



Etude théorique de la diffusion élastique électron-agrégat

P. Descourt¹, C. Guet² et M. Farine^{1,3}

¹Ecole Navale, Brest - ²CEA Grenoble - ³Subatech

Abstract: Quantal many-body formalism, within jellium approximation, is applied to elastic scattering of electrons from an alkali-metal cluster. Influence of correlations on the phase shifts will be taken in account.

Les propriétés des agrégats de quelques dizaines à quelques centaines d'atomes alcalins sont en général assez bien décrites dans l'approximation du jellium. Celle-ci consiste à traiter l'agrégat comme un liquide de Fermi chargé et de dimension finie. La réponse optique prédite dans cette approximation et tenant compte des corrélations électron-électron au-delà du champ moyen Hartree-Fock est en bon accord avec l'expérience. L'objectif de cette thèse est d'étudier dans l'approximation du jellium la diffusion élastique d'un électron par un agrégat à basse énergie. Les agrégats métalliques étant fortement polarisables, il sera nécessaire d'évaluer soigneusement la contribution des corrélations aux déphasages de diffusion.

Le point de départ est l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde ψ de l'électron diffusé,

$$H\Psi = (h + V_{HF} + \Sigma)\Psi = \varepsilon\Psi$$

Σ est l'opérateur de "self-energy" (ou de polarisation) de l'électron, h l'hamiltonien à 1-corps et V_{HF} le potentiel Hartree-Fock de l'agrégat. Ce problème a été résolu dans le cas atomique par C. Guet et al. Pour les agrégats, il s'agit tout d'abord de construire un programme HF incluant le continuum pour le modèle du jellium. On peut ensuite résoudre l'équation précédente en négligeant Σ au départ ; on obtient une première estimation de ψ qui sera utilisée pour calculer Σ , jusqu'à un ordre donné, et on continue le processus jusqu'à la convergence. Les déphasages seront calculés par un "matching" à une fonction régulière de Bessel (solution de l'équation d'une particule libre).