**Mesure des sections efficaces différentielles totales de diffusion des électrons de 40 keV par l'atome d'argon.
Effet de corrélations électroniques**

A. Duguet, A. Jaéglé

► **To cite this version:**

A. Duguet, A. Jaéglé. Mesure des sections efficaces différentielles totales de diffusion des électrons de 40 keV par l'atome d'argon. Effet de corrélations électroniques. Journal de Physique Lettres, 1975, 36 (7-8), pp.193-195. 10.1051/jphyslet:01975003607-8019300 . jpa-00231186

HAL Id: jpa-00231186

<https://hal.science/jpa-00231186>

Submitted on 1 Jan 1975

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Classification
Physics Abstracts
 5.282 — 5.232

MESURE DES SECTIONS EFFICACES DIFFÉRENTIELLES TOTALES DE DIFFUSION DES ÉLECTRONS DE 40 keV PAR L'ATOME D'ARGON. EFFET DE CORRÉLATIONS ÉLECTRONIQUES

A. DUGUET (*) et A. JAÉGLÉ (†)

(Reçu le 12 mars 1975, révisé le 13 mai 1975, accepté le 15 mai 1975)

Résumé. — La mesure des sections efficaces différentielles totales de diffusion d'électrons de 40 keV par des atomes d'argon montre l'influence des corrélations électroniques par comparaison avec des sections efficaces différentielles totales calculées à partir de fonctions d'onde de Hartree-Fock et à partir de fonctions d'onde corrélées.

Abstract. — The measurement of the total differential cross sections for 40 keV electrons scattered by Argon atoms show the effect of electronic correlations by comparison with theoretical total differential cross sections calculated from Hartree-Fock wave functions and from correlated wave functions.

Bartell et Gavin [1, 2, 3, 4] ont montré que les grandeurs apparaissant dans l'étude des phénomènes de diffusion des rayons X ou des électrons rapides, telles que les sections efficaces différentielles, sont directement liées aux densités radiales monoélectroniques $D(r)$ (noyau-électron) et biélectroniques $P(r)$ (électron-électron). Pour les électrons rapides les sections efficaces différentielles totales (élastique + inélastique) de diffusion $d\sigma_T(s)/d\Omega$ sont données, dans le cadre de la première approximation de Born, par la relation :

$$s^4 \frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} = [Z - F(s)]^2 + S(s)$$

où Z est le numéro atomique de l'atome diffusant, $F(s)$, $S(s)$ respectivement le facteur de structure et la section efficace différentielle incohérente pour les rayons X et $s = (4\pi/\lambda) \sin \theta/2$ le paramètre usuel de diffusion, λ étant la longueur d'onde associée à la particule incidente. Les grandeurs $F(s)$ et $S(s)$ s'expriment à partir des densités radiales $D(r)$ et $P(r)$ par les relations :

$$F(s) = \sum_i \int D(r_i) \frac{\sin sr_i}{sr_i} dr_i$$

où r_i = distance noyau-électron.

(*) Laboratoire de Diffraction Electronique (Laboratoire Associé au C. N. R. S.) Université de Paris Sud, 91405 Orsay, France.

(†) I. S. E. A. Centre Universitaire du Haut-Rhin, 68 Mulhouse, France.

$$S(s) = \sum_i \sum_j \int P(r_{ij}) \frac{\sin sr_{ij}}{sr_{ij}} dr_{ij} - F^2(s)$$

où r_{ij} = distance électron-électron.

$D(r_i)$ et $P(r_{ij})$ sont directement liées à l'énergie du système diffractant. L'énergie totale E s'exprime par :

$$E = \frac{1}{2} \left[\sum_i \bar{V}_{ni} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \bar{V}_{ij} \right]$$

avec

$$\bar{V}_{ni} = -Ze^2 \int \frac{D(r_i)}{r_i} dr_i$$

et

$$\bar{V}_{ij} = e^2 \int \frac{P(r_{ij})}{r_{ij}} dr_{ij}.$$

Les sections efficaces différentielles de diffusion des rayons X et des électrons rapides par les atomes ont été calculées par différents auteurs dont C. Tavad [5] qui a utilisé, dans le cadre de la méthode de Waller et Hartree, des fonctions d'onde atomiques de Clementi [6]. Ces fonctions d'onde déterminées par résolution du système d'équations de Hartree-Fock-Roothan rendent bien compte des densités radiales monoélectroniques $D(r)$ et conduisent à une énergie du système diffusant différente de l'énergie exacte, la différence représente l'énergie de corrélation :

$$E_{\text{corr}} = E_{\text{exact}} - E_{\text{H.F.}}$$

Durant ces dernières années plusieurs auteurs [7, 8, 9, 10, 11, 12] ont étudié l'influence des corrélations électroniques dans les phénomènes de diffusion. Dans cette étude on doit distinguer d'une part les sections efficaces différentielles élastiques de diffusion qui sont liées aux valeurs moyennes des opérateurs mono-électroniques et d'autre part les sections efficaces différentielles inélastiques qui sont liées aux valeurs moyennes des opérateurs biélectroniques. L'influence des corrélations électroniques est prépondérante sur la partie inélastique des sections efficaces différentielles de diffusion. Ceci est aisément compréhensible puisque l'on sait que les fonctions d'onde de Hartree-Fock donnent de bonnes valeurs moyennes des opérateurs monoélectroniques.

Les résultats présentés montrent cet effet des corrélations électroniques sur les sections efficaces différentielles totales de diffusion d'électrons de 40 keV par l'atome d'argon. Les expériences ont été réalisées au moyen d'un diffractographe Trüb Täuber (KD. Gaz). Dans le but d'éliminer au maximum la diffusion parasite qui perturbe les mesures des sections efficaces différentielles totales, des modifications importantes de l'appareillage ont été apportées [13]. Nous rappellerons brièvement la méthode expérimentale qui a été décrite en détail dans un article précédent [14]. La détection des électrons diffusés s'effectue par voie photographique. Dans cette méthode le détecteur ne dissocie pas les électrons d'énergies différentes, c'est-à-dire les contributions élastique et inélastique des sections efficaces différentielles de diffusion. C'est par conséquent la section efficace différentielle totale de diffusion qui est mesurée. Les plaques photographiques employées (Kodak-Electron image) sont utilisées dans le domaine où la densité optique est proportionnelle à la densité électronique reçue. Le secteur tournant situé au-dessus de la plaque photographique, dont le but est de modifier la répartition d'intensité électronique reçue par celle-ci doit être étalonné. Pour ce faire, la fonction d'ouverture de chacun des 2 secteurs utilisés, l'un d'ouverture proportionnelle à s^2 , l'autre à s^3 , est obtenue en comparant les sections efficaces différentielles totales de diffusion du Néon, calculées théoriquement [11] au moyen de fonctions d'onde corrélées, à celles obtenues expérimentalement lors de chaque expérience pour chacune des 3 hauteurs de diffraction. Les fonctions d'onde utilisées pour le Néon par Naon et Cornille [11] sont les meilleures actuellement disponibles. Elles donnent 97,3 % de l'énergie de corrélation alors que celles utilisées par Peixoto, Bunge, Bonham [10] n'en donnent que 86 %. Les sections efficaces différentielles totales calculées à partir de ces fonctions d'onde corrélées par Naon, Cornille d'une part et Peixoto *et al.* d'autre part sont à l'intérieur du domaine d'incertitude expérimentale obtenue par Fink et Bonham [15]. L'écart relatif entre les sections efficaces différentielles totales expérimentales et celles calculées théoriquement par

C. Tavard au moyen de fonctions d'onde Hartree-Fock

$$\left[s^4 \left(\frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} \right)_{\text{exp}} - s^4 \left(\frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} \right)_{\text{H.F.}} \right] / s^4 \left(\frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} \right)_{\text{exp}}$$

représentée figure 1, montre l'influence des corrélations électroniques sur les sections efficaces différentielles totales de diffusion pour l'atome d'argon. La courbe en trait plein représente la valeur la plus probable de la grandeur mesurée et les barres d'incertitude de $\pm 2,5$ % englobent la précision sur les sections efficaces et la dispersion des résultats.

FIG. 1. — $\left[s^4 \left(\frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} \right) - s^4 \left(\frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} \right)_{\text{H.F.}} \right] / s^4 \left(\frac{d\sigma_T(s)}{d\Omega} \right)$

— expérimental
- - - théorique (Naon, Cornille).

On peut comparer ces résultats aux calculs effectués par Naon et Cornille [16] sur l'atome d'argon (Fig. 1 courbe en tireté). Ces auteurs ont calculé les incréments aux valeurs moyennes des opérateurs qui apparaissent dans les phénomènes de diffusion au moyen des équations de Bethe-Goldstone qui fournissent une énergie de corrélation de presque 100 % de l'énergie de corrélation empirique. L'écart entre théorie et expérience peut s'interpréter en terme d'incertitude expérimentale due à diverses causes (diffusion parasite restante non corrigée, étalonnage du secteur) propres à la méthode expérimentale utilisée, ainsi qu'en terme d'incertitude théorique, les corrélations entre les électrons MM et LM ont seules été prises en considération. Dans le but de préciser ce point, de nouvelles mesures sont en cours sur un nouveau diffractographe utilisant la technique de comptage des électrons. De plus, ce nouveau diffractographe est muni d'un analyseur de vitesses qui permet de séparer les contributions élastique et inélastique, l'effet relatif des corrélations électroniques est plus important [16] sur cette dernière. Ces mesures permettront de tester les fonctions d'onde utilisées, la diffraction des électrons étant un puissant moyen d'investigation.

Bibliographie

- [1] BARTELL, L. S. et GAVIN, R. M., *J. Am. Chem. Soc.* **86** (1964) 3493.
 - [2] BARTELL, L. S., GAVIN, R. M., *J. Chem. Phys.* **43** (1965) 856.
 - [3] GAVIN, R. M. et BARTELL, L. S., *J. Chem. Phys.* **44** (1966) 3687.
 - [4] GAVIN, R. M. et BARTELL, L. S., *J. Chem. Phys.* **45** (1966) 4700.
 - [5] TAVARD, C., NICOLAS, D. et ROUAULT, M., *J. Chim. Phys. Phys. Chim. Biol.* **64** (1967) 540.
 - [6] CLEMENTI, E., Tables of Atomic Functions, supplément à l'article : *Ab Initio* Computations in Atoms and Molecules, *IBM J. Res.* **9** (1965) 2.
 - [7] BROWN, R. T., *J. Chem. Phys.* **55** (1971) 353.
 - [8] TANAKA, K. et FUKUSHI, S., *Int. J. Quantum Chem.* **5** (1971) 157.
 - [9] BENESCH, R. et SMITH, V. H. Jr, *Acta Crystallogr. A* **26** (1970) 586.
 - [10] PEIXOTO, E. M. A., BUNGE, C. F. et BONHAM, R. A., *Phys. Rev.* **181** (1969) 322.
 - [11] NAON, M. et CORNILLE, M., *J. Phys. B* **5** (1972) 1965.
 - [12] NAON, M. et CORNILLE, M., *J. Phys. B* **6** (1973) 1347.
 - [13] DUGUET, A., JAÉGLÉ, A., *Chem. Phys. Lett.* à paraître.
 - [14] JAÉGLÉ, A., DUGUET, A., ROUAULT, M., *J. Chim. Phys. Phys. Chim. Biol.* **68** (1971) 1148.
 - [15] FINK, M., BONHAM, R. A., *Phys. Rev.* **187** (1969) 114.
 - [16] NAON, M., CORNILLE, M. and KIM, Y. K., à paraître.
-