. C'est ainsi que le cas du fondamental $L_{int} = 0$ comme état intermédiaire a été traité mais pour des paramètres non-optimaux.

E.2 Processus $(e, 2e)$ dans l'approximation de fermeture

L'amplitude du second Born est donnée par

$$T_{fi}^{Born2} = T_{fi}^{(1)} + T_{fi}^{(2)}, \quad (\text{E.2})$$

où le second terme est donné par

$$T_{fi}^{(2)} = -(2\pi)^2 \langle \psi_f | V_d G_d^{(+)} V_d | \psi_i \rangle, \quad (\text{E.3})$$

avec le propagateur $G_d^{(+)}$ dont l'expression est

$$G_d^{(+)} = \frac{1}{E - H_d + i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+. \quad (\text{E.4})$$

Notons que la relation (E.3) peut aussi être obtenu à partir de la relation donnant l'amplitude (5.1) pour qu'un système atomique qui absorbe deux photons. Mais dans ce cas là, il faut lui associer le système d'équations de Dalgarno-Lewis pour obtenir exactement cette amplitude de transition du Born. Un état propre $|\vec{q}, n\rangle$ du hamiltonien H_d peut s'écrire

$$\langle \vec{q}', n' | \vec{q}, n \rangle = \delta_{nn'} \delta(\vec{q}' - \vec{q}), \quad (\text{E.5})$$

si les états $|n\rangle$ et $|n'\rangle$ sont liés. Dans ces conditions, on a

$$\frac{1}{E - H_d + i\varepsilon} = \sum_n \int d\vec{q} \frac{|\vec{q}, n\rangle \langle \vec{q}, n|}{E - E_d + i\varepsilon}, \quad (\text{E.6})$$

avec

$$H_d |\vec{q}, n\rangle = E_d |\vec{q}, n\rangle = \left(\frac{q^2}{2} + \omega_n \right), \quad (\text{E.7})$$

où ω_n est l'énergie associée à l'état $|n\rangle$ de l'hélium et $q^2/2$ est l'énergie de l'électron incident dans les états intermédiaires. De plus, l'état initial est caractérisé par $E_{initial} = k_i^2/2 + \omega_i$ où ω_i est l'énergie du fondamental de l'atome d'hélium. Substituant la relation (E.6) dans l'équation (E.3), on obtient facilement

$$T_{fi}^{(2)} = 8\pi^2 \sum_n \int d\vec{q} \frac{\langle \psi_f | V_d | \vec{q}, n \rangle \langle \vec{q}, n | V_d | \psi_i \rangle}{q^2 - k_i^2 + 2(\omega_n - \omega_i) - i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+. \quad (\text{E.8})$$

Nous pouvons remarquer que la somme sur n porte sur tous les états discrets et continus $|n\rangle$ de l'hélium. Posons $k_n^2 = k_i^2 + 2(\omega_i - \omega_n)$, et supposons que l'électron dans l'état intermédiaire est discernable de ceux de la cible atomique, on obtient la relation

$$T_{fi}^{(2)} = 8\pi^2 \sum_n \int d\vec{q} \frac{\langle \vec{k}_f \Theta_f | V_d | \vec{q}, n \rangle \langle \vec{q}, n | V_d | \vec{k}_i \Theta_i \rangle}{q^2 - k_n^2 - i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+, \quad (\text{E.9})$$

où nous avons utilisé la notation contractée

$$\langle \vec{q}_p, \Theta_p | V | \vec{q}_q, \Theta_q \rangle = \langle e^{\vec{q}_p \cdot \vec{r}_1} \Theta_p(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | -\frac{2}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} | e^{\vec{q}_q \cdot \vec{r}_1} \Theta_q(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle. \quad (\text{E.10})$$

Dans l'approximation de fermeture [157], on suppose que les états intermédiaires $|n\rangle$ dans la relation (E.9) sont associés à une énergie moyenne $\bar{\varepsilon}$ telle que

$$k_n^2 \rightarrow p^2 \equiv \bar{k}^2 = k_i^2 + 2(\omega_i - \bar{\omega}_n) = k_i^2 - 2\bar{\omega}, \quad \bar{\omega} = \omega_n - \bar{\omega}_i, \quad (\text{E.11})$$

et la somme sur n dans la relation (E.9) devient ainsi triviale. En faisant appel à la relation de fermeture $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$, et on obtient alors

$$\bar{f}_{SB2} \equiv T_{fi}^{(2)} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int \frac{F(\vec{q}) d\vec{q}}{q^2 - p^2 - i\varepsilon}, \quad (\text{E.12})$$

où

$$F(\vec{q}) = \frac{2}{\pi^2} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} G(\vec{q}), \quad (\text{E.13})$$

avec

$$G(\vec{q}) = \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \left[\exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) + \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3) - Z \right] \\ \times \left[\exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2) + \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_3) - Z \right] | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \quad (\text{E.14})$$

et les transferts d'impulsion partiels qui sont $\vec{K}_i = \vec{k}_i - \vec{q}$ et $\vec{K}_f = \vec{k}_f - \vec{q}$. L'approximation (E.12) exige seulement la connaissance des fonctions d'onde décrivant les états initial $\Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3)$ et final $\Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3)$ de l'hélium. La notation $\bar{f}_{SB2}$ sera utilisée dans l'approximation de fermeture (voir la relation (E.12)).

E.2.1 Evaluation du terme du second Born

Notre approche de calcul du terme (E.12) consiste à utiliser les méthodes d'intégrations telles que les quadratures de Gauss pour mener à bien l'évaluation des intégrales doubles (sur $\hat{q}$) et triples (sur $\vec{q}$). Bien entendu, nous utilisons toujours la base sturmienne comme dans le cas du calcul du premier Born. La relation (E.13) peut encore s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} F(\vec{q}) = & \frac{2}{\pi^2} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | (\exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) + \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_3) \\ & + \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_3) + \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3) \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2) \\ & - Z \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) - Z \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3) \\ & - Z \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2) - Z \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_3) + Z^2) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

et si nous utilisons la symétrie des fonctions d'onde initial et final par rapport aux coordonnées positions, on obtient aisément

$$\begin{aligned} F(\vec{q}) = & \frac{2}{\pi^2} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | (2 \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) + 2 \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_3) \\ & - 2Z \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) - 2Z \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2) + Z^2) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

Dans le but d'évaluer la relation (E.16) de façon optimisée, nous faisons apparaître les éléments de matrice qui ont été utilisés dans l'étude du premier Born. Ce qui fait apparaître une nouvelle intégrale dans le plan complexe qui est telle que son expression analytique est connue. Ainsi, en posant

$$\bar{f}_{SB2} = \frac{4}{\pi^2} (\bar{f}_{SB2}^1 + \bar{f}_{SB2}^2 + \bar{f}_{SB2}^3 + \bar{f}_{SB2}^4 + \bar{f}_{SB2}^5), \quad (\text{E.17})$$

où les différents termes de la relation (E.17) sont donnés respectivement par les expressions suivantes

$$\bar{f}_{SB2}^1 = \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2}, \quad (\text{E.18})$$

$$\bar{f}_{SB2}^2 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \quad (\text{E.19})$$

$$\bar{f}_{SB2}^3 = -Z \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \quad (\text{E.20})$$

$$\bar{f}_{SB2}^4 = -Z \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle, \quad (\text{E.21})$$

$$\bar{f}_{SB2}^5 = \frac{Z^2}{2} \langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2}. \quad (\text{E.22})$$

Le recouvrement des fonctions d'onde initial et final du système collisionnel $\langle \Theta_f | \Theta_i \rangle$ et l'élément de matrice $\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle$ ont été calculés dans le cadre de l'approximation de Born. Ces éléments de matrice peuvent encore s'écrire comme

$$\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle = -(2\pi^2 K^2 / Z) T_1, \quad (\text{E.23})$$

et

$$\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}_2) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle = 2\pi^2 K^2 T_2. \quad (\text{E.24})$$

Ainsi, il va de soi que les éléments de matrice restants pour décrire le second Born dans le closure approximation notamment les éléments $\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle$ et $\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle$ seront déduits de la relation (E.24) si on change le vecteur $\vec{K}$ par les vecteurs $-\vec{K}_f$ et $\vec{K}_i$ respectivement. D'autre part, il est bien connu que l'intégrale de Dalitz [95]

$$I_D = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int d\vec{q} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} \frac{1}{K_i^2 K_f^2}, \quad (\text{E.25})$$

peut être évaluée analytiquement [139] et le résultat est donné par les expressions de la partie réelle

$$\mathcal{R}_e(I_D) = \begin{cases} \frac{\pi^3}{K} (p^2 K^2 + (p^2 - k_i^2)(p^2 - k_f^2))^{-1/2}, & p < k_f \\ \frac{\pi^3}{2pK^2}, & p = k_f \\ 0, & p \in]k_f, k_i[\\ -\frac{\pi^3}{2pK^2}, & p = k_i \\ -\frac{\pi^3}{K} (p^2 K^2 + (p^2 - k_i^2)(p^2 - k_f^2))^{-1/2}, & p > k_i \end{cases}, \quad (\text{E.26})$$

et de la partie imaginaire

$$\mathcal{I}_m(I_D) = \begin{cases} \frac{\pi^2}{K\sqrt{\Delta(p,K,k_i,k_f)}} \ln \left\{ \frac{[pK + \sqrt{\Delta(p,K,k_i,k_f)}]^2}{|p^2 - k_i^2||p^2 - k_f^2|} \right\} \\ \frac{2\pi^2}{pK^2} \quad \text{si} \quad p^2 K^2 + (p^2 - k_i^2)(p^2 - k_f^2) = 0 \\ \infty \quad \text{si} \quad p \in \{k_f, k_i\} \end{cases} \quad (\text{E.27})$$

avec $\Delta(p, K, k_i, k_f) = p^2 K^2 + (p^2 - k_i^2)(p^2 - k_f^2)$. Ainsi, nous pouvons exprimer les relations (E.18) et (E.22) en fonction de l'intégrale de Dalitz. A présent, tournons-nous sur l'élément de matrice de transition $\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3) \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2) | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle$ qui reste le seul inconnu. Si nous procédons de la même manière que lors du calcul des éléments de matrice du premier born, on obtient très facilement sous la forme du produit vecteur-matrice-vecteur

$$\langle \Theta_f | e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_3} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} | \Theta_i \rangle = \sum_{L_f, M_f} \sum_{\lambda_3} \sum_{\nu_3} \sum_{(l_2, l_3)} \sum_{(n_2, n_3)} b_{\nu_3, \lambda_3}^*(k_3) \mathcal{J}_j a_{n_2, n_3}^{l_2, l_3, L_i, M_i}, \quad (\text{E.28})$$

où $j = 1, 2, 3, 4$ et les matrices $\mathcal{J}_j$ sont données au facteur 2π près

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1 = & \sum_{l_i=|\lambda_3-l_3|}^{\lambda_3+l_3} \sum_{\mu_3=-\lambda_3}^{\lambda_3} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (-1)^{\mu_2+\mu_3-m_2} i^{l_i+l_2} [\lambda_2, l_2, \lambda_3, l_i, l_3] y_{\lambda_3 \mu_3}(\hat{k}_3) \\ & \times y_{l_2, \mu_2-m_2}^*(\hat{K}_f) y_{l_i, \mu_3+m_2}^*(\hat{K}_i) \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ m_2 & -m_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & l_2 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_i & l_3 \\ -\mu_3 & \mu_3+m_2 & -m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_i & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{\lambda_2 l_2 l_2}^{\nu_2 n_2}(K_f) I_{\lambda_3 l_i l_3}^{\nu_3 n_3}(K_i), \end{aligned} \quad (\text{E.29})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_2 = & \sum_{l_i=|\lambda_3-l_2|}^{\lambda_3+l_2} \sum_{\mu_3=-\lambda_3}^{\lambda_3} \sum_{m_3=-l_3}^{l_3} (-1)^{\mu_2+\mu_3-m_3} i^{l_i+l_3} [\lambda_2, l_3, \lambda_3, l_i, l_2] y_{\lambda_3 \mu_3}(\hat{k}_3) \\ & \times y_{l_3, \mu_2-m_3}^*(\hat{K}_f) y_{l_i, \mu_3+m_3}^*(\hat{K}_i) \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ -m_3 & m_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & l_3 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_i & l_2 \\ -\mu_3 & \mu_3+m_3 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_i & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{\lambda_2 l_2 l_3}^{\nu_2 n_3}(K_f) I_{\lambda_3 l_i l_2}^{\nu_3 n_2}(K_i), \end{aligned} \quad (\text{E.30})$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_3 = & \sum_{l_f=|\lambda_3-l_2|}^{\lambda_3+l_2} \sum_{\mu_3=-\lambda_3}^{\lambda_3} \sum_{m_2=-l_2}^{l_2} (-1)^{\mu_2+\mu_3-m_2+l_f+l_3} i^{l_f+l_3} [\lambda_3, l_f] [l_2, \lambda_2, l_3] y_{\lambda_3\mu_3}(\hat{k}_3) \\
& \times y_{l_f, \mu_3-m_2}^*(\hat{K}_f) y_{l_3, \mu_2+m_2}^*(\hat{K}_i) \begin{pmatrix} 0 & l_3 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{\lambda_2 l_3 l_3}^{\nu_2 n_3}(K_i) I_{\lambda_3 l_f l_2}^{\nu_3 n_2}(K_f) \\
& \times \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_f & l_2 \\ -\mu_3 & \mu_3 - m_2 & -m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ m_2 & -m_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_f & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{E.31}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_4 = & \sum_{l_f=|\lambda_3-l_3|}^{\lambda_3+l_3} \sum_{\mu_3=-\lambda_3}^{\lambda_3} \sum_{m_3=-l_3}^{l_3} (-1)^{\mu_2+\mu_3-m_3+l_f+l_2} i^{l_f+l_2} [\lambda_3, l_f] [l_3, \lambda_2, l_2] y_{\lambda_3\mu_3}(\hat{k}_3) \\
& \times y_{l_f, \mu_3-m_3}^*(\hat{K}_f) y_{l_2, \mu_2+m_3}^*(\hat{K}_i) \begin{pmatrix} 0 & l_2 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} I_{\lambda_2 l_2 l_2}^{\nu_2 n_2}(K_i) I_{\lambda_3 l_f l_3}^{\nu_3 n_3}(K_f) \\
& \times \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_f & l_3 \\ -\mu_3 & \mu_3 - m_3 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & l_3 & 0 \\ -m_3 & m_3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_3 & l_f & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{E.32}
\end{aligned}$$

avec $I_{\lambda_2 l_3 l_3}^{\nu_2 n_3}(K_i) \equiv I_{\lambda_2 l_3 l_3}^{\nu_2 n_3}(\kappa, K_i, \kappa)$. Les tests analytiques et numériques relatifs à la stabilité des éléments de matrice **E.28** sont donnés en **annexe D**. Il est clair que les termes $\bar{f}_{SB2}^1$ et $\bar{f}_{SB2}^5$ étant bien connus, le calcul du second Born dans l'approximation de fermeture passe donc par l'évaluation des trois termes restants $\bar{f}_{SB2}^2$, $\bar{f}_{SB2}^3$ et $\bar{f}_{SB2}^4$ qui seront gérés numériquement au moyen des méthodes de quadrature.

Revenons à l'amplitude du second Born, nous présentons ici une transformation qui nous permettra de mieux gérer les intégrales. En utilisant le théorème suivant de l'analyse complexe

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{q^2 - p^2 - i\varepsilon} = \frac{1}{q^2 - p^2} + i\pi\delta(q^2 - p^2), \tag{E.33}$$

l'intégrale **(E.34)** peut se réécrire sous la forme

$$\bar{f}_{SB2} = \mathcal{P} \int d\vec{q} \frac{F(\vec{q})}{q^2 - p^2} + i\pi \frac{p}{2} \int d\hat{q} F(p, \hat{q}), \tag{E.34}$$

où $\mathcal{P}$ est la partie principale d'une fonction complexe. Nous notons d'emblée deux problèmes qui nécessitent une attention particulière. Le premier est la présence de la partie principale en dimension trois et la seconde est liée aux singularités en K_i^2 et K_f^2 présentes dans la fonction $F(\vec{q})$.

Puisque la partie principale tridimensionnelle d'une intégrale est très difficile à calculer, nous utilisons une méthode astucieuse [94] qui consiste à ajouter et soustraire la quantité $\int d\vec{q} \frac{f(q)F(p, \hat{q})}{q^2 - p^2}$, la relation (E.34) peut alors se mettre sous la forme

$$\bar{f}_{SB2} = \int d\vec{q} \frac{F(\vec{q}) - f(q)F(p, \hat{q})}{q^2 - p^2} + \left(\mathcal{P} \int_0^\infty \frac{f(q)q^2 dq}{q^2 - p^2} + i\pi \frac{p}{2} \right) \int d\hat{q} F(p, \hat{q}), \quad (\text{E.35})$$

où nous avons introduit le facteur $f(q)$ pour accélérer la convergence de l'intégration sur la variable radiale q quand $q \rightarrow \infty$. L'intégrand du premier terme de la relation (E.35) est fini lorsque $q = p$. Ainsi la valeur principale tridimensionnelle a été transformée en une partie principale unidimensionnelle dans le second terme. Cette dernière intégrale peut facilement être évaluée numériquement ou analytiquement. Ayant résolu le problème de la partie principale, il reste le problème lié aux singularités. Pour le résoudre, on peut utiliser les deux relations suivantes (décomposition en ondes partielles) pour faciliter l'intégration sur la variable $\vec{q}$

$$\frac{1}{K_i^2} = 4\pi \sum_{l_i=0}^{\infty} \sum_{m_i=-l_i}^{l_i} \frac{l_i + 1}{2l_i + 1} \frac{q_{<}^{l_i}}{q_{>}^{l_i+2}} y_{l_i m_i}^*(\hat{q}) y_{l_i m_i}(\hat{k}_i), \quad (\text{E.36})$$

et

$$\frac{1}{K_f^2} = 4\pi \sum_{l_f=0}^{\infty} \sum_{m_f=-l_f}^{l_f} \frac{l_f + 1}{2l_f + 1} \frac{q_{<}^{l_f}}{q_{>}^{l_f+2}} y_{l_f m_f}^*(\hat{q}) y_{l_f m_f}(\hat{k}_f). \quad (\text{E.37})$$

Mais si les intégrations sur la variable $\vec{q}$ allaient être menées analytiquement, alors les relations (E.36) et (E.37) seraient très utiles. Dans cette étude, ces évaluations se font numériquement. Ainsi utiliser cette décomposition en ondes partielles alourdirait le code numérique car elles introduisent de nouvelles sommes. Par ailleurs, relevons que le problème de singularité n'est en réalité qu'apparent puisque nous pouvons toujours centrer notre élément de volume $d\vec{q}$ sur des points $\vec{q} = \vec{k}_i$ et $\vec{q} = \vec{k}_f$. Par exemple,

$$d\vec{q} \rightarrow |\vec{q} - \vec{k}_i|^2 d\widehat{(\vec{q} - \vec{k}_i)}, \quad (\text{E.38})$$

va éliminer la singularité dans la fonction $F(\vec{q})$ au point $\vec{q} = \vec{k}_i$. De façon similaire, la singularité au point $\vec{q} = \vec{k}_f$ sera tuée si l'élément de volume est plutôt centré sur le point $\vec{q} = \vec{k}_f$. Tout de même, il est plus commode de diviser le volume d'intégration en au moins deux régions de forme

complexe. Ainsi, si nous utilisons la relation (E.38) dans une région et son analogue au point $\vec{q} = \vec{k}_f$ dans l'autre, on resoudra ainsi le problème des deux singularités simultanément. Ce dont nous avons besoin, c'est une méthode qui évite une telle division mais qui est basée sur la prise en compte des deux singularités apparentes $\vec{q} = \vec{k}_i$ et $\vec{q} = \vec{k}_f$ pour une meilleure gestion des procédures numériques. C'est ainsi que l'utilisation des coordonnées prolates sphéroïdales est adéquate et très indiquée. Mais avant de développer ces coordonnées, notons que les singularités dans la relation (E.13) ne sont en réalité que d'ordre 1 puisque les éléments de matrice contenus dans la relation (E.13) tendent vers zéro comme $(\vec{q} - \vec{k}_i)$ lorsque $\vec{q} \rightarrow \vec{k}_i$ et comme $(\vec{q} - \vec{k}_f)$ lorsque $\vec{q} \rightarrow \vec{k}_f$. Ainsi, nous avons besoin d'un élément de volume qui sera proportionnel à $|\vec{q} - \vec{k}_i|$ et $|\vec{q} - \vec{k}_f|$ pour éliminer la singularité dans la relation (E.13).

Pour implémenter les coordonnées prolates sphéroïdales, introduisons premièrement le système de coordonnées cartésien (x, y, z) avec $\vec{k}_i$ suivant l'axe z et $\vec{k}_f$ dans le plan $x - z$ avec un angle θ_f par rapport à $\vec{k}_i$. Dans ce système, la variable d'intégration $\vec{q}$ est donnée par

$$\vec{q} = x\vec{e}_x + y\vec{e}_y + z\vec{e}_z. \quad (\text{E.39})$$

Ensuite, considérons un second système de coordonnées cartésien (x', y', z') avec les axes respectivement parallèles aux axes du système (x, y, z) mais une origine située au point $\vec{q} = (\vec{k}_i + \vec{k}_f)/2$ par rapport à l'origine du système (x, y, z) . Enfin, introduisons un troisième système de coordonnées (x'', y'', z'') dans lequel l'axe z'' est liée à la direction du transfert d'impulsion $\vec{K} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ et le plan $x'' - z''$ coïncide avec le plan $x' - z'$ du second système. Dans le système (x'', y'', z'') , les points $\vec{q} = \vec{k}_i$ et $\vec{q} = \vec{k}_f$ sont suivant l'axe z'' , mais de part et d'autre de l'origine et sont équidistants de $a = |\vec{k}_i - \vec{k}_f|/2$ par rapport à ce dernier. Introduisons à présent les coordonnées prolates sphéroïdales (ζ, η, ϕ) qui sont définies par

$$\zeta = \frac{K_f + K_i}{2a}, \quad \eta = \frac{K_f - K_i}{2a}, \quad (\text{E.40})$$

où K_i (K_f) est la distance de tout point $P(x'', y'', z'')$ par rapport au point $\vec{q} = \vec{k}_i$ ($\vec{q} = \vec{k}_f$) et ϕ est l'angle azimuthal dans le système de coordonnées (x'', y'', z'') . Les coordonnées (ζ, η, ϕ) vérifient les relations $1 \leq \zeta \leq \infty$, $-1 \leq \eta \leq 1$, $0 \leq \phi \leq 2\pi$ respectivement. En fonctions des

coordonnées ζ , η et ϕ , on peut écrire que

$$\begin{aligned} x'' &= a\sqrt{\zeta^2 - 1}\sqrt{1 - \eta^2}\cos(\phi) \\ y'' &= a\sqrt{\zeta^2 - 1}\sqrt{1 - \eta^2}\sin(\phi) \\ z'' &= a\zeta\eta, \end{aligned} \quad (\text{E.41})$$

et l'élément de volume s'écrit

$$d\vec{q} = a(\zeta^2 - \eta^2)d\zeta d\eta d\phi. \quad (\text{E.42})$$

En utilisant la relation (E.40), l'équation (E.42) peut encore s'écrire $aK_i K_f d\zeta d\eta d\phi$. Nous voyons immédiatement que l'élément de volume exprimé dans le système de coordonnées prolata sphéroïdale (E.42) élimine les singularités d'ordre 1 présentes dans la relation (E.13) en $\vec{q} = \vec{k}_i$ et $\vec{q} = \vec{k}_f$. Les composantes (E.39) du vecteur $\vec{q}$ sont données en fonction des variables du système de coordonnées (x'', y'', z'') par

$$\begin{aligned} x &= (a - z'')\sin(\theta_K) + x''\cos(\theta_K) \\ y &= y'' \\ z &= -(a - z'')\cos(\theta_K) + x''\sin(\theta_K) + k_i, \end{aligned} \quad (\text{E.43})$$

où

$$\cos(\theta_K) = \frac{k_i - k_f \cos(\theta_f)}{K}, \quad (\text{E.44})$$

et $0 \leq \theta_K \leq \pi/2$ car $k_f < k_i$. Les relations (E.39), (E.42), (E.43) et (E.44) définissent la variable d'intégration $\vec{q}$ en fonction des coordonnées du système prolata sphéroïdale ζ , η et ϕ .

Marchalant *et al.* [94] ont testé cette méthode d'intégration décrit ci-dessus en utilisant comme facteur de convergence

$$f(q) = \exp(-\alpha(q - p)^2),$$

dans un certain nombre de cas ayant le même type de singularités que la relation (E.13). Ils ont obtenu de très bon accord entre les résultats numériques et analytiques. En général, tous les calculs du second Born [14, 94, 15] qui existe dans la littérature sont faites dans l'approximation de Born.

E.2.2 Second Born dans l'approximation de fermeture et lien avec l'intégrale de Dalitz

Nous abordons l'évaluation des intégrales rencontrées dans l'étude du second Born dans l'approximation de fermeture tout en faisant un lien avec l'intégrale de Dalitz qui servira de test de convergence. Dans cette étude, il est question de calculer la quantité

$$I = \int d\vec{q} \frac{\langle \Theta_f(\vec{r}_2, \vec{r}_3) | M | \Theta_i(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \rangle}{(q^2 - p^2 - i\varepsilon)(K_i^2 K_f^2)}, \quad (\text{E.45})$$

où la quantité M peut être

$$M = \begin{cases} \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2), & \vec{K}_i = \vec{k}_i - \vec{q} \\ \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2), & \vec{K}_f = \vec{k}_f - \vec{q} \\ \exp(-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2) \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_3) \end{cases}, \quad (\text{E.46})$$

Pour tester la procédure d'intégration de la relation (E.45), il est astucieux de supposer que ces éléments de matrice valent 1. Ainsi, calculer numériquement le terme du second ordre de l'amplitude de transition du second Born (E.45) revient à calculer l'intégrale de Dalitz numériquement qui contient de véritables singularités

$$I_D = \int d\vec{q} \frac{1}{(q^2 - p^2 - i\varepsilon)K_i^2 K_f^2} = \text{Re}(I_D) + i\text{Im}(I_D), \quad (\text{E.47})$$

avec la partie réelle et la partie imaginaire qui sont données par les équations respectifs (E.26) et (E.27). La relation (E.47) a été obtenue en utilisant le théorème de l'analyse complexe (E.33)

$$I_D = \mathcal{P} \left(\int d\vec{q} \frac{1}{(q^2 - p^2)K_i^2 K_f^2} \right) + \frac{ip\pi}{2} \int d\hat{q} \frac{1}{K_i^2|_{q=p} K_f^2|_{q=p}}. \quad (\text{E.48})$$

Le test crucial consiste à calculer numériquement la partie réelle et la partie imaginaire de l'intégrale de Dalitz (voir **annexe D**) et de les comparer aux calculs analytiques (E.26) et (E.27). Ainsi, si cette procédure numérique converge bien alors le terme du second ordre de l'amplitude de transition convergera plus facilement puisque les éléments de matrice de l'intégrand ont un comportement plus doux que celles de l'intégrale de Dalitz. L'**annexe D** nous indique les paramètres qu'il est conseillé d'utiliser pour avoir une bonne convergence de l'intégrale de Dalitz.

Conclusion

Il fallait résoudre le problème des singularités apparentes en K_i^{-2} et K_f^{-2} dans le calcul du second Born dans le "closure approximation". Pour ce faire, le test crucial était le calcul numérique de l'intégrale de Dalitz parce qu'elle possède de véritables singularités et par suite, son évaluation est plus difficile que celle I de la relation (E.45). Ainsi, d'après l'**annexe D**, le calcul de la partie imaginaire en $q = p$ (cas le plus difficile) a été bien maîtrisé en comparant les résultats analytiques et numériques (les quadratures de Chebyshev et Chebyshev généralisée ont été utilisées pour calculer les intégrales sur ϕ_q et θ_q respectivement). La plus grosse difficulté fût le calcul de la partie réelle dont le calcul analytique prévoit qu'elle est nulle. Ainsi, la méthode de trapèze symétrique a été utilisée sans succès pour mener l'intégration sur q . La raison de cet échec est due au fait qu'une partie de l'intégrale sur θ_q n'était pas pris en compte. De plus, les paramètres cinématiques utilisés pour faire les tests correspondaient au cas les plus difficiles puisque les valeurs de K_f , p et K_i étaient très proches. Ainsi, en changeant ces paramètres de manière à éloigner K_f de p et K_i ; nous avons utilisé la "Symmetric Pairing Method" avec succès puisque nous avons obtenu une valeur de l'ordre de 10^{-5} pour la valeur principale (partie réelle). Ainsi une fois le calcul de l'intégrale de Dalitz maîtrisé, nous avons donc décidé de poursuivre les calculs du second Born dans l'approximation de fermeture en utilisant les coordonnées sphériques c'est-à-dire en supposant que les éléments de matrice constituant l'intégrand ne valent pas 1. Faute de temps et suite aux fortes exigences machines, nous n'avons pas pu achever ce calcul. Mais si les calculs numériques sont bien menés, on devrait avoir de bonnes convergences des intégrales double et triple.

E.3 Contributions de quelques états intermédiaires dans l'évaluation du 2nd Born

E.3.1 Introduction

Le second Born dans l'approximation de fermeture étant maîtrisé [14, 94, 15], nous nous attelons à présent sur la contribution de certains états intermédiaires au calcul du second Born du processus $(e, 2e)$. Nous débutons par quelques rappels sur les états intermédiaires qui sont en réalité les états obtenus par diagonalisation du hamiltonien de l'hélium pour une

valeur fixée du moment angulaire total L_{int} . Comme il est question de l'importance des états SE et DE comme états intermédiaires, nous avons décidé de débiter par l'état intermédiaire le plus bas énergétiquement. C'est ainsi que nous présentons la contribution de l'état fondamental $L_{int} = 0$ comme état intermédiaire dans le calcul du second Born. Ces calculs ont été faits juste pour des paramètres d'intégrations numériques non-optimaux car malgré les techniques massives du HPC utilisées, les temps de calculs sont gigantesques et les mémoires-machines sont insuffisantes. Nous espérons que dans un futur proche, nous allons achever ces calculs et qu'ensuite, nous passerons à l'étude des autres contributions. S'il s'avère que les contributions des états autoionisants sont prépondérantes, alors ceci serait une preuve inéluctable de l'importance des corrélations électroniques dans le processus $(e, 2e)$ avec excitation.

E.3.2 Quelques états intermédiaires

Lorsque nous diagonalisons le hamiltonien de l'hélium pour le moment angulaire total L fixé, le spectre en énergie nous renseigne sur l'état fondamental et les différents états excités. La table **E.1** nous renseigne sur les 25 premiers états pour des valeurs de L_{int} allant de 0 à 3. Focalisons-nous sur le cas $L_{int} = 0$, d'après la table **E.1**, l'énergie du fondamental pour les paramètres utilisés est de -2.90329861236771 en unité atomique. De plus, toujours pour $L_{int} = 0$, la seconde énergie -2.14594691053 est très proche de l'énergie des états dégénérés $1s2s$ et $1s2p$ (qui est de -2.125) obtenu en supposant que les deux électrons sont indépendants mais avec prise en compte des effets d'écrantages de l'électron *interne*. La troisième -2.05896022487 est très proche de l'énergie des états triplement dégénérés $1s3s$, $1s3p$ et $1s3d$ obtenu par le même modèle -2.056 . La quatrième -2.00058675864 est proche de l'énergie des états quatre fois dégénérés $1s4s$, $1s4p$, $1s4d$ et $1s4f$ obtenu par le même modèle -2.031 . Dans tous ces cas, notons que l'on ne peut pas parler d'états excités $1s2s$ ou $1s2p$ proprement dit parce que les nombres quantiques λ et l ne sont plus de bons nombres quantiques. Ainsi le bon état quantique est plutôt une combinaison linéaire de ces états dégénérés. Par ailleurs, les états autoionisants apparaissent sur le spectre en énergie $L_{int} = 0$ pour des énergies qui sont supérieures à -0.781631261325236 . Pour mieux les repérer, faisons la rotation complexe dans la diagonalisation du hamiltonien de He. Etudions ensuite la stabilité des parties imaginaires des états excités. Les états à partie imaginaire stable sont des états autoionisants

TABLE E.1 – *Le fondamentale et quelques (24) états excités de l'hélium pour $L_{int} = 0, 1, 2$, pour 20 sturmiennes, pour $\kappa = 2$ et pour 4 couples de moments angulaires.*

<i>Energie($L = 0$)</i>	<i>Energie($L = 1$)</i>	<i>Energie($L = 2$)</i>
-2.90329861236771	-2.12368908031754	-2.05510520645619
-2.14594691052701	-2.05304381100466	-2.01682241945300
-2.05896022486683	-2.00294842503279	-1.95988818512550
-2.00058675864168	-1.92707281477092	-1.87723842227195
-1.91123091236732	-1.82063572383210	-1.76580024610816
-1.78458322791626	-1.67902410068622	-1.62057070401099
-1.61416567696396	-1.49483520368399	-1.43421472575089
-1.38950560599598	-1.25721270261180	-1.19630360578296
-1.09512367157896	-0.950552113255995	-0.892355796934758
-0.781631261325236	-0.710152951946199	-0.698562535812947
-0.703115592110212	-0.692563600620706	-0.568580971828513
-0.621018622888159	-0.596963855385760	-0.557964886160558
-0.589006273553040	-0.567215365834513	-0.555400969388535
-0.544295826052962	-0.564565502572642	-0.524147166966335
-0.531826840310770	-0.549932895355974	-0.522520870981562
-0.490797795394688	-0.543928676885325	-0.519375589223979
-0.458966840679354	-0.537528674057226	-0.514211803393294
-0.408755056900818	-0.518379774532986	-0.496984162785113
-0.360320139344842	-0.511116769084535	-0.480404907339725
-0.347658547253967	-0.502388507627067	-0.465864330597888
-0.319952779034592	-0.471135486578928	-0.463775347547118
-0.291961523350608	-0.449232131750970	-0.442007896998249
-0.275331739582613	-0.443004486142234	-0.414178795665785
-0.255682092230014	-0.428554750789719	-0.387492525911187
-0.252033734811955	-0.377450772276008	-0.383675237271552

(résonnants). Les tables **E.2**, **E.3** et **E.4** nous donne un bref aperçu de la stabilité de la partie imaginaire des états associés aux énergies débutant à $-0.7 u.a.$ pour $L = 0$. Le test de la stabilité de la partie imaginaire se fait en variant les paramètres de la base notamment la valeur du paramètre non linéaire, du nombre de couples de moments angulaires et du nombre de sturmiennes utilisé pour décrire chaque électron du système atomique.

Comme l'état fondamental $L_{int} = 0$ est l'état intermédiaire le plus bas, nous allons à présent nous pencher sur la contribution de celui-ci

TABLE E.2 – Test de stabilité de la partie imaginaire des états résonnants pour repérer les états autonionisants pour $L_{int} = 0$, $\kappa = 0.5$, $N = 20$ sturmiennes et 4 couples de moments angulaires

Etat	$\mathcal{Re}(E)$	$\mathcal{Im}(E)$	θ_{rep}
16	-1.57408152362599	-0.203881602662430	0.1288
17	-1.27644986147546	-0.334865251447745	0.25656
18	-0.777916611793566	-0.228158125739419(-2)	0.2933(-2)
19	-0.634864558124570	-0.616918937491201	0.7711
20	-0.621156823582156	-0.101823010402010(-3)	0.16393(-3)
21	-0.589884176540859	-0.709366547849921(-3)	0.1203(-2)
22	-0.547996082150096	-0.387956210047349(-4)	0.70796(-4)
23	-0.544872803830335	-0.255712447737930(-3)	0.4693(-3)
24	-0.527679560441203	-0.245853943373524(-4)	0.4659(-4)

TABLE E.3 – Test de stabilité de la partie imaginaire des états résonnants pour repérer les états autonionisants pour $L_{int} = 0$, $\kappa = 2$, $N = 20$ sturmiennes et 4 couples de moments angulaires

Etat	$\mathcal{Re}(E)$	$\mathcal{Im}(E)$	θ_{rep}
10	-0.798186725605065	-0.501392228609163	0.5609
11	-0.777853669933655	-0.227798847188350(-2)	0.2929(-2)
12	-0.621184891408039	-0.111619820113027(-3)	0.1797(-3)
13	-0.590043299052623	-0.895966030134995(-3)	0.1519(-2)
14	-0.546247949089590	-0.380353248298644(-2)	0.6963(-2)
15	-0.537481321678557	-0.126648059689182(-1)	0.2356(-1)
16	-0.497561803708840	-0.245365581747561(-1)	0.4927(-1)

comme état intermédiaire dans le calcul du second Born. Tous les tests relatif à la convergence de l'intégrale angulaire $I_{\Omega}(p)$ qui est fondamentale pour la stabilité de la matrice de transition du second Born, sont présentés en **annexe D**. Il en ressort des précisions sur les valeurs des paramètres des quadratures en fonction du moment angulaire total final L_f qu'il est conseillé d'utiliser.

TABLE E.4 – *Test de stabilité de la partie imaginaire des états résonnants pour repérer les états autonionisants pour $L_{int} = 0$, $\kappa = 2$, $N = 30$ sturmiennes et 4 couples de moments angulaires*

Etat	$Re(E)$	$Im(E)$	θ_{rep}
13	-1.13067219259111	-0.358187639938644	0.3068
14	-0.897856727702559	-0.446306031103720	0.4613
15	-0.777850573486327	-0.227657532234413(-2)	0.2927(-2)
16	-0.621183620395497	-0.111471138373345(-3)	0.1795(-3)
17	-0.615664065269009	-0.552718533547378	0.7316
18	-0.589881206221686	-0.680903999823894(-3)	0.1154(-2)

E.3.3 Contribution du fondamental ($L_{int} = 0$) comme état intermédiaire

Dans cette sous-section, nous étudions la contribution du fondamental $L_{int} = 0$ comme état intermédiaire dans le calcul du second Born. Pour ce faire, nous avons considéré le processus $(e, 2e)$ sans excitation de l'hélium pour un électron diffusé avec 5500 eV et un angle 0.35°. De plus, nous supposons que l'électron est éjecté avec 5 eV. Dans le cadre des tests numériques, nous avons choisi 4 couples de moments angulaires, le paramètre non linéaire est de $\kappa = 2$, et des paramètres qui ne sont pas optimaux. Ces paramètres sont le nombre de sturmiennes par électron qui est de $N = 5$, le nombre de points de la quadrature de Chebyshev qui a été pris égal à $ncheb_{new} = 10$, le nombre de points de la quadrature de Legendre qui a été pris aussi égal à $nleg = 10$. Ces paramètres sont encore loin de ceux qui sont nécessaires pour avoir de bons résultats. Les résultats du premier Born et du second Born obtenus par notre approche théorique sont consignés dans la table **E.5**. On observe que le recouvrement entre les résultats du premier Born et du second Born dans le cas où on ne prend en compte que la contribution du fondamental comme état intermédiaire pour des paramètres non-optimaux est de 2 à 3 chiffres. Comme l'épaisseur d'un trait est de cet ordre, le tracer des deux courbes en fonction de l'angle d'éjection donne deux courbes confondues. Notons que ce recouvrement est juste indicateur de la stabilité du code numérique et l'étape suivante consistera à augmenter les

TABLE E.5 – *Résultat du premier Born et résultat du second Born avec la contribution du fondamental $L_{int} = 0$ comme état intermédiaire pour $\kappa = 2$, $N = 5$ sturmiennes, 4 couples de moments angulaires, les nombres de points de la quadrature de Chebyshev et Legendre égaux à $nleg = nleg_{new} = ncheb = ncheb_{new} = 10$*

$\theta_e(deg)$	$TDCSB1(u.a.)$	$TDCSB12(u.a.)$
0	5.1438273968123687	5.1446983065143481
15	14.060235725778927	14.108655497573295
30	25.07891585910798	25.142270373549373
50	37.441983705774845	37.474037380889385
55	39.345959973166607	39.352252354010552
60	40.567722339713825	40.575723047884324
65	41.075341033293611	41.097319909038291
70	40.887026839786202	40.896869684299233
75	39.978945210247048	39.982130617476798
90	33.427990737555277	33.431661663795531
135	3.8985225365254634	3.9169662171699873
150	0.149169973852496	0.161227959597965
165	1.3519848269074768	1.3193723550429075
180	6.3862520896894708	6.3844195268733106
210	20.947347049880932	20.833823746298066
235	28.89507350090491	28.889092359146122
240	29.551180930029592	29.532229634206644
245	29.824982554947766	29.804337190964091
250	29.704625703041451	29.699911025504171
265	27.192739727753327	27.186606700335549
275	23.881693946803928	23.87026640208229
290	17.167129990065121	17.15959532752483
295	14.683911223810595	14.669734605307088
310	7.3815467015984986	7.3652689050357836
340	3.30772039871212(-2)	3.36493550465314(-2)
355	3.0420349059200928	3.0443222941555446
360	5.1438273968123687	5.1446983065143481

nombres de points des différentes quadratures pour assurer une bonne convergence des intégrales radiale et angulaire.

E.3.4 Conclusion

Comme il était question d'évaluer le second Born dans l'approximation de fermeture et la contribution de quelques états intermédiaires à la section efficace différentielle du processus $(e, 2e)$ dans la seconde approximation de Born, nous avons posé les jalons de cette étude. Nous avons effectué la mise en oeuvre des codes numériques puisque la réalisation complète des codes exige un temps matériel immense et des exigences machines énormes (HPC massif surtout une grande mémoire). C'est ainsi que nous nous sommes limités juste à la contribution de l'état fondamental comme état intermédiaire pour des paramètres non-optimaux c'est-à-dire des paramètres petits qui sont encore très loin des paramètres optimaux dictés par l'**annexe D**. En perspective, une fois nous aurons terminé avec cette contribution pour des paramètres optimaux, nous en ferons de même pour les autres contributions notamment les autres états intermédiaires tels que l'état métastable $(1s2s)$, et quelques états autoionisants qui sont présentés dans les tables **E.2**, **E.3** et **E.4**.

Annexe F

Expression des termes de la section efficace avec AMM en polarisation linéaire et circulaire

Dans cette annexe, nous donnons l'expression explicite des différents termes qui apparaissent dans les sections efficaces différentielles avec AMM en polarisation linéaire et circulaire. Mais avant d'y arriver, faisons un bref rappel de quelques propriétés des matrices γ et du calcul des traces de leur produit. Nous utilisons la métrique de Minkowski. Les relations suivantes [211] ont été utilisées dans ce travail

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad \gamma_\mu = g_{\mu\nu}\gamma^\nu, \quad \gamma_\mu\gamma^\mu = 4, \quad \gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\mu = -2\gamma^\nu, \quad (\text{F.1})$$

$$\gamma_\mu\gamma^\nu\gamma^\sigma\gamma^\mu = 4g^{\nu\sigma}, \quad (\gamma a) = \gamma^\mu a_\mu = \not{a}, \quad (a\gamma)(b\gamma) + (b\gamma)(a\gamma) = 2(ab), \quad (\text{F.2})$$

$$\begin{aligned} \gamma_\mu(a\gamma)\gamma^\mu &= -2(a\gamma), \quad \gamma_\mu(a\gamma)(b\gamma)\gamma^\mu = 4(ab), \\ \gamma_\mu(a\gamma)(b\gamma)(c\gamma)\gamma^\mu &= -2(c\gamma)(b\gamma)(a\gamma). \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

S'agissant des traces, on a les relations suivantes

$$T^{\mu_1\mu_2\cdots\mu_n} = \frac{1}{4}Tr(\gamma^{\mu_1}\gamma^{\mu_2}\cdots\gamma^{\mu_n}), \quad T^{\mu\nu} = g^{\mu\nu}, \quad Tr\gamma^\mu = 0, \quad (\text{F.4})$$

$$T^{\lambda\mu\nu\rho} = g^{\lambda\mu}g^{\nu\rho} - g^{\lambda\nu}g^{\mu\rho} + g^{\lambda\rho}g^{\mu\nu}, \quad T^{\lambda\mu\nu\rho} = 2g^{\lambda\mu}T^{\nu\rho} - T^{\mu\lambda\nu\rho}, \quad (\text{F.5})$$

La trace du produit d'un nombre impair des matrices γ est nulle. D'autre part,

$$Tr(a\gamma)(b\gamma) = 4(ab), \quad Tr(a\gamma)(b\gamma)(c\gamma)(d\gamma) = (ab)(cd) - (ac)(bd) + (ad)(bc). \quad (\text{F.6})$$

F.1 Polarisation linéaire

En utilisant les propriétés des matrices de Dirac et les techniques usuelles du calcul des traces du produit des matrices γ , on obtient en polarisation linéaire les termes K_i suivants

$$\begin{aligned}
 K_1 = 2|B_n|^2 \{ & c^2[c^2 + (p_i \tilde{p}_f)] - 2\alpha_i c^3[(kp_i) + (k\tilde{p}_f)] - 2\alpha_f c^3[(kp_f) + (k\tilde{p}_i)] \\
 & + 2\alpha_i^2 c^2(kp_i)(k\tilde{p}_f) + 2\alpha_f^2 c^2(k\tilde{p}_i)(kp_f) + 4\alpha_i \alpha_f c^2[(kp_i)(kp_f) + 2k_0^2 c^2] \\
 & - 8\alpha_i^2 \alpha_f c^3 k_0^2(kp_i) - 8\alpha_f^2 \alpha_i c^3 k_0^2(kp_f) + 8\alpha_i^2 \alpha_f^2 c^2 k_0^2(kp_i)(kp_f) \}, \quad (F.7)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K_2 = 2|B_{n1}|^2 c^2 \{ & 2A^2(\nu_i^2 - 2\beta\alpha_i \nu_i - c^2 \delta_i^2)[(kp_i)(kp_f) - 2k_0 p_{f0}(kp_i)] + 2\nu_i \nu_f \\
 & \times [4k_0^2(Ap_i)(Ap_f) - A^2(kp_i)(kp_f) - A^2(k\tilde{p}_i)(k\tilde{p}_f) + 2k_0^2 A^2(c^2 + (p_i \tilde{p}_f))] \\
 & + 2A^2(\nu_f^2 - 2\beta\alpha_f \nu_f - c^2 \delta_f^2 + \alpha_f^2 \beta^2 + \alpha_i^2 \beta^2)[(kp_i)(kp_f) - 2k_0 p_{i0}(kp_f)] \\
 & + 4(c^2 \delta_i \delta_f + \alpha_i \alpha_f \beta^2 - \beta\alpha_f \nu_i - \beta\alpha_i \nu_f)[-A^2(kp_i)(kp_f) + 2k_0^2(Ap_i)(Ap_f) \\
 & + A^2 k_0 p_{f0}(kp_i) + A^2 k_0 p_{i0}(kp_f) A^2 k_0^2(c^2 - (p_i p_f))] - 8A^2 k_0^2(\alpha^2 \nu_f^2 - 2\alpha_i \alpha_f \nu_i \nu_f \\
 & + \alpha_f^2 \nu_i^2 - c^2 \alpha_f^2 \delta_i^2 - 2\alpha_i \alpha_f \delta_i \delta_f + c^2 \alpha^2 \delta_f^2)(kp_i)(kp_f) - 8cA^2 k_0^2(\nu_i \nu_f \alpha_i - \nu_i^2 \alpha_f \\
 & + c^2 \alpha_f \delta_i^2 + c^2 \alpha_i \delta_i \delta_f - \alpha_i^2 \nu_f \beta + \alpha_i \alpha_f \nu_i \beta)(kp_i) + 8cA^2 k_0^2(\alpha_i \nu_f^2 - \alpha_i \nu_i \nu_f \\
 & - \alpha_i \alpha_f \nu_f \beta - c^2 \alpha_i \delta_f^2 - c^2 \alpha_f \delta_i \delta_f + \alpha_f^2 \nu_i \beta)(kp_f) \}, \quad (F.8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K_3 = 2|B_{n2}(\xi)|^2 (A^2)^2 c^2 \{ & 2\beta^4[c^2 + (p_i \tilde{p}_f)] + 4(\beta^2 \nu_i \nu_f - c^2 \beta^2 \delta_i \delta_f)[k_0 p_{i0}(kp_f) \\
 & + k_0 p_{f0}(kp_i) + k_0^2(c^2 - (p_i p_f))] - 2c\beta^3 \nu_i[(kp_i) + (k\tilde{p}_f)] - 2c\beta^3 \nu_f[(kp_f) \\
 & + (k\tilde{p}_i)] + 2(c^2 \beta^2 \delta_i^2 - \beta^2 \nu_i^2)[(kp_i)(kp_f) - 2k_0 p_{f0}(kp_i)] + 2(c^2 \beta^2 \delta_f^2 - \beta^2 \nu_f^2) \\
 & \times [(kp_i)(kp_f) - 2k_0 p_{i0}(kp_f)] + 4(c^2 \beta^2 \delta_i \delta_f + \beta^2 \nu_i \nu_f)[(kp_i)(kp_f) - k_0 p_{i0}(kp_f) \\
 & - k_0 p_{f0}(kp_i) + k_0^2(c^2 + (p_i p_f))] + 8ck_0^2(c^2 \beta \delta_i^2 \nu_f - \beta \nu_i^2 \nu_f)(kp_i) + 8ck_0^2(c^2 \beta \delta_f^2 \nu_i \\
 & - \beta \nu_f^2 \nu_i)(kp_f) + 8k_0^2(c^4 \delta_i^2 \delta_f^2 + 2c^3 \nu_i \delta_i \delta_f^2 - 4c^2 \nu_i \nu_f \delta_i \delta_f - c^2 \nu_i^2 \delta_f^2 - c^2 \nu_f^2 \delta_i^2 \\
 & + \nu_i^2 \nu_f^2)(kp_i)(kp_f) \}, \quad (F.9)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 K_4 = 2B_n^*(\xi)B_{n1}(\xi)c^2 \{ & 2(\beta\alpha_i - \nu_i)[(kp_i)(Ap_f) + 2k_0 p_{f0}(Ap_i)] - (kp_f)(Ap_i) \\
 & + 2(\beta\alpha_f - \nu_f)[(kp_f)(Ap_i) - (kp_i)(Ap_f) + 2k_0 p_{i0}(Ap_f)] + 4ck_0^2(\alpha_i \nu_f - \alpha_f \nu_i) \\
 & \times [(Ap_f) - (Ap_i)] + 4ck_0^2(\alpha_i \nu_f - 2\alpha_i \alpha_f \beta + \alpha_f \nu_i)[(Ap_f) + (Ap_i)] \\
 & + 8k_0^2(\alpha_f \alpha_i^2 \beta - \alpha_i^2 \nu_f)(Ap_f)(kp_i) + 8k_0^2(\alpha_i \alpha_f^2 \beta - \alpha_f^2 \nu_i)(Ap_i)(kp_f) \}, \quad (F.10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_5 = & 2B_n^*(\xi)B_{n2}(\xi)c^2\{ -2A^2\beta^2[c^2 + (p_i\tilde{p}_f)] + 2cA^2(\beta\nu_i + \alpha_i\beta^2)[(kp_i) - (kp_f) \\
& + 2k_0p_{f0}] + 2cA^2(\beta\nu_f + \alpha_f\beta^2)[(kp_f) - (kp_i) + 2k_0p_{i0}] + 4A^2(c^2\delta_i\delta_f - \nu_i\nu_f \\
& + \alpha_i\alpha_f\beta^2)[k_0p_{i0}(kp_f) + k_0p_{f0}(kp_i) + k_0^2(c^2 - (p_i p_f))] + 4A^2\alpha_i\beta\nu_i[(kp_i)(kp_f) \\
& - 2k_0p_{f0}(kp_i)] + 4A^2\alpha_f\beta\nu_f[(kp_i)(kp_f) - 2k_0p_{i0}(kp_f)] + 8cA^2k_0^2(\alpha_i\nu_i\nu_f \\
& - c^2\alpha_i\delta_i\delta_f + \alpha_i\alpha_f\beta\nu_i)(kp_i) + 8cA^2k_0^2(\alpha_f\nu_i\nu_f - c^2\alpha_f\delta_i\delta_f + \alpha_i\alpha_f\beta\nu_f)(kp_f) \\
& + 4A^2(\alpha_i\beta\nu_f - \alpha_f\beta\nu_i)[(kp_i)(kp_f) - k_0p_{i0}(kp_f) - k_0p_{f0}(kp_i) + k_0^2(c^2 + (p_i p_f))] \\
& + 16A^2k_0^2(c^2\alpha_i\alpha_f\delta_i\delta_f - \alpha_i\alpha_f\nu_i\nu_f)(kp_i)(kp_f) \}, \tag{F.11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
K_6 = & 2B_{n1}^*(\xi)BC_{n2}(\xi)A^2c^2\{ 2(\beta^2\nu_i - \beta^3\alpha_i)[(Ap_f)(kp_i) - (Ap_i)(kp_f) + 2k_0p_{f0}(Ap_i)] \\
& + 2(\beta^2\nu_f - \beta^3\alpha_f)[(Ap_i)(kp_f) - (Ap_f)(kp_i) + 2k_0p_{i0}(Ap_f)] + 4ck_0^2(\beta^2\alpha_f\nu_i \\
& + \beta^2\alpha_i\nu_f - 2\beta\nu_i\nu_f - 2c^2\beta\delta_i\delta_f)[(Ap_f) + (Ap_i)] + 4ck_0^2(\beta^2\nu_f\alpha_i + \beta^2\nu_i\alpha_f) \\
& \times [(Ap_f) - (Ap_i)] + 8k_0^2(\nu_f\nu_i^2 - c^2\nu_f\delta_i^2 - \beta\alpha_f\nu_i^2 - c^2\beta\alpha_f\delta_i^2 + 2c^2\beta\alpha_i\delta_i\delta_f) \\
& \times (Ap_f)(kp_i) + 8k_0^2(\nu_i\nu_f^2 - c^2\nu_i\delta_f^2 - \beta\alpha_i\nu_f^2 + c^2\beta\alpha_i\delta_f^2)(Ap_i)(kp_f) \}. \tag{F.12}
\end{aligned}$$

Nous avons utilisé les abréviations $\tilde{v}^\mu = (v^0, -\vec{v}^i)$ de la référence [173].

F.2 Polarisation circulaire

Posons $e_i = 1/(kp_i) = 1/(kq_i)$, $e_f = 1/(kp_f) = 1/(kq_f)$, $\tilde{e}_i = 1/(k\tilde{q}_i)$ et $\tilde{e}_f = 1/(k\tilde{q}_f)$. Pour la polarisation circulaire, les termes $\mathcal{C}_i$ sont donnés

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_1 = & \frac{1}{2} \left[\left\{ c^2 + (Q_i Q_f / c^2) + \vec{q}_f \cdot \vec{q}_i + (A^2 / 2c^2) (\tilde{e}_f^{-1} e_i + \tilde{e}_i^{-1} e_f) + (A^2)^2 \omega^2 e_i e_f / (2c^6) \right\} \right. \\
& \times \{ (1 - \beta_f \beta_i A^2) [c^2 (1 + 4\omega^2 \delta_i \delta_f A^2) + 4\omega^2 (\alpha_i \alpha_f - \nu_i \nu_f A^2)] \} + \{ (\nu_f \beta_i A^2 - \alpha_f) \\
& \times [2c^3 (1 - \beta_i \beta_f A^2) + 8c\omega^2 \{ c^2 \delta_i \delta_f A^2 + (\alpha_i \alpha_f - \nu_i \nu_f A^2) \}] - 6c^3 \omega^2 (\delta_f \beta_i A^2) \\
& \times (\delta_i \beta_f A^2) \} (kq_f) + \{ (\beta_f \nu_i A^2 - \alpha_i) [2c^3 (1 - \beta_i \beta_f A^2) + 8c\omega^2 \{ (\alpha_i \alpha_f - \nu_i \nu_f A^2) \\
& + c^2 \delta_i \delta_f A^2 \}] + 4c^3 \omega^2 \beta_f \delta_i A^2 (\nu_f \delta_i - \nu_i \delta_f + c \delta_f \delta_i) A^2 \} (kq_i) + \{ 2c^3 (1 - \beta_f \beta_i A^2) \\
& \times (\nu_f \beta_i A^2 - \alpha_f) - 4c^3 \omega^2 \beta_f \delta_i A^2 (\nu_f \delta_i - \nu_i \delta_f + c \delta_f \delta_i) A^2 \} [\tilde{e}_i^{-1} + A^2 \omega^2 e_i / c^4] \\
& + \{ (\nu_f \beta_i A^2 - \alpha_f) [2c^2 (\nu_f \beta_i A^2 - \alpha_f) - 4c^3 \delta_f \beta_i A^2] \} [\tilde{e}_i^{-1} e_f^{-1} + A^2 \omega^2 / c^4] \\
& + \{ -2c^4 (\beta_f \delta_i A^2)^2 + (\beta_f \nu_i A^2 - \alpha_i) [c^5 \beta_f \delta_i A^2 / \omega^2 + 2c^2 (\beta_f \nu_i A^2 - \alpha_i)] \} \\
& \times [\tilde{e}_f^{-1} e_i + A^2 \omega^2 e_f e_i^{-1} / c^4] + \{ 2c^2 (1 - \beta_f \beta_i A^2) [(\alpha_f \alpha_i - \nu_i \nu_f A^2) + c^2 \delta_i \delta_f A^2] \\
& + 8c^2 \omega^2 \delta_f \nu_i (A^2)^2 (2\nu_f \delta_i - \delta_f \nu_i) - 4c^2 [c^2 (\delta_f \beta_i A^2)^2 + 2\omega^2 (\nu_f \delta_i A^2)^2] \\
& + 8\omega^2 (\alpha_i \alpha_f - \nu_i \nu_f A^2) + 8c^2 \omega^2 \delta_i \delta_f A^2 (2 + c^2 \delta_i \delta_f A^2) \} e_f^{-1} e_i^{-1} + \{ -2c^2 (1 - \beta_i \beta_f A^2) \\
& \times [(\alpha_i \alpha_f - \nu_i \nu_f A^2) + c^2 \delta_i \delta_f A^2] \} [\tilde{e}_f^{-1} \tilde{e}_i^{-1} + (A^2 \omega^2 / c^4) (\tilde{e}_f^{-1} e_i + \tilde{e}_i^{-1} e_f) + (A^2)^2 \omega^4 \\
& \times e_i e_f / c^8] + \{ c^2 + (Q_i Q_f / c^2) - \vec{q}_f \cdot \vec{q}_i + (A^2 / 2c^2) (e_i^{-1} e_f + e_f^{-1} e_i) - (c^2 / 2\omega^2) [e_i^{-1} \tilde{e}_f^{-1} \\
& + e_f^{-1} \tilde{e}_i^{-1} + (A^2 \omega^2 / c^4) (1 + e_f e_i^{-1})] \} \{ (\beta_f \nu_i A^2 - \alpha_i) [4\omega^2 (\nu_f \beta_i A^2 - \alpha_f) - 2c^3 \beta_i \delta_i A^2] \\
& + 4c^2 \omega^2 (\delta_i \beta_f A^2) (\delta_f \beta_i A^2) \} \}, \tag{F.13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_2 = & [\{-4c\omega^2 A^2[\alpha_i(2\nu_f + \nu_i) - \alpha_f(2\nu_i + c\delta_i) + \alpha_f(c^2\delta_i^2 + \alpha_f\nu_i\beta_i) - c^2\delta_f(\delta_i\alpha_f + \delta_f\alpha_i)]\}e_f^{-1} \\
& + \{4c\omega^2 A^2[\alpha_f(c^2\delta_i^2 + \alpha_f\nu_i\beta_i) - c^2\delta_f(\delta_i\alpha_f + \delta_f\alpha_i)]\}(\tilde{e}_f^{-1} + A^2\omega^2 e_f/c^4) \\
& + \{-4c\omega^2 A^2[-\nu_i(\nu_f\alpha_i - \alpha_f\nu_i + \alpha_i\alpha_f\beta_f) - c^2\delta_i(\delta_i\alpha_f + 2\delta_f\alpha_i) + \nu_f\alpha_i(\alpha_i\beta_f - \alpha_f\beta_i)]\} \\
& \times (e_i^{-1} - \tilde{e}_i^{-1} - A^2\omega^2 e_i/c^4) + \{4\omega^2 A^2[-\nu_f\alpha_i(\nu_f\alpha_i - 2\alpha_f\nu_i) + c^2\alpha_f\delta_i(\alpha_f\delta_i + 2\delta_f\alpha_i) \\
& + c^2\nu_f(\nu_f - 2\alpha_f\beta_i) + (\alpha_f\nu_i)^2 + c^2(\delta_f\alpha_i)^2 + c^2(\alpha_f\beta_i)^2 + c^4\delta_f^2]\}e_i^{-1}e_f^{-1} + \{-4\omega^2 A^2 \\
& \times [-\nu_f\alpha_i(\nu_f\alpha_i - 2\nu_i\alpha_f) + (\nu_i\alpha_f)^2 + c^2(\delta_f\alpha_i)^2 + c^2(\alpha_f\beta_i)^2 + c^4\delta_f^2]\}e_i^{-1}e_f^{-1} \\
& + \{-2A^2c^2[-\nu_i(\nu_i - 2\beta_f\alpha_i) - (\beta_f\alpha_i)^2 + c^2\delta_i^2]\}(\tilde{e}_f^{-1}e_i^{-1} + A^2\omega^2 e_f e_i^{-1}/c^4) - 4A^2\omega^2 \\
& \times [-\beta_f(2\nu_f + \nu_i\alpha_f - \alpha_f\beta_i\alpha_i)]\{c^2 + Q_iQ_f/c^2 - \vec{q}_f \cdot \vec{q}_i + (A^2/2c^2)(e_f e_i^{-1} + e_i e_f^{-1}) \\
& + (q_{fx}q_{ix} + q_{fy}q_{iy}) - (c^2/2\omega^2 A^2)[\tilde{e}_i^{-1}e_f^{-1} + \tilde{e}_f^{-1}e_i^{-1} + (A^2\omega^2/c^4)(1 + e_f e_i^{-1})]\} \\
& + 4\omega^2\nu_i\nu_f\{(c^2 A^2/2\omega^2)[\tilde{e}_i^{-1}\tilde{e}_f^{-1} + e_f^{-1}e_i^{-1} + (A^2\omega^2/c^4)(e_i\tilde{e}_f^{-1} + e_f\tilde{e}_i^{-1}) + (A^2)^2\omega^4 \\
& \times e_i e_f/c^8] - A^2\{c^2 + Q_iQ_f/c^2 + \vec{q}_f \cdot \vec{q}_i + (A^2/2c^2)(e_i\tilde{e}_f^{-1} + e_f\tilde{e}_i^{-1}) + (A^2)^2\omega^2 e_i e_f/2c^6 \\
& + (q_{fx}q_{ix} + q_{fy}q_{iy})\}\}, \tag{F.14}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_3 = & \cos(2\phi_0) [-8A^2\omega^2\{-\beta_f(2\nu_f + \nu_i\alpha_f - \alpha_f\beta_i\alpha_i) + c^2\delta_i\delta_f + \nu_i\nu_f\}(q_{fx}q_{ix} - q_{fy}q_{iy})] \\
& + \sin(2\phi_0) [-8A^2\omega^2\{-\beta_i(2\nu_i + \nu_f\alpha_i - \alpha_i\beta_f\alpha_f) + c^2\delta_f\delta_i + \nu_f\nu_i\}(q_{fx}q_{ix} + q_{fy}q_{iy})]. \tag{F.15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_4 = & [4c\omega^2(\nu_f\alpha_i - \alpha_f\nu_i)(1 - \beta_i\beta_f A^2)[(\dot{A}q_f) - (\dot{A}q_i)] + [4c\omega^2(\beta_f\alpha_i - \nu_i)(\nu_f\beta_i A^2 - \alpha_f) \\
& + 4c\omega^2(\alpha_f\beta_i - \nu_f)(\beta_f\nu_i A^2 - \alpha_i) - 8c^3\omega^2\delta_f\delta_i\beta_i][(\dot{A}q_i) + (\dot{A}q_f)] + 2c^2(\alpha_i\beta_f - \nu_f) \\
& \times (1 - \beta_i\beta_f A^2)[(\dot{A}q_i)e_f^{-1} + (\dot{A}q_f)e_i^{-1}] + 2c^2(\alpha_f\beta_i - \nu_i)(1 - \beta_i\beta_f A^2)[\tilde{e}_f^{-1}(\dot{A}q_i) + e_i^{-1} \\
& \times (\dot{A}q_f) + (A^2\omega^2/c^4)(\dot{A}q_i)e_f] + [2\omega^2(\alpha_f\nu_i - \nu_f\alpha_i)\{(\nu_f\beta_i A^2 - \alpha_f) - (\nu_i\beta_f A^2 - \alpha_i)\} \\
& + 2c\omega^2(\nu_f + \nu_i)(\delta_f\nu_i - \delta_i\nu_f)A^2 - 2c^2\omega^2(\delta_f + \delta_i)(\delta_f\nu_i - \delta_i\nu_f)A^2 - 2c\omega^2(\alpha_f\beta_i + \alpha_i\beta_f) \\
& \times (\delta_f\nu_i - \delta_i\nu_f)A^2 - 2c^2\omega^2\delta_i\delta_f(\alpha_f\beta_i + \alpha_i\beta_f)A^2 + 2c\omega^2(\nu_f\alpha_i - \nu_i\alpha_f)(\beta_f\delta_i - \beta_i\delta_f)A^2 \\
& - 2c^2\omega^2\delta_f\delta_i(\nu_i + \nu_f)A^2][e_f^{-1}(\dot{A}q_i) - e_i^{-1}(\dot{A}q_f)] + [4\omega^2(\alpha_i\alpha_f - \nu_i\nu_f A^2)(2\beta_f\alpha_i - 2\nu_i \\
& - c\delta_i) + 4\omega^2(\alpha_f\nu_i - \alpha_i\nu_f)(\nu_i\beta_f A^2 - \alpha_i) - 4c^2\omega^2\delta_f\delta_i(\beta_f\alpha_i - 2c\delta_i)A^2 + 4c\omega^2\delta_f\nu_i \\
& \times (\nu_i - \alpha_i\beta_f + 2c\delta_i)A^2 - 4c\omega^2\delta_i\nu_f(\nu_i - \alpha_i\beta_f + 2c\delta_i)A^2 + 4c^2\omega^2\beta_f\delta_i(\alpha_f\delta_i + \alpha_i\delta_f)A^2 \\
& + 4c\omega^2\delta_f(c\nu_i\delta_i - \nu_f\beta_i)A^2](\dot{A}q_f)e_i^{-1} + [4\omega^2(\alpha_f\nu_i - \alpha_i\nu_f)(\nu_f\beta_i A^2 - \alpha_f) + 4\omega^2(\alpha_i\alpha_f \\
& - \nu_i\nu_f A^2)(2\alpha_f\beta_i - 2\nu_f - c\delta_f) - 4c\omega^2\delta_f\nu_i(\nu_f + 2c\delta_f - \alpha_f\beta_i)A^2 + 4c\omega^2\delta_i\nu_f(2c\delta_f \\
& - \alpha_f\beta_i)](\dot{A}q_i)e_f^{-1}], \tag{F.16}
\end{aligned}$$

Bibliographie

- [1] Richter K, Tanner G et Wintgen D, 1993 *Phys. Rev. A* **48**, 4182.
- [2] Madronero J, Hilico L, Grémaud B, Delande D et Buchleitner A, 2007 *Math. Struct. in Comp. Science* **17**, 225.
- [3] Fomouuo E, Antoine Ph, Piraux B, Malégat L, Bachau H et Shakeshaft R 2008 *J. Phys. B* **41** 051001.
- [4] Bachau H et Lambropoulos P, 1991 *Phys. Rev. A* **44**, R9.
- [5] Shakeshaft R 2007 *Phys. Rev. A* **76** 063405.
- [6] Feng L et van der Hart H W 2003 *J. Phys. B* **36** L1.
- [7] Lagmago Kamta G et Piraux B *Thèse de doctorat*, Université Nationale du Benin et Université Catholique de Louvain, (1999).
- [8] Fomouuo E *Thèse de doctorat*, Université Catholique de Louvain, (2008).
- [9] Byron F W et Joachain C J 1998 *J.Phys.B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** 1141.
- [10] Fomouuo E, Lagmago Kamta G, Edah G et Piraux B 2006 *Phys. Rev. A* **74** 063409.
- [11] Fomouuo E, Laulan S, Bachau H et Piraux B 2006 *J. Phys. B* **39** S427.
- [12] Marchalant P J, Rasch J, Whelan C T, Madison D H, et Walters H R J 1999 *J. Phys. B* **32** L705.
- [13] Rouvellou B, Rioual R Pochat A, Tweed R J, Langlois J, Nguyen Vien G et Robaux O 2000 *J.Phys.B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** L599.
- [14] Chen Z et Madison D H 2005 *J. Phys. B* **38** 4195.
- [15] Bartschat K, Bray I, Fursa D V et Stelbovics T 2007 *Phys. Rev. A* **76** 024703.
- [16] Bray I, Bartschat K et Stelbovics 2003 *Phys. Rev. A* **67** R060704.
- [17] Kheifets A S, Bray I et Bartschat K 1999 *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **32** L433-438.
- [18] Zaytsev S A, Knys V A et Popov Yu V 2006 *Phys. Rev. A* **75** 024703.
- [19] Dupré *et al.* 1992 *J.Phys.B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** 259.

- [20] Stefani G, Avaldi L et Camilloni R 1990 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **23** L227.
- [21] Dogan M et Crowe A, 2000 *J.Phys.B* : **33** L461.
- [22] Bellm S, Lower J et Bartschat K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 223201.
- [23] Bellm S, Lower J, Bartschat K Guan X, Weffen D, Foster M, Harris A L et Madison D H 2007 *Phys. Rev. A* **75** 042704.
- [24] Dürr M, Dorn A, Ullrich J, and Bartschat K 2008, in preparation.
- [25] deHarak B A, Bartschat K and Martin N L S 2008 *Journal of Physics : Conference Series* **141** 012005 ; deHarak B A, Bartschat K and Martin N L S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 063201.
- [26] Bartschat K 2008 *Journal of Physics : Conference Series* **141** 012002.
- [27] Claude Cohen-Tannoudji, *Mécanique Quantique*, Ed. Hermann, (1997).
- [28] Finlayson B A *The Method Weighted Residuals et Variational Principles Academic Press*, New York, (1972).
- [29] Formberg B et Sloan D M 1994 *J. Fourier Anal. Appl.* **203** 864.
- [30] Coleman J P 1976 *IMA J. Appl. Math.* **17** 85.
- [31] Pekeris C L 1958 *Phys. Rev.* **112** 1649.
- [32] Schiff B, Lifson H, Pekeris C L et Rabinowitz P 1965 *Phys.Rev.* **140** A1104.
- [33] Bhatia A K et Temkin A 1964 *Rev. Mod. Phys.* **36** 1050 ; Sims J S et Martin W C 1988 *Phys. Rev. A* **37** 2259 ; Scrinzi A et Piraux B 1997 *ibid.* **56** R13.
- [34] Grémaud B et Delete D 1997 *Europhys. Lett.* **40** 363.
- [35] Sims J S, Parmer D R et Reese J M 1982 *J. Phys. B* **15** 327.
- [36] Kono A et Hattori S 1984 *Phys. Rev. A* **29** 2981.
- [37] Schwartz H M 1956 *Phys. Rev.* **103** 110 ; 1960 *ibid.* **128** 483.
- [38] Schwartz C 1962 *Phys. Rev.* **126** 1015 ; 1962 *ibid.* **128** 1146 ; 1964 *ibid.* **134** 1181.

- [39] Bunge C F 1980 *Phys. Scr.* **21** 328.
- [40] Davis B F et Chung K T 1981 *Phys. Rev. A* **25** 1328.
- [41] Carroll D P, Silverstone H J et Metzger R M 1979 *J. Chem. Phys.* **71** 4142.
- [42] Davis H L 1963 *J. Chem. Phys.* **39** 1183.
- [43] Brown R T 1968 *J. Chem. Phys.* **48** 4698.
- [44] Broad J T 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1494.
- [45] Roothaan C C J et Weiss A W 1960 *Rev. Mod. Phys.* **32**, 194.
- [46] Rotenberg M 1962 *Ann. Phys.* **19** 262.
- [47] Yamani H A et Reinhardt W P 1975 *Phys. Rev. A* **11** 1144.
- [48] Rotenberg M 1970 *Adv. At. Mol. Phys* **6** 233.
- [49] Abramowitz M et Stegun I A, *Hetbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, et Mathematical Tables*, Dover Publications, New York (1970).
- [50] Pont M et Shakeshaft R 1991 *Phys. Rev. A* **44** R4110.
- [51] Nikiforov A et Ouvarov V, *Fonctions spéciales de la physique Mathématique.*, Edition Mir (1983).
- [52] Varshalovich D A, Moskalev A N et Khersouskii V K *Quantum theory of angular momentum, Word Sientific.*, Singapore (1988).
- [53] Reinhardt W P 1982 *Ann. Rev. Phys. Chem.* **33** 223.
- [54] Junker B R 1982 *Adv. At. Mol.* **18** 207.
- [55] Ho Y K 1983 *Phys. Rep.* **99** 1.
- [56] Golub G H et Van Loan C F *Matrix Computations*, 3rd ed. Johns Hopkins University Press, Baltimore, (1996).
- [57] Li T et Shakeshaft R 2005 *Phys. Rev. A* **71** 052505.
- [58] Laarmann T, de Castro A, Gurtler P, Laasch W, Schulz J, Wabnitz H et Moller T 2005 *Phys. Rev. A* **72** 032409.

- [59] Nabekawa Y, Hasegawa H, Takahashi E J et Midorikawa K 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 043001.
- [60] Antoine P, Fomouo E, Piraux B, Shimizu T, Hasegawa H, Nabekawa Y et Midorikawa K, 2008 *Phys. Rev. A* **78**, 023415.
- [61] Kheifets A S et Ivanov I A 2006 *J. Phys. B* **39** 1731.
- [62] Hasegawa H, Takahashi E J, Nabekawa Y, Ishikawa K L et Midorikawa K 2005 *Phys. Rev. A* **71** 023407.
- [63] Sorokin A A, Wellhöfer M, Bobashev S V, Tiedtke K et Richter M 2007 *Phys. Rev. A* **75** 051402.
- [64] Pindzola M S et Robicheaux F 1998 *J. Phys. B* **31** L823.
- [65] Nikolopoulos L A A et Lambropoulos P 2001 *J. Phys. B* **34** 545.
- [66] Parker J S, Moore L R, Meharg K J, Dundas D et Taylor K T 2001 *J. Phys. B* **34** L69.
- [67] Mercouris T, Haritos C et Nicolaïdes C A 2001 *J. Phys. B* **34** 3789.
- [68] Ishikawa K et Midorikawa K 2002 *Phys. Rev. A* **65** 043405.
- [69] Nakajima T et Nikolopoulos L A A 2002 *Phys. Rev. A* **66** 041402 (R).
- [70] Drake G W F *Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics* Springer, 2006.
- [71] Yamani H A et Fishman L 1975 *J. Math. Phys.* Vol.**16** No 2.
- [72] Proulx D *PhD thesis* University of Southern California (1993).
- [73] Lambropoulos P 1991 Report **44** R9.
- [74] Heddle D W O et Keesing R G W 1968 *Adv. At. Mol. Phys.* **4** 267.
- [75] Ehrhardt H, Fischer M, Jung K, Byron F W, Joachain C J et Piraux B 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 1807.
- [76] McCarthy I E, Ugbabe A, Weigold E et Teubner P J O 1974 *Phys. Rev. Lett.* **33** 459.
- [77] Dixon A J, McCarthy I E et Weigold E 1976 *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **9** L195.

- [78] Cook J P D, McCarthy I E, Stelbovics A T et Weigold E 1984 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **17** 2339.
- [79] Smith A D, Coplan M A, Chornay D J, Moore J H, Tossell J A, Mrozek J, Smith V H Jr et Chant N S 1986 *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **19** 969.
- [80] Lahmam-Bennani A, Duguet A, Dupré C et Dal Cappello C 1992 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **58** 17.
- [81] Zheng Y, Lerner N, Todd B R, Cann N M, Brion C E, Chakravorty S et Davidson E R 1995 *Proc XIX Int. Conf. on the Physics of Electronic et Atomic Collisions Abstracts of Contributed Papers* ed J B A Mitchell, J W McConkey et C E Brion p 522.
- [82] Murray A J et Read F H 1992 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** L579.
- [83] Robaux O, Tweed R J et Langlois J 1991 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24** 4567.
- [84] Hayes P A et Williams J F 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3098.
- [85] Tweed R J, Mazevet S, Robaux O et Langlois J 1993 *(e, 2e) et Related Processes* ed C T Whelan et al (Dordrecht : Kluwer) p 145.
- [86] Kheifets A S, Bray I, McCarthy I E et Shang S 1994 *Phys. Rev. A* **50** 4700.
- [87] Knyr V A, Nasyrov V V, Stotlet L A et Popov Yu V 1996 *Sov. Phys. JETP* **82** 190.
- [88] Nath B, Biswas R et Sinha C 1996 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29** 5909.
- [89] Robaux O, Tweed R J et Langlois J 1992 *Z. Phys. D* **23** 331.
- [90] Saxena S, Baliyan K S et Srivastava M K 1987 *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **20** L611.
- [91] Franz A et Altick P L 1995 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28** 4639.
- [92] Franz A et Altick P L 1992 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** L257.
- [93] Franz A et Altick P L 1993 *(e, 2e) et Related Processes* ed C T Whelan, H R J Walters, A Lahmam-Bennani et H Ehrhardt (Dordrecht : Kluwer) p 223.

- [94] Marchalant P J *et al.*, 1998 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** 1141.
- [95] Joachain C J *Quantum Collision Theory*, North-Hollet, Amsterdam (1983).
- [96] Tweed R J et Langlois J 1987 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **20** 5213.
- [97] Vanroose W, Broeckhove J et Arickx F 2002 *Phys. Rev. Lett* **88** 010404.
- [98] Broad J T et Reinhard W P 1976 *J. Math. Phys.* **14** 2159.
- [99] Gersbacher R et Broad J T 1990 *J. Phys. B* **23** 365.
- [100] Filippov G F et Okhrimenko I P 1980 *Yad. Fiz.* **32** 932 ; 1981 **33** 928 ; [1982 *Sov. J. Nucl. Phys.* **32** 480 ; 1982 **33** 488] ; Smirnov Yu F et Nechaev Yu I 1982 *Kinam* **4** 445 ; Nechaev Yu I et Smirnov Yu F 1982 *Yad. Fiz.* **35** 1385 ; [1982 *Sov. J. Nucl. Phys.* **35** 808] ; Revai J, Sotona M et Zofka J 1985 *J. Phys. G* **11** 745.
- [101] Kheifets A S et Ivanov I A 2006 *J. Phys. B* **39** 1731 ; Ivanov I A et Kheifets A S 2005 *Phys. Rev. A* **71** 043405.
- [102] Broad J T 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1494.
- [103] Hecht K T, *Quantum Mechanics*, Ed. Springer, (2000).
- [104] Gradshteyn I S et Ryzhik I M, *Table of Integrals, Series et Products*, 5th Ed., Academic Press, San Diego, USA (1994).
- [105] McGuire J H 1991 *Adv. At. Mol. Phys.* **29** 217.
- [106] McGuire J H *Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions* Cambridge University Press, Cambridge, (1997).
- [107] Tweed R J 1992 *Z. Phys. D* **23** 309.
- [108] Proulx D et Shakeshaft 1993 *J. Phys. B* **26** L7.
- [109] Proulx D, Marcel Pont et Shakeshaft R 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1208.
- [110] Faisal H M, *Theory of Multiphoton processes* Ed. Springer, Hardcover, (1987).
- [111] Baker G A *Adv. in Theor. Phys.* **1** Academic Press, New York-London (1965).

- [112] Baker G A and Graves-Morris P *Padé approximants. Part I : Basic theory. Part II : Extensions and applications* Addison-Wesley, Massachusetts, (1981).
- [113] Bayfield J E 1979 *Phys. Rep.* **51C** 317.
- [114] Bender C M and Orszag S A *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers* McGraw-Hill, New York, (1978).
- [115] Venuti M, Decleva P et Lisini A 1996 *J. Phys. B* **29** 5315.
- [116] Samson J A R, He Z X, Yin L et Haddad G N 1994 *J. Phys. B* **27** 887.
- [117] Nicolaides C A, Haritos C et Mercouris T 1997 *Phys. Rev. A* **55** 2830.
- [118] Kukulin V I, Krasnopol'sky V M et Horáček J *Theory of Resonances : Principles and Applications* Ed. Kluwer Academic Publishers, USA, (1989).
- [119] McDaniel Earl W *Atomic Collisions : Electron and Photon Projectiles* Ed. McGraw-Hill, USA, (1976).
- [120] Oza 1983 *Phys. Rep.* **99** 1.
- [121] Stefani G, Avaldi L, Camilloni R et Fainelli E 1992 *Correlations et Polarization in Electronic et Atomic Collisions et (e, 2e) Reactions* ed P J O Teubner et E Weigold (Bristol : Institute of Physics) p 109.
- [122] Stefani G, Avaldi L et Camilloni R 1995 *private communication*.
- [123] Fang Y et Bartschat K, 2001 *Phys. Rev. A* **64**, 020701(R).
- [124] Fang Y et Bartschat K, 2001 *J. Phys. B* **34** L19.
- [125] Pindzola M S, Robicheaux F J, Colgan J P, Witthoeft M C et Ludlow J A 2004 *Phys. Rev. A* **70** 032705.
- [126] Hudson E T, Bartschat K, Scott M P, Burke P G, et Burke P M 1996 *J. Phys. B* **29** 5513.
- [127] Bartschat K 1998 *Comput. Phys. Commun.* **114** 168.
- [128] Bray I, Fursa D V, Kheifets A S, et Stelbovics A T 2002 *J. Phys. B* **35** R117.
- [129] Fursa D V et Bray I 1997 *J. Phys. B* **30** 757.

- [130] Kheifets A S, Bray I, et Bartschat K 2004 *Phys. Rev. A* **69** 032712.
- [131] Bethe H A et Salpeter E *Quantum Méchanics of one-et two-electron atoms.*, Springer Verlag, Berlin (1957).
- [132] Lower J et Weigold E 1990 *J. Phys. B* **23** 2819.
- [133] McDonald D G et Crowe A 1992 *Z. Phys. D : At. Mol. Clusters* **23** 371.
- [134] Menzel A, Frigo S P, Whitfield S B, Caldwell C D et Krause M O A 1996 *Phys. Rev. A* **54** 2080.
- [135] Scrinzi A et Piraux B, 1998 *Phys. Rev. A* **58**, 1310.
- [136] Lindroth E, 1994 *Phys. Rev. A* **49**, 4473.
- [137] Ho Y K 1986 *Phys. Rev. A* **34**, 4402 ; 1991 *Z. Phys. D* **21**, 191 ; Ho Y K and Bhatia A 1991 *Phys. Rev. A* **44**.
- [138] Sakhelashvili G, Dorn A, Höhr C, Ullrich J, Kheifets A S, Lower J, et Bartschat K 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 033201.
- [139] Piraux B *Thèse de doctorat*, Université Catholique de Louvain, (1982).
- [140] Jackson J D *Classical electrodynamics, 3th Edition* Printed in the Unite State of America Ed. McGraw-Hill, New York, (1998). 041402 (R).
- [141] Joachain C J *Quantum Collision Theory*, North-Hollet, Amsterdam (1983).
- [142] Heller E J et Yamani H A 1974 *Phys. Rev. A* **9** 1201.
- [143] Heller E J et Yamani H A 1974 *Phys. Rev. A* **9** 1209.
- [144] Yamani H A et Fishman L 1975 *J. Math. Phys.* **16** 410.
- [145] Erdélyi A, *Higher Transcendental Functions, Vol. I* Ed. (McGraw-Hill, New York,1953).
- [146] Freund R W, Golub G H and Natchigal N M, 1991 *Acta Numerica* **57**.
- [147] Varga R, 1962 *Matrix iterative analysis* (Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs).
- [148] Lanczos C, 1950 *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, **45** 255.

- [149] Carpraux J F, Godunov S, and Kuznetsov S *Stability of the krylov bases and subspaces. Technical Report 2296*, INRIA, (1994).
- [150] Gosselet P and Rey C *On a selective reuse of krylov subspaces in newton-krylov approaches for nonlinear elasticity*. In Proceedings of the 14th conference on domain decomposition methods, pages 419-426, (2002).
- [151] Parks M, De Sturler E, Mackey G, Johnson D, and Maiti S *Recycling krylov subspaces for sequences of linear systems. SIAM J. Sci. Comput.* **28(5)** :1651-1674, (2006).
- [152] Risler F and Rey C *Iterative accelerating algorithms with Krylov subspaces for the solution to large-scale nonlinear problems. Numerical Algorithms*, **23** :1-30, (2000).
- [153] Wang S, De Sturler E, and Paulino G *Large-scale topology optimization using preconditioner krylov subspace methods with recycling. Int. J. Numer.Meth. Engng*, **69(12)** : 2441-2468, (2007).
- [154] Van Der Vorst H A, 1992 *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **13** 631.
- [155] Gutnecht M H, 1991 *IPS Research Report*, **91-14**.
- [156] Sleijpen G L G and Fokkema D R, *Electronic transactions on Numerical Analysis*, **1** 11 (1993).
- [157] Walters H R J 1984 *Phys. Rep.* **116** 1; 1988 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **21** 1277.
- [158] C. Joshi, B. Blue, C.E. Clayton, E. Dodd, C. Huang, K.A. Marsh, W.B. Morri, S. Wang, M.J. Hogan, C. O'Connell, R. Siemann, D. Watz, P. Muggly, T. Katsouleas and S. Lee *Phys. Plasm.* **9** (2002) 1845.
- [159] V. Bagnoud and F. Salin *1.1 terawatt kilohertz femtosecond laser, invited talk*, Conference on lasers and Electro-Optics (CLEO), CTuD3, Baltimore (23-28 May 1999).
- [160] P.A. Norreys, M. Zepf, S. Monstaizis, A.P. Fewes, J. Zhang, P. Lee, M. Bakerezos, C.N. Danson, A. Dyson, P. Gibbon, P. Lonkakos, D. Neely, F.N. Walsh, J.S. Wark, A.E. Dangor *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 1832.
- [161] H. Milchberg and R. Freeman *J. Opt. Soc. Am. B* **13** (1996) 51.
- [162] I.I. Gol'dman *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **46** (1964) 1412 [*Sov. Phys. JETP* **19** (1964) 954].

- [163] C.I. Moore, J.P. Knauer and D.D. Meyerhofer *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 2439.
- [164] L. Rosenberg et F. Zhou *J. Phys. A : Math. Gen.* **24** (1991) 631. F. Zhou et L. Rosenberg *Phys. Rev. A* **49** (1992) 7818.
- [165] C. Bula, K.T. McDonald, E.J. Prebys, C. Bamber, S. Boege, T. Kotseroglou, A.C. Melissinos, D.D. Meyerhofer, W. Ragg, D.L. Burke, R.C. Field, G. Horton-Smith, A.C. Odian, J.E. Spencer, D. Walz, S.C. Bridgman, W.M. Bugg, K. Shmakov and A.W. Weidemann *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 3116.
- [166] V.F. Hartemann and A.K. Kerman *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 624.
- [167] M. Protopapas, C.H. Keitel and P.L. Knight *Rep. Prog. Phys.* **60** (2002) 389.
- [168] C. Szymanowski and A. Maquet *Opt. Express.* **2** (1998) 262.
- [169] J.Z. Kaminski and F. Ehlotzky *Phys. Rev. A* **59** (1999) 2105.
- [170] P. Panek, J.Z. Kaminski and F. Ehlotzky *Phys. Rev. A* **65** (2002) 033408.
- [171] M.M. Denisov and M.V. Fedorov *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **53** (1968) 1340 [*Sov. Phys. JETP* **26** (1968) 779].
- [172] S.P. Roshchupkin *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **106** (1994) 102 [*Sov. Phys. JETP* **79** (1994) 54] ; *ibid* *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **82** (1996) 177 [*Sov. Phys. JETP* **109** (1996) 337].
- [173] C. Szymanowski, V. Vénard, R. Taieb, A. Maquet and C.H. Keitel *Phys. Rev. A* **56** (1997) 3846.
- [174] S.-M. Li, J. Berakdar, J. Chen and Z.-F. Zhou *Phys. Rev. A* **67** (2003) 063409.
- [175] D.M. Volkov *Z. Phys.* **94** (1935) 250.
- [176] J. Bergon and S. Varro *J. Phys. A : Math. Gen.* **13** (1980) 2823.
- [177] J.S. Roman, L. Roso and H.R. Reiss *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000) 1869.
- [178] M. Jain and N. Tzoar *Phys. Rev. A* **18** (1978) 538.

- [179] P. Cavaliere, G. Ferrante and C. Leone *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **13** (1980) 4495.
- [180] S.-M. Li, Y.-G. Miao, Z-F. Zhou, J. Chen and Y.-Y. Liu *Phys. Rev. A* **58** (1998) 2615.
- [181] G. Duchateau, C. Illescas, B. Pons, E. Cornuer and R. Gayet *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** (2000) L571.
- [182] G. Duchateau, E. Cornier and R. Gayet *Eur. Phys. J. D* **11** (2000) 191.
- [183] S.-M. Li, J. Chen and Z-F. Zhou *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **35** (2002) 557.
- [184] J.Z. Kaminski, A. Jaron and F. Ehlotzky *Phys. Rev. A* **53** (1996) 1756
- [185] H.R. Reiss and V.P. Krainov, *Phys. Rev. A* **50**, (1994) R910.
- [186] H.R. Shakeshaft and R.M. Potvilege, *Phys. Rev. A* **36**, (1987) 5478.
- [187] A. Jaron, J.Z. Kaminski and F. Ehlotzky *Phys. Rev. A* **61** (2000) 023404.
- [188] S. Basile, F. Trombetta and G. Ferrante *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 2435.
- [189] A. De Bohan *Dynamique de l'interaction laser-atome. Moment canonique et approximation du champ fort*. Thèse de Doctorat, Université Catholique de Louvain (2001).
- [190] X. Mau *Phys. Rev. A* **43** (1991) 5149.
- [191] W. Gordon *Z. Phys.* **40** (1926) 117.
- [192] A.S. Kornev and B.A. Zon *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **35** (2002) 2451.
- [193] Z.W. Liu and H.P. Kelly *Phys. Rev.* **47** (1993) 1460.
- [194] H.R. Reiss *J. Opt. Soc. Am. B* **7** (1990) 574.
- [195] L.V. Keldysh *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **47** (1965) 1945 [*Sov. Phys. JETP* **20** (1965) 1307].
- [196] F. Faisal *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **6** (1973) L89.
- [197] H.R. Reiss *Phys. Rev. A* **22** (1980) 1786.

- [198] C. Leone, R. Burlon, F. Trombetta, S. Basile and G. Ferrante *Nuovo Cimento D* **9** (1987) 609.
- [199] F. Trombetta, S. Basile and G. Ferrante *J. Opt. Soc. Am. B* **6** (1989) 554.
- [200] S.-M. Li, J. Berakdar, J. Chen and Z.-F. Zhou *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **37** (2004) 653.
- [201] R.S. Van Dyck, Jr., P.B. Schwinberg and H.G. Dehmelt, *Phys. Rev. Lett* **59** (1987) 26.
- [202] A.M. Awobode *ICTP Preprint Publications*. The anomalous Magnetic Moment of the electron, IC/2001/167
- [203] Youssef I. Salamin *J. Phys. A : Math. Gen.* **26** (1993) 6067-6071.
- [204] Y. Attaourti and B. Manaut *Phys. Rev. A* **68** (2003) 067401.
- [205] Itzykson et Züber, *Phys. Rev. Lett* **59** (1987) 26.
- [206] Landau et Lifchitz *Théorie quantique relativiste, deuxième partie* Edition Mir, Moscou, (1973)
- [207] V.B. Berestetskii, E.M. Lifshitz and Pitaevskii *Quantum Electrodynamics (Course of Theoretical Physics Vol 4)* 2nd edn Pergamon Press, (1982).
- [208] W.H. Furry *Phys. Rev.* **46** (1934) 391.
- [209] A. Sommerfeld and A.W. Maue *Ann. d. Physik.* **22** (1935) 629.
- [210] W. C. Hennenberger *Phys. Rev. Lett* **21** (1968) 838.
- [211] F. Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. Springer, (1999)
- [212] K.T. Hecht *Quantum Mechanics* Ed. Springer, (2000).
- [213] J.D. Bjorken et S.D. Drell *Relativistic Quantum Mechanics*, Mc-Graw Hill, New-York, (1964).
- [214] C.J. Joachain *Quantum Collision Theory* North-Hollet, Amsterdam, (1983).
- [215] J.M. Ngoko Djiokap, M.G. Kwato Njock, H.M. Tetchou Nganso *ICTP Preprint Publications*. Coulomb effects in relativistic laser-assisted Mott scattering, IC/2004/82.

-
- [216] I.S. Gradshteyn et I.M. Ryzhik *Table of Integrals, Series et Products*, 5th Ed., Academic Press, San Diego, USA (1994).
- [217] H.M. Faisal *Theory of Multiphoton processes* Ed. Springer, Hardcover, (1987).
- [218] W. Greiner et J. Reinhardt *Quantum electrodynamics* 2nd Edition, Berlin, Springer (1994).
- [219] L. Bess *Phys. Rev.* **77** (1950) 550.
- [220] M. Abramowitz and I.A. Stegun (ed) *Handbook of Mathematical Functions with formulas, graphs and mathematical tables*, Dover Publications, (1972).
- [221] F.V. Bunkin and M.V. Fedorov *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **49** (1966) 1215 [*Sov. Phys. JETP* **22** (1966) 844].