

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE Dr. TAHAR MOULAY- SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

En PHYSIQUE

Option : Physique numérique

Par

Mr. KHEDAOUI Mammar

Sur le thème

**Etude variationnelle de l'excitation de l'atome d'hydrogène
par impact de particules α (He^{2+}) aux énergies intermédiaires.**

Soutenu le 14/06/2015 devant la commission d'examen:

M ^f ABBES Oukacha	Professeur (U. Saïda)	Président
M ^f LASRI Boumediene	Professeur (U. Saïda)	Encadreur
M ^f BEKHECHI Smaine	Maitre de Conférences «A » (U. Tlemcen)	Examineur
M ^f BOUDRAA Kamel Eddine	Maitre de Conférences «A » (U. Saïda)	Examineur

Année Universitaire 2014 - 2015



Dédicace

Je dédie ce travail à :

mes parents.

mes enfants Wail et Aicha hibat al rahmane

mes frères.

mes sœurs.

A tous ceux qui me sont chers

KHEDDAOUI Maamar





REMERCIEMENT

Merci à dieu de m'avoir guidé dans le bon chemin celui du savoir et du bon sens.

Je tenais à remercier tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réussite de ce modeste travail en particulier mon encadreur Mr. Lasri. B, professeur à l'université de Saïda pour son guide et ses conseils à réaliser ce travail.

À tous les enseignants du département de physique et les membres du jury pour avoir accepté de juger ce travail.

Un remerciement spécial à Mr Norredine Marbouh pour ses aides précieuses.

- Kheddaoui Maamar.



Table des matières

Introduction générale.....	1
Chapitre I	
Principe variationnel de Schwinger	11
I-1. Formes stationnaires de l'amplitude de transition.....	12
I-1.1 Forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger :.....	13
I-1.2 Forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger.....	13
I-2. Amplitude variationnelle approchée dans le formalisme de Schwinger.....	15
Chapitre II	
Amplitude de transition de Schwinger pour l'excitation.....	19
II.1 Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact.....	19
II-2. Amplitude de transition.....	24
II.2.1 Amplitude de transition eikonale.....	25
II.2.2 Sections efficaces eikonales :.....	26
Chapitre III	
Calcul de l'amplitude de transition Variationnelle.....	30
III.1 Calcul des éléments de matrice de Born-I.....	30
III.2 Calcul des éléments de matrice de Born-II.....	32
III.2.1 Contribution de la totalité du spectre discret de la cible.....	35
III.2.2 Contribution des états du continuum de la cible	36
III.3 Méthode d'intégration.....	37

Chapitre IV

Excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particules α (He^{2+}) aux énergies intermédiaires	39
IV-1. INTRODUCTION	39
IV-2. Excitation du l'état $n = 2$ de H dans la collision H - He^{2+}	40
IV-2.2. Résultats expérimentaux des états 2s et 2p	40
IV-3. Excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).....	41
IV-3.1. Excitation à l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).....	44
IV-3.2. Excitation à l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).....	46
IV-3.3. Excitation au niveau $n=2$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+})...	48
IV-3.4. Excitation de l'état 3s de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).....	50
IV-3.5. Excitation de l'état 3p de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).....	52
IV-3.6. Excitation de l'état 3d de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).....	54
IV-3.7. Excitation au niveau $n=3$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+})....	56
IV-4. Résultats et discussion	58
Conclusion générale	62

Introduction



L'étude des processus d'excitation de cibles atomiques ou moléculaires par impact de particules chargées représente l'un des axes les plus importants dans la physique moderne. La théorie des collisions atomiques est l'une des théories la plus adéquate qui permet d'expliquer et d'interpréter ces processus qui s'avèrent primordial dans divers modèles de la physique comme ceux des plasmas, l'astrophysique et la radiobiologie.

Un des buts majeurs de la radiobiologie par exemple est la compréhension des mécanismes physiques puis chimiques conduisant aux effets biologiques des particules ionisantes (légères et/ou lourdes). Lorsqu'un rayonnement interagit avec la matière biologique, il induit une vaste gamme de processus primaires qui peuvent aboutir à la mort de la cellule, mais aussi à des modifications irréversibles du patrimoine génétique de l'échantillon biologique irradié. Cependant, entre l'interaction proprement dite du rayonnement avec la cellule et l'apparition des effets biologiques, il se produit toute une suite d'événements, et bien que l'étape post-irradiation dite "de physique pure" ne dure que quelques femto-secondes, elle n'en constitue pas moins le chaînon initiateur et essentiel d'une longue suite d'étapes physico-chimiques, chimiques puis biologiques qui peut se révéler vitale pour la cellule irradiée.

Dans plusieurs domaines de la physique, les collisions atomiques demeurent les processus les plus fondamentaux et présentent un intérêt essentiel et assez particulier surtout en physique nucléaire et en astrophysique. Citons par exemple, les mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) en astrophysique interviennent

lors de la formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs [1,2]. Récemment, la connaissance des divers processus d'interaction entre un ion et un atome isolé (cible gazeuse) peut être considéré comme la première étape dans la compréhension profonde des interactions ion-matière complexe, et notamment des mécanismes physique lié au dépôt d'énergie des ions et à l'endommagement des matériaux inertes ou vivants sous irradiation.

La connaissance de ces mécanismes permet ainsi d'analyser les phénomènes galactiques. Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, l'interaction des ions multichargés avec l'atome d'hydrogène se manifeste dans les plasmas de fusion thermonucléaire au sein des étoiles et l'étude des phénomènes d'ionisation et d'excitation est fondamentale pour le développement de la physique des plasmas de fusion, dans lesquels les collisions conduisent à la production d'ions excités dont la désexcitation se traduit par l'émission de rayons X [3]. Grâce à des méthodes performantes de spectroscopie, il est possible d'obtenir une estimation précise de la densité, de la température ainsi que la mise en évidence des processus de transfert d'énergie au sein de ces plasmas chauds , et par conséquent la notion de section efficace totale qui a été largement étudiées en fonction des énergies d'impact est fondamentale.

Afin de profiter au maximum des prédictions théoriques il est souvent nécessaire de modéliser d'une manière adéquate un formalisme mathématique selon la nature du processus à étudier. Cependant, suivre la rigueur d'un formalisme mathématique nécessite un savoir faire et mène souvent à des complications au niveau des calculs numériques qui rendent parfois impossible l'extraction des résultats avec les moyens matériels misent à notre disposition. Le temps nécessaire pour obtenir un résultat est aussi un facteur très important. Donc nous somme souvent obligés de faire des approximations pour simplifier le formalisme mathématique d'un côté pour rendre les calculs maniables et d'un autre côté pour pouvoir tirer des informations sur la nature du processus étudié. Cependant, les résultats obtenus par simulation doivent être en bon accord avec ceux donnés par des modèles précédents de précision déjà confirmée, et le plus important c'est qu'ils doivent être également en bon accord avec les données de l'expérience.

L'atome d'hydrogène ou, plus généralement, le système ionique à un électron présente un intérêt fondamental pour la description théorique des structures atomiques. On exigera d'une théorie fiable qu'elle décrive l'interaction des noyaux avec les électrons via la force Coulombienne, à cause du large domaine d'influence de cette force. Il y a deux situations où les approximations peuvent être employées et ainsi une grande simplification peut être faite. La première est celle où la théorie de perturbation peut être appliquée à cause du temps d'interaction court. La seconde est le cas de collisions très lentes : il y a formation d'une quasi-molécule et le mouvement lui-même peut être considéré comme une perturbation.

Dans un problème de collision, le plus important est la détermination de la fonction d'onde qui représente l'onde de diffusion, car elle contient toutes les informations nécessaires sur l'état du système. Cependant pour résoudre ce problème, diverses techniques sont développées afin d'aboutir à une solution quasi-exacte. C'est ce que nous allons décrire brièvement dans ce chapitre, à savoir les principales approches et approximations qui ont été largement employées au cours de ces dernières décennies.

Au début, il faut noter que l'approximation de Born est essentiellement un développement perturbatif de la fonction d'onde ou de l'amplitude de diffusion, en puissance du potentiel d'interaction. En général, l'approximation de Born donne un bon résultat pour des hautes énergies d'incidence et ainsi la vitesse de collision doit être plus grande que les vitesses électroniques orbitales.

Dans l'ordre de surmonter certaines faiblesses de l'approximation de Born, une nouvelle méthode a été développée au début des années soixante, appelé VPS (Vainshtein, Presnyakov et Sobelman) [4]. Elle consiste en une correction partielle de la fonction d'onde par inclusion de la distorsion due à l'interaction entre la particule incidente et les électrons liés en essayant de traiter exactement cette interaction. Une version partiellement différente de l'approche initiale a été proposée en 1965 par McCarroll et Crothers [5]. Elle fut appliquée ensuite, en 1966 par Mc Carroll et Salin [6] aux collisions de type Proton-atome d'hydrogène.

Développée par Glauber à la fin des années cinquante sous l'appellation de "Impact Parameter Method" [7][8], ensuite par Mc Carroll et Salin en 1966 pour des cas de collisions atomiques à plusieurs voies de réarrangement [7], l'approximation de Glauber est l'une des formulations de l'approximation eikonale qui permet d'introduire les effets du potentiel d'interaction dans la fonction d'onde décrivant l'état final du système. Sachant que l'approximation eikonale est une approximation où le projectile est supposé se déplacer en ligne droite et le transfert d'impulsion de la cible est supposée être perpendiculaire à la trajectoire du projectile, cette nouvelle formulation eikonale (approximation de Glauber) modifie ou déforme l'onde plane représentant le projectile. Ainsi elle prend en compte l'influence du potentiel d'interaction sur la fonction d'onde de diffusion quand le projectile s'approche ou s'éloigne de la cible. En effet les fonctions d'onde incidente et de diffusion ne sont plus des ondes planes.

Une autre alternative à l'approximation de Born est l'approximation des équations couplées, où la fonction d'onde de diffusion est développée sur des bases de fonctions d'onde représentant les différentes voies des réactions. Il en résulte un système d'équations différentielles couplées sur les coefficients du développement.

Outre ces applications, le calcul des sections efficaces totales de diffusion constitue l'intérêt majeur des études faites sur ces processus de collisions. En effet, plusieurs chercheurs se sont penchés sur le problème de la diffusion multiple. Ce n'est qu'en 1975 que Park et ses collaborateurs ont publié les résultats expérimentaux [9], concernant des mesures de la section efficace totale de diffusion obtenues par la technique appelée "CrossedBeam".

Plusieurs approches ont été formulées afin de donner des modèles adéquats à l'étude du processus de collision. Nous citons le modèle de Cheshire et Sullivan établi en 1967 [10] dans lequel ces auteurs ont développé l'interaction et la fonction d'onde sur des harmoniques sphériques, le modèle du potentiel de second ordre proposé par Bransden et Coleman en 1972 [11] fondé sur la méthode des voies couplées et le modèle des pseudo-états utilisé pour la première fois par Reading et al en 1976 [12], puis repris par Fichard et al [13].

Juste après, en 1979 Reading et al [14] ont utilisé la méthode appelée OHCE "One and HalfCentred Expansion", afin de lever les difficultés rencontrées dans le calcul de la section efficace par la méthode SCE "Single Centred Expansion". Cependant, et dans la même année Bransden et al [15] ont utilisé le modèle appelé "Single-CentredCoupled Chanel" élaboré à partir du modèle des pseudo-états.

La majorité de ces approches ont dévoilés leurs insuffisances dans la prise en considération des effets de couplage, soit parce que les calculs deviennent très difficiles par l'addition des états du continuum soit parce que ces approches sont inexacte.

A cause de l'insuffisance des méthodes citées précédemment et des difficultés de mise en œuvre des méthodes basées sur une théorie perturbative, dans ce mémoire nous nous sommes intéressés à une approche relativement nouvelle excluant un traitement perturbatif, et fondée sur une théorie variationnelle, nommée "Principe Variationnel de Schwinger" qui consiste à un développement de la fonction d'onde de diffusion d'un système collisionnel sur une base des états d'essai. Notre objectif principal été donc d'élaborer un outil performant et efficace à l'étude de la collision ion-atome aux vitesses intermédiaires.

Pour la première fois, en 1979 une application du principe variationnel de Schwinger à la diffusion e -He a été présentée par Lucchese et Mc Koy [16] dont le but était de montrer que ce dernier fournit de bonnes solutions aux problèmes de diffusion sans nécessiter des développements sur des bases importantes. Par la suite, Lucchese, Watson et Mc Koy [17] ont développé cette approche dans le cas de la diffusion élastique d'électron par des molécules. En effet leur objectif était de montrer que l'amplitude de diffusion déduite du principe variationnel de Schwinger converge rapidement par rapport à la base sur laquelle la fonction d'onde de diffusion est développée.

En 1984, B. Brendlé [18,19] et sous la direction du Pr. R. Gayet au Laboratoire des Collisions Atomiques de l'université de Bordeaux-I (France), a appliqué cette méthode à l'excitation d'ions et d'atomes par impact de noyaux nus aux vitesses intermédiaires. Il a montré que la restriction de la base à deux vecteurs représentant les seuls états initial et final de la transition considérée donne une meilleure stabilité des résultats et une amplitude de transition stationnaire, quoique le choix ne satisfasse pas exactement les conditions asymptotiques.

Parallèlement, M. Bouamoud [20], dans le même Laboratoire à l'université de Bordeaux I (France) et toujours sous la direction du Pr R. Gayet, a repris et développé cette méthode en mettant au point une nouvelle approche en utilisant une base constituée de cinq états de la cible.

En 1998, et dans un travail qui a fait l'objet d'une thèse de Magister de Mr B. Lasri[21] à l'Université de Tlemcen (Algérie) sous la direction du Pr M. BOUAMOUD, ce formalisme variationnel a été réexaminé de nouveau en s'appuyant sur un nouveau code informatique de calcul en Fortran calculant systématiquement les sections efficaces totales d'excitation et ainsi la base a été élargie de deux à cinq états en incluant la totalité du spectre discret ainsi que celui de continuum de la cible.

Récemment, dans le but de développer et d'affiner encore plus cette approche variationnelle dans la représentation de la fonction d'onde de diffusion, B. Lasri[22] n'était pas restreints lors de son développement à 5 états de base mais il avait élargi cette base de 5 états à 10 puis à 14 états. Le propagateur de Green a été développé aussi sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que par celui du continuum de la cible. En fait, dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, la contribution des états du continuum est petite sans toutefois être complètement négligeable [15][19].

Ce nouveau modèle théorique fut appliqué avec succès par le biais du formalisme du paramètre d'impact à l'excitation de l'atome d'hydrogène principalement et ions hydrogénoïdes (Li^{2+} , Be^{3+} , ...etc) en collision avec des protons et à l'excitation des ions héliumoïdes (Fe^{24+} , Kr^{34+} , Xe^{54+} , ...etc) avec des noyaux de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N_2 , Ne, Ar, Kr et Xe) aux vitesses intermédiaires [20-26].

En effet, vu les divers prédictions théoriques qui paraissent très encourageantes pour l'atome d'hydrogène principalement et les ions hydrogénoïdes (Li^{2+} , Be^{3+} , ...) ainsi que les ions héliumoïdes (Fe^{24+} , Kr^{34+} , Xe^{52+} , ...) étudiés, ces derniers demeurent en parfait accord avec ceux d'autres travaux théoriques fondés sur d'autres techniques récentes comme celles de Close Coupling [27-38] ainsi qu'avec la totalité des résultats expérimentaux [39-44]. Cependant, on pourra dire que cette nouvelle formulation de l'approche variationnelle de Schwinger, s'avère un outil d'investigation très puissant pour étudier l'excitation électronique d'atomes par impact d'ion aux vitesses d'impact intermédiaires et de prédire également et avec succès la saturation des sections efficaces

totales d'excitation quand la charge du projectiles (atomes de gaz rares) augmente (B. Brendlé et al (1985) [18], K. Wohrer et al (1986) [19], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [20], B. Lasri (1998, 2007) [21,22], M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [23], B. Lasri, A Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet (2005) [24], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2006) [25], B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen (2007) [26], B. Lasri *et al.* Chin. J. Phys. 52, 1498 (2014) [27]).

Contrairement à la croissance en Z_p^2 prédite par l'approximation de Born I, le principe variationnel de Schwinger prévoit donc la saturation à une valeur finie de ces sections efficaces lorsque Z_p tend vers l'infini, là où d'autre théorie (base d'états couplés) semblent prédire le passage par un maximum puis une décroissance de ces section pour des valeurs asymptotiquement grande de la charge excitatrice.

Dans notre travail, et en se basant sur le principe variationnel de Schwinger nous allons calculer théoriquement et numériquement les sections efficaces totales d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}) au régime de vitesses intermédiaires. Nos résultats seront comparés avec les résultats expérimentaux disponibles.

Ce travail est organisé de la manière suivante :

Après une brève introduction et le survol des principales approches théoriques et des divers travaux effectués jusqu'à présent sur les processus de collisions atomiques, nous exposons dans le premier chapitre l'approche variationnel de Schwinger avec la détermination des formes stationnaires de l'amplitude de transition dans le cas d'une collision sans réarrangement (collision directe).

Le chapitre II décrit l'adaptation du principe à l'excitation atomique. Ceci nous permet de développer l'amplitude de transition variationnel pour aboutir aux sections efficaces totales d'excitations des systèmes hydrogénéoïdes par impact d'ions.

Le chapitre III consiste en l'évaluation de deux sortes d'éléments de matrice, notés $(i|V|j)$ et $(i|V G_T^+ V|j)$ dits respectivement de premier ordre de Born (Born-I) et de deuxième ordre de Born (Born-II).

Le dernier chapitre (IV), représentant le vif du sujet, a été consacrée à l'application de ce formalisme variationnel à l'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}) au régime de vitesses intermédiaires.

Nos résultats seront comparés par la suite avec ceux de Fritsch *et al.* [28] basée sur une approche semi-classique des voies couplées « semi-classical close-coupling method with atomic orbital basis set » avec des bases composés d'orbitales atomique ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Hughes *et al.* [29].

On clôture ce travail avec une conclusion générales et des perspectives.

Références :

- [1] - C. P. Ballance, N. R. Badnell and K. A. Berrington, *J. Phys. B.* 34, 3287 (2001).
- [2] - A. D. Whiteford, N. R. Badnell, C. P. Ballance, S. D. Loch, M. G. O'Mullane and H. P. Summers, *J. Phys. B* 35, 3729 (2002).
- [3] - W. A. Schroeder, T. R. Nelson, A. B. Borisov, J. W. Longworth, K. Boyer and C. K. Rhodes, *J. Phys. B* 34, 297 (2001).
- [4] - Vainshtein, I. Presnyakov, and I. Sobelman, *zh. Eksp. sov. ,phys. Jetp* 18,pp 1383-1390 (1964).
- [5] - D. Crothers , R. Mccarroll , *proc. Phys. Soc.* 86 issue: 4, 753-760(1965)
- [6] - R. McCarroll and A. Salin, *Phys. B , ser. 2, vol.1*,pp163-171(1968).
- [7] - R. McCarroll et A. Salin, *Ann. Phys. (Paris)* 1 pp283-287(1966).
- [8] - R. J. Glauber,. *Lectures in theoretical physics, Vol. 1*, pp. 315,320 (1959).
- [9] - J. T. Park, J. E. Aldag, J. M. George et J. L. Preacher, *Phys. Rev. A* 14, pp 608-614 (1976).
- [10] - I. M. Cheshire et E.C. Sullivan, *Phys. Rev.* 4 ,pp160-167 (1967).
- [11] - B. H. Bransden et J.P. Coleman , *J. Phys. B* 5 ,pp 537-540(1972)
- [12] - J. F. Reading, A. L. Ford and E. G. Fitchard, *Phys. Rev. Lett.* 36 5B (1976).
- [13] - E. Fitchard, A.L. Ford et J.F. Reading, *Phys. Rev. A* 16,pp 1325-13(1977).
- [14] - J. F. Reading and A. L. Ford, *Phys. Rev. A* 20 ,pp130-13 (1979).
- [15] - B h Bransden , D P Dewangan and C.J Noble , *J. Phys. B: atom. Molec.Phys*, vol. 12, N°. 21, pp3563-3568(1979).
- [16] - R. R. Lucchese et V. McKoy, *J. Phys. B* 12 L421(1979).
- [17] - R. R. Lucchese, D.R. Watson et V. McKoy, *Phys. Rev. A* 22 pp 421(1980).
- [18] - Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, *Phys. Rev. Lett.* 54 ,N :18,pp2007-2010 (1985).
- [19] - K Wohrer, A Chetioui, J P Roze, A Jolly, F Fernandez, C Stephan, BBrendlé and R Gayet, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 19 pp1997-2006 (1986) .

- [20] - R. Gayet and M. Bouamoud ,Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 pp515-522 (1989).
- [21] - B. Lasri ,Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakrBelkaïd de Tlemcen (1998).
- [22] - B. Lasri ,Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakrBelkaïd de Tlemcen (2007).
- [23] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, Phys. Chemi. News , Vol 20 , pp12-17 (2004).
- [24] - B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud,R. Gayet , Physical and chiminal news vol.28 pp97-102 (2006).
- [25] - B. Lasri, M. Bouamoud, R. Gayet, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 251, pp66–72 (2006).
- [26] - B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen, Journal of Electron Devices, Vol. 5, pp. 127-131(2007).
- [27] - B. Lasri, C. Champion, M. Sahlaoui, M. Bouamoud, and M. Dogan, Chin. J. Phys. 52, 1498 (2014).
- [28] - W. Fritsch, R. Shingal and C-D. Lin, Physical Review A, 44 (9), 5686 (1991)
- [29] - Hughes et al J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27 1143-1150 (1994).

Chapitre I

Principe variationnel de Schwinger

Durant ces dernières décennies, les méthodes variationnelle ont prouvé leur efficacité comme étant un outil d'investigation inestimable dans la physique théorique, notamment pour l'étude des phénomènes de collisions atomique, ainsi que pour la chimie afin de résoudre par exemple le problème des états liés. Pour des problèmes collisionnels, ces méthodes variationnelle peuvent être groupées en deux catégories: celles basées sur l'équation de Schrödinger dites méthodes de Hulthén-Khon [1-2], la méthode variationnelle dite de la matrice-R (**R-matrix**) [3-4] et celles basées sur l'équation de Lippmann-Schwinger qui est une méthode variationnelle, que Schwinger en personne a présenté dans ses cours à l'université de Harvard et fut publiée en 1947 [5] d'où l'appellation « principe variationnel de Schwinger ».

Le principe variationnel de Schwinger consiste à obtenir une forme stationnaire de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations des états de diffusion. Dans ce chapitre on a présenté les expressions stationnaires de l'amplitude de transition dans le cas d'une collision.

I-1. Formes stationnaires de l'amplitude de transition :

Considérons le cas d'une voie de réarrangement c où l'hamiltonien du système se décompose comme suit :

$$H = H_c + V_c \quad \text{I-1}$$

Où H_c est l'hamiltonien des particules sans interaction et V_c le potentiel d'interaction entre les particules dans cette voie.

Nous désignerons par les vecteurs $|\alpha\rangle$ et $\langle\beta|$ présentent respectivement les états propres de H_c dans la voie d'entrée (état initial du système) et la voie de sortie (état final du système).

Les états de diffusions $|\Psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\Psi_\beta^-|$, vecteurs propres de l'hamiltonien total du système satisfaisant respectivement aux conditions d'ondes entrantes et sortantes, vérifient les équations de Lippmann-Schwinger :

$$|\Psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_c^+ V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \quad \text{I-2a}$$

$$\langle\Psi_\beta^-| = \langle\beta| + \langle\Psi_\beta^-| G_c^- V_c \quad \text{I-2b}$$

Avec G_c^+ l'opérateur de Green définit par:

$$G_c^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H_c + i\varepsilon)^{-1} \quad \text{I-3}$$

Où E désigne l'énergie totale du système.

Définissons l'opérateur de transition T par :

$$T |\alpha\rangle = V_c |\Psi_\alpha^+\rangle, \quad \langle\beta| T = \langle\Psi_\beta^-| V_c \quad \text{I-4}$$

L'amplitude de transition ($\alpha \rightarrow \beta$) est définie comme étant l'élément de matrice de transition s'écrivant sous la forme :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta| T |\alpha\rangle \quad \text{I-5}$$

A partir des deux expressions (I-2a, b), on peut tirer les trois formes différentes de l'expression de l'amplitude de transition :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta| V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \quad \text{I-6a}$$

$$= \langle \psi_{\beta}^{-} | V_C | \alpha \rangle \quad \text{I-6b}$$

$$= \langle \psi_{\beta}^{-} | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_{\alpha}^+ \rangle \quad \text{I-6c}$$

Après ces trois formes précédentes (I-6a, b, c), nous pouvons écrire le principe variationnel pour l'amplitude de transition sous deux formes :

I-1.1 Forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger :

Après les relations (I-6a, b, c), on peut tirer la forme **bilinéaire** de $T_{\beta\alpha}$:

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_C | \psi_{\alpha}^+ \rangle + \langle \psi_{\beta}^{-} | V_C | \alpha \rangle - \langle \psi_{\beta}^{-} | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_{\alpha}^+ \rangle \quad \text{I-7}$$

De plus, quand on utilise les vecteurs exacts $|\Psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle \Psi_{\beta}^-|$, la forme bilinéaire de L'amplitude de transition est exacte et stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires

$|\delta\psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle \delta\psi_{\beta}^-|$ des vecteurs $|\psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle \psi_{\beta}^-|$, autour de leurs valeurs exactes. En différentiant l'expression (I-7), nous obtenons :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | - \langle \psi_{\beta}^{-} | + \langle \psi_{\beta}^{-} | V_C G_C^+ V_C | \delta\psi_{\alpha}^+ \rangle + \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | V_C [| \alpha \rangle - | \psi_{\alpha}^+ \rangle + G_C^+ V_C | \psi_{\alpha}^+ \rangle \right] \quad \text{I-8}$$

Puisque $|\Psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle \Psi_{\beta}^-|$ vérifient les équations intégrales de Lippmann-Schwinger (I-2 a, b)

la relation (I-8) donne alors :

$$\delta T_{\beta\alpha} = 0 \quad \text{I-9}$$

L'expression (I-7) qui est bilinéaire en $|\psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle \psi_{\beta}^-|$ est bien stationnaire du principe variationnel de Schwinger.

I-1.2 Forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger:

Suivant la même procédure citée ci-dessus et à partir des équations (I-6 a, b, c), nous déduisons une autre expression stationnaire de $T_{\beta\alpha}$, appelée forme **fractionnaire** du principe variationnel de Schwinger :

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle}{\langle \psi_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle} \quad \text{I-10}$$

En tenant compte les représentations intégrales équivalentes (I-6a, b, c) de l'amplitude de transition, nous obtenons une forme identique à l'expression (I-8):

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | -\langle \psi_\beta^- | + \langle \psi_\beta^- | V_C G_C^+ \right] V_C | \delta \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta \psi_\beta^- | V_C \left[| \alpha \rangle - | \psi_\alpha^+ \rangle + G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \right] \quad \text{I-11}$$

La forme fractionnaire (I-10) est bien stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires des états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \psi_\beta^-|$ autour de leurs valeurs exactes. De plus cette forme présente l'avantage d'être indépendante de la normalisation choisie pour les états de diffusion.

Jusqu'à présent, les principes variationnels que nous venons d'examiner sont « exacts » en ce sens qu'ils font usage des solutions $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \psi_\beta^-|$ des équations de Lippmann-Schwinger.

On obtient des formules approchées en remplaçant dans les expressions stationnaires de $T_{\beta\alpha}$ les fonctions d'onde inconnues $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \psi_\beta^-|$ par les fonctions d'essai connues.

Comme une première illustration, l'approximation de Born (**Born-I**) consiste à remplacer, respectivement dans l'expression (I-10) les vecteurs exacts inconnus $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \psi_\beta^-|$ par les vecteurs d'essais $|\alpha\rangle$ et $\langle \beta|$ soit :

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle \quad \text{I-12a}$$

$$\langle \psi_\beta^-| = \langle \beta| \quad \text{I-12b}$$

L'expression stationnaire (I-10) de l'amplitude de transition que nous noterons $T_{\beta\alpha}^B$ devient:

$$T_{\beta\alpha}^B = \frac{\langle \beta | V_C | \alpha \rangle \langle \beta | V_C | \alpha \rangle}{\langle \beta | V_C - V_C G_C^+ V_C | \alpha \rangle} \quad \text{I-13}$$

On sous une autre formulation :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} \left[\frac{1}{1 - \frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}}} \right] \quad \text{I-14}$$

Tel que :

$$T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle \beta | V_c | \alpha \rangle \quad \text{I-15}$$

Est l'amplitude de transition à la première approximation de Born et où

$$\begin{aligned} \overline{T}_{\beta\alpha}^{BII} &= \langle \beta | V_c G_c^+ V_c | \alpha \rangle \\ &= T_{\beta\alpha}^{BII} - T_{\beta\alpha}^{BI} \end{aligned} \quad \text{I-16}$$

$T_{\beta\alpha}^{BII}$ étant l'amplitude de transition à la seconde approximation de Born.

Si le rapport
$$\frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}} < 1 \quad \text{I-17}$$

nous pouvons développer l'expression (I-14) et obtenir $T_{\beta\alpha}$:

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} + \overline{T}_{\beta\alpha}^{B2} + \dots \quad \text{I-18}$$

De sorte que la condition (I-17) soit remplie, La deuxième approximation de Born apparait comme le premier terme d'une série qui converge vers l'expression stationnaire approchée. On peut donc conclure que, dans le cas des énergies assez élevées pour lesquelles la série de Born converge, le principe variationnel de Schwinger pourrait fournir une meilleure approximation que celle de Born au 2^{ème} ordre.

I-2. Amplitude variationnelle approchée dans le formalisme de Schwinger :

Comme les états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ n'étant pas connus exactement, nous allons prendre comme états d'essai les vecteurs approchés $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$ et tels que :

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \quad \text{I-19a}$$

Et

$$\langle \tilde{\psi}_\beta^- | = \langle \psi_\beta^- | + \langle \delta \psi_\beta^- | \quad \text{I-19b}$$

Que l'on développe dans un sous-espace vectoriel de dimension finie N , soit :

$$| \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i | i \rangle \quad \text{I-20a}$$

$$\langle \tilde{\psi}_\beta^- | = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j | \quad \text{I-20b}$$

Les coefficients \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* composantes des états de diffusion approchés se déduisent à partir de la résolution de l'équation $\delta T_{\beta\alpha} = 0$

Pour exprimer l'amplitude de transition approchée, substituons dans l'expression (I-10) les états de diffusion par ceux d'essai. Nous obtenons alors $\tilde{T}_{\beta\alpha}$:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | V_C | \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle \langle \tilde{\psi}_\beta^- | V_C | \alpha \rangle}{\langle \tilde{\psi}_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle} \quad \text{I-21}$$

A partir de l'équation (I-8) et des expressions (I-19a, b), nous déduisons l'équation suivante :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | - \langle \tilde{\psi}_\beta^- - \delta \psi_\beta^- | (1 - V_C G_C^+) | V_C | \delta \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta \psi_\beta^- | V_C | [\alpha \rangle - (1 - G_C^+ V_C) | \tilde{\psi}_\alpha^+ - \delta \psi_\alpha^+ \rangle \right] \quad \text{I-22}$$

Il est facile de montrer que pour toute variations en premier ordre en $|\delta \psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \delta \psi_\beta^-|$ nous avons : $\delta T_{\beta\alpha} = 0$

En remplaçant les vecteurs $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_\beta^-|$ par leurs développements (I-20a, b), nous obtenons pour les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusion approchés les deux systèmes d'équations couplées suivants :

$$\begin{aligned} \langle j | V_C | \alpha \rangle - \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle &= 0 & j=1, \dots, N \\ \langle \beta | V_C | i \rangle - \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle &= 0 & i=1, \dots, N \end{aligned} \quad \text{I-23}$$

Si on désigne par D la matrice carrée de dimension N dont les éléments sont :

$$D_{ji} = \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle \quad \text{I-24}$$

Et par V_α et V_β les vecteurs colonnes dont les composantes sont respectivement :

$$(V_\alpha)_j = \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad \text{I-25a}$$

$$(V_\beta)_i = \langle i | V_C | \beta \rangle \quad \text{I-25b}$$

Et les vecteurs colonnes \tilde{a} et \tilde{b} dont les éléments sont \tilde{a}_i et \tilde{b}_j , les deux systèmes d'équations couplés (I-23) peuvent être exprimés sous une forme matricielle :

$$V_\alpha = D \cdot \tilde{a} \quad \text{I-26a}$$

$$(V_\beta^*)^t = \tilde{b}^* \cdot D \quad \text{I-26b}$$

Ou encore, en utilisant les propriétés algébriques des matrices:

$$\tilde{a} = D^{-1} V_\alpha \quad \text{I-27a}$$

$$\tilde{b}^* = (V_\beta^*)^t D^{-1} \quad \text{I-27b}$$

D^{-1} étant l'inverse de la matrice D .

Ces deux équations permettent de donner les solutions pour les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états d'essais $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$. En substituant ces deux états d'essai $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$ dans l'expression (I-21) de l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$, on obtient :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle \tilde{a}_i \tilde{b}_j^* \langle j | V_C | \alpha \rangle}{\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle \tilde{a}_i} \quad \text{I-28}$$

ou sous forme matricielle :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{[(V_\beta^*)^t \cdot \tilde{a}] [\tilde{b}^* \cdot V_\alpha]}{\tilde{b}^* D \tilde{a}} \quad \text{I-29}$$

Qui s'écrit aussi à l'aide des deux équations (I-27a, b):

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = (V_\beta^*)^t \tilde{a} = \tilde{b}^* V_\alpha \quad \text{I-30}$$

Finalement, en explicitant les deux vecteurs \tilde{a} et \tilde{b}^* en fonction des solutions (I-27a, b) nous obtenons à partir de l'équation (I-30):

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad \text{I-31}$$

Où $(D^{-1})_{ij}$ est l'élément de la matrice D^{-1} relatif aux vecteurs de base $|i\rangle$ et $|j\rangle$. Nous venons de déterminer l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ en fonction des états de diffusion approchés qu'on a développée dans un sous-espace vectoriel de dimension finie.

Références:

- [1]- L. Hulthén, K. Fysiogr. Sallsk. Lund. Forh.257 (1944).
- [2]- W.Kohn , phys. Rev .74 , 1763 (1948) .
- [3]- R.K. Nesbet , “Variational Methods in Electron –Atom Scattering Theory”, Plenum press, New York (1980) .
- [4]- B.I. Schneider,”An R-Matrix Approach to Electron Molecule Collision” chapitre 8 in Computational Methods for Electron- Molecule Collisions Edited by W .M. Huo and F .A. Gianturco , Plenum Press , New York (1995).
- [5]- J.Schwinger, Phys. Rev. 56, 750 (1947).

Chapitre II

Amplitude de transition de Schwinger pour l'excitation



l'importance, de l'étude l'excitation d'un système hydrogénoïde par impact d'ions aux vitesses intermédiaires est de décrire correctement ce processus en termes de passage par des états intermédiaires pour de petites distances internucléaires [1], et la principale contribution à la transition va se produire aux petits angles ($< 10^{-3}$ radian pour $H^+ \rightarrow H$ à 50 KeV) [2], on peut considérer que le projectile décrit une trajectoire rectiligne par rapport à la cible et traiter donc ce problème dans l'approximation eikonale.

II.1 Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact:

Pour cette étude théorique il existe deux approximations :

1- La trajectoire des noyaux peut être traitée de manière classique par la donnée de la vitesse \vec{v} et du paramètre d'impact $\vec{\rho}$ de la collision.

2- Le mouvement des noyaux peut être représenté par une onde plane.

La méthode eikonale est une approche semi-classique car elle consiste à supposer que les noyaux se déplacent d'une façon classique tandis que le mouvement des électrons est traité d'une manière quantique. Pour cela, considérons une collision entre un projectile de masse M_p et de charge Z_p et une cible de masse M_T et de charge Z_T , représentée par la figure ci-dessous, (figure II-1), dont la séparation internucléaire est donnée par :

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \quad \text{II-1a}$$

$$\vec{z} = \vec{v} \cdot t \quad \text{II-1b}$$

$$\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \quad \text{II-1c}$$

\vec{R} : La distance internucléaire.

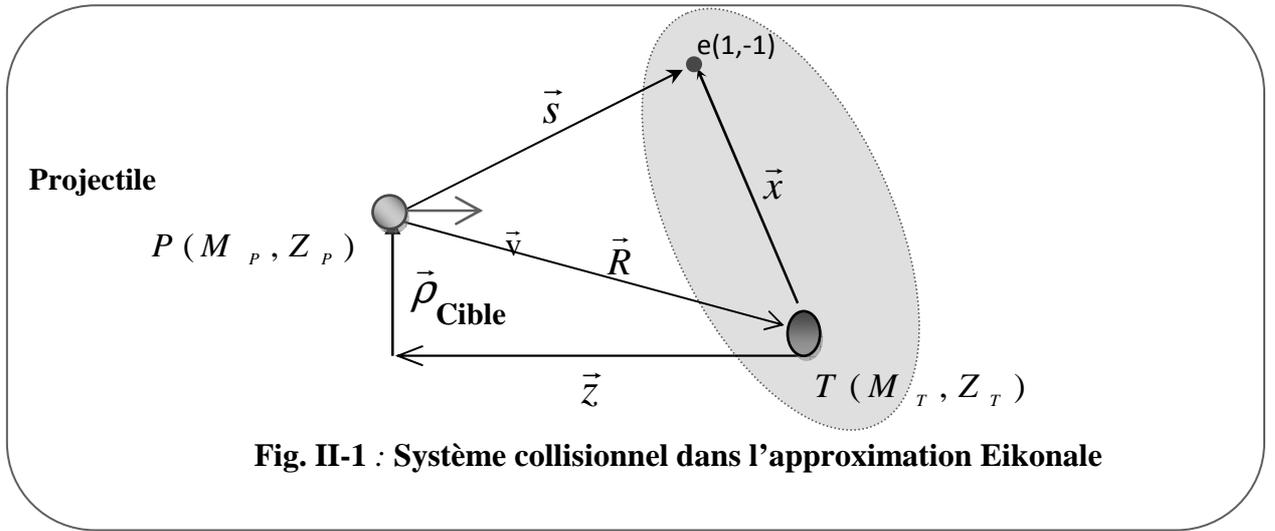
$\vec{\rho}$: Paramètre d'impact.

\vec{v} : vitesse d'impact.

t : temps pris arbitrairement égal à zéro quand $\vec{R} = \vec{\rho}$.

\vec{z} est la projection du \vec{R} sur le chemin du projectile.

Géométriquement, on représente le système collisionnel comme suit :



Avec \vec{x} : La position de l'électron relative à la cible T.

\vec{s} : La position de l'électron relative au projectile P.

L'Hamiltonien total décrivant le système S formé par le projectile, la cible et l'électron, dans le cas d'une seule voie de réarrangement s'écrit :

$$H = H_C + V_C \quad \text{II-2}$$

H_C est le Hamiltonien des particules sans interaction donné par $H_C = H_T + H_P$.

Avec :

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \quad \text{II-3a}$$

Et

$$H_P = -\frac{1}{2\mu} \Delta_R \quad \text{II-3b}$$

Où μ représente la masse réduite du système :

$$\mu = \frac{M_p(M_T + 1)}{M_p + M_T + 1} \quad \text{II-4}$$

V_C est le potentiel d'interaction entre les particules en collision :

$$V_C = \frac{Z_p Z_T}{R} - \frac{Z_p}{S} \quad \text{II-5}$$

L'équation de Schrödinger dépendant du temps donnée par $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$ s'écrit sous une autre forme dite équation de Schrödinger de diffusion eikonale, que l'on déduit en dérivant par rapport à Z au lieu de t et en utilisant l'expression (II-1b) $\vec{Z} = \vec{v}t$, on aura alors :

$$\left(-i\vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} + H_T + V_C \right) |\psi(z)\rangle = 0 \quad \text{II-6}$$

Pour résoudre l'équation (II-6), nous impliquons d'abord à résoudre l'équation de Schrödinger eikonale de la cible suivante :

$$\left(-i\vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{Z}} + H_T \right) |k(Z)\rangle = 0 \quad \text{II-7}$$

Où $|k(Z)\rangle$ est un vecteur propre de H_T , exprimé dans la représentation des coordonnées électroniques de la cible $\{\vec{x}, Z\}$ par :

$$\langle \vec{x}, Z | k(Z) \rangle = e^{\frac{-i\varepsilon_k Z}{v}} \varphi_k(\vec{x}) \quad \text{II-8}$$

ε_k : est l'énergie propre de l'état lié φ_k .

En ajoutant le potentiel inter-agrégat V_{int} (le potentiel d'interaction coulombienne de longue portée entre le projectile et la cible):

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_p(Z_T - 1)}{R} \quad \text{II-9}$$

Ce potentiel doit s'ajouter au hamiltonien H_T dans l'équation (II-7), pour obtenir les états propres eikonales de la cible, solutions de l'équation de Schrödinger eikonales de cette dernière, multipliés par un facteur de phase nommé « de coulomb » : $i \frac{Z_p(Z_T - 1)}{v} \ln(vR - vZ)$ avec $R - Z = \rho$. Donc l'amplitude de transition est également multipliée par un facteur de phase qui dépend du paramètre d'impact $\vec{\rho}$, donné par $\rho \frac{2iZ_p(Z_T - 1)}{v}$, ce facteur et grâce à sa

forme exponentielle va être négligé dans le calcul de la section efficace totale mais il sera réintroduit dans le calcul de la section efficace différentielle.

Ces conclusions nous amènent donc à négliger le potentiel inter-agrégat dans le calcul de l'amplitude de transition et définir ainsi l'interaction responsable de l'excitation comme :

$$\begin{aligned}
 V &= V_C - V_{\text{int}} \\
 &= V_C - \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \\
 &= Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right)
 \end{aligned}
 \tag{II-10}$$

L'équation de Schrödinger dans le formalisme du paramètre d'impact devient :

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \left| \psi_{\alpha}^{+}(z) \right\rangle = 0
 \tag{II-11a}$$

Et

$$\left\{ iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \left\langle \psi_{\beta}^{-}(z) \right| = 0
 \tag{II-11b}$$

Sachant que les états $\left| \alpha(z) \right\rangle$ et $\left\langle \beta(z) \right|$ sont respectivement les états initial et final de la cible. Ils sont aussi des solutions de (II-7). Nous pouvons résoudre les deux équations différentielles (II-11a, b) avec leurs conditions initiales, en invoquant les opérateurs de Green de la cible, solutions des équations suivantes :

$$\left(\mp iv \frac{\partial}{\partial Z} + H_T \right) G_T^{\pm}(Z - Z') \left| k(Z') \right\rangle = -\delta(Z - Z') \left| k(Z') \right\rangle
 \tag{II-12}$$

Avec les conditions initiales suivantes :

$$G^+(z) = 0 \quad \text{si } z < 0
 \tag{II-13a}$$

$$G^-(z) = 0 \quad \text{si } z > 0
 \tag{II-13b}$$

En résolvant l'équation (II-12), on trouve :

$$\left\langle v(z') \right| G_T^+(z - z') = -\frac{i}{v} \left\langle v(z) \right| \theta(z - z')
 \tag{II-14a}$$

$$G_T^-(z - z') \left| v(z') \right\rangle = \frac{i}{v} \theta(z - z') \left| v(z) \right\rangle
 \tag{II-14b}$$

Où $\theta(Z - Z')$ est la fonction Heaviside « du nom de Oliver Heaviside, c'est une fonction discontinue prenant la valeur 0 pour tous les valeurs réels strictement négatifs et la valeur 1 partout ailleurs ».

Les états de diffusion $|\Psi_{\alpha}^{+}(Z)\rangle$ et $\langle\Psi_{\beta}^{-}(Z)|$, solutions de l'équation (II-11a, b), sont alors déterminés dans l'approximation eikonale par les équations de Lippmann-Schwinger suivantes [3] :

$$|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^{+}(z - z') V(z') |\psi_{\alpha}^{+}(z')\rangle \quad \text{II-15a}$$

$$\langle\psi_{\beta}^{-}(z)| = \langle\beta(z)| + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^{-}(z - z') V(z') \langle\psi_{\beta}^{-}(z')| \quad \text{II-15b}$$

L'amplitude de transition eikonale en $\vec{\rho}$ s'écrit sous trois formes suivantes :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle\beta(z)|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle \quad \text{II-16a}$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow -\infty} \langle\psi_{\beta}^{-}(z)|\alpha(z)\rangle \quad \text{II-16b}$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle\psi_{\beta}^{-}(z)|V|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle \quad \text{II-16c}$$

Où la notation $\langle | \rangle$ indique l'intégration sur les coordonnées électroniques. Injectons l'expression (II-15a) de $|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle$ dans (II-16a), et en utilisant (II-14a), on obtient :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\beta(z)|V|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle \quad \text{II-17a}$$

De façon analogue, nous obtenons :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_{\beta}^{-}(z)|V|\alpha(z)\rangle \quad \text{II-17b}$$

Et

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_{\beta}^{-}(z)|V \left\{ |\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^{+}(z - z') V |\psi_{\alpha}^{+}(z')\rangle \right\} \quad \text{II-17c}$$

En utilisant les relations (II-17a, b, c), on établit la formule variationnelle eikonale de l'amplitude de transition en $\vec{\rho}$ qui est analogue à l'expression quantique (I-10) :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\beta(z)|V|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle \left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_{\beta}^{-}(z)|V|\alpha(z)\rangle}{\left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_{\beta}^{-}(z)|V \left\{ |\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^{+}(z - z') V |\psi_{\alpha}^{+}(z')\rangle \right\}} \quad \text{II-18}$$

En adoptant la notation $(| \rangle)$ qui indique l'intégration sur les coordonnées électroniques et la coordonnée z c'est-à-dire $(k | \Theta | k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dZ \langle k(Z) | \Theta | k'(Z) \rangle$ où Θ dénote un opérateur, l'expression de $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ peut être écrite sous une forme condensée dite forme eikonale du principe variationnel de Schwinger, soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} \frac{(\beta | V | \psi_{\alpha}^+) (\psi_{\beta}^- | V | \alpha)}{(\psi_{\beta}^- | V - V G_T^+ V | \psi_{\alpha}^+)} \quad \text{II-19}$$

D'une manière semblable au traitement quantique, l'expression (II-19) de l'amplitude de transition pour un paramètre d'impact donné est d'une part, stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion $|\Psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle\Psi_{\beta}^-|$ autour de leurs valeurs exactes et conduit d'autre part, à la forme approchée suivante :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha) \quad \text{II-20}$$

Où $(D^{-1})_{ij}$ représente ici l'élément de la matrice inverse de celle de l'opérateur $(V - V G_T^+ V)$ définie sur la base des vecteurs $|i\rangle$ et $\langle j|$:

$$D_{ji} = (j | V - V G_T^+ V | i) \quad \text{II-21}$$

II-2. Amplitude de transition :

Après avoir exprimé l'amplitude de transition dans le formalisme du paramètre d'impact (II-20), nous allons déterminer les formes simplifiées de l'amplitude de transition eikonale et de la section efficace totale pour l'excitation d'une cible atomique par impact d'un atome nu tout en prenant le développement des états de diffusion approchés $|\tilde{\psi}_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_{\beta}^-|$ sur une base constituée uniquement par les états liés de la cible parmi ceux intermédiaires de transition en ignorant l'inclusion des états de capture sur le projectile .

II.2.1 Amplitude de transition eikonale :

Soient $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ les états électroniques initial et final, états propres de H_T . Soient $|\vec{k}_\alpha\rangle$ et $|\vec{k}_\beta\rangle$ les états propres initial et final décrivant l'onde plane associée au projectile (\vec{k}_α et \vec{k}_β sont les vecteurs quantités des mouvements initial et final du projectile).

L'amplitude de transition quantique prise entre l'état initial et l'état final $|\alpha\rangle \otimes |\vec{k}_\alpha\rangle \rightarrow |\beta\rangle \otimes |\vec{k}_\beta\rangle$ s'écrit :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \vec{k}_\beta | \otimes \langle \beta | V | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (a)$$

$$= \left[\langle \vec{k}_\beta | \otimes \langle \beta | \right] V \left[| \psi_\alpha^{+E} \rangle \otimes |\vec{k}_\alpha \rangle \right] \quad (b) \quad \text{II-22}$$

$$= \langle \vec{k}_\beta, \beta | V | \vec{k}_\alpha, \psi_\alpha^{+E} \rangle \quad (c)$$

où $|\psi_\alpha^{+E}\rangle$ représente l'onde de diffusion eikonale de la cible.

Les équations (II-22b, c) résultent en prenant l'onde de diffusion au premier ordre d'un développement en puissance de $1/\mu$ de l'approximation de paramètre d'impact.

En représentation de coordonnées $\{|\vec{R}, \vec{x}\rangle\}$, on exprime l'amplitude de transition quantique sous sa forme eikonale comme suit :

$$T_{\beta\alpha} = \int d^3\vec{R} d^3\vec{x} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \phi_\beta^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad \text{II-23}$$

Le vecteur \vec{q} représente la quantité de mouvement transférée à la cible. La conservation de la quantité de mouvement impose que :

$$\vec{q} = \vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta \quad \text{II-24}$$

Il peut s'écrire à l'aide de ses composantes longitudinale et transversale par rapport à la vitesse relative tel que : $\vec{\eta}\cdot\vec{v} = 0$:

$$\vec{q} = q_v \vec{v} + \vec{\eta} \quad \text{II-25}$$

la conservation de l'énergie exige :

$$\frac{k_\alpha^2}{2\mu} + \varepsilon_\alpha = \frac{k_\beta^2}{2\mu} + \varepsilon_\beta \quad \text{II-26}$$

ε_α et ε_β sont les énergies des états liés initial et final de la cible. Sachant que l'approximation eikonale est valable à haute énergie et aux petites angles de collision,

l'angle θ (entre les vecteurs \vec{k}_α et \vec{k}_β) est petit et l'énergie transférée est petite devant l'énergie du projectile, alors la composante longitudinale du moment transféré s'exprime :

$$q_v \approx \frac{\mathcal{E}_\beta - \mathcal{E}_\alpha}{v} \quad \text{II-27}$$

Et en utilisant la relation $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$, on obtient :

$$\vec{q} \cdot \vec{R} = \frac{\mathcal{E}_\beta - \mathcal{E}_\alpha}{v} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad \text{II-28}$$

Substituons l'expression approchée (II-28) de $\vec{q} \cdot \vec{R}$ en tenant compte $d^3\vec{R} = d^2\vec{\rho} dz$ dans l'expression de l'amplitude de transition (II.23), on obtient la forme suivante :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} \underbrace{\int dz d^3\vec{x} e^{i\frac{\mathcal{E}_\beta}{v}z} \phi_\beta^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) e^{i\frac{\mathcal{E}_\alpha}{v}z} \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x})}_{\left(\beta | V | \psi_\alpha^+ \right)}$$

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} \left(\beta | V | \psi_\alpha^+ \right) \quad \text{II-29}$$

Finalement, pour $\alpha \neq \beta$, on peut écrire l'amplitude de transition quantique (II.29) approchée en fonction de l'amplitude de transition variationnelle, exprimée dans le formalisme du paramètre d'impact, comme suit :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = i v \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} \rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{v}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad \text{II-30}$$

Où le facteur de phase $\rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{v}}$ dépendant du paramètre d'impact traduit la contribution du potentiel inter-agrégat (II-9) qui a été réintroduite [3].

II.2.2 Sections efficaces eikoniales :

Pour un processus d'excitation, La section efficace différentielle est donnée par la relation :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_\alpha}{k_\beta} \left| T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) \right|^2 \quad \text{II-31}$$

Où Ω est l'angle solide donnée par : $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\varphi$

Dans le cas où l'énergie incidente est très supérieure à la différence d'énergie $(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha)$ entre les états de la cible $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$, et dans le cas d'un faible transfert d'impulsion longitudinal ($\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$), l'expression (II.31) devient, à partir de la relation (II-26) :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad \text{II-32}$$

Pour accéder à la section efficace totale, il est utile de déterminer la section efficace différentielle en η , la composante transversale de la quantité de mouvement transférée. Par conséquent, la section efficace différentielle s'écrit :

$$d\sigma_{\beta\alpha} = d\varphi_\beta \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad \text{II-33}$$

En différentiant \vec{q}^2 calculé à partir des expressions (II-24, 25), et en se basant sur un cas de faible transfert d'impulsion $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$, on peut écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \quad \text{II-34}$$

En tenant compte du fait que $\varphi_\beta \equiv \varphi_\eta$, la section efficace totale s'écrit :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\eta \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi v} \right|^2 \quad \text{II-35}$$

En remplaçant maintenant $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ par son expression (II.30), et en appliquant la transformée de Fourier à deux dimensions, on aura :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad \text{II-36}$$

L'intégration sur l'angle azimutal φ_ρ est égale à 2π car $\left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2$ ne dépend que du module de $\vec{\rho}$. La section efficace totale devient donc :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad \text{II-37}$$

Nous avons vu auparavant que l'amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est variationnelle, par analogie au traitement quantique, et qu'une forme approchée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est complètement déterminé par l'expression (II-20), quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-

espace vectoriel de dimension finie. Il nous suffira alors, pour calculer la section efficace totale de diffusion, de déterminer $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ qui ne nécessite aucune intégration sur le paramètre d'impact $\vec{\rho}$ et nous permet de nous affranchir d'une difficulté majeure, celle de la divergence qui apparaît dans l'évaluation des éléments de matrice de type $(i|V|j)$ et $(i|V G_T^+ V|j)$ entre certains états hydrogénoïdes dégénérés (2s et 2p₀ par exemple), quand le calcul est fait de façon entièrement quantique.

Références :

- [1]- A. Kara-Hachemi , H. Hachemi, « Eléments de physique quantique », © Office des publications Universitaires : 01-1998. Edition : 1. 02.4100.
- [2]- B. Lasri , Thèse de doctorat es sciences , Université de Tlemcen (2007) , Texte en français.
- [3]- R. K. Janev et A. Salin, ann. Phys. N .y 73(1972)136-155.

Chapitre III

Calcul de l'amplitude de transition variationnelle

La détermination de l'amplitude de transition variationnelle approchée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{p})$ nécessite d'évaluer les deux catégories d'éléments de matrice :

- éléments de matrice de type $(i | V | j)$ dit de **Born-I**.
- éléments de matrice de type $(i | VG_T^+ V | j)$ dit de **Born-II**.

Les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont solutions de l'équation eikonale de Schrödinger avec l'Hamiltonien H_T de la cible. Rappelons que la notation $(| |)$ indique que l'intégration est effectuée sur la composante Z et les coordonnées électroniques.

III.1 Calcul des éléments de matrice de Born-I:

Les éléments de matrice de Born-I ont été présentés dans le chapitre précédent comme suit :

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle i|V|j\rangle \quad \text{III-1}$$

On peut ainsi les exprimer, en injectant la relation de complétude de la représentation de coordonnées, sous la forme :

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v} z} W_{ij}(\vec{\rho}, z) \quad \text{III-2}$$

Où :

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) \quad \text{III-3}$$

ε_i et ε_j sont respectivement les énergies associées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$ et v la vitesse d'impact. On démontre que $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ peut s'écrire comme suit [1]:

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = e^{i(m_j - m_i) \varphi_{\vec{R}}} W_{ij}(\rho, z) \quad \text{III-4}$$

Où m_i et m_j représentent respectivement les nombres quantiques magnétiques des états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$ et $\varphi_{\vec{R}}$ est l'angle azimutal relatif au paramètre d'impact $\vec{\rho}$.

Certaines propriétés de symétrie des éléments $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$, $(i|V|j)$ et $(i|VG_T^+V|j)$ ont été démontrées. Ces propriétés nous permettent d'une part de restreindre l'intervalle d'intégration sur z à des valeurs de z positives, et d'autre part, de réduire considérablement le nombre d'éléments à calculer.

$$W_{ij}(z) = W_{ij}^*(z) \quad (\text{réel}) \quad \text{III-5a}$$

$$W_{ij}(z) = W_{ji}(z) \quad \text{III-5b}$$

$$W_{ij}(-z) = (-1)^{i+l_j+m_i-m_j} W_{ij}(z) \quad \text{III-5c}$$

$$W_{-i,-j}(z) = (-1)^{m_i-m_j} W_{ij}(z) \quad \text{III-5d}$$

Dans cette dernière expression, les indices $-i$ et $-j$, signifient respectivement le changement simultané de m_i et m_j en $-m_i$ et $-m_j$.

Posons :

$$d_{ij} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v} \quad \text{III-6}$$

Il en résulte :

$$(i|V|j) = \left[\int_{-\infty}^0 dz + \int_0^{+\infty} dz \right] e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad \text{III-7}$$

Soit la fonction $G_{ij}(x, y)$ définie comme suit :

$$G_{ij}(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad \text{III-8}$$

On déduit, des relations (III-5a, b,c,d), les propriétés suivantes pour la fonction G_{ij} :

$$G_{ij}(-x, -y) = (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(x, y) \quad \text{III-9a}$$

$$G_{ij}(x, y) = G_{ji}^*(x, y) \quad \text{III-9b}$$

Où $G_{ij}^*(x, y)$ est la fonction conjuguée de $G_{ij}(x, y)$.

Par conséquent, l'expression (III-7) devient:

$$(i | V | j) = G_{ij}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(0, +\infty) \quad \text{III-10}$$

Où l'intervalle d'intégration $]-\infty, +\infty[$ est réduit à une intégration dans l'intervalle $[0, +\infty[$.

Pour calculer ensuite $G_{ij}(0, +\infty)$ dans l'expression (III-10), nous avons divisé

l'intervalle d'intégration sur z en deux intervalles:

- $[0, \tilde{z}_{ij}[$ aussi petit que possible où l'intégration sur z est effectuée d'une façon numérique.
- $[\tilde{z}_{ij}, +\infty[$ dans lequel l'intégration est faite analytiquement.

Ce choix des intervalles vient du fait, pour une valeur donnée du paramètre d'impact ρ et pour z suffisamment grand, qu'on peut définir une forme asymptotique plus simple $W_{ij}^{as}(\rho, z)$ de $W_{ij}(\rho, z)$ [2].

$$W_{ij}(\rho, z) = W_{ij}^{as}(\rho, z) \quad (z \geq \tilde{z}_{ij} \text{ et } \tilde{z}_{ij} \geq \frac{3}{2}\rho) \quad \text{II-11}$$

Et par la suite nous aurons :

$$G_{ij}(0, +\infty) = G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij}) + G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}, +\infty) \quad \text{III-12}$$

Où

$$G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij}) = \int_0^{\tilde{z}_{ij}} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad \text{III-13}$$

Est calculée numériquement et

$$G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}, +\infty) = \int_{\tilde{z}_{ij}}^{+\infty} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}^{as}(z) \quad \text{III-14}$$

Est déterminée analytiquement [2].

III.2 Calcul des éléments de matrice de Born-II:

La difficulté essentielle du formalisme de Schwinger consiste en l'évaluation des éléments de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$, nommés éléments de type Born-II. Une mauvaise représentation de l'opérateur G_T^+ entraîne une erreur dans le calcul de cet élément qui modifie considérablement l'amplitude de transition et par conséquent les prédictions physiques.

Afin de décrire de façon appropriée les phénomènes physiques, on a donné une représentation adéquate de G_T^+ pour une bonne évaluation des éléments $(i|V G_T^+ V|j)$ nous avons développé l'opérateur sur une base complète de la cible, l'ensemble des états propre de H_T .

On peut démontrer que l'opérateur de Green, correspondant à l'équation de Schrödinger eikonale de la cible, peut s'écrire sous la forme :

$$G_T^+(z, z') = -\frac{i}{v} \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{z'}^z H_T(u) du\right) \theta(z - z') \quad \text{III-15}$$

$\theta(z - z')$ Étant la fonction échelon unité (Heaviside).

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left[\sum + \int \right]_{\nu} (i|V|\nu) \left(-\frac{i}{v}\right) \theta(z - z') (\nu|V|j) \quad \text{III-16}$$

Où $\left[\sum + \int \right]_{\nu}$ signifie la sommation sur tous les états de base complète de la cible, incluant le spectre discret ainsi que celui du continuum de la cible [3].

En utilisant la propriété de la fonction $\theta(z - z')$, l'élément de Born-II peut s'exprimer, dans la représentation de coordonnées électroniques de la cible, sous deux formes :

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) \left[\sum + \int \right]_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{\nu j}z'} W_{\nu j}(z') \quad \text{III-17a}$$

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) \left[\sum + \int \right]_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} dz' e^{id_{\nu j}z'} W_{\nu j}(z') \int_{z'}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \quad \text{III-17b}$$

A partir de l'expression (III-11), et en définissant les régions asymptotiques par les valeurs \tilde{z}_{iv} et $\tilde{z}_{\nu j}$ deux cas peuvent être considérés:

• $\tilde{z}_{iv} > \tilde{z}_{vj}$: il est plus facile d'utiliser la forme (III-17a) pour calculer les éléments de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$. En effet l'intégration sur z' étant analytique au-delà de \tilde{z}_{vj} . L'intégration double se réduit alors à une intégrale simple dès que $z > \tilde{z}_{vj}$.

• $\tilde{z}_{vj} > \tilde{z}_{iv}$: il serait intéressant d'utiliser la forme (III-17b). Nous remarquons qu'en utilisant les relations de symétrie de $W_{ij}(z)$ et celles des éléments $(i|V G_T^+ V|j)$, on peut toujours revenir vers la forme (III-17a).

Cette propriété nous a permis de mettre au point un programme unique de traitement numérique pour évaluer ces éléments de matrice.

Posons :

$$\mathcal{H}_{ij}^v(-\infty, +\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}(z') \quad \text{III-18}$$

En ne considérant que le cas $\tilde{z}_{iv} > \tilde{z}_{vj}$, on a alors :

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) \left[\sum + \int \right]_v \mathcal{H}_{ij}^v(-\infty, +\infty) \quad \text{III-19}$$

En utilisant les propriétés de symétrie de $W_{ij}(z)$ et ainsi que celles de la fonction $G_{ij}(x, y)$ (III-9 a, b), on obtient :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ij}^v(-\infty, +\infty) = G_{vj}^*(0, +\infty) \left\{ (-1)^{l_v+l_j+m_v-m_j} G_{iv}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{iv}^*(0, +\infty) \right\} \\ + \mathcal{H}_{ij}^v(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} \mathcal{H}_{ij}^{v*}(0, +\infty) \end{aligned} \quad \text{III-20}$$

On définit la fonction $\mathcal{H}_{ij}^v(x, y)$ comme suit :

$$\mathcal{H}_{ij}^v(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z) \quad \text{III-21}$$

Pour effectuer la sommation sur les états électroniques, indiquée par l'expression (III-19), nous avons au point une méthode systématique qui garantit la stabilité des résultats pour chaque couple d'états $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

III.2.1 Contribution de la totalité du spectre discret de la cible:

Le problème principal dans l'évaluation $(i|V G_T^+ V|j)$, comme il est donné dans l'expression (III-19), est le calcul de la somme infinie sur la partie discrète du spectre et celui de l'intégral sur la partie continue du spectre $\{|\nu\rangle\}$. La contribution du spectre discret entier de $\{|\nu\rangle\}$ a été prise en compte en utilisant la forme asymptotique de la fonction d'onde radiales $R_{\nu l}(x)$ de $\varphi_\nu(\bar{x})$ aux petites valeurs de x . Sachant que $R_{\nu l}(x)$ est la solution de l'équation radiale :

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} R_{\nu l}(x) + \frac{1}{x} \frac{d}{dx} R_{\nu l}(x) + \left(\frac{Z_T}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} + E \right) R_{\nu l}(x) = 0 \quad \text{III-22}$$

Où ν , l désignent respectivement le nombre quantique principal et le nombre quantique azimutal. Les contributions d'état $|\nu\rangle$, dans le calcul de $W_{\nu j}(z)$, proviennent des valeurs de x où le chevauchement entre $\varphi_\nu(\bar{x})$ et $\varphi_j(\bar{x})$ est considérable (III-3). De-là, quand ν augmente, le domaine des contributions est localisé autour de rayon de l'orbital j . Pour $x \ll \nu^2 / Z_T$, l'énergie $E = -Z_T^2 / 2\nu^2$ est négligeable par rapport aux termes Z_T / x et $\frac{l(l+1)}{x^2}$. La solution de l'équation (III-22) est donc :

$$R_{\nu l}(x) = \frac{Z_T}{\nu^{3/2}} \sqrt{\frac{2}{x}} J_{2l+1}(\sqrt{8Z_T x}) \quad \text{III-23}$$

J_{2l+1} désigne la fonction de Bessel régulière d'ordre $2l+1$. Seul le facteur de normalisation dépend de ν dans l'expression de $R_{\nu l}(x)$. Pour des valeurs de ν grandes et l donné, il doit y avoir une valeur ν_0 telle que l'on peut écrire pour $\nu \geq \nu_0$:

$$W_{j\nu}(\rho, z) \approx \left(\frac{\nu_0}{\nu} \right)^{3/2} W_{j\nu_0}(\rho, z) \quad \text{III-24a}$$

$$W_{\nu i}(\rho, z) \approx \left(\frac{\nu_0}{\nu} \right)^{3/2} W_{\nu_0 i}(\rho, z) \quad \text{III-24b}$$

Définissons la série des fonctions $\mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l)}$:

$$\mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l)} = \sum_{m=-l}^{+l} \mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l, m)} \quad \text{III-25}$$

Où ν, l et m sont les nombres quantiques de la fonction d'état $\varphi_\nu(\bar{x})$ et la fonction

$\mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l, m)}$ est défini par l'équation (III-18). A partir des équations précédentes (III-24a,b) et (III-25), on aura pour $\nu \geq \nu_0$:

$$\mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l)} \approx \left(\frac{\nu_0}{\nu} \right)^3 \mathcal{H}_{ij}^{(\nu_0, l)} \quad \text{III-26}$$

La sommation sur les états du spectre discret pour l donnée est :

$$\sum_{\nu=l+1}^{+\infty} \mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l)} = \sum_{\nu=l+1}^{\nu_0} \mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l)} + \nu_0^3 \mathcal{H}_{ij}^{(\nu_0, l)} \sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} \frac{1}{\nu^3} \quad \text{III-27}$$

On a :

$$\sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} \frac{1}{\nu^3} = \zeta(3) - \sum_{\nu=1}^{\nu_0} \frac{1}{\nu^3} \quad \text{III-28}$$

Où $\zeta(3)$ est la fonction dzêta-Riemann.

De l'expression (III-19), l'élément de Born-II peut être écrit comme suit :

$$\left(i \left| V G_T^+ V \right| j \right) = \left(-\frac{i}{\nu} \right) \sum_{l=0}^{+\infty} \left[\sum_{\nu=l+1}^{+\infty} \mathcal{H}_{ij}^{(\nu, l)} + \int_0^{+\infty} dk \mathcal{H}_{ij}^{(k, l)} \right] \quad \text{III-29}$$

Où k est l'impulsion de l'électron dans le continuum de la cible.

III.2.2 Contribution des états du continuum de la cible :

Dans l'évaluation de $\left(i \left| V G_T^+ V \right| j \right)$, les éléments de Born-II, donné par l'équation (III-29), on doit calculer le second terme entre parenthèses qui ne pourrait pas être négligeable [3]. Il faudrait déterminer avec précision la région du continuum, située au-dessus du seuil d'ionisation qui contribue effectivement. La contribution du continuum près du seuil d'ionisation pourrait être évaluée par une extension du calcul analytique de premier terme de (III-29) en remplaçant ν par Z_T / ik .

Cependant, cette procédure, qui fournit le comportement de \mathcal{H}_{ij}^k juste au-dessus du seuil d'ionisation, n'est pas faite pour des grandes valeurs de k où la contribution du continuum devient négligeable.

On montre, en faisant ce changement de variable, que la relation reliant la fonction d'onde radiale discrète $R_{vl}(x)$ à la fonction d'onde radiale continue $R_{kl}(x)$, est la suivante:

$$R_{vl}(x) = -ke^{i\pi/4} \sqrt{1 - e^{-2\pi/k}} R_{kl}(x) \quad \text{III-30}$$

$$R_{vl}(x) = \frac{2Z_T^2}{v^2 (2l+1)!} \sqrt{\frac{(v+l)!}{(v-l-1)!}} \left(\frac{2x}{v} Z_T\right)^l e^{-xZ_T/v} F\left(-v+l+1; 2l+2; \frac{2x}{v} Z_T\right) \quad \text{III-31a}$$

$$R_{kl}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \frac{e^{ikx}}{2l+1} \left| \Gamma\left(l+1 - \frac{i}{k}\right) \right| (2kx)^l F\left(\frac{i}{k} + l + 1; 2l+2; 2ikx\right) \quad \text{III-31b}$$

III.3 Méthode d'intégration:

Pour évaluer les sections efficaces totales de diffusion, dans notre étude, nous avons utilisé la méthode d'intégration de **Simpson**. Qui consiste à approcher, dans un petit intervalle, la fonction par l'arc de la parabole passant par les extrémités et le milieu de l'intervalle. Ceci requiert que l'intervalle d'intégration soit divisé en sous-intervalles égaux de telle façon que leur nombre soit pair.

Cette méthode a l'avantage, quand la précision est insuffisante (le nombre d'intervalles doit être augmenté), de doubler le nombre d'intervalles en utilisant les points calculés auparavant.

Dans le programme numérique utilisé, l'intervalle d'intégration total est divisé en plusieurs intervalles. Le passage d'un intervalle à un autre effectué avec un contrôle automatique de la précision en fonction de la contribution relative du nouvel intervalle.

Dans le calcul des sections efficaces totales, données par (II-32), nous avons calculé la probabilité transition $(\alpha \rightarrow \beta) \left| a_{\alpha\beta}(\vec{\rho}) \right|^2$ pour différentes valeurs du paramètre d'impact. Nous avons remarqué que sa contribution dans les sections efficaces totales se situe seulement dans un intervalle de petits paramètres d'impact. Ceci nous a permis, dans l'évaluation de l'intégration sur $[0, +\infty[$, de nous limiter à l'intervalle d'intégration $[0, \rho_{\max}]$. L'équation (II-32) se réduit donc à :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{\rho_{\max}} d\rho \rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad \text{III-32}$$

Il faut noter également que le temps de calcul ainsi que la place mémoire ont été réduits grâce aux propriétés de symétrie des éléments de matrice $(i | V | j)$ et $(i | VG_T^+ | j)$.

Dans ce qui suit et selon le modèle adapté, on montre que l'étude d'un processus de collision de type ion-atome se réduit à la collision d'un proton avec un atome d'hydrogène avec un paramètre d'impact réduit et une vitesse réduite.

Références :

[1]- R. K. Janev et A. Salin, *Ann. Phys. N.Y.* 73(1972)136-155.

[2]- B. Lasri, Thèse de doctorat en sciences, Université de Tlemcen (2007), Texte en français.

[3]- B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Phys. Chem. News*, Vol 20, pp12-17 (2004).

[4]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 2007.

Chapitre IV

Excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particules α (He^{2+}) aux énergies intermédiaires.

IV-1. INTRODUCTION :

Durant ces dernières années, l'étude des processus mono-électronique au régime de vitesses intermédiaires ont subi des développements très intenses. Expérimentalement, il a été observé que les sections efficaces totales d'excitation des ions Heliumoïdes et Hydrogéoïdes entrant en collision avec des atomes neutres ont tendance à se saturer quand la charge nucléaires des atomes augmente (Wohrer et al (1986) [1], Xiang-yuan Xu et al (1988) [2]). Ce phénomène a été modélisé théoriquement par Brendlé et Gayet (1985)[3], Bouamoud (1988) [4], Bouamoud et Gayet (1989) [5], Lasri, Bouamoud et Gayet (2006) [6] }.

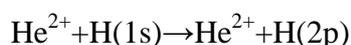
La compréhension détaillée du processus d'excitation des atomes d'hydrogène dans des collisions avec les particules α (He^{2+}) s'avère d'une importance capitale et directement liée au diagnostic des plasmas de haute température et également à la modélisation de la pénétration du faisceau d'hydrogène neutre dans de grands dispositifs de tokamak (Janev 1989 [7]).

Des données expérimentales fiables peuvent également fournir un test de fiabilité et de validité important des modèles théoriques qui s'avèrent difficile et complexe à concevoir.

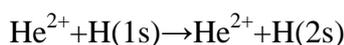
En 1991, Donnelly *et al.* [8] ont utilisé une méthode dite « Modulated Crossed Beam » afin d'étudier les émissions Balmer- α résultant à partir de H ($n=3$) d'excitation dans $\text{He}^{2+} \rightarrow \text{H}$ collisions.

Dans la même année Fritsch *et al.* [9] ont utilisé une approche semi-classique des voies couplées « semi-classical close-coupling method with atomic orbital basis set » avec des bases composés d'orbitales atomique afin d'étudier l'excitation aux niveaux $n=2$ et $n=3$ respectivement de l'atome d'hydrogène par impact de particules α (He^{2+}) aux énergies allant de 1 à 300 keV/amu.

Trois ans après (1994), de nouveaux résultats ont été présentés par Hughes *et al.* [10] en utilisant une méthode similaire à celle de Donnelly *et al.* [8] citée précédemment. Cette méthode a été développés afin d'étudier l'émission Lyman- α de la désintégration spontanée de l'atome H(2p) ainsi que le champ électrique induit de l'atome H(2s) formés dans la collisions $\text{He}^{2+} \rightarrow \text{H}$. Les sections efficaces ont été déterminées pour les processus d'excitation directs suivants :



et



dans la gamme d'énergie allant de 113.3 à 66.6 keV/amu et 33.3 à 66.6 keV/amu respectivement.

IV-2. Résultats expérimentaux des états 2s et 2p :

Energie (Kev/amu)	Sections efficaces (10^{-16} cm^2)
33.3	3.28 ± 1.45
40	3.51 ± 0.58
46.7	5.03 ± 0.92
53.3	6.25 ± 0.98
60	5.59 ± 1.09
66.7	5.16 ± 1.20

Tableau IV-2.A : Résultats expérimentaux de Hughes *et al* [10] de H(2s) de la formation dans la collision H - He^{2+} .

Energie (Kev/amu)	Sections efficaces (10^{-16} cm^2)
13.3	0.30 ± 0.15
20	0.88 ± 0.13
26.7	1.28 ± 0.11
33.3	1.32 ± 0.13
40	1.19 ± 0.19
46.7	1.20 ± 0.08
53.3	1.26 ± 0.07
60	1.19 ± 0.01
66.7	1.34 ± 0.20

Tableau IV-2.B : Résultats expérimentaux de Hughes *et al* [10] de H(2p) de la formation dans la collision H - He^{2+} .

Le tableau suivant (**IV-2.C**) représente les résultats théoriques de Fritsch *et al.* [9] basé sur une approche dite « **semi-classical close-coupling method with atomic orbital basis set** ».

E (keV/amu)	2s	2p	3s	3p	3d
1.00	0.0054	0.025	0.0002	0.0012	0.0017
1.40	0.0112	0.045	0.0006	0.0012	0.0032
1.70	0.0206	0.062	0.0010	0.0031	0.0049
2.00	0.2022	0.081	0.0027	0.0068	0.0075
2.20	0.0162	0.088	0.0038	0.0092	0.0087
2.50	0.0096	0.088	0.0054	0.0111	0.0104
2.70	0.0067	0.085	0.0056	0.0112	0.0121
3.00	0.0049	0.086	0.0047	0.0104	0.0153
3.50	0.0061	0.111	0.0046	0.0093	0.0220
4.10	0.0148	0.167	0.0037	0.0156	0.0310
5.00	0.0371	0.248	0.0057	0.0425	0.0394
7.00	0.0488	0.354	0.011	0.089	0.038
10.00	0.0757	0.251	0.013	0.036	0.035
15.00	0.1310	0.197	0.031	0.036	0.028
20.00	0.1860	0.309	0.043	0.044	0.027
25.00	0.2080	0.517	0.046	0.097	0.046
30.00	0.2530	0.763	0.049	0.151	0.075
40.00	0.4550	1.161	0.094	0.258	0.129
45.00	0.5670	1.295	0.114	0.281	0.144
50.00	0.6490	1.354	0.137	0.284	0.157
55.00	0.6770	1.352	0.155	0.309	0.165
60.00	0.6520	1.328	0.178	0.312	0.163
70.00	0.5220	1.336	0.174	0.273	0.149
75.00	0.4510	1.368	0.140	0.258	0.142
90.00	0.2830	1.522	0.097	0.206	0.127
100.00	0.2220	1.635	0.053	0.234	0.119
125.00	0.1810	1.859	0.031	0.278	0.107
150.00	0.1850	1.954	0.031	0.301	0.096
200.00	0.1740	1.880	0.032	0.309	0.073
300.00	0.1170	1.622	0.012	0.277	0.044

IV-3. Excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}), Notre approche théorique :

Dans notre travail, et afin d'examiner le processus d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particules α (He^{2+}), nous avons adopté un modèle basé sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger illustrée précédemment. De plus, la base sur laquelle les fonctions d'ondes $|\Psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\Psi_\beta^-|$ ont été développées, est élargie de 5 états (1s, 2s, 2p₀, 2p₊₁, 2p₋₁) notée Schw55 à 10 états (1s, 3s, 3p₀, 3p₊₁, 3p₋₁, 3d₀, 3d₊₁, 3d₋₁, 3d₊₂, 3d₋₂) notée Schw1010 afin d'aboutir à une meilleure représentation du propagateur G_T^+ qui va nous mener sûrement à une description plus précise et assez complète de ce processus. L'ensemble des résultats obtenus (sections efficaces totales calculées de ces approximations) ont été comparés aux données expérimentales de Hughes et al [10].

Pour ce faire, le programme de calcul a été réalisé en Fortran et divisé en deux grandes parties :

- La première partie permet la détermination des éléments $(i|V|j)$ dit de type **Born I** ainsi que les éléments de second ordre dit de type **Born II** $(i|VG_T^+|j)$ pour différents couples des états $(|i\rangle, |j\rangle)$. Ces éléments vont nous servir à la détermination des éléments D_{ji} de la matrice D : $D_{ji} = (j|V - VG_T^+V|i)$.
- La seconde partie permet la détermination des matrices D et D^{-1} , et de tirer les valeurs de l'amplitude de transition variationnelle $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\bar{\rho})$ et par conséquent l'obtention des sections efficaces totales d'excitation après intégration par la méthode du Simpson sur le paramètre d'impact ρ .

Dans un premier cas, et en utilisant un développement à cinq états noté Schw55, on considère B_1 et B_2 deux ensembles de base contenant les cinq états de base utilisés pour étudier l'excitation au niveau $n=2$ {1s, 2s, 1p₀, 1p₊₁, 1p₋₁}. La matrice D peut être définie comme suit :

$$\begin{array}{c}
 1s \quad 2s \quad 2p_0 \quad 2p_{+1} \quad 2p_{-1} \\
 \left(\begin{array}{ccccc}
 X & X & X & X & \zeta \\
 & X & X & X & \zeta \\
 & & X & X & \zeta \\
 & & & X & X \\
 & & & & \zeta
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

X : désignent les éléments à calculer.

ζ : désignent les éléments qui se déduisent par les règles de symétrie.

Afin de décrire d'une manière assez convenable l'excitation du niveau $n=3$, nous avons opté pour une base constituée seulement de 10 états et ainsi inclure tous les états intermédiaires de la cible et par conséquent la base comprendra : $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$. Ce développement selon notre nouvelle approche de Schwinger à 10 états sera noté par Schw1010 dans tout ce qui suit et ainsi la matrice D à inverser sera donnée comme suit:

$$\begin{array}{c}
 1s \quad 3s \quad 3p_0 \quad 3p_{+1} \quad 3p_{-1} \quad 3d_0 \quad 3d_{+1} \quad 2d_{-1} \quad 3d_{+2} \quad 3d_{-2} \\
 \left(\begin{array}{cccccccccc}
 X & X & X & X & \zeta & X & X & \zeta & X & \zeta \\
 & X & X & X & \zeta & X & X & \zeta & X & \zeta \\
 & & X & X & \zeta & X & X & \zeta & X & \zeta \\
 & & & X & X & X & X & X & X & X \\
 & & & & \zeta & \zeta & \zeta & \zeta & \zeta & \zeta \\
 & & & & & X & X & \zeta & X & \zeta \\
 & & & & & & X & X & X & X \\
 & & & & & & & \zeta & \zeta & \zeta \\
 & & & & & & & & X & X \\
 & & & & & & & & & \zeta
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

X : désignent les éléments à calculer.

ζ : désignent les éléments qui se déduisent par les règles de symétrie.

Les opérations de symétrie ont réduit d'une façon considérable les temps de calcul. Ainsi les matrices de Schw55 et Schw1010 qui nécessiteraient respectivement les calculs de 25 et 100 éléments ne nécessitent plus que les calculs de 11 et 34 éléments. Ces opérations de symétrie ont l'avantage de nous faire gagner énormément du temps machine.

IV-3.1. Excitation à l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}) :

Tableau IV-3.1 : Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E (kev)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw55
10	1.73920E-16	1.00725E-15	2.4417E-17	3.63723E-17
20	1.33171E-16	7.3302E-16	5.3706E-17	5.08814E-17
30	1.00948E-16	5.13741E-16	8.66829E-17	5.09328E-17
36	0.87676E-17	4.22739E-16	1.0617E-16	5.02206E-17
40	8.05676E-17	3.74086E-16	1.17176E-16	4.95345E-17
50	6.6929E-17	2.87722E-16	1.31190E-16	4.74141E-17
54	6.26703E-17	2.62353E-16	1.30665E-16	4.63694E-17
60	5.72017E-17	2.31253E-16	1.24877E-16	4.46682E-17
72	4.86874E-17	1.84736E-16	1.01719E-16	4.10425E-17
80	4.42862E-17	1.62292E-16	8.51727E-17	3.85976E-17
90	3.97863E-17	1.39963E-16	6.858E-17	3.56057E-17
100	3.61142E-17	1.22551E-16	5.6569E-17	3.29302E-17
110	3.30612E-17	1.08518E-16	4.79073E-17	3.05506E-17
120	3.04832E-17	9.74211E-17	4.15002E-17	2.84292E-17
130	2.82776E-17	8.74751E-17	3.66122E-17	2.65554E-17
140	2.63692E-17	7.93578E-17	3.27669E-17	2.48929E-17
150	2.47018E-17	7.24054E-17	2.96645E-17	2.34211E-17
160	2.32326E-17	6.64156E-17	2.71069E-17	2.2111E-17
200	1.87665E-17	4.89118E-17	2.02528E-17	1.80751E-17
250	1.51299E-17	3.56714E-17	1.54703E-17	1.47356E-17
300	1.26735E-17	2.7668E-17	1.25667E-17	1.24515E-17

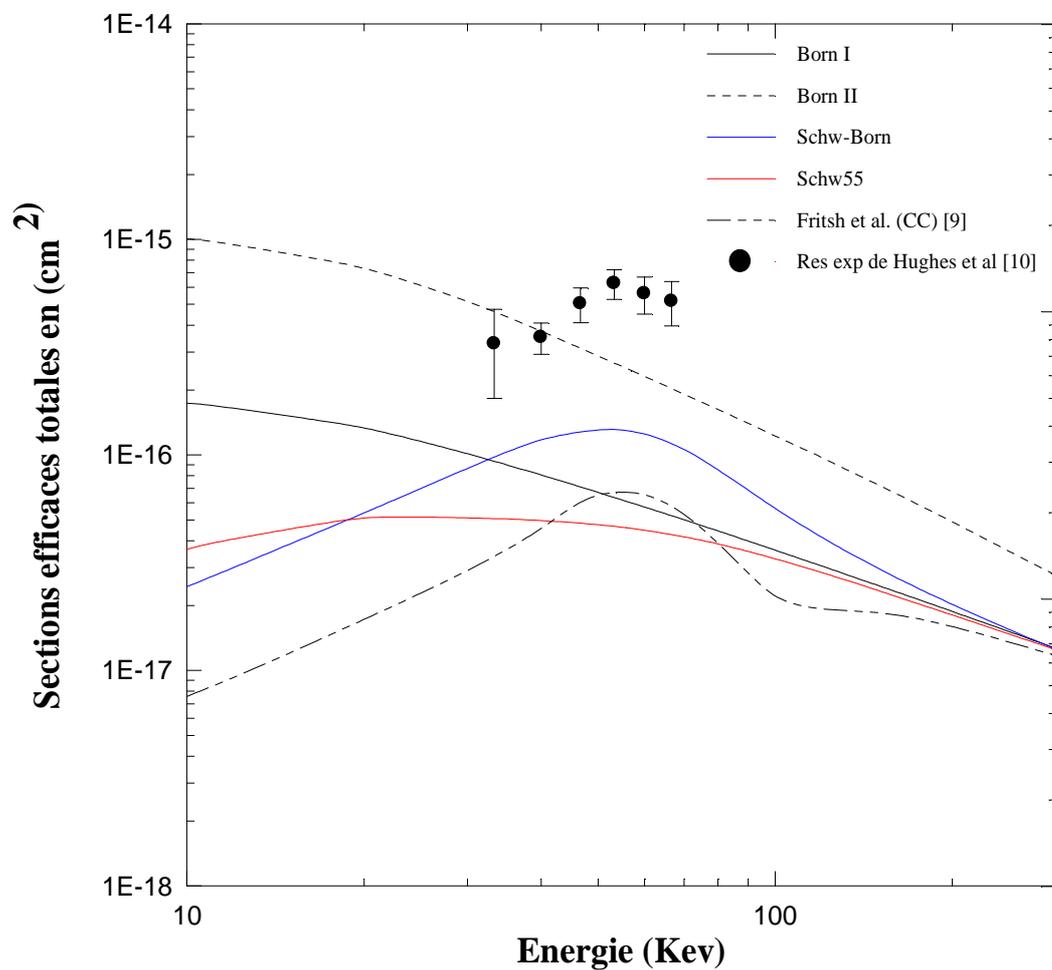


Figure IV-3.1: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état $2s$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-3.2. Excitation à l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Tableau IV-3.2 : Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état **2p** de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E (kev)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw55
10	6.03967E-16	1.298081E-15	3.108182E-16	28.30248E-18
30	6.62183E-16	1.220774E-15	51.5251D-17	3.004296E-17
36	6.22646E-16	1.05081E-15	5.44153E-16	3.843282E-17
46.7	5.93082E-16	9.50561E-16	5.37384E-16	4.54537E-17
50	5.7366E-16	8.95804E-16	5.28992E-16	5.10441E-17
54	5.28499E-16	7.85503E-16	5.03416E-16	6.77526E-17
66.7	5.12025E-16	7.49505E-16	4.91796E-16	7.5205E-17
72	4.89003E-16	7.0057E-16	4.74523E-16	8.67905E-17
90	4.48484E-16	6.21149E-16	4.42095E-16	1.090456E-16
100	4.25008E-16	5.77081E-16	4.22063E-16	1.220291E-16
110	3.98968E-16	5.30464E-16	3.99202E-16	1.350303E-16
120	3.76014E-16	4.90362E-16	3.78152E-16	1.450581E-16
130	3.55634E-16	4.56091E-16	3.592788E-16	1.522672E-16
140	3.37417E-16	4.26217E-16	3.418422E-16	1.571615E-16
150	3.21035E-16	4.00109E-16	32.60492E-17	1.60306E-16
160	3.06218E-16	3.76816E-16	31.16412E-17	1.62097E-16
200	2.927498E-16	3.56337E-16	2.984552E-16	1.628309E-16
250	2.804505E-16	3.37867E-16	2.862556E-16	1.627695E-16
300	2.403057E-16	2.80511E-16	2.460362E-16	1.578225E-16

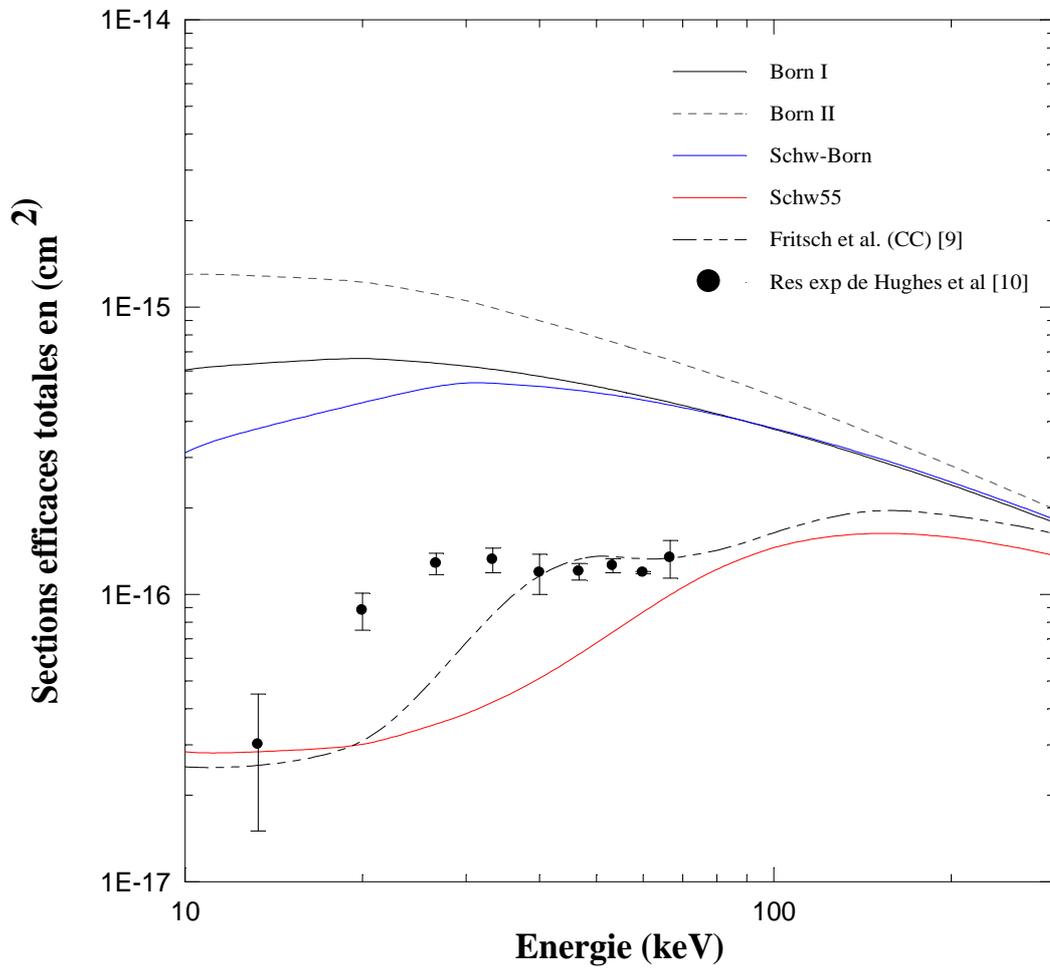


Figure IV-3.2: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état $2p$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-3.3. Excitation au niveau $n=2$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Tableau IV-3.3 : Section efficace totale d'excitation en (cm^2) au niveau $n=2$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E (kev)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw55
10	7.77887E-16	2.305331E-15	3.352359E-16	6.467478E-17
20	7.95354E-16	1.953794E-15	5.68957E-16	8.092436E-17
30	7.23594E-16	1.564551E-15	6.308359E-16	8.936562E-17
36	6.807581E-16	1.3733E-15	6.43554E-16	9.56743E-17
40	6.542276E-16	1.26989E-15	6.46168E-16	1.005786E-16
50	5.95428E-16	1.073225E-15	6.34606E-16	1.151667E-16
54	5.746953E-16	1.011858E-15	5.381654E-16	1.215744E-16
60	5.462047E-16	9.31823E-16	5.191912E-16	1.314587E-16
72	4.971714E-16	8.05885E-16	4.831375E-16	1.500881E-16
80	4.692942E-16	7.39373E-16	4.606606E-16	1.606267E-16
90	4.387543E-16	6.70427E-16	4.348077E-16	1.70636E-16
100	4.121282E-16	6.12913E-16	4.110822E-16	1.779883E-16
110	3.886952E-16	5.64609E-16	3.898294E-16	1.828178E-16
120	3.679002E-16	5.236381E-16	3.702714E-16	1.855907E-16
130	3.493126E-16	4.875841E-16	3.526046E-16	1.868614E-16
140	3.325872E-16	4.561738E-16	3.365341E-16	1.869899E-16
150	3.174516E-16	4.287424E-16	3.218763E-16	1.86252E-16
160	3.036831E-16	4.042826E-16	3.083666E-16	1.848805E-16
200	2.590722E-16	3.294228E-16	2.641113E-16	1.758976E-16
250	2.192018E-16	2.674402E-16	2.240196E-16	1.620617E-16
300	1.90131E-16	2.255036E-16	1.94496E-16	1.486034E-16

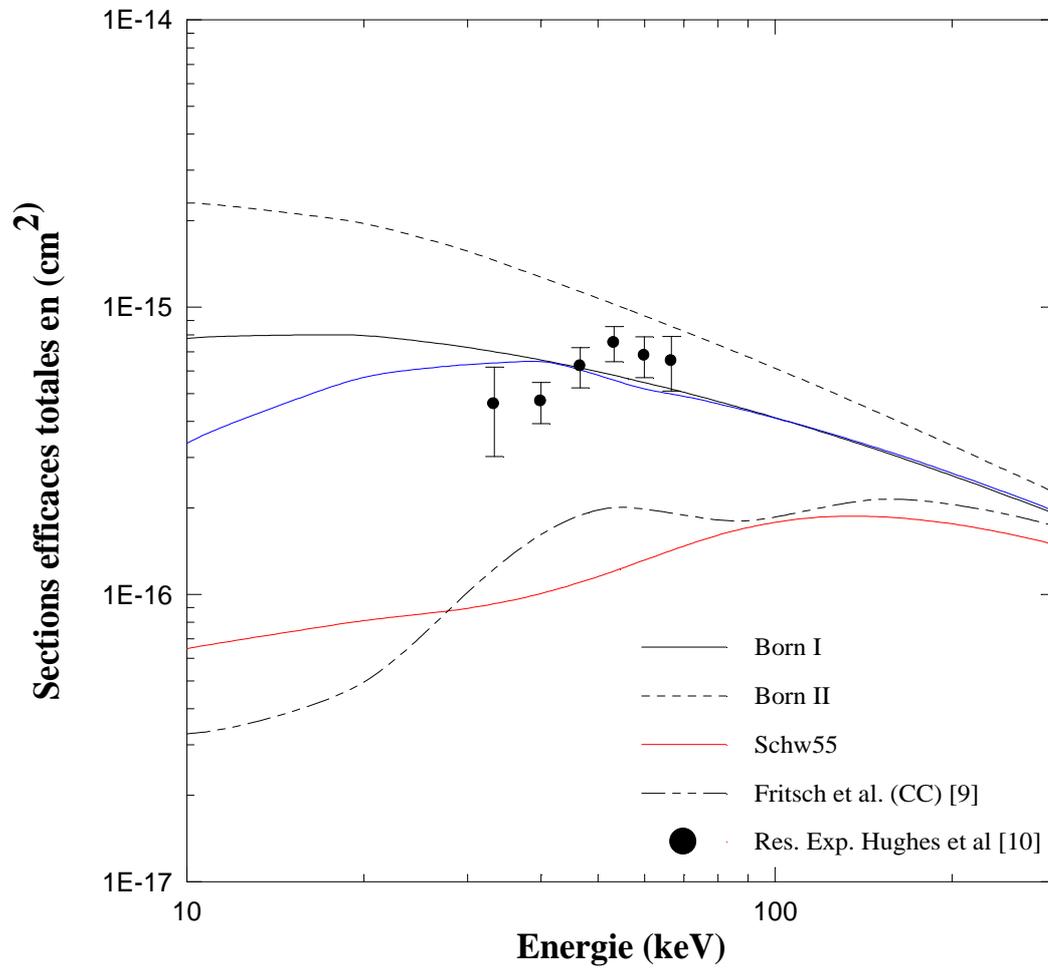


Figure IV-3.3: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) au niveau $n=2$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-3.4. Excitation de l'état 3s de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Tableau IV-3.4: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état 3s de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E(KE)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw 1010
1	3.56839E-18	2.7162E-16	4.92085E-21	1.9952E-19
2	1.42885E-17	4.30866E-16	7.1856E-20	1.48254E-18
4	3.06136E-17	5.69956E-16	4.919E-19	4.5597E-18
6	3.63458E-17	6.08587E-16	1.04366E-18	6.91078E-18
10	3.58597E-17	5.78161E-16	1.99488E-18	1.0206E-17
15	3.09137E-17	5.00772E-16	2.5534E-18	1.30476E-17
20	2.63913E-17	4.12154E-16	2.86116E-18	1.53939E-17
30	2.00245E-17	2.52797E-16	3.0813E-18	1.86243E-17
40	1.60172E-17	1.7274E-16	3.07869E-18	2.06701E-17
50	1.33162E-17	1.26801E-16	3.00178E-18	2.18456E-17
60	1.13841E-17	9.75669E-17	2.89772E-18	2.25202E-17
80	8.81424E-18	6.38152E-17	2.6841E-18	2.27743E-17
100	7.18687E-18	4.51996E-17	2.48254E-18	2.21667E-17
160	4.62135E-18	2.12853E-17	1.93223E-18	1.85844E-17
200	3.73218E-18	1.49022E-17	1.79107E-18	1.63702E-17
250	3.00836E-18	1.04104E-17	1.57798E-18	1.38152E-17

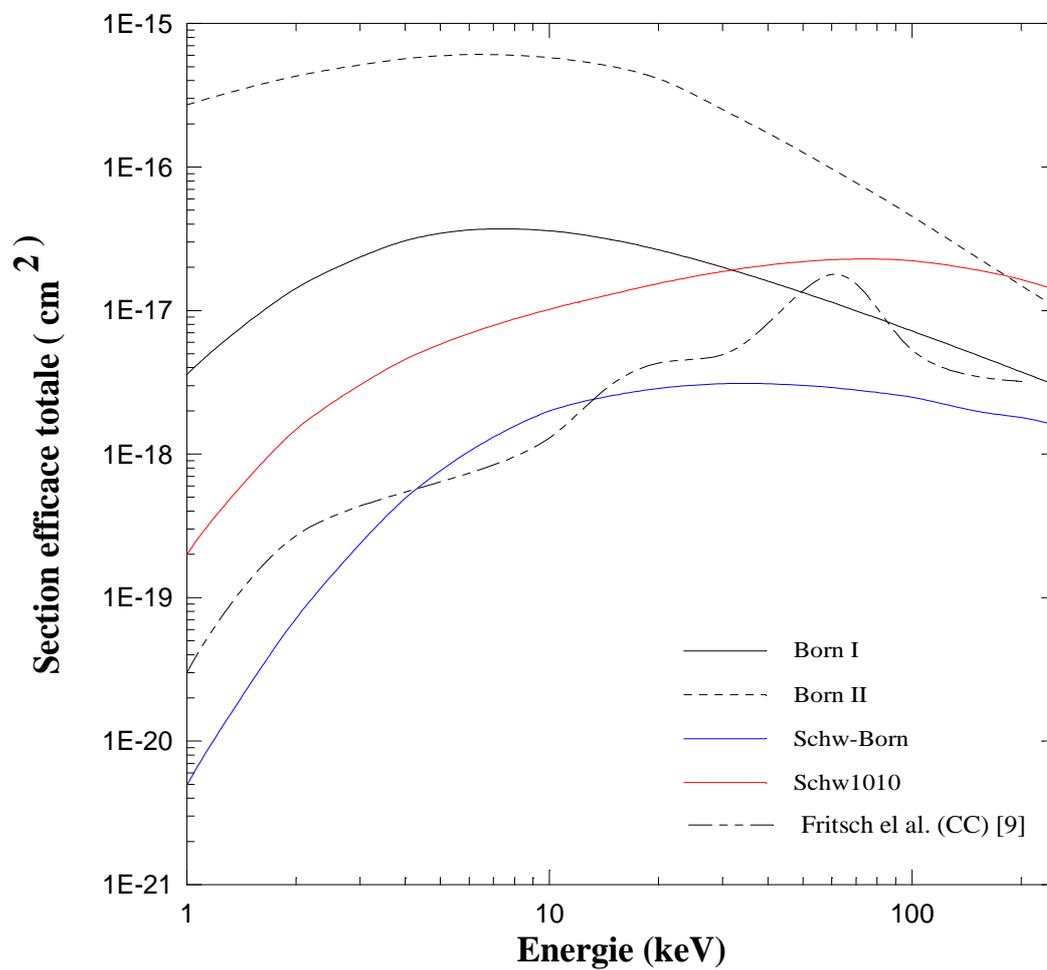


Figure IV-3.4 : Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état $3s$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-3.5. Excitation de l'état 3p de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Tableau IV-3.5: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état 3p de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E(Kev)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw1010
1	1.512232E-18	3.965852E-16	2.139918E-21	1.314244E-19
2	1.145382E-17	8.2608E-16	5.875816E-20	1.186548E-18
4	4.439442E-17	1.147789E-15	8.27692E-19	4.135818E-18
6	7.24582E-17	1.212021E-15	2.77051E-18	6.481222E-18
10	1.028643E-16	1.180333E-15	8.76392E-18	9.71004E-18
15	1.150312E-16	1.075073E-15	1.819412E-17	1.216012E-17
20	1.162722E-16	9.053948E-16	3.06894E-17	1.382364E-17
30	1.095953E-16	6.22189E-16	5.372542E-17	1.599569E-17
40	1.008209E-16	4.637866E-16	7.0882E-17	1.726224E-17
50	9.27164E-17	3.644432E-16	8.24989E-17	1.804928E-17
60	8.56651E-17	2.97483E-16	9.00722E-17	1.853669E-17
80	7.43378E-17	2.144212E-16	9.5237E-17	1.898993E-17
100	6.5748E-17	1.653912E-16	9.01061E-17	1.904443E-17
160	4.91618E-17	9.61656E-17	6.89947E-17	1.837569E-17
200	4.22359E-17	7.45252E-17	5.77032E-17	1.770384E-17
250	3.59897E-17	5.80594E-17	4.76718E-17	1.691709E-17

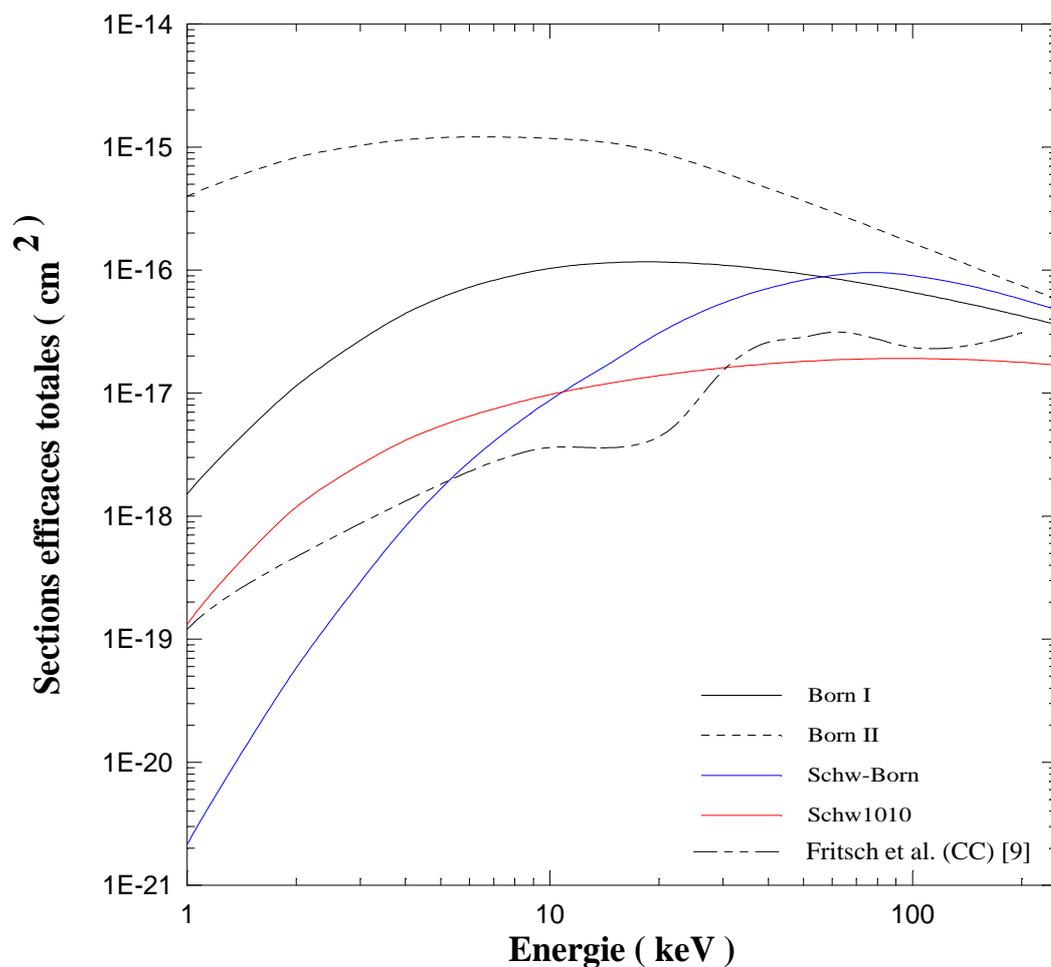


Figure IV-3.5: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état $3p$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-3.6. Excitation de l'état 3d de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Tableau IV-3.6: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état 3d de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E(Kev)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw 1010
1	5.459488E-20	2.271107E-16	1.594232E-23	4.927702E-20
2	6.740492E-19	5.317313E-16	8.113058E-22	2.884848E-19
4	3.725662E-18	7.103462E-16	2.10433E-20	7.010798E-19
6	6.934002E-18	6.649119E-16	8.952252E-20	9.97202E-19
10	1.073062E-17	5.02619E-16	3.293916E-19	1.555198E-18
15	1.210796E-17	3.3422E-16	6.575581E-19	2.219774E-18
20	1.199827E-17	2.398102E-16	9.771094E-19	2.776122E-18
30	1.068529E-17	1.578433E-16	1.343816E-18	3.570504E-18
40	9.29726E-18	1.13139E-16	1.529924E-18	4.06969E-18
50	8.13619E-18	8.523146E-17	1.614592E-18	4.35736E-18
60	7.196703E-18	6.65596E-17	1.644075E-18	4.503218E-18
80	5.807727E-18	4.389822E-17	1.624107E-18	4.60043E-18
100	4.846815E-18	3.120032E-17	1.561465E-18	4.459252E-18
160	3.208887E-18	1.489923E-17	1.297593E-18	3.639808E-18
200	2.609008E-18	1.011425E-17	1.214054E-18	3.221052E-18
250	2.110457E-18	6.974126E-18	1.08485E-18	2.72952E-18

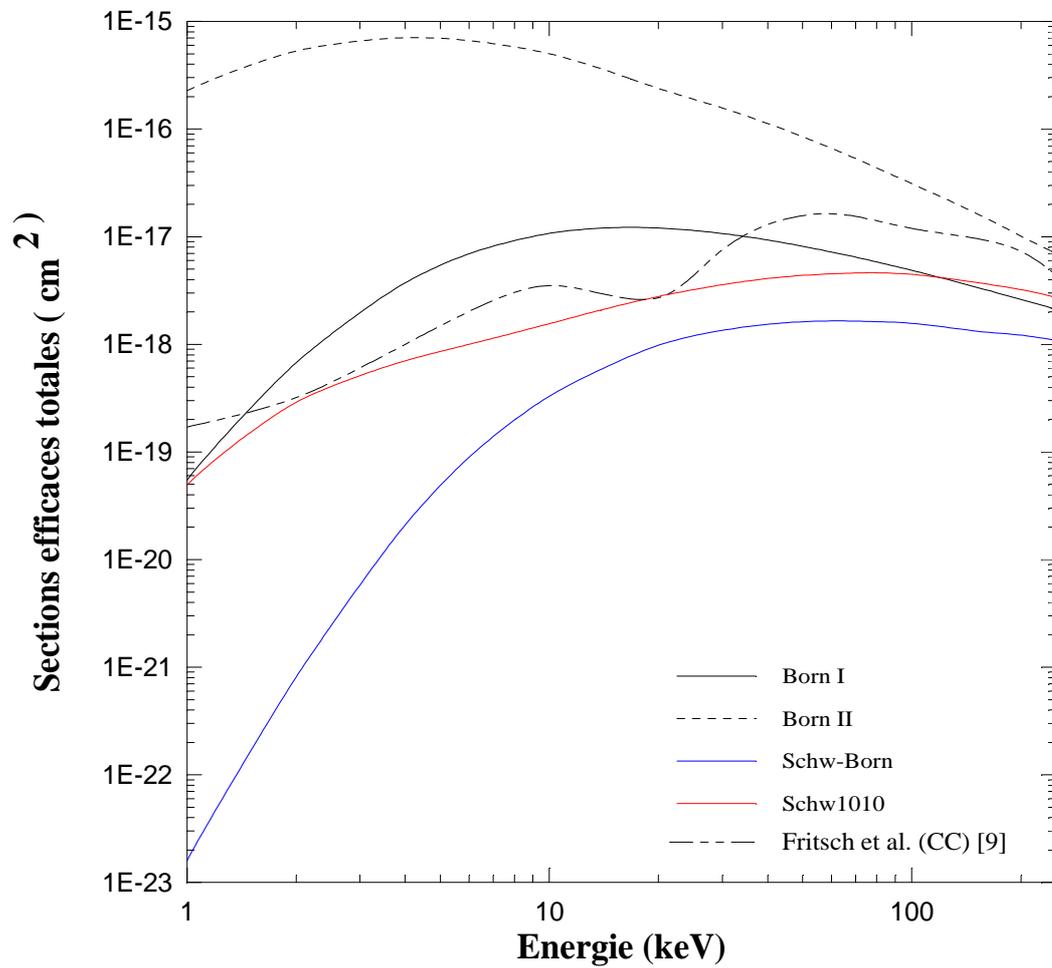


Figure IV-3.6: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) à l'état $3d$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-3.7. Excitation au niveau $n=3$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Tableau IV-3.7: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) de niveau $n=3$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

E(Kev)	Born I	Born II	Schw-Born	Schw 1010
1	5.135217E-18	8.953159E-16	2.716221E-16	3.802214E-19
2	2.641637E-17	1.788677E-15	4.309256E-16	2.957573E-18
4	7.873368E-17	2.428091E-15	5.708047E-16	9.396598E-18
6	1.15738E-16	2.48552E-15	6.11447E-16	1.43892E-17
10	1.494546E-16	2.261113E-15	5.872543E-16	2.147124E-17
15	1.580529E-16	1.910065E-15	5.196237E-16	2.742749E-17
20	1.546618E-16	1.557359E-15	4.438205E-16	3.199366E-17
30	1.403051E-16	1.032829E-15	3.078662E-16	3.81905E-17
40	1.261354E-16	7.496656E-16	2.451519E-16	4.200203E-17
50	1.141688E-16	5.764757E-16	2.109145E-16	4.425224E-17
60	1.042459E-16	4.616095E-16	1.892832E-16	4.556011E-17
80	8.895977E-17	3.221346E-16	1.606763E-16	4.636466E-17
100	7.778169E-17	2.417911E-16	1.368672E-16	4.567038E-17
160	5.699204E-17	1.323501E-16	9.157759E-17	4.05999E-17
200	4.857709E-17	9.954165E-17	7.381945E-17	3.729509E-17
250	4.110851E-17	7.544392E-17	5.916705E-17	3.346181E-17

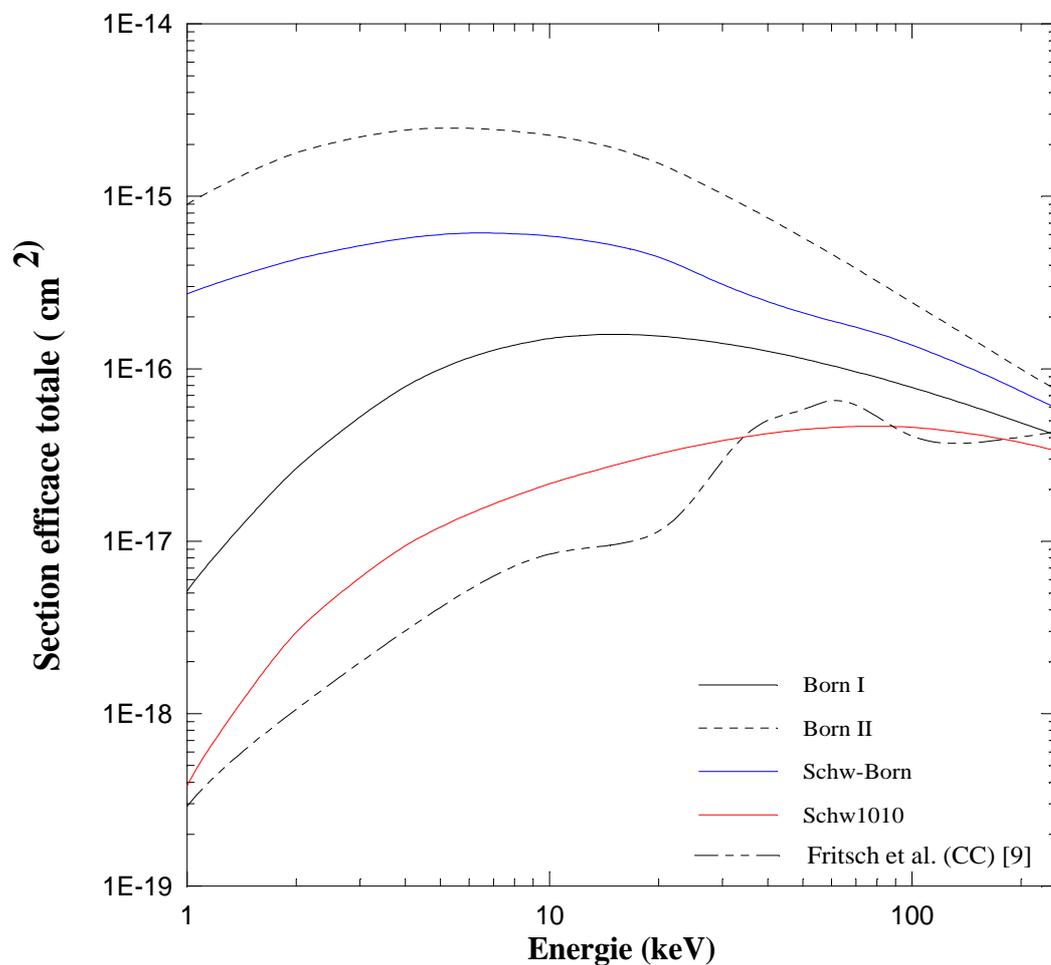


Figure IV-3.7: Sections efficaces totales d'excitation en (cm^2) au niveau $n=3$ de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

IV-4. Résultats et discussion :

Dans notre approche, notre programme informatique permet de nous donner cinq approximations:

- Approximation de Born au premier ordre notée Born I.
- Approximation de Born au deuxième ordre notée Born II.
- Approximation Schwinger-Born (Schw-B).
- Approximation de Schwinger avec 5 états de bases notée Schw55.
- Approximation de Schwinger à 10 états de bases notée Schw1010.

Pour l'excitation au niveau $n=2$ nos présents calculs sont exécutés avec des séries de base $\{|i\rangle\}$ et $\{|j\rangle\}$ constituées au début de 5 états de base suivants $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$ notée Schw55. Afin de décrire convenablement l'excitation au niveau $n=3$, il faut inclure tous les états intermédiaires.

Ceci nous a poussé d'élargir la base sur laquelle le propagateur est développé afin d'aboutir à une meilleure représentation de la fonction d'onde et la série de base $\{|i\rangle\}$ et $\{|j\rangle\}$ est élargie de 5 états à 10 états $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$ notée Schw1010. Il faut dire que le développement à 10 états est spécialement adapté à l'étude de l'excitation du niveau $n=3$.

Les sections efficaces d'excitation totale de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}) sont représentées dans les figures IV-3-1 à IV-3.7. Sur ces figures apparaissent nos différents calculs théoriques: Born-I et Born-II, approximation de Schwinger-Born (Schw-B) ainsi que Schwinger55 (Schw55) avec un développement à 5 états de base suivis de Schw1010 à 10 états de base. A titre de comparaison, nous avons inséré les résultats théoriques de Fritsch et al [9] basés sur la méthode des voies couplées ainsi que les résultats expérimentaux de Hughes *et al.* [10].

Les trois premières figures représentent respectivement les sections efficaces d'excitation des états 2s, 2p et au niveau $n=2$. Pour l'état 2s, on peut dire que nos prédictions Schw55 présentent un pic environ de 30 keV, par contre les résultats expérimentaux de Hughes *et al.* [10] présente un pic autour de 53.3 keV. La totalité des approximations: Born-I, Born-II, Schw55 commence à converger vers une même valeur dès qu'on dépasse de peu le pic des sections efficaces estimé vers 30 keV par

contre l'approximation de Schw-Born est en bon accord avec les résultats de Fritsch *et al.* [9] basés sur une méthode semi-classique des voies couplées dite « semi-classical close-coupling method with atomic orbital basis set » avec des bases composés d'orbitales atomique ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Hughes *et al.*[10] et donne toutes les deux un maximum au alentours de 53.3 keV.

Pour l'état 2p les résultats Schw55 ainsi que les résultats de Fritsch *et al.* [9] suivent quasiment la même allure que ceux des résultats expérimentaux qui présente un max aux alentours de 80 keV avec un léger décalage du pic de Schw55 autour de 200 keV.

Sur la figures (IV-3.3), on rapporte des sections efficaces totales d'excitation au niveau $n=2$, qui sont obtenues en additionnant les sections efficaces d'excitation aux états 2s et 2p. Il est indispensable de noter que les résultats théoriques fournis par l'approximation de Born au premier ordre et au deuxième ordre ainsi que l'approximation de Schwinger-Born surestiment légèrement les sections efficaces totales d'excitation au niveau $n=2$ dans le domaine des basses énergies mais rejointe les résultats expérimentaux à des énergies intermédiaires et l'ensemble se rejoignent à haute énergie. Les résultats de fritsch *et al.* [9] ainsi que ceux de Schw55 sous estiment toutes les deux les résultats expérimentaux en suivant les même allures..

Sur les figures IV-4, 5, 6 et 7 présentent nos différents calculs théoriques des sections efficaces d'excitation des états 3s, 3p, 3d et $n=3$ respectivement.

Il faut rappeler que dans notre procédure de calcul et afin de décrire convenablement l'excitation au niveau $n=3$, il faut inclure tous les états intermédiaires ; ce qui nous a poussé à élargir la base de 5 états à 10 états afin d'aboutir à une représentation adéquate de la fonction d'onde. Ainsi la base comprendra {1s, 3s, 3p₀, 3p₁, 3p₋₁, 3d₀, 3d₁, 3d₋₁, 3d₂, 3d₋₂}.

La comparaison entre nos résultats et ceux de Fritsch *et al.* [9] pour l'excitation de l'état 3s, 3p et 3d, révèlent un bon accord entre ces derniers et ceux de Fritsch *et al.* [9] tout en suivant les mêmes allures sauf pour Born II qui surestime ces derniers. Il est à noter l'absence des résultats expérimentaux pour ces états (3s, 3p et 3d) ce qui ne permet pas de trancher sur la validité de chaque calcul théorique présenté dans cette partie.

Il faut noter que la surestimation de nos résultats est due sûrement aux choix d'états sur lesquels la fonction d'onde était développée comme l'inclusion des états intermédiaires du niveau $n=2$, ainsi que l'influence des états de capture ignorée lors du calcul surtout à basse énergie.

Références :

- [1]-K. Wohrer, A. Chetioui, J. P. Rozet, A. Jolly, F. Fernandez, C. Stephan, B. Brendlé et R. Gayet, J. Phys. B 19 (1986) 1997.
- [2]- Xu. Xiang-Yuan , Montenegro E C. Anholt . DanzmannK , W E Meyerhof , A S Schlachter , B S Rude et R J McDonald (1988) Phys. Rev . A 38 1848.
- [3]- Brendlé. B, Gayet. R ,Rozet, J. P. and Wohrer, K. Phys. Rev. Lett. 54, 2007 (1985).
- [4]-M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état es sciences , Université de Bordeaux-I (1988) , Texte en français.
- [5]-R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **42**. 515-522 (1989).
- [6]-B. Lasri, M. Bouamoud et R.Gayet , Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, **251** (2006) 62-77.
- [7]-R. K. Janev and L. P. Prensyaikov, J. Phys.B **13**, 4233, (1980)
- [8]- A. Donnelly, J. Geddes and H. B. Gilbody, J. Phys. B **24**, 165 (1991).
- [9]- W. Fritsch, R. Shingal and C-D. Lin, Physical Review A, **44** (9), 5686 (1991)
- [10]-Hughes et al J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **27** (1994) 1143-1150.

Conclusion générale

Dans ce travail, notre objectif principal été d'appliquer un nouveau outil de calcul pour calculer les sections efficaces totales d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}).

Nous avons utilisé avec succès la méthode variationnelle de Schwinger afin d'étudier l'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de particule α (He^{2+}). Les sections efficaces d'excitation directe déduites à partir de cette nouvelle approche montrent une convergence assez bonne de l'approche variationnelle quand on augmente le nombre d'état de la cible sur lequel les fonctions d'onde sont développées. De bons résultats sont obtenus quand les fonctions d'onde $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$, sont développée sur une base de 5 et de 10 états, comparant avec les résultats expérimentaux de Hughes *et al* (1994) ainsi qu'avec ceux de Fritsch et al. basés sur une approche semi-classique des voies couplées dite « semi-classical close-coupling method with atomic orbital basis set » avec des bases composés d'orbitales atomique.

L'inclusion de la contribution des états du continuum près du seuil d'ionisation dans le développement du propagateur de green qui apparaît dans les éléments de type **Born-I** et **Born-II** aboutit à une influence quasi-nulle sur les sections efficaces totales, principalement dans la gamme des énergies intermédiaires.

Finalement, la méthode variationnelle, liée au principe de Schwinger peut donc, être l'outil d'investigation puissant qui prend le relais des traitements perturbatifs, dans l'étude des collisions atomiques aux vitesses d'impact intermédiaires.