الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي







Setif 1 University Ferhat Abbas
Faculty of Sciences
Department of Physics

جامعـــة سطيف 1 فرحـــــات عباس
كليـــة العلـــــــوم
قســـــــم الفيزياء

# MASTER THESIS

**Field: Science of the matter**

**Branch: Physics**

**Speciality: Theoretical and Fundamental Physics**

## Theme

***Double ionisation of the N2 molecule by collision with an intermediate-energy electron***

**Presented by**
***ZIANI ASMA***

**Directed by**
***ABDELAZIZ MANSOURI***

**Thesis Defended on June 24, 2026, before the jury composed of**

| | | |
|---|---|---|
| **President** | **Pr. Kamel. BENCHEIKH** | **Setif 1 University Ferhat Abbas** |
| **Examiner** | **Dr. Hakim. GUENNOUNE** | **Setif 1 University Ferhat Abbas** |
| **Supervisor** | **Pr. Abdelaziz. MANSOURI** | **Setif 1 University Ferhat Abbas** |

**2025 / 2026**

**Contents**

**General Introduction** ..... 1

**Chapter 1: Scattering Theory** ..... 3
1.1 Introduction ..... 3
1.2 Role of Scattering Theory in Ionization Processes ..... 4
1.3 Concept of Cross Sections ..... 4
1.4 Scattering Amplitude ..... 6
1.4.1 Relation with Cross Section ..... 6
1.4.2 Transition Matrix ..... 8
1.4.3 Differential Cross Section ..... 8
1.5 Born Approximation ..... 10
1.5.1 Limitations in Double Ionization ..... 11
1.6 Summary ..... 12

**Chapter 2: Double Ionization Theory** ..... 13
2.1 Introduction ..... 13
2.2 (e,3e) Process Description ..... 13
2.3 Kinematics and Geometries ..... 14
2.3.1 Symmetric Coplanar Geometry ..... 14
2.3.2 Asymmetric Coplanar Geometry ..... 15
2.4 Mechanisms of Double Ionization ..... 15
2.4.1 Shake-off Mechanism ..... 15
2.4.2 Two-Step 1 (TS1) ..... 16
2.4.3 Two-Step 2 (TS2) ..... 16
2.5 Electron Correlations ..... 17
2.6 Double Ionization: Atoms and Molecules ..... 17
2.7 Initial State Description ..... 18
2.8 Final State Description ..... 18
2.8.1 Plane Wave Born Approximation Model (PWBA) ..... 18
2.8.2 Coulomb Wave Born Approximation (CWBA) ..... 19
2.8.3 Brauner, Briggs, and Klar (BBK) Model ..... 20
2.8.4 Two Coulomb Waves–Gamow Factor (2CWG) Model ..... 20
2.9 Summary ..... 21

**Chapter 3: Double Ionization of $N_2$ Molecule** ..... 22
3.1 Introduction ..... 22
3.2 Structure of $N_2$ Molecule ..... 23
3.3 Theoretical Framework ..... 23
3.4 Initial State ..... 24
3.5 Final State ..... 26
3.6 Results and Discussion ..... 27
3.7 Summary ..... 33

**General Conclusion** ..... 35

## Abstract

This thesis investigates the double ionization of the nitrogen molecule ($N_2$) induced by electron impact in the (e,3e) process. It first introduces the theoretical foundations of scattering theory and the main mechanisms responsible for double ionization. The study employs the Two Coulomb Waves–Gamow Factor (2CWG) model within the First-Born Approximation to calculate five-fold differential cross sections (5DCS). Theoretical results are compare with available experimental measurements to evaluate the model's accuracy. The work also assesses the reliability of the wave functions proposed in Mekhalfa's thesis. The results show good agreement under specific kinematic conditions and provide insight into electron correlation effects. This study contributes to improving theoretical descriptions of molecular double ionization.

## Résumé

Ce mémoire porte sur la double ionisation de la molécule d'azote ($N_2$) par impact électronique dans le processus (e,3e). Il présente d'abord les bases de la théorie de la diffusion ainsi que les principaux mécanismes de double ionisation. Les calculs sont réalisés à l'aide du modèle Two Coulomb Waves–Gamow Factor (2CWG) dans le cadre de la première approximation de Born. Les sections efficaces différentielles à cinq dimensions (5DCS) sont comparées aux résultats expérimentaux disponibles. L'objectif est également de vérifier la validité des fonctions d'onde proposées dans la thèse de Mekhalfa. Les résultats montrent un bon accord avec l'expérience dans certaines configurations cinématiques. Cette étude améliore la compréhension théorique des processus de double ionisation moléculaire.

## ملخص

تتناول هذه الرسالة دراسة التأين المزدوج لجزيء النتروجين($N_2$) الناتج عن تصادم الكترون ضمن تفاعل (e,3e). تبدأ الرسالة بعرض المبادئ الأساسية لنظرية التشتت واليات التأين المزدوج، ثم تعتمد على نموذج(2CWG)ضمن تقريب بورن الأول لحساب المقاطع العرضية التفاضلية الخماسية(5DCS). تمت مقارنة النتائج النظرية بالنتائج التجريبية المتوفرة لتقديم دقة النموذج كما تهدف الدراسة الى التحقق من دوال الموجة المستخدمة في أطروحة الدكتوراة لمخلفة، أظهرت النتائج توافقا جيدا مع التجارب في بعض الشروط الحركية وساهمت في تحسين الفهم النظري لعملية التأين المزدوج في الجزيئات.