

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA  
FACULTE DES SCIENCES**



# **MEMOIRE**

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

## **MASTER**

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : Physique des rayonnements

Par

M. **ABER Abderrahim**

Sur le thème

**Sections efficaces totales d'excitation des ions  
helumoides  $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$  par impact d'atomes neutres à  
8.6 MeV/amu**

Soutenu le 25/06/2018 devant le jury composé de :

M. MESKINE Mohammed	<b>Président</b>	<b>M.C.A</b>	<b>U. Saida</b>	<b>Président</b>
M. SAHLAOUI Mohammed	<b>Rapporteur</b>	<b>M.C.A</b>	<b>ESSA-Tlemcen</b>	<b>Rapporteur</b>
M. LASRI Boumediene	<b>Examineur</b>	<b>Pr</b>	<b>U. Saida</b>	<b>Examineur</b>
M. BOUDRAA Kamel-Eddine	<b>Examineur</b>	<b>M.CA</b>	<b>U. Saida</b>	<b>Examineur</b>

**Année Universitaire 2017 - 2018**

## **Résumé**

Dans le formalisme de paramètre d'impact, Approche variationnelle, basée sur la forme fractionnaire de principe variationnel de Schwinger, est appliquée pour évaluer les sections efficaces totales d'excitation directe aux niveaux  $n=2$  de l'ion helimoïdes  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) par impact des divers atomes de charges  $Z_p$  incluant ceux de gaz rares (He, Ne, Ar, Kr, Xe) à une énergie égale à 8.6 MeV/amu. Nos prédictions théoriques de la saturation des sections efficaces totales d'excitation, obtenues par cette nouvelle approche variationnelle, sont comparées avec les résultats expérimentaux de Xian-Yuan Xu et al.

**Mots clés** : Collision atomique, Principe Variationnel de Schwinger, Excitation atomique, Section efficace.

## **Abstract**

In the impact parameter formalism, variational approach based on the fractional form of Schwinger's variational principle is applied to evaluate the total excitation cross sections of direct excitation to  $n=2$  of the Heliumlike ions  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) by impact of various atoms with  $Z_p$  charges including those of rare gases (He, Ne, Ar, Kr, Xe) at 8.6 MeV/amu. Our theoretical predictions of saturation effect of excitation cross sections, obtained using this new variational approach are compared with experimental results of Xian-Yuan Xu et al.

**Key words:** Atomic collision; Schwinger variational principle; Atomic excitation; Excitation cross sections.

## ملخص

في تشكيلة معامل التأثير، طبق التقريب التغيري المعتمد على الصيغة الكسرية للمبدأ التغيري لشوينغر لتقييم المقاطع الفعلة الكلية للتحريض الالكتروني المباشر إلى المستويات  $n=2$  لشبهات الهليوم  $Ca^{18+} (1s^2)$  بتأثير مختلف الذرات ذوات الشُّحنات ( $Z_p$ ) المحتوية على شُّحات الغازات النادرة (He, Ne, Ar, Kr, Xe) من أجل طاقة

قيمتها  $8.6 \text{ MeV/amu}$

توقعاتنا النظرية لتشبع المقاطع الفعالة الكلية للتحريض الالكتروني و المتحصّل عليها بهذا المبدأ التغيري الجديد ، تتوافق مع النتائج التحريبية ل Xian-Yuan Xu و مساعديه.

## الكلمات المفتاحية

- التصادم الذري.
- المبدأ التغيري لشوينغر.
- التحريض الذري.
- المقاطع الفعالة.

# *Dédicaces*

*Je dédie ce mémoire à*

*Ma mère, qui a œuvré pour ma réussite, par son amour, son soutien, tous les sacrifices consentis et ses précieux conseils, pour toute son assistance et sa présence dans ma vie, reçois à travers ce travail aussi modeste soit-il, l'expression de mes sentiments et de mon éternelle gratitude.*

*Mon père, qui peut être fier et trouver ici le résultat de longues années de sacrifices et de privations pour m'aider à avancer dans la vie. Puisse Dieu faire en sorte que ce travail porte son fruit ; Merci pour les valeurs nobles, l'éducation et le soutien permanent venu de toi.*

*Mes frères « Abderrazak, mokhtar, Achour, Abdelkrim » et Ma sœur « Soumia, Saliha, Samah » qui n'ont cessé d'être pour moi des exemples de persévérance, de courage et de générosité.*

*A mes amis qui ont toujours été à mes côtés et avec qui j'ai partagé les meilleurs moments, De ma vie « Lakhdar, Zoheir, Mohamed, Habib, Abdou, Hichem, Zouidi, Yamina, ».*

*A qui est toujours à mes côtés dans le mal et dans le bien « Mon chère frère ACHOUR » et « Mon chère BELGOUR YAMINA » .*

*A mes professeurs qui doivent voir dans ce travail la fierté d'un savoir bien acquis.*

*A celui qui était avec moi par son encouragement et m'a aidé à la réalisation de ce travail.*

**« Pr : LASRI Boumediene »**

**A tous mes collègues la promotion de physique des Rayonnements  
2017-2018**

# **Remerciements**

*Avant tout je remercie **Allah** le tout puissant, de m'avoir guidées toutes ces années d'études et m'avoir données la volonté, la patience et le courage pour terminer mon travail.*

*J'adresse le grand remerciement à mon encadreur **Dr . Sahlaoui Mohammed** qui a proposé le thème de ce mémoire, pour avoir accepté de m'encadrer dans cette étude.*

*Un grand remerciement à Monsieur « **Morbouh Norredine** » pour son aide, son orientation et ses efforts*

*Je tiens à remercier profondément **Mr. Meskine Mohammed** Maitre de conférences A à l'université de Saïda d'avoir accepté de présider ce jury. J'exprime également ma profonde gratitude au Professeur **Lasri Boumediene** aungsi que **Dr. Boudraa Kamel eddine** pour avoir bien voulu examiner ce travail.*

*Un grand merci à tous mes collègues.*

*Enfin, je tiens à exprimer ma profonde gratitude à ma famille qui j'ai toujours soutenues et à tout ce qui participe de réaliser ce mémoire. Ainsi que l'ensemble des enseignants qui ont contribué à ma formation.*

*Je voudrais également remercier tous les travailleurs de la bibliothèque et tous les travailleurs de l'université.*

*Un grand merci à tous ceux qui me sont chers.*

# Sommaire

Résumé	
Abstract	
ملخص	
Table des figures	
Liste des tableaux	
<b>Introduction générale</b> .....	1
<b>Références</b> .....	3
<b>Chapitre I</b> PROCESSUS ELEMENTAIRES, DOMAINES DE VITESSES D'IMPACT ET DIVERS TRAVAUX	
I-1.Processus mono-électroniques directs .....	5
I.1.1 Ionisation.....	5
I.1.2 Excitation.....	6
I.1.3 Capture.....	6
I-2.Domaines des vitesses d'impact.....	6
I.2.1 Régime des faibles vitesses d'impact.....	6
I.2.2 Régime de hautes vitesses d'impact.....	7
I.2.3 Régime des vitesses d'impact intermédiaires.....	7
I-3.Principales méthodes théoriques développées .....	8
I.3.1 Approximation de Born.....	8
I.3.2 Approximation de VPS (Vainshtein, Presnyakov et Sobelman.....	10
I.3.3 Approximation des voies couplées.....	10
I.3.4 Approximation de Glauber.....	13
I.3.5 Approche variationnelle.....	14
<b>Références</b> .....	16
<b>Chapitre II</b> PRINCIPE VARIATIONNEL DE SCHWINGER	
II-1.Formes stationnaires de l'amplitude de transition .....	20
II-2.Amplitude variationnelle de transition approchée dans le formalisme de Schwinger.....	25
<b>Références</b> .....	28
<b>Chapitre III</b> TRAITEMENT VARIATIONNEL DE SCHWINGER POUR L'EXCITATION	
III-1 .Introduction.....	30
III-2. Les systèmes hydrogénéoïdes.....	30
III-3.Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact.....	32
III-4 .Amplitude de transition eikonale et la section efficace totale d'excitation .....	38
III.4.1 Amplitude de transition eikonale.....	38
III.4.2 sections efficaces eikonales.....	41
<b>Références</b> .....	42

## **Chapitre IV** EVALUATION DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION

### VARIATIONNELLE APPROCHEE

IV-1. Calcul des éléments de matrice de Born-I .....	44
IV-2. Calcul des éléments de matrice de Born-II .....	47
IV-3. Méthode d'intégration numérique.....	49
IV-4 Lois d'échelle.....	50
IV-5 Lois d'échelle sur la charge $Z_p$ .....	51
<b>Références</b> .....	52

## **Chapitre V** APPLICATION DU P.V.S A L'EXCITATION DE L'ION $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$

### PAR IMPACT DE DIVERS NOYAUX

V.1 Introduction.....	54
V.2 Choix du partenaire excité (projectile).....	54
V.3 Excitation de l'ion $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$ .....	59
V.3.1 Excitation à l'état 2s du $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$ .....	59
V.3.2 Excitation à l'état 2p du $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$ .....	61
V.3.3 Excitation au niveau $n=2$ du $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$ .....	63
V.4 Test de convergence et discussion.....	65
<b>Références</b> .....	67
<b>Conclusion</b> .....	68



## Table des figures

I.1 schéma de la collision.....	05
III.1 Géométrie du système collisionnel dans' approximation Eikonale .....	33
V.1 Section efficace totale d'excitation à l'état <b>2s</b> ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion <b>Ca<sup>18+</sup></b> ( $1s^2$ ) à une énergie de <b>8.6 MeV/amu</b> en fonction de la charge du projectile ( $Z_P$ ).....	60
V.2 Section efficace totale d'excitation à l'état <b>2s</b> ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion <b>Ca<sup>18+</sup></b> ( $1s^2$ ) à une énergie de <b>8.6 MeV/amu</b> en fonction de la charge du projectile ( $Z_P$ ).....	62
V.3 Section efficace totale d'excitation à l'état $n=2$ ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion <b>Ca<sup>18+</sup></b> ( $1s^2$ ) à une énergie de <b>8.6 MeV/amu</b> en fonction de la charge du projectile ( $Z_P$ ).....	64

## Liste des tableaux

V.1 Section efficace totale d'excitation à l'état <b>2s</b> ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion <b>Ca<sup>18+</sup></b> ( $1s^2$ ) à une énergie de <b>8.6 MeV/amu</b> en fonction de la charge du projectile ( $Z_P$ ).....	59
V.2 Section efficace totale d'excitation à l'état <b>2p</b> ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion <b>Ca<sup>18+</sup></b> ( $1s^2$ ) à une énergie de <b>8.6 MeV/amu</b> en fonction de la charge du projectile ( $Z_P$ ).....	61
V.3 Section efficace totale d'excitation à l'état $n=2$ ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion <b>Ca<sup>18+</sup></b> ( $1s^2$ ) à une énergie de <b>8.6 MeV/amu</b> en fonction de la charge du projectile ( $Z_P$ ).....	63

# ***Introduction Générale***



# Introduction Générale

**L**a physique, dont l'objectif initial était d'établir les lois de la nature, a contribué à des avancées technologiques de premier plan en permettant la réalisation, par exemple, des lasers et des horloges atomiques. Elle a aussi ouvert un champ considérable de recherches fondamentales, allant de l'optique quantique à la physico-chimie des molécules.

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. La connaissance de la nature et de l'efficacité des processus collisionnels a une importance considérable en physique de l'atmosphère, physique des lasers, voire même la chimie de la combustion.

Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, comme tout corps chaud, les plasmas émettent du rayonnement qui peut se situer dans n'importe quelle gamme du spectre électromagnétique, et ceci en fonction du degré d'ionisation de la matière. La spectroscopie du rayonnement, émis par un plasma, est un outil de diagnostic qui a été utilisé depuis les premières études, en permettant l'évaluation des paramètres plasmas tels que la densité, la température et le degré d'ionisation.

L'intérêt de l'étude de l'émission X réside dans un certain nombre d'applications, dont l'une des plus importantes est l'astrophysique : les étoiles sont constituées de plasmas chauds, qui émettent et absorbent du rayonnement en dehors de la gamme visible, en particulier depuis les X, UV jusqu'aux rayons gamma. Les trois mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) sont principalement responsables de l'émission de rayonnement par un tel milieu. Ils interviennent dans les milieux thermonucléaires (les plasmas : les étoiles, l'espace interstellaire et l'espace intergalactique) ainsi que lors de la formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs, libérée d'énergie sous la forme d'une intense émission en rayon X [1].

L'étude de ces mécanismes analysant les raies émises induites par collision fournit des données uniques sur les phénomènes célestes dans l'univers. Récemment, dans le domaine du dommage biologique, des travaux semblent mettre en évidence une corrélation entre les sections efficaces de mort cellulaire et la création d'une lacune en couche interne (par excitation ou ionisation) d'un atome de carbone du squelette d'ADN d'une cellule. En particulier, il apparaît que le maximum des sections efficaces d'inactivation cellulaire correspond à l'égalité des vitesses du projectile et de l'électron en couche  $K$  de l'atome de carbone, exactement comme pour les sections efficaces d'ionisation ou d'excitation en couche  $K$ . Une bonne connaissance des sections efficaces d'excitation (et d'ionisation), en particulier pour des collisions de grande asymétrie, s'avère donc fondamentale, dans le but de rendre compte, par exemple, de la saturation de l'efficacité des effets biologiques par des projectiles de grand numéro atomique [2].

**Ce mémoire est organisé comme suit :**

Le **chapitre I** est consacré à l'aspect théorique de la collision développé après une description générale de la collision et un survol des principales méthodes utilisées pour résoudre les problèmes de collisions atomiques.

Le **chapitre II** décrit l'essentiel du principe variationnel de Schwinger avec la détermination des expressions stationnaires.

Dans le **chapitre III**, le principe variationnel est adapté à l'excitation atomique. Ceci nous permet de développer l'amplitude de transition variationnelle pour aboutir aux sections efficaces totales d'excitation des systèmes hydrogénoïdes par impact d'ions. Ce problème a été traité dans l'approximation du paramètre d'impact où le projectile est supposé décrire une trajectoire rectiligne par rapport à la cible.

Le **chapitre IV** consiste en l'évaluation de deux sortes d'éléments de matrice, notés  $(i | V | j)$  et  $(i | VG_T^+ V | j)$  dits respectivement de premier ordre de Born (Born-I) et de deuxième ordre de Born (Born-II). On note que dans cette approche, le propagateur de Green a été développé sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que celui du continuum de la cible. Afin de décrire d'une manière plus correcte la fonction d'onde de diffusion, nous avons utilisé une base de 5 états.

Enfin dans le **chapitre V**, nous appliquons le formalisme variationnel de Schwinger aux processus d'excitation des ions  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) en collision avec divers atomes nus de charges allant de 1 jusqu'au 56 incluant celles des gaz rares (He, Ne, Ar, Kr, Xe) dans un régime de vitesses intermédiaires correspondant à une énergie de 8.6 Mev/amu.

Les résultats de calculs des sections efficaces totales d'excitation ont été comparés avec ceux obtenus par d'autres modèles théoriques ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Xian-Yuan Xu *et al* [3].

On clôture ce mémoire par une conclusion générale et des perspectives.

## REFERENCES

- [1] - J.Rangama" *Ionisation et excitation de l'atome de lithium par impact de particules chargées rapides*", *Thèse de Doctorat Es Sciences, CAEN/BASSE-NORMANDIE (1995)*.
- [2] - A.Chetioui, I.Despiney, L.Adoui, L.Sabatier, B.Dutrillaux, *Int.J of Radiat. Biol.* 65 (1994) 511-512.
- [3] - Xiang-Yuan Xu, E.C. Montenegro, R. Anholt, K. Danzmann and W.E. Meyerhof, A.S. Schlachter, B.S. Rude and R.J. McDonald, *Physical Review A*, Vol 38, 4, 1848, (1988).

---

# Chapitre I

## *Processus élémentaires, domaines de vitesses d'impact et divers travaux*



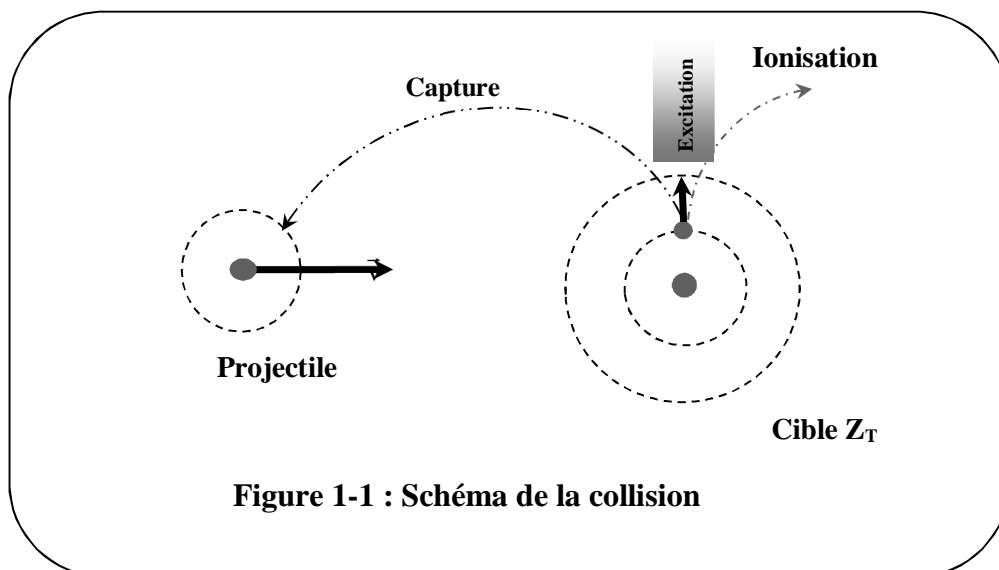
*Max Born : Le Britannique d'origine allemande Max Born (1882-1970) a effectué des travaux dans divers domaines, et plus particulièrement en physique quantique. Il a reçu le prix Nobel de physique en 1954.*

Lors des collisions ion-atome, une partie de l'énergie cinétique du mouvement est transférée aux deux cortèges électroniques et il se produit un réarrangement des états d'un ou plusieurs électrons correspondant à des processus d'excitation, d'ionisation ou de capture. (Figure I-1) [1].

## I.1 Processus mono-électroniques directs :

Dans l'étude de la collision entre un ion projectile P et une cible atomique ou moléculaire T, les électrons « actifs » de la cible sont ceux qui, au cours de la collision, peuvent passer d'une orbitale initiale de T vers une autre orbitale de T (excitation), vers le continu (ionisation), ou vers une autre de P (capture). Les électrons « passifs » sont ceux qui conservent leurs états quantiques, au cours de la collision.

Afin de simplifier la compréhension de ces trois processus, on considère un modèle à un seul électron, où le concept « électron actif » a pour but de définir les processus mono-électroniques et les régimes de vitesses d'impact.



### I.1.1 Ionisation :

Dans ce processus, l'interaction est assez intense. Par conséquent, le transfert d'énergie peut être suffisant pour arracher un électron de l'atome cible T. Il y a donc création d'une paire ion-électron (ion positif et électron) dans le milieu.



### I.1.2 Excitation :

Au contraire, l'interaction est insuffisante pour créer une ionisation. Il n'y aura que l'excitation (l'électron change l'état quantique) : le fait passer d'un état initial à un état final moins lié, (ce processus est peu probable pour les cibles biologiques).

### I.1.3 Capture :

Le processus de simple capture est le passage d'un électron d'une orbitale de l'atome cible T vers une orbitale du projectile P sans émission simultanée de rayonnement. Ce processus est aussi appelé processus de « transfert de charge ». Il intervient surtout lors d'irradiations en ions lourds.

## I.2 Domaines des vitesses d'impact :

Pour chaque système collisionnel, ces mécanismes sont caractérisés par des sections efficaces dépendantes de l'énergie d'impact. Ces différents processus sont donc déterminés en fonction du domaine de l'énergie où se produisent les collisions, comme le montre la figure (I-2).

La théorie des collisions classe ainsi trois régimes selon la valeur du paramètre définie par Chetioui [2] :

$$K = \frac{Z_p}{Z_T} \times \frac{v_e}{v_p} \quad \text{I-1}$$

où  $v_e$  est la vitesse de l'électron sur une couche atomique (ou moléculaire) cible,  $v_p$  la vitesse de l'ion incident,  $Z_p$  et  $Z_T$  sont respectivement numéros atomiques du projectile et de la cible. La comparaison de  $v_e$  et  $v_p$  et celle de  $Z_p$  et  $Z_T$  permettent de classer les trois régimes de vitesses d'impact.

### I.2.1 Régime des faibles vitesses d'impact ( $K \gg 1$ )

Ce régime, appelé aussi régime de fortes interactions, est atteint pour des vitesses de collision ( $v_p$ ) très inférieures à celle de l'électron actif ( $v_e$ ), entre partenaires de charges nucléaires comparables ou *pour* une grande asymétrie de collision du type ( $Z_T \ll Z_p$ ). La théorie, appropriée pour l'étude de ce régime, est fondée sur l'hypothèse de la formation d'une molécule transitoire au cours de la collision, d'où l'appellation "régime quasi-moléculaire". Cette théorie est basée sur une représentation des états électroniques

moléculaires. Un de ses modèles est celui d'onde déformée du continuum de la cible par l'onde du projectile - Continuum Distorted Wave (CDW)-.

### I.2.2 Régime de hautes vitesses d'impact ( $K \ll 1$ )

Ce régime, appelé aussi régime perturbatif, est atteint pour des grandes vitesses d'impact comparées à celle de l'électron actif de l'atome cible, ou pour des grandes asymétries ( $Z_P \ll Z_T$ ). Dans ce domaine, la transition électronique est attribuée à la perturbation, créée par le projectile. En effet une théorie de perturbation de premier ordre telle que l'approximation **PWBA** (**P**lane-**W**ave **B**orn **A**pproximation) devient fiable pour une bonne évaluation des sections efficaces totales des réactions d'ionisation et d'excitation.

Par contre, la voie de capture apparaît comme fortement couplée à la voie d'ionisation ; comme cette dernière est quasiment indépendante. Il en résulte que le processus de capture doit être un processus beaucoup moins important que celui de l'ionisation [2].

### I.2.3 Régime des vitesses d'impact intermédiaires ( $K \cong 1$ )

Pour des systèmes quasi-symétriques, ce domaine est caractérisé principalement par :

- un fort couplage entre les voies de capture et d'excitation.
- les sections efficaces des différents processus atomiques sont proches de leurs valeurs maximales.
- les processus multiples ont des probabilités non négligeables.

Le processus d'ionisation apparaît d'autant plus important que la vitesse d'impact est grande. Le processus d'ionisation est essentiellement dû à des électrons éjectés avec de faibles moments cinétiques autour de la cible et du projectile. Dans ce régime, une approche naturelle du processus d'ionisation consiste à le considérer comme un prolongement de l'excitation dans le continu de la cible ou comme celui de la capture dans le continu du projectile [3].

Dans le cas de la collision Proton-Hydrogène, la capture électronique est le processus prédominant dans le régime des basses vitesses de collision. Par contre, l'ionisation et l'excitation sont dominantes aux hautes vitesses de collision.

L'hydrogène est l'atome le plus simple à étudier. La compréhension de la théorie quantique de cet atome fut très importante car elle permet de développer la théorie des atomes à  $N$  électrons.

### I.3 Principales méthodes théoriques développées :

Dans l'étude d'un système collisionnel, formé par une cible atomique et un projectile ionique incident, le problème réside dans la détermination de la fonction d'onde. Cette fonction représente l'onde de diffusion car elle contient toutes les informations sur l'état du système. Pour résoudre ce problème, diverses techniques et approches ont été développées afin d'aboutir à des solutions quasi-exactes.

Les théories que nous allons décrire brièvement, dans ce chapitre, ne sont pas spécifiques seulement à l'étude du processus d'excitation. Cependant, Ce sont qui ont été largement employées au cours de ces dernières décennies à l'étude des processus collisionnels (l'excitation, l'ionisation et la capture).

#### I.3.1 Approximation de Born :

L'approximation de Born est essentiellement un développement de type perturbatif de la fonction d'onde ou de l'amplitude de diffusion en puissance du potentiel d'interaction. Dans cette approche, nous commençons par l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour déduire les équations intégrales de la fonction d'onde. Nous devons alors prendre en considération les conditions aux limites appropriées et relatives aux grandes distances. C'est à dire un choix donné pour la fonction de Green et pour la solution homogène de l'équation différentielle implique une définition des conditions aux limites. Il est aussi possible d'obtenir le même résultat si nous utilisons l'équation de Schrödinger et la fonction de Green dépendantes du temps [4].

Dans une collision d'une cible atomique et un ion incident, on considère la transition d'un électron de l'état initiale  $|\alpha\rangle$  de la voie d'entrée, à l'état final  $|\beta\rangle$  de la voie de sortie.

Dans ce traitement perturbatif, on peut exprimer l'élément matriciel de l'amplitude de transition comme suit :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_{\beta} | \psi_{\alpha}^+ \rangle \quad \text{I-2}$$

où  $|\Psi_\alpha^+\rangle$  représente le vecteur propre de l'Hamiltonien total  $H$  dans la voie de sortie  $\Pi$  vérifie l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$|\Psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G^+ V_\alpha |\alpha\rangle \quad \text{I-3}$$

où

$$G^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H + i\varepsilon)^{-1} \quad \text{I-4}$$

est l'opérateur de Green,  $E$  étant l'énergie totale du système, et  $H$  l'Hamiltonien total du système. Ce Hamiltonien peut s'écrire comme suit :

$$H = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \quad \text{I-5}$$

$|\alpha\rangle, H_\alpha$  et  $V_\alpha$  désignent respectivement le vecteur propre, l'Hamiltonien des particules sans interaction, et le potentiel d'interaction dans la voie d'entrée.  $|\beta\rangle, H_\beta$  et  $V_\beta$  sont respectivement le vecteur propre, l'Hamiltonien des particules sans interaction, et le potentiel d'interaction dans la voie de sortie.

En utilisant l'identité générale reliant les inverses de deux opérateurs et à l'aide de l'expression (I-5), on peut écrire  $G^+$  sous la forme :

$$G^+ = G_\alpha^+ + G_\alpha^+ V_\alpha G^+ \quad \text{I-6}$$

avec

$$G_\alpha^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H_\alpha + i\varepsilon)^{-1} \quad \text{I-7}$$

De la relation (I-6), on obtient facilement la série suivante :

$$G^+ = G_\alpha^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_\alpha G_\alpha^+)^n \quad \text{I-8}$$

Par substitution l'expression de  $G^+$  dans la relation (I-3), on obtient :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_\beta \left[ 1 + G_\alpha^+ \sum_{i=0}^{+\infty} (V_\alpha G_\alpha^+)^i V_\alpha \right] | \alpha \rangle \quad \text{I-9}$$

Si on ne retient que le premier terme de cette série, on obtient l'approximation de Born au premier ordre (Born-I) :

$$T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle \beta | V_\beta | \alpha \rangle \quad \text{I-10}$$

L'approximation de Born du premier ordre est plus fréquemment utilisée vue sa simplicité. Elle est valable uniquement pour des collisions atomiques avec des ions de haute énergie. De même, l'approximation de Born au deuxième ordre revient à ne retenir que les deux premiers termes de la série (I-9) :

$$T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle \beta | V_{\beta} + V_{\beta} G_{\alpha}^{+} V_{\alpha} | \alpha \rangle \quad \text{I-11}$$

L'approximation de Born de second ordre domine la diffusion à haute énergie dans le cas de collisions inélastiques. Le second terme qui laisse apparaître un caractère de processus en deux étapes est essentiel dans le cas de capture à haute énergie. Et ainsi de suite, le N<sup>ième</sup> ordre de l'approximation de Born revient à retenir seulement les N premiers termes de la série. Quoique l'inclusion des termes du développement donne une meilleure représentation de la fonction d'onde de diffusion. Elle augmente rapidement la difficulté de calculs numériques sur ordinateurs.

On voit bien que d'après (I-9), excepté l'approximation de Born au premier ordre, les approximations d'ordres supérieurs dépendent étroitement des développements utilisés pour l'opérateur  $G^{+}$ .

### I.3.2 Approximation de VPS (Vainshtein, Presnyakov et Sobelman):

Afin de surmonter certaines faiblesses de l'approximation de Born, une nouvelle approche a été développée par Vainshtein, Presnyakov et Sobelman « approximation VPS » pour traiter les déformations de la fonction d'onde sortante décrivant le système collisionnel.

Dans cette approximation, on tente de traiter exactement l'interaction entre le projectile et l'électron actif. L'interaction entre le projectile et le noyau de la cible est évalué approximativement, de telle façon qu'elle satisfasse les conditions propres du processus de collision. Mc Carroll et Crothers [5] ont proposé une version légèrement différente de l'approche initiale qui fut appliquée en 1966 par \$ Mc Carroll et Salin [6] aux collisions proton-hydrogène.

### I.3.3 Approximation des voies couplées (Close-Coupling) :

Une puissante alternative à l'approximation de Born est l'approximation des voies couplées. La fonction d'onde de diffusion est développée sur des bases de fonctions d'onde

représentant les différentes voies de réaction. Il en résulte un système d'équations différentielles couplées sur les coefficients du développement [4].

Dans cette approximation, l'étude des processus collisionnels est traitée dans le formalisme du paramètre d'impact, qui est valable aussi à haute énergie et aux petits angles de collision. Ce formalisme consiste à supposer que le projectile se déplace en ligne droite et que le transfert d'impulsion de la cible est perpendiculaire à la trajectoire du projectile, décrit par les équations suivantes :

$$\begin{cases} \vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \\ \vec{z} = \vec{v}t \\ \vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \end{cases} \quad \text{I-12}$$

où  $\vec{R}$  est la distance du projectile-cible,  $\vec{v}$  est la vitesse incidente du projectile,  $\vec{\rho}$  désigne le paramètre d'impact et  $t$  est le temps pris arbitrairement égale à zéro quand  $\vec{R} = \vec{\rho}$ . L'équation de Schrödinger peut se mettre sous:

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H(z) + V(\vec{R}(z)) \right\} |\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle = 0 \quad \text{I-13}$$

où  $H$  est l'Hamiltonien électronique du système sans potentiel d'interaction. Il est responsable de la transition électronique. La fonction d'onde peut être approchée par un développement sur une base tronquée d'états, arbitraire  $\{|\chi_j\rangle\}$  qui sont des vecteurs propres de  $H$ . On pose alors :

$$|\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle = \sum_{k=1}^n a_k(\vec{\rho}, \vec{z}) |\chi_k\rangle \exp(-i\varepsilon_k z/v) \quad \text{I-14}$$

où  $\varepsilon_k$  désigne l'énergie propre de l'état propre  $|\chi_k\rangle$ . En portant l'expression ci-dessus de  $|\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle$  dans l'équation (I-13), on obtient un système d'équations différentielles couplées sur les fonctions  $a_j(\vec{\rho}, \vec{z})$ , après projection sur  $\langle \chi_j |$ :

$$i \frac{\partial}{\partial z} a_j(\vec{\rho}, \vec{z}) = \sum_{k=1}^n V_{jk}(\vec{R}(z)) \exp(i(\varepsilon_j - \varepsilon_k)z/v) a_k(\vec{\rho}, \vec{z}) \quad \text{I-15}$$

où les éléments de matrice  $V_{jk}(z)$  sont donnés par :

$$V_{jk}(\vec{R}(z)) = \langle \chi_j | V(\vec{R}(z)) | \chi_k \rangle \quad \text{I-16}$$

avec les conditions asymptotiques:

$$a_j(\vec{\rho}, z(t \rightarrow -\infty)) = \delta_{ij} \quad \text{I-17}$$

L'indice  $i$  étant relatif à l'état initial du système dans la voie d'entrée :

$$a_j(\vec{\rho}, t) = \int_{-\infty}^t dt \sum_{k=1}^n V_{jk}(\vec{R}(t)) \exp(i(\varepsilon_j - \varepsilon_k)t) a_k(\vec{\rho}, t) \quad \text{I-18}$$

La probabilité de transition dans une voie de réaction particulière  $f$  est donnée par le coefficient du développement de la fonction d'onde dans cette voie. Elle est donc :

$$P = |a_f(\vec{\rho}, +\infty)|^2 \quad \text{I-19}$$

Nous allons maintenant rapidement présenter les différents choix de base qui ont été effectués, choix qui dépend aussi bien de la vitesse que de l'asymétrie de la collision.

- Base à un centre : (**Single Centered Expansion –SCE-**) : La fonction d'onde de diffusion est développée sur une base d'états atomiques, qui sont les vecteurs propres de l'Hamiltonien de la cible, dite « à un centre », c'est-à-dire centrée sur la cible. une application a été effectuée pour le système collisionnel étudié dans ce mémoire ( $\text{P}+\text{Li}^{2+}$ ) par cette approche, appelé (**FHBS ; Finit Hilbert base Set**)[7].
- Base à deux centres (**Two Centred Atomic Orbital –TCAO-**): Dans le domaine de faibles vitesses, les sections efficaces de capture deviennent grandes. Par conséquent, Les voies de capture –qui font intervenir les états du projectile- sont ouvertes et la fonction d'onde ne peut pas être développée uniquement sur les états de la cible. Lors de l'excitation par passage par des états intermédiaires centrés sur le projectile (et donc par voie de capture), la méthode traditionnellement utilisée consiste alors à un développement de  $|\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle$  sur une base dite « à deux centres » [1]. Il en est de même dans le régime de vitesses intermédiaire. Dans ce cas, le traitement de fort couplage existant entre l'excitation et la capture requiert un développement sur une base à deux centres.

On écrit alors :

$$|\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle = \sum_{k=1}^n a_k(\vec{\rho}, \vec{z}) |\chi_k^c\rangle \exp(-i\varepsilon_k z/v) + \sum_{l=1}^m b_l(\vec{\rho}, \vec{z}) |\chi_l^p\rangle \exp(-i\varepsilon_l z/v) \quad \text{I-20}$$

$|\chi_k^c\rangle$  et  $|\chi_l^p\rangle$  sont respectivement les états propres de la cible et du projectile.

La résolution de l'équation de Schrödinger (I-12) pose souvent des problèmes liés au coût relatifs au temps de calcul et aussi au nombre d'états à introduire pour assurer la convergence. Cette méthode a ainsi été appliquée, dans le calcul de sections efficaces d'excitation pour le système collisionnel  $P+\text{Li}^{2+}$  (Ermolaev et al [8]), étudié dans ce mémoire.

- Base à un centre et demi (**One and Half Centered Expansion –OHCE–**) : Dans cette méthode, l'ionisation de la cible due à la capture par le projectile est représentée en incluant quelques fonctions centrées sur le projectile dans le développement de la fonction d'onde de diffusion sur les orbitales de la cible. L'introduction de ces fonctions permet donc, lorsque le projectile et la cible s'éloignent l'un de l'autre à l'électron, de quitter la région de la cible dans un état lié du projectile, tenant ainsi compte des voies de capture alors accessibles [1].

Cette approximation a été appliquée par Reading et al en 1981[9] pour des calculs d'excitation sur le système  $P+H$ , en n'introduisant que la seule fonction  $1s$  centrée sur le projectile. Elle a ainsi été appliquée par Ford et al (1982) [10] pour des calculs d'ionisation sur le système  $P+\text{Li}^{2+}$ .

### I.3.4 Approximation de Glauber :

Cette approche a été développée par Glauber à la fin des années cinquante. Elle est l'une des formulations de l'approximation eikonale. Elle permet aussi 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.

L'influence du potentiel d'interaction sur la fonction d'onde de diffusion se traduit par une déformation de l'onde plane représentant le projectile quand celui-ci s'approche ou s'éloigne de la cible. On s'attend à ce que cette approximation reste valable à des énergies



d'impact plus basses que celles où l'approximation de Born au premier ordre est valable. En effet, les fonctions d'onde incidente et de diffusion ne sont plus des ondes planes [4].

### I.3.5 Approche variationnelle :

Plusieurs approches ont été formulées afin de donner des modèles adéquats à l'étude du processus de collision. Nous citons : le modèle de Cheshire établi en 1968 [11] dans lequel cet auteur a 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 [12] fondé sur la méthode des voies couplées et le modèle des pseudo-états utilisé pour la première fois par Reading et al en 1976 [13], puis repris par Fichard et al [14] ainsi que Swaford et al en 1977 [15].

La majorité des approches, décrits jusqu'à présent, concernant essentiellement l'étude de collisions à haute énergie (à l'exception de la méthode des équations couplées dont l'application peut être étendue au domaine des énergie moyennes) a dévoilé leurs insuffisances dans la prise en considération des effets de couplage, soit car les calculs deviennent très difficiles par l'addition des états du continuum soit les approches sont inexactes.

Une autre alternative a vu le jour en l'émergence d'une nouvelle approche : principe variationnel de Schwinger qui a été introduit par Schwinger en 1950, pour remédier à ces insuffisances. Il constitue un outil performant et efficace à l'étude de la collision proton-atome d'hydrogène ou d'une façon plus générale à l'étude de la collision ion-atome multichargé aux vitesses intermédiaires.

Lucchese et Mc Koy [16] ont présenté pour la première fois une application du principe variationnel de Schwinger pour la diffusion (électron-He). Leurs résultats étaient très encourageants et ont montré que cette méthode peut fournir des solutions excellentes aux problèmes de diffusion sans toujours nécessiter des développements sur des bases importantes. Par la suite, cette approche a été appliquée dans le cas de la diffusion élastique d'électron par des molécules par Lucches, Watson et Mc Koy [17]. Ils ont montré que l'amplitude de diffusion dans le principe variationnel de Schwinger converge rapidement par rapport à la base sur laquelle la fonction d'onde de diffusion est développée.

En 1984, Brendlé, et sous la direction du Pr R. Gayet au Laboratoire des collisions Atomique de l'université de Bordeaux-I (France), a encore développé cette méthode pour l'étude de l'excitation d'ions et d'atomes par impact des noyaux nus aux vitesses

intermédiaires et il a montré l'existence d'une remarquable stabilité des résultats vis-à-vis des différentes bases choisies [18].

Dans le même laboratoire et toujours sous la direction du Pr R. Gayet, M Bouamoud a repris et a développé cette méthode en mettant au point une nouvelle approche, basée sur un nouveau code informatique de calcul en Fortran, calculant systématiquement les sections efficaces totales d'excitation, en utilisant une base constituée de cinq états de la cible [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 l'ion hydrogénoïde  $\text{Be}^{3+}$  en collision avec des protons et à l'excitation des ions heliumoïdes ( $\text{Fe}^{24+}$ ,  $\text{Ar}^{16+}$ ,  $\text{Xe}^{54+}$ , ...) avec des noyaux de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, Ne, Ar, Kr et Xe) aux vitesses intermédiaires [21-26].

En effet, vu les divers prédictions théoriques qui paraissent très encourageantes pour l'atome d'hydrogène principalement ainsi que les ions heliumoïdes ( $\text{Fe}^{24+}$ ,  $\text{Ar}^{16+}$ ,  $\text{Xe}^{52+}$ , ...) étudiés, ces derniers demeurent en parfait accord avec ceux d'autres travaux théoriques fondés sur d'autres techniques récentes comme celles de Close Coupling ainsi qu'avec la totalité des résultats expérimentaux [26-39]. 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) [40], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [19], B. Lasri (1998, 2007) [20],[4], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [21], B. Lasri, A Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet (2005) [22], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2006) [23], B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen [24] ).

# REFERENCES

- [1]-L. Adoui, "*Mécanismes d'excitation d'ions Ar<sup>+</sup>16 en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire*", *Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995)*.
- [2]- A.Chetioui, I.Despiney, L.Adoui, L.Sabatier, B.Dutrillaux, *Int.J of Radiat. Biol.* 65 J. Phys. B: *At. Mol. Phys.* 20 L379-L383 (1987). (1994) 511-512.
- [3] -M. Bouamoud, « *Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif* » *Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I (1988), Texte en français*.
- [4]-B.Lasri, *Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (2007)*.
- [5]-B. Mc Carroll et D. Crothers, *Proc. Phys. Soc.* 86 (1965) 753
- [6]-R. McCaroll et A. Salin, *Ann. Phys. (Paris) 1* (1966) 283
- [7]-K. A. Hall, J. F. Reading et A. L. Ford, *Phys. B At Mol. Opt Phys.* 29 pp1979-1994(1996).
- [8]-A. M. Ermolaev et M. R. C. McDowell,
- [9]-J. F. Reading, A. L. Ford et R. L. Becker, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 14 pp1995-2012 (1981)
- [10]-A L Ford, J F Reading and R L Beckerf, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 15 (1982) 3257-3273
- [11]-I. M. Cheshire, *J.Phys. SER. 2, VOL. 1* (1968)
- [12]-B. H. Bransden et J.P. Coleman, *J. Phys. B 5* (1972) 537
- [13]-J. F. Reading, A. L. Ford and E. G. Fitchard, *Phys. Rev. Lett.* 36 5B(1976).
- [14]-E. G. Fitchard, A.L. Ford et J.F. Reading, *Phys. Rev. A 16* (1977) 1325.
- [15]-G. L. Swaford, J. F. Reading, A. L. Ford and E. Fitchard, *Phys. Rev. A 16*(1977)
- [16]-R. R. Lucchese et V. McKoy, *J. Phys. B 12* (1979) L421

- [17]-R. R. Lucchese, D.R. Watson et V. McKoy, *Phys. Rev. A* 22 .421
- [18]-B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, *Phys. Rev. Lett.* 54. 2007(1985).
- [19]-ethodsR. Gayet and M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 42 .515-522 (1989)
- [20]-B. Lasri, *Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen* (1998).
- [21]-B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Phys. Chemi. News, Vol 20* , pp12-17 (2004).
- [22]-B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud,R. Gayet, *Physical and chimical news vol.28 pp97-102* (2006).
- [23]-B. Lasri, M. Bouamoud, R. Gayet, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 251, pp66–72 (2006).
- [24]-B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen, *Journal of Electron Devices, Vol. 5*, pp. 127-131(2007).
- [25]-Y. Si Abderrahmane, *mémoire de magistère, Institut des sciences et des technologies, Université de Saida* (2008).
- [26]-N. Tochima, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26 No 11 pp281-286( 1993).
- [27]-R. Schakeshaft, *Phys Rev A* 18 pp1930-1934(1978). 4551. (1993).
- [28]-A. L. Ford, J. F. Reading et K. A. Hall, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26 pp4537-
- [29]-H. A. Slim et A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27, pp203-209 (1994).
- [30]-N. Toshima, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 30 No 5 pp131-136 ( 1997).
- [31]-H. J. Lüdde et R. M. Dreizler, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 15,pp 2703-2711 (1982).
- [32]-Brendan M McLaughlin, Y. k. Thomas G Winterz et James F. McCann, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 30 1043–1059 (1997)
- [33]-F. Martin, A. Salin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 28pp 671-683 (1995)
- [34]-A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 24 L495-L499 (1991)

[35]-C. F. Barnett, *Oak Ridge National Laboratory Report No 6086* (1990)

[36]-D P Higgins, J Geddes et H B Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 pp1219 – 1224(1996).

[37]-A. Donnelly, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 24pp 165-173 (1991).

[38]-D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, et K-H Schartner, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 pp4195 -4213(1994)

[39]-Stephan M. Chabot, P. Nicolai, K. Wohrer, A. Chetioui, J.P. Rozet, M..F. Politis, A. Touati, D, Vernhet, C.et R. Gayet, *Nucl. Instr. and Methods in Physics Research B* 56 pp 1-4 (1991).

[40]-M. Chabot, K Wohrert, A Chetioui, J P Rozet, A Touati, D Vernhet, M F Politis, C Stephan, J P Grandin, a Macias, F Martin, a Riera, J L San and R Gayet, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 pp111-125 (1994).

---

# Chapitre II

## PRINCIPE VARIATIONNEL DE SCHWINGER



*Julian Seymour Schwinger (1918-1994), est un physicien américain. Il formule la théorie de la renormalisation et décrit un phénomène de paire d'électron-positron connu sous le nom d'effet Schwinger.*

Parmi les nombreuses méthodes variationnelles proposées dans l'étude des collisions quantiques directes, élastique et inélastique, l'une des plus intéressantes est celle de Schwinger ([1] [2]) relative au calcul de l'amplitude de diffusion. Cette méthode, qui est basée directement sur les équations intégrales de Lippmann-Schwinger, jouit en effet d'une série de propriétés remarquables [3] qui la rendent particulièrement bien adaptée aux applications.

Cependant, en dépit de ces avantages et de résultats préliminaire encourageants, le calcul de l'amplitude de diffusion par la méthode de Schwinger n'a été mené à bien que dans un petit nombre de cas ([4]-[10]). La raison de ce fait provient de ce que la méthode de Schwinger introduit des éléments de matrice du second ordre en les potentiels d'interaction analogues à ceux de la deuxième approximation de Born- qui sont généralement malaisés à évaluer. Cela étant, il nous a semblé intéressant d'entreprendre une étude systématique de la méthode variationnelle de Schwinger, dans le but d'obtenir une forme stationnaire de l'amplitude de transition par rapport à des petites variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes.

## II-1. Formes stationnaires de l'amplitude de transition :

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

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

où  $H_c$  est le 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  $\langle\beta|$  respectivement les états propres du hamiltonien  $H_c$  dans la voie d'entrée (état initial du système) et dans la voie de sortie (état final du système) de la cible.

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 :

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

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

avec  $G_c^+$  l'opérateur de Green défini par [32] :

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

où  $E$  désigne l'énergie totale du système.

L'amplitude de transition définie comme étant l'élément de matrice de transition s'écrit sous la forme :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|T|\alpha\rangle \quad \text{II-4}$$

Par définition, l'équation formelle de l'amplitude de transition  $T$  est :

$$\begin{cases} V_c |\Psi_\alpha^+\rangle = T |\alpha\rangle \\ \langle\Psi_\beta^-| V_c = \langle\beta|T \end{cases} \quad \text{II-5}$$

et en introduisant cette dernière dans l'expression (II-4) on obtient deux formes d'expression de l'amplitude de transition suivantes :

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

$$T_{\beta\alpha} = \langle\Psi_\beta^-|V_c|\alpha\rangle \quad \text{II-6b}$$

A partir des expressions (II-2a) et (II-2b), on peut exprimer l'amplitude de transition sous une troisième forme en multipliant par exemple (II-2a) par  $V_c$  :

$$\begin{aligned} \text{(II-2a)} \Rightarrow V_c |\Psi_\alpha^+\rangle &= V_c |\alpha\rangle + V_c G_c^+ V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \\ \Rightarrow V_c |\alpha\rangle &= V_c |\Psi_\alpha^+\rangle - V_c G_c^+ V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \\ \Rightarrow V_c |\alpha\rangle &= (V_c - V_c G_c^+ V_c) |\Psi_\alpha^+\rangle \end{aligned}$$

et en injectant  $V_c |\alpha\rangle$  de cette dernière équation dans (II-6b), on aura alors :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\Psi_\beta^-|V_c - V_c G_c^+ V_c|\Psi_\alpha^+\rangle \quad \text{II-6c}$$



A partir d'une simple combinaison des trois formes précédentes (II-6a,b,c), une nouvelle forme de  $T_{\beta\alpha}$  dite forme **bilinéaire** de l'amplitude de transition :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_c | \Psi_\alpha^+ \rangle + \langle \Psi_\beta^- | V_c | \alpha \rangle - \langle \Psi_\beta^- | V_c - V_c G_c^+ V_c | \Psi_\alpha^+ \rangle \quad \text{II-7}$$

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 correctes. En différentiant la relation (II-7), nous obtenons :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[ \langle \beta | - \langle \Psi_\beta^- | + \langle \Psi_\beta^- | V_c G_c^+ \right] V_c |\delta\Psi_\alpha^+\rangle + \langle \delta\Psi_\beta^- | V_c \left[ |\alpha\rangle - |\Psi_\alpha^+\rangle + G_c^+ V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \right] \quad \text{II-8}$$

Puisque  $|\Psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \Psi_\beta^-|$  vérifient les équations intégrales de Lippmann-Schwinger (II-2a,b), la relation (II-8) donne alors :

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

Donc la forme bilinéaire en  $|\Psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \Psi_\beta^-|$  (II-7), est bien stationnaire du principe variationnel de Schwinger. Et selon le même protocole, à partir des trois équations (II-8a,b,c) nous déduisons une autre expression stationnaire de  $T_{\beta\alpha}$ , appelée forme **fractionnaire** du principe variationnel de Schwinger :

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | V_c | \Psi_\alpha^+ \rangle \langle \Psi_\beta^- | V_c | \alpha \rangle}{\langle \Psi_\beta^- | V_c - V_c G_c^+ V_c | \Psi_\alpha^+ \rangle} \quad \text{II-10}$$

En différenciant cette expression, nous obtenons :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \frac{\left[ \langle \beta | - \langle \Psi_\beta^- | + \langle \Psi_\beta^- | V_c G_c^+ \right] V_c |\delta\Psi_\alpha^+\rangle + \langle \delta\Psi_\beta^- | V_c \left[ |\alpha\rangle - |\Psi_\alpha^+\rangle + G_c^+ V_c |\Psi_\alpha^+\rangle \right]}{\left( \langle \Psi_\beta^- | V_c - V_c G_c^+ V_c | \Psi_\alpha^+ \rangle \right)^2} \quad \text{II-11}$$

C'est clair que le numérateur de cette dernière fraction est identique à l'expression (II-8) qui est stationnaire ; cela vérifie la stationnarité de la forme (II-10). De plus cette forme fractionnaire présente l'avantage d'être indépendante de la normalisation choisie pour les états de diffusion.

Notons que cette forme, ainsi que la forme bilinéaire (II-7), est plus sensible à la forme des états d'essais dans la région d'interaction qu'aux formes asymptotiques exactes des états de diffusion. Pour rendre cela clair, on remplace les vecteurs exacts inconnus  $|\Psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\Psi_\beta^-|$  dans l'expression (II-10) par les vecteurs d'essais correspondants dans l'approximation de Born,  $|\alpha\rangle$  et  $\langle\beta|$ , soit :

$$\begin{cases} |\Psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle \\ \langle\Psi_\beta^-| = \langle\beta| \end{cases} \quad \text{II-12}$$

Nous obtenons alors :

$$T_{\beta\alpha}^B = \frac{\langle\beta|V_c|\alpha\rangle\langle\beta|V_c|\alpha\rangle}{\langle\beta|V_c - V_c G_c^+ V_c|\alpha\rangle} \quad \text{II-13}$$

Dans ce traitement perturbatif, de Born, et en utilisant l'identité générale reliant les inverses de deux opérateurs [11] ainsi que l'équation (II-1), le propagateur  $G^+$  peut se mettre sous la forme :

$$G^+ = G_c^+ + G_c^+ V_c G^+ \quad \text{II-14}$$

avec :

$$G^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H + i\varepsilon) \quad \text{II-15}$$

est l'opérateur de green;  $E$ ,  $H$  étant respectivement l'énergie totale et l'hamiltonien total du système, qui s'écrit :

$$H = H_c + V_c = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \quad \text{II-16}$$

En exploitant la relation (II-14), on obtient la série suivante :

$$G^+ = G_c^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_c G_c^+)^n \quad \text{II-17}$$

Qui sera ensuite injectée dans l'équation de Lippmann-Schwinger (II-2a) et par conséquent la relation (II-6a) nous donne :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_c \left[ 1 + G_c^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_c G_c^+)^n V_c \right] |\alpha\rangle \quad \text{II-18}$$

Si l'on retient que le premier terme de cette série, on obtient l'approximation de Born au premier ordre :

$$T_{\beta\alpha}^{B1} = \langle \beta | V_c | \alpha \rangle \quad \text{II-19}$$

de même, l'approximation de Born au second ordre revient à ne retenir que les deux premiers termes de la série, soit :

$$T_{\beta\alpha}^{B2} = \langle \beta | V_c + V_c G_c V_c | \alpha \rangle \quad \text{II-20}$$

et ainsi de suite, l'approximation de Born au  $n$ ème ordre, consiste à ne retenir que les  $n$  premiers termes de la série (II-18), quoique l'inclusion des termes d'ordres supérieurs de cette dernière donne une meilleure représentation de la fonction d'onde de diffusion, mais augmente rapidement la difficulté des calculs numériques sur ordinateur.

L'approximation de Born est donc une approche perturbative qui consiste à développer la fonction d'onde ou l'amplitude de diffusion sous forme d'une série en puissance du potentiel d'interaction.

Pour des énergies incidentes suffisamment grandes, l'approximation de Born au premier ordre donne une bonne estimation de la section efficace totale d'excitation. Vue sa simplicité, cette dernière est habituellement utilisée. Cette approximation est en effet valable quand l'énergie cinétique de l'ion incident est très grande par rapport au potentiel d'interaction [11].

Revenant maintenant à l'expression fractionnaire de l'amplitude de transition (II-13) qui, à l'aide des deux équations (II-19) et (II-20), s'écrit sous une autre formulation :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{B1} \left[ \frac{1}{1 - \frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{B2}}{T_{\beta\alpha}^{B1}}} \right] \quad \text{II-21}$$

tel que :  $T_{\beta\alpha}^{B1}$  correspond à l'approximation de Born au premier ordre pour l'amplitude de transition.

l'approximation de Born au second ordre de l'amplitude de transition notée  $\overline{T}_{\beta\alpha}^{B2}$  est telle que :

$$T_{\beta\alpha}^{B2} = \overline{T}_{\beta\alpha}^{B2} + T_{\beta\alpha}^{B1} \quad \text{II-22}$$

si le rapport  $\left| \overline{T}_{\beta\alpha}^{B2} / T_{\beta\alpha}^{B1} \right|$  est petit devant l'unité, nous pouvons développer l'expression (II-21) et obtenir  $T_{\beta\alpha}$  :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{B1} + \overline{T}_{\beta\alpha}^{B2} + \dots \quad \text{II-23}$$

dont les deux premiers termes sont identiques à la série de Born au deuxième ordre pour l'amplitude de transition (II-20).

On s'attend donc à ce que le principe variationnel de Schwinger fournisse une meilleure approximation que celle de Born au deuxième ordre pour des énergies suffisamment élevées, pour lesquelles la série de Born converge et où la comparaison est possible.

## II-2. Amplitude variationnelle de transition approchée dans le formalisme de Schwinger :

Nous venons de déterminer deux formes stationnaires de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations arbitraires des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes : la forme bilinéaire (II-7) et la forme fractionnaire (II-10). Ce qui signifie que l'erreur commise sur l'amplitude de transition est quadratique par rapport à celle faite sur les états de diffusion.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = |\psi_{\alpha}^{+}\rangle + |\delta\psi_{\alpha}^{+}\rangle \\ \langle\tilde{\psi}_{\beta}^{-}| = \langle\psi_{\beta}^{-}| + \langle\delta\psi_{\beta}^{-}| \end{array} \right. \quad \text{II-24}$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \\ \langle\tilde{\psi}_{\beta}^{-}| = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^{*} \langle j| \end{array} \right. \quad \text{II-25}$$

La résolution de l'équation  $\delta T_{\beta\alpha} = 0$  nous donnera alors les composantes  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j^*$  des états de diffusions approchés. En exprimant l'amplitude de transition, donnée par l'expression (II-10) en fonction de ces vecteurs d'essais nous obtiendrons ainsi l'amplitude de transition approchée  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$  :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | V_c | \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle \langle \tilde{\psi}_\beta^- | V_c | \alpha \rangle}{\langle \tilde{\psi}_\beta^- | V_c - V_c G_c^+ V_c | \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle} \quad \text{II-26}$$

A partir de l'équation (II-8) et des expressions (II-24), nous déduisons l'équation suivante :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[ \langle \beta | - \langle \tilde{\psi}_\beta^- - \delta \psi_\beta^- | (1 - V_c G_c^+) | V_c | \delta \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta \psi_\beta^- | V_c [ | \alpha \rangle - (1 - G_c^+ V_c) | \tilde{\psi}_\alpha^+ - \delta \psi_\alpha^+ ] \right] \quad \text{II-27}$$

qui est satisfaite pour toutes variation au premier ordre en  $|\delta \Psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \delta \Psi_\beta^-|$ . En remplaçant les vecteurs  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \tilde{\psi}_\beta^-|$  par leurs développements (II-25) nous obtenons, pour les composantes  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j^*$  des états de diffusion approchés, les deux systèmes d'équations différentiels couplés suivants :

$$\begin{cases} \langle j | V_c | \alpha \rangle - \sum_{i=1}^n \tilde{a}_i \langle j | V_c - V_c G_c^+ V_c | i \rangle = 0. \rightarrow (j = 1, \dots, N) (a) \\ \langle \beta | V_c | i \rangle - \sum_{j=1}^n \tilde{b}_j^* \langle j | V_c - V_c G_c^+ V_c | i \rangle = 0. \rightarrow (i = 1, \dots, N) (b) \end{cases} \quad \text{II-28}$$

En définissant alors la matrice carrée D de dimension N et les vecteurs colonnes  $V_\alpha$  et  $V_\beta$  dont les éléments sont respectivement :

$$\begin{cases} D_{ji} = \langle j | V_c - V_c G_c^+ V_c | i \rangle \\ (V_\alpha)_j = \langle j | V_c | \alpha \rangle \\ (V_\beta)_i = \langle i | V_c | \beta \rangle \end{cases} \quad \text{II-29}$$

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 (II-28a,b) peuvent être exprimés sous une forme matricielle :

$$\begin{cases} V_\alpha = D \tilde{a} \\ (V_\beta^*)^t = \tilde{b}^* D \end{cases} \quad \text{II-30a}$$

ou encore, en utilisant les propriétés algébriques des matrices:

$$\begin{cases} \tilde{a} = D^{-1} V_{\alpha} \\ \tilde{b}^* = (V_{\beta}^*)^t D^{-1} \end{cases} \quad \text{II-30b}$$

qui donnent les solutions pour les composantes  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j^*$  des états d'essais  $|\tilde{\psi}_{\alpha}^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_{\beta}^-\rangle$ . En substituant ces derniers dans (II-26) l'expression de l'amplitude de transition approchée,  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$  s'écrit :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle\beta|V_C|i\rangle \tilde{a}_i \tilde{b}_j^* \langle j|V_C|\alpha\rangle}{\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle \tilde{a}_i} \quad \text{II-31}$$

ou également :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\left[ (V_{\beta}^*)^t \cdot \tilde{a} \right] \left[ \tilde{b}^* \cdot V_{\alpha} \right]}{\tilde{b}^* D \tilde{a}} \quad \text{II-32}$$

qui s'écrit aussi à l'aide des relations (II-30a) :

$$\tilde{F}_{\beta\alpha} = (V_{\beta}^*)^t \cdot \tilde{a} = \tilde{b}^* V_{\alpha} \quad \text{II-33a}$$

en substituant les vecteurs  $\tilde{a}$  et  $\tilde{b}^*$  par leurs expressions (II-30b) dans cette dernière équation qui sera changée en remplaçant les éléments de la matrice  $D$  (II-29) nous obtenons alors :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle\beta|V_C|i\rangle (D^{-1})_{ij} \langle j|V_C|\alpha\rangle \quad \text{II-33b}$$

où  $(D^{-1})_{ij}$  désigne l'élément de la matrice  $D^{-1}$  inverse de la matrice  $D$  relative 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  $N$  finie.

# REFERENCES

- [1] J. Schwinger, *Phys. Rev.*, t. 72, 1947, p. 742.
- [2] B.A. Lippmann et J. Schwinger, *Phys. Rev.*, t. 79, 1950, p. 469. MR 39582 | Zbl 0039.42406
- [3] M. Moe et D.S. Saxon, *Phys. Rev.*, t. 111, 1958, p. 950. MR 103070 | Zbl 0085.43204.
- [4] E. Gerjuoy et D.S. Saxon, *Phys. Rev.*, t. 85, 1952, p. 704 et 939.
- [5] L. Mower, *Phys. Rev.*, t. 89, 1953, p. 947. MR 53596 | Zbl 0050.22707
- [6] S. Altshuler, *Phys. Rev.*, t. 89, 1953, p. 1278. Zbl 0050.22709
- [7] E. Gerjuoy et D.S. Saxon, *Phys. Rev.*, t. 94, 1954, p. 484. MR 64595
- [8] L. Mower, *Phys. Rev.*, t. 99, 1955, p. 1065. Zbl 0064.44704
- [9] M.C. Newstein, *Technical Report n° 4, Project DIC 6915, Massachusetts Institute of Technology, 1955.*
- [10] C. Joachain, *Bull. Cl. Sciences Acad. Roy. Belg.*, t. 48, 1962, p. 302. Zbl 0114.44406
- [11] Brendan M McLaughlin, Y. k. Thomas G Winterz et James F. McCann, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 30 1043–1059 (1997).

# Chapitre III

## **TRAITEMENT VARIATIONNEL DE SCHWINGER POUR L'EXCIATION**

*"Une expérience de physique n'est pas seulement l'observation d'un phénomène ; elle est en outre l'interprétation théorique de ce phénomène"*

*Pierre Duhem*



## III-1 INTRODUCTION

La compréhension des mécanismes de collisions atomiques par impact d'ions constitue l'intérêt majeur des chercheurs pour la mise à l'épreuve des méthodes théoriques et des modèles conçus pour étudier et tester ces processus de collisions. Ceci exigera une théorie fiable décrivant convenablement l'interaction des noyaux avec les électrons via la force Coulombienne à cause de sa longue portée . Lors d'une collision atomique, l'importance des mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) entre, par exemple une particule chargée et un atome dépend essentiellement de la vitesse de collision par rapport à la vitesse des électrons de la cible. En particulier, à haute vitesse de collision, les processus d'ionisation et d'excitation de la cible atomique sont dominants.

L'étude des processus d'excitation se produisant lors des collisions d'atomes par impact d'ions a reçu un intérêt considérable au cours de cette dernière décennie [1-7] .

Nous nous intéresserons, dans cette étude, à l'excitation d'un système hydrogénoïde par impact d'ions, aux vitesses intermédiaires. L'importance dans ce domaine de vitesses est de décrire correctement le processus d'excitation en termes de passage par des états intermédiaires pour de petites distances internucléaires [8], et la principale contribution à la transition va se produire aux petits angles ( $< 10^{-3}$  radian pour  $H^+ \rightarrow H$  à 50 KeV) [9], on peut considérer que le projectile décrit une trajectoire rectiligne par rapport à la cible, et traiter donc ce problème dans l'approximation eikonale.

## III-2 Les systèmes hydrogénoïdes

Les ions hydrogénoïdes sont les plus simples des édifices atomiques, ils ne possèdent qu'un seul électron, un ion hydrogénoïde est donc constitué d'un noyau N de charge  $+Ze$  et d'un électron de masse  $m_e$  et de charge  $-e$  ( $Z$  est le numéro atomique ou nombre de protons contenus dans le noyau de l'atome). La résolution de l'équation de Schrödinger permet de décrire rigoureusement les états quantiques de cet électron unique que l'on dénomme orbitales atomiques. L'utilisation des orbitales atomiques est à la base de la description de la structure électronique des atomes poly-électroniques. [10] .

Les systèmes hydrogénoïdes sont les seuls systèmes pour lesquels il est possible de déterminer les solutions exactes de l'équation de Schrödinger. Pour les systèmes les plus

complexes (plus de deux particules en interaction), on ne peut déterminer que des fonctions d'onde approchées.

On recherche donc les fonctions d'onde stationnaires  $\Psi_{el}(r, \theta, \varphi)$  de l'électron dans le référentiel atomique, où  $(r, \theta, \varphi)$  sont les coordonnées sphériques. On doit pour ce faire résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule mobile soumise à une énergie potentielle coulombienne attractive due au noyau :

$$H_{el} \Psi_{el}(r, \theta, \varphi) = E \Psi_{el}(r, \theta, \varphi) \quad \text{III-1}$$

L'opérateur  $H_{el}$  est la somme de l'opérateur  $T$  correspondant à l'énergie cinétique de l'électron et de l'opérateur  $V$  associé à l'énergie d'attraction électron-noyau :

$$H_{el} = T + V \quad \text{III-2}$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} T = \frac{-\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \\ V = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \end{array} \right. \quad \text{III-3}$$

Pour simplifier les expressions mathématiques et faire disparaître les constantes, on introduit les unités atomiques (u.a.) de longueur et d'énergie.

L'unité atomique de longueur correspond au rayon de la première orbite électronique du modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène. Elle porte le nom de Niels Bohr, en hommage à sa contribution à l'avènement de la mécanique quantique :

$$1 \text{ Bohr} = a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0,529 \text{ \AA} \quad \text{III-4}$$

L'unité atomique d'énergie fut nommée en l'honneur de Hartree, père et fils, qui contribuèrent de manière significative à l'avancement de la théorie de la structure électronique des atomes :

$$1 \text{ Hartree} = \frac{e^2}{4\pi a_0} = 4.359 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 27,21 \text{ eV} \quad \text{III-5}$$

Compte tenu de ce nouveau système d'unité, on peut réécrire l'opérateur hamiltonien de manière plus simple :

$$H_{el} = T + V = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z}{r} \quad \text{III-6}$$

### III-3 Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact :

La collision directe, est un cas particulier de l'amplitude de transition variationnelle pour plusieurs voies de réarrangement, quand  $V_i = V_f = V_c$  [9]. On raisonnera- pour cette étude théorique-dans le formalisme du paramètre d'impact qui sous-tend deux approximations :

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

Cette méthode, dite aussi « eikonale », est donc 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[11].

Dans l'étude d'excitation d'un ion hydrogénoïde T de masse  $M_T$  et de charge  $Z_T$  par impact d'un projectile nu (noyau) P de masse  $M_P$  et de charge  $Z_P$ , nous pouvons formaliser le problème en se plaçant dans le référentiel du laboratoire ayant une origine centrée sur la cible (l'atome-cible est au repos et le projectile se déplace à une vitesse  $\vec{v}$  constante le long d'une trajectoire rectiligne de paramètre d'impact  $\vec{\rho}$ ). De cette manière, il est possible de séparer le mouvement du projectile du mouvement de la cible. Le système est donc décrit par les coordonnées suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \\ \vec{z} = \vec{v} \cdot t \\ \vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \end{array} \right. \quad \text{III-7}$$

$\vec{R}$  : vecteur distance projectile-noyau cible.

$\vec{\rho}$  : 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.

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

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

Géométriquement, on représente le système collisionnel comme suit :

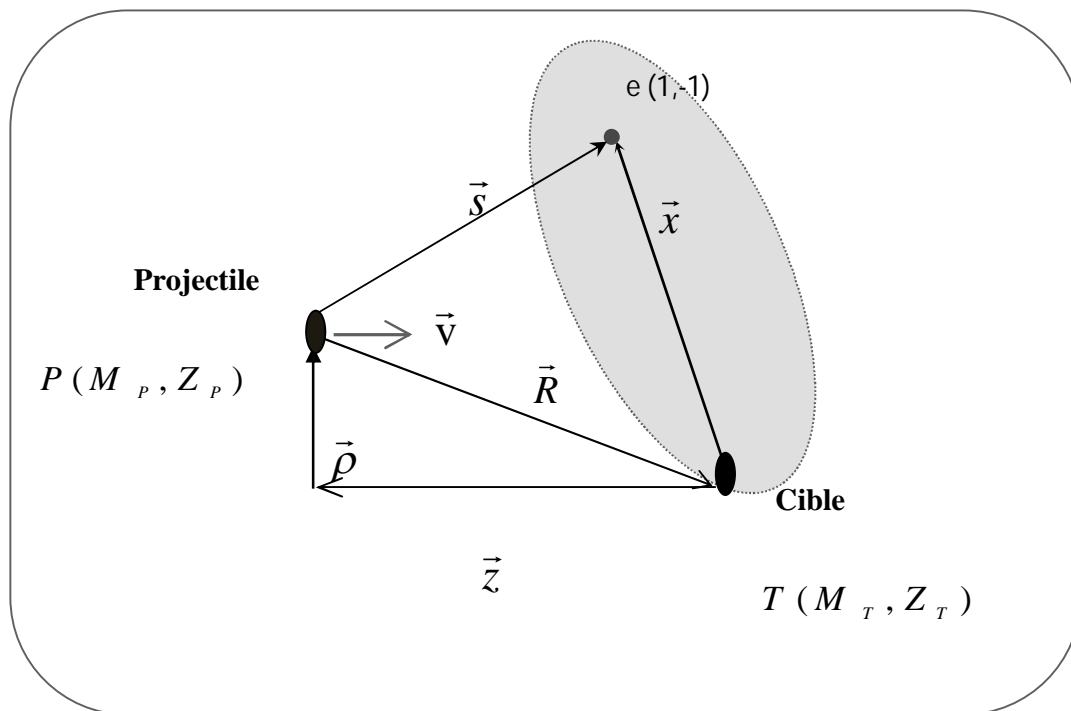


Fig. III-1 : Système collisionnel dans l'approximation Eikonale

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \tag{III-8a}$$

$H_P$  : le Hamiltonien décrivant le mouvement relatif du projectile par rapport au noyau de la cible :  $H_P = -\Delta_R / 2\mu$ . Dans le système du centre de masse projectile-cible le hamiltonien total du système est donné par la relation (I-2) où le hamiltonien des particules sans interaction  $H_c$  peut s'écrire :  $H_C = H_T + H_P$ . Sachant que  $H_T$  est le Hamiltonien atomique décrivant le mouvement non perturbé de la cible (en unité atomique), exprimé par :

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \quad \text{III-8b}$$

où  $\mu$  représente la masse réduite du système :

$$\mu = \frac{M_P(M_T + 1)}{M_P + M_T + 1} \quad \text{III.9}$$

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

$$V_C = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{S} \quad \text{III-10}$$

L'équation de Schrödinger eikonale résulte, en remplaçant la dérivation temporelle par celle spatiale ( par rapport à  $z$  ) dans l'équation de Schrödinger dépendant du temps. On obtient l'équation de Schrödinger de diffusion eikonale :

$$\left( -i v \frac{\partial}{\partial z} + H_T + V_C \right) |\psi(z)\rangle = 0 \quad \text{III-11}$$

Pour résoudre l'équation (III-6), considérons l'équation de Schrödinger eikonale de la cible (sans interaction):

$$\left( -i v \frac{\partial}{\partial z} + H_T \right) |v(z)\rangle = 0 \quad \text{III-12}$$

$|v(z)\rangle$  est un vecteur propre de  $H_T$ , exprimé dans la représentation de coordonnées d'électron de la cible  $\{|\vec{x}, z\rangle\}$  par :

$$\langle \vec{x}, z | v(z) \rangle = e^{-i \frac{E_v}{v} z} \varphi_v(\vec{x}) \quad \text{III-13}$$

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

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \quad \text{III-14}$$

L'équation (III-12) devient alors :

$$\left( -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T + V_{\text{int}} \right) |v(z)\rangle = 0 \quad \text{III-15}$$

Les états asymptotiques eikonales, solutions de l'équation (III-15), sont celles de l'équation (III-12)  $\{|v(z)\rangle\}$  multipliées par un facteur de phase, dite « de coulomb »  $i(Z_p(Z_T - 1)/v) \ln(vR - vz)$ , ceci implique que l'amplitude de transition est multipliée par un facteur de phase, dépendant du paramètre d'impact  $\bar{\rho}$ , donné par  $\rho \frac{2iZ_p(Z_T - 1)}{v}$  qui peut être négligé dans le calcul de la section efficace totale. Par contre, il se réintroduit dans le calcul de la section efficace différentielle.

Le potentiel responsable de l'excitation, prenant les états asymptotiques eikonales, est par conséquent:

$$\begin{aligned} V &= V_C - V_{\text{int}} \\ &= V_C - \frac{Z_p(Z_T - 1)}{R} \\ &= Z_p \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right) \end{aligned} \quad \text{III-16}$$

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

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle = 0 \quad \text{III-17a}$$

$$\left\{ iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | = 0 \quad \text{III-17b}$$

Sachant que les états  $|\alpha(z)\rangle$  et  $\langle \beta(z) |$  sont respectivement les états initial et final de la cible. Ils sont aussi des solutions de (III-12). Nous pouvons résoudre les deux équations différentielles (III-17a, b) avec leurs conditions initiales, en invoquant les opérateurs de Green de la cible, solutions des équations suivantes :

$$\left( \mp iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T \right) G_T^{\pm}(z - z') = -\delta(z - z') \quad \text{III-18}$$

avec les conditions initiales suivantes :

$$G^+(z) = 0 \quad \text{si } z < 0 \quad \text{III-19a}$$

$$G^-(z) = 0 \quad \text{si } z > 0 \quad \text{III-19b}$$

En résolvant l'équation (III-13), on trouve :

$$\langle v(z') | G_T^+(z - z') = -\frac{i}{v} \langle v(z) | \theta(z - z') \quad \text{III-20a}$$

$$G_T^-(z - z') | v(z') \rangle = \frac{i}{v} \theta(z - z') | v(z) \rangle \quad \text{III-20b}$$

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

Les états de diffusion, solutions d'équations (III-12a, b),  $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$  et  $\langle \psi_\beta^-(z) |$  vérifient donc les équations, dite « les équations eikonales de Lippmann-Schwinger », suivantes[12]:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z - z') V(z') |\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad \text{III-21a}$$

$$\langle \psi_\beta^-(z) | = \langle \beta(z) | + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z - z') V(z') \langle \psi_\beta^-(z') | \quad \text{III-21b}$$

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

$$a_{\beta\alpha}(\bar{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle \beta(z) | \psi_\alpha^+(z) \rangle \quad \text{III-22a}$$

$$a_{\beta\alpha}(\bar{\rho}) = \lim_{z \rightarrow -\infty} \langle \psi_\beta^-(z) | \alpha(z) \rangle \quad \text{III-22b}$$

$$a_{\beta\alpha}(\bar{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle \psi_\beta^-(z) | V | \psi_\alpha^+(z) \rangle \quad \text{III-22c}$$

où la notation  $\langle | \rangle$  indique l'intégration sur les coordonnées électroniques. Injectons l'expression (III-16a) de  $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$  dans (III-17a), et en utilisant (III-15a), on obtient :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \beta(z) | V | \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle \quad \text{III-23a}$$

de façon analogue, nous obtenons :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | V | \alpha(z) \rangle \quad \text{III-23b}$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | V \left\{ | \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^{+}(z-z') V | \psi_{\alpha}^{+}(z') \rangle \right\} \rangle \quad \text{III-23c}$$

En utilisant les relations (III-23a, b, c), on établit la formule variationnelle eikonale de l'amplitude de transition en  $\vec{\rho}$  qui est analogue à l'expression quantique (III-19) :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left( -\frac{i}{v} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \beta(z) | V | \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle \left( -\frac{i}{v} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | V | \alpha(z) \rangle}{\left( -\frac{i}{v} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | V \left\{ | \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^{+}(z-z') V | \psi_{\alpha}^{+}(z') \rangle \right\} \rangle} \quad \text{III-24}$$

En écrivant :

$$(v | \Omega | v') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle v(z) | \Omega | v'(z) \rangle \quad \text{III-25}$$

où  $\Omega$  est un opérateur, et où la notation  $( | | )$  indique l'intégration sur les coordonnées électroniques et la coordonnée  $z$ . On peut écrire symboliquement une autre forme de l'amplitude de transition eikonale en  $\vec{\rho}$ .

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} \frac{(\beta | V | \psi_{\alpha}^{+})(\psi_{\beta}^{-} | V | \alpha)}{(\psi_{\beta}^{-} | V - V G_T^{+} V | \psi_{\alpha}^{+})} \quad \text{III-26}$$

De façon similaire à l'étude quantique (chapitre II), on peut vérifier que l'expression (III-21) de l'amplitude de transition pour un paramètre d'impact donné  $\vec{\rho}$  est stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes. La forme approchée s'écrit alors :



$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left( -\frac{i}{v} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha) \quad \text{III-27}$$

où  $(D^{-1})_{ij}$  est l'élément  $(i, j)$  de la matrice  $D^{-1}$ , inverse de la matrice  $D$ , définie par les éléments :

$$D_{ji} = \left( j | V -VG_T^+V | i \right) \quad \text{III-28}$$

### III.4 Amplitude de transition eikonale et la section efficace totale d'excitation :

Nous venons de déterminer l'amplitude de transition dans le formalisme du paramètre d'impact (III-20). Par la suite, l'amplitude de transition eikonale et la section efficace totale seront exprimées pour un processus d'excitation d'une cible atomique par impact de proton, prenant les développements des états de diffusion approchés  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$  sur une base constituée seulement par les états liés de la cible en ignorant l'inclusion des états de capture sur le projectile parmi les états intermédiaires de transition.

#### III.4.1 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 ( $\vec{k}_\alpha$  et  $\vec{k}_\beta$  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 :

$$\begin{aligned} T_{\beta\alpha} &= \langle\vec{k}_\beta| \otimes \langle\beta| V |\psi_\alpha^+\rangle & (a) \\ &= \left[ \langle\vec{k}_\beta| \otimes \langle\beta| \right] V \left[ |\psi_\alpha^{+E}\rangle \otimes |\vec{k}_\alpha\rangle \right] & (b) \\ &= \langle\vec{k}_\beta, \beta | V | \vec{k}_\alpha, \psi_\alpha^{+E}\rangle & (c) \end{aligned} \quad \text{III-29}$$

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

Les équations (III-24b, 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 :

$$T_{\beta\alpha} = \int d^3\vec{R} d^3\vec{x} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \varphi_{\beta}^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \psi_{\alpha}^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad \text{III-30}$$

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

$$\vec{q} = \vec{k}_{\alpha} - \vec{k}_{\beta} \quad \text{III-31}$$

Il peut s'écrire à l'aide de ses composantes longitudinale et transversale par rapport à la vitesse relative tel que :

$$\vec{q} = q_v \vec{v} + \vec{\eta} \quad \text{III-32}$$

La conservation de l'énergie

$$\frac{k_{\alpha}^2}{2\mu} + \varepsilon_{\alpha} = \frac{k_{\beta}^2}{2\mu} + \varepsilon_{\beta} \quad \text{III.33}$$

$\varepsilon_{\alpha}$  et  $\varepsilon_{\beta}$  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  $\theta$  (entre les vecteurs  $\vec{k}_{\alpha}$  et  $\vec{k}_{\beta}$ ) est petit et l'énergie transférée est petite devant l'énergie du projectile, alors la composante longitudinale du moment transféré s'exprime :

$$q_v \approx \frac{\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\alpha}}{v} \quad \text{III.34}$$

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

$$\vec{q} \cdot \vec{R} = \frac{\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\alpha}}{v} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad \text{III.35}$$

Substituons l'expression approchée (III-30) 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 (III.25), on obtient la forme suivante :

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

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} \left(\beta|V|\psi_\alpha^+\right) \quad \text{III.36}$$

Finalemnt, pour  $\alpha \neq \beta$ , on peut écrire l'amplitude de transition quantique (III.31) approchée en fonction de l'amplitude de transition variationnelle, exprimée dans le formalisme du paramètre d'impact, comme suit :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = i v \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} \rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{v}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad \text{III.37}$$

Remarquons que dans cette dernière expression, la contribution du potentiel inter-agrégat (III.14) qui se traduit par un facteur de phase  $\rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{v}}$  dépendant du paramètre d'impact a été réintroduite [12].

### III-4-2 Sections efficaces eikonales :

La probabilité indépendante du temps, pour qu'un processus particulier de collision s'effectue, est représentée par la section efficace de diffusion correspondante. Elle caractérise le procédé de diffusion et elle est bien définie dans les expériences de la réaction (e, 2e). L'interaction effective entre l'électron et la cible dépend fortement de l'énergie de l'électron incident, comme elle dépend de l'angle de diffusion et la nature du processus [13].

La section efficace différentielle de diffusion  $d\sigma/d\Omega$  est définie comme étant le nombre de particules diffusées dans l'élément d'angle solide  $d\Omega$  pendant l'unité de temps et par unité de courant de probabilité ("flux" de particules incidentes) [14]. Elle est donnée par la relation :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_\alpha}{k_\beta} \left| T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) \right|^2 \quad \text{III.38}$$

avec  $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\varphi$ .

Dans le cas d'un faible transfert d'impulsion longitudinal ( $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$ ), l'expression (III.38)

devient :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad \text{III.39}$$

Pour accéder à la section efficace totale, il est utile de déterminer la section efficace différentielle en  $\eta$ , la composante transversale de la quantité de mouvement transférée.

Par conséquent, la section efficace différentielle s'écrit :

$$d\sigma_{\beta\alpha} = d\varphi_\beta \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad \text{III.40}$$

En différentiant  $\vec{q}^2$  calculé à partir des expressions (III-26, 27), et en se basant sur un cas de faible transfert d'impulsion  $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$ , on peut écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \quad \text{III-41}$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\eta \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi v} \right|^2 \quad \text{III.42}$$

En remplaçant maintenant  $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$  par son expression (III.37), et en appliquant la transformée de Fourier à deux dimensions, on aura :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad \text{III.43}$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad \text{III.45}$$

# REFERENCES

- [1]-R. Gayet et J. Hanssen *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 25 825-37 (1992).
- [2]- R. Gayet and J. Hanssen *Nucl. Instrum, Metlt. Phys. Res. B* 86 52-61 (1994).
- [3]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 2007.
- [4]- M. Bouamoud, *Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I, (1988), Texte en français.*
- [5]- R. Gayet et M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 42(1989) 515-522.
- [6]- B. Lasri, *Thèse de Doctorat, Institut de Physique, Université de Tlemcen, (2007), Texte en français.*
- [7]- B. Lasri , M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal. Volume20, Novembre 2004, p. 12 -1.*
- [8] - A. Benyahia , *Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (2003).*
- [9]-M. Bouamoud , « *Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif* » *Thèse de doctorat d'état es sciences , Université de Bordeaux-I (1988) , Texte en français.*
- [10]-A.Rakrak..*Mémoire de Magistère (04 juillet2009).Université Dr Moulay tahar Saida.*
- [11]F.Khelfaoui. *Mémoire de Magistère (2009)Université DrMoulay tahar Saida.*
- [12] - R. K. Janev et A. Salin, *ann. Phys. N.y* 73 (1972) 136-155
- [13]-Sahlaoui.*Thèse de Doctorat(03juin2012)Application du formalisme variationnel à l'ionisation de la molécule d'eau*
- [14]-A. Messiah , *Mécanique quantique , Dunod, tome 2 (1995).*

---

# Chapitre IV

## EVALUATION DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION VARIATIONNELLE APPROCHEE

*"Le physicien peut aussi, dans le silence de son laboratoire et de son cabinet, exercer des fonctions patriotiques; il peut espérer par ses travaux diminuer la masse des maux qui affligent bonheur par les routes nouvelles qu'il s'est ouvertes "*

*Lavoisier*

La détermination de l'amplitude de transition variationnelle approchée  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  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 des éléments de la base  $\{|v\rangle\}$  qui sont solutions de l'équation de Schrödinger eikonale avec l'Hamiltonien  $H_T$  de la cible. Rappelons que la notation  $(| |)$  signifie que l'intégration est effectuée sur la coordonnée  $z$  ainsi que sur les coordonnées électroniques.

## IV.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 :

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

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

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

où :

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

$\varepsilon_i$  et  $\varepsilon_j$  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]:

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

où  $m_i$  et  $m_j$  représentent respectivement les nombres quantiques magnétiques des états  $|\varphi_i\rangle$  et  $|\varphi_j\rangle$  et  $\varphi_{\bar{R}}$  est l'angle azimutal relatif au paramètre d'impact  $\bar{\rho}$ . Certaines propriétés de symétrie des éléments  $W_{ij}(\bar{\rho}, z)$ ,  $(i|V|j)$  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.

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

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

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

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

Dans l'expression (IV-5d), les indices  $-i$  et  $-j$ , signifient respectivement le changement simultané de  $m_i$  et  $m_j$  en  $-m_i$  et  $-m_j$ . Posons :

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

il en résulte :

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

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

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

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

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

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



où  $G_{ij}^*(x, y)$  est la fonction conjuguée de  $G_{ij}(x, y)$ . L'expression (IV-7) devient:

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

où l'intégrale sur l'intervalle  $]-\infty, +\infty[$  est réduit à une intégration sur l'intervalle  $[0, +\infty[$ .

Pour calculer ensuite  $G_{ij}(0, +\infty)$  dans l'expression (IV-10), nous avons divisé l'intervalle d'intégration sur  $z$  en deux intervalles:

- $[0, \tilde{z}_{ij}[$  aussi petit que possible où l'intégration est effectuée numériquement .
- $[\tilde{z}_{ij}, +\infty[$  dans lequel l'intégration est analytique.

Ce choix des intervalles vient du fait, pour une valeur donnée du paramètre d'impact  $\rho$  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].

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

Notons que la dépendance en  $\rho$  est écrite explicitement dans l'élément  $W_{ij}(\rho, z)$ . Nous avons alors :

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

où

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

est calculée numériquement et

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

est déterminée analytiquement [3].

## IV.2 Calcul des éléments de matrice de Born-II:

Nous avons vu précédemment que l'amplitude  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  comme  $T_{\beta\alpha}$  est stationnaire par rapport à de faibles variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes. Cependant, comme nous l'avons précisé plus haut, le sous-espace des états engendré par les bases  $\{|i\rangle\}$  et  $\{|j\rangle\}$  doit être bien choisi pour décrire convenablement les états de diffusion.

Par ailleurs, 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 :

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

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

En substituant l'expression de l'opérateur  $G_T^+(z, z')$  (IV- 15) et en injectant deux relations de complétude dans l'élément de matrice  $(i|V G_T^+ V|j)$ , on obtient alors :

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

où  $\left[ \sum + \int \right]_v$  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 :

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

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

En définissant maintenant les régions asymptotiques par les valeurs  $\tilde{z}_{iv}$  et  $\tilde{z}_{vj}$  conformément à l'expression (IV-11), deux cas peuvent être considérés :

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
H_{ij}^v(-\infty, +\infty) = & G_{vj}^*(0, +\infty) \left\{ (-I)^{l_v+l_j+m_v-m_j} G_{iv}(0, +\infty) + (-I)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{iv}^*(0, +\infty) \right\} \\
& + H_{ij}^v(0, +\infty) + (-I)^{l_i+l_j+m_i-m_j} H_{ij}^{v*}(0, +\infty)
\end{aligned} \quad \text{IV-20}$$

On définit la fonction  $H_{ij}^v(x, y)$  comme suit :

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

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

### IV.3 Méthode d'intégration :

Dans le calcul des intégrales numériques, pour évaluer les sections efficaces totales de diffusion, nous avons utilisé la méthode d'intégration de Simpson. Cette méthode repose sur le principe d'interpolation de la fonction  $f$  à intégrer entre  $a$  et  $b$ , bornes d'intégration, par une fonction polynôme de second ordre sur les valeurs  $a$ ,  $b$  et  $(a+b)/2$ . Ceci nécessite que l'intervalle d'intégration soit divisé en sous-intervalles égaux dont le nombre doit être paire. 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.

en utilisant une subdivision de pas  $h = (b-a)/n$ , où  $n$  est un entier positif, la formule générale de Simpson, pour une subdivision en  $n$  intervalles est:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{6} \left( \sum_{k=1}^n f \left( a_{k-1} + 4f \left( \frac{a_{k-1} + a_k}{2} \right) + f(a_k) \right) \right) \quad \text{IV-22}$$

où  $a_k = a + kh$ .

Dans le programme numérique utilisé, l'intervalle d'intégration total est divisé en plusieurs intervalles. Le passage d'un intervalle à un autre est 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 l'expression (III-39), nous avons calculé la probabilité transition  $(\alpha \rightarrow \beta) |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2$  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'intégrale sur  $[0, +\infty[$ , de nous limiter à l'intervalle d'intégration  $[0, \rho_{\max}]$ . L'équation (III-41) se réduit donc à :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{\rho_{\max}} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad \text{IV-23}$$

Nous avons divisé cet intervalle en sous-intervalles, ayant même amplitude, pour lesquels nous avons déterminé la valeur de la fonction  $\rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2$  aux bornes afin d'utiliser ensuite une intégration par la méthode de Simpson.

Tous ces calculs ont été simplifiés grâce aux comportements des éléments de matrice qui nous intéressent vis-à-vis des charges respectives  $Z_p$  et  $Z_T$  du projectile et de la cible. On montre dans ce qui suit que le modèle adapté peut toujours se réduire à la collision Proton-Hydrogène avec un paramètre d'impact réduit et une vitesse réduite.

#### IV.4 Lois d'échelle :

Dans une collision, on a démontré, dans le chapitre précédent, que le potentiel responsable de l'excitation de la cible entre un ion hydrogénoïde T, de charge nucléaire  $Z_T$  avec un ion nu P de charge  $Z_p$  T est :

$$V = Z_p \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \right) \quad \text{IV-24}$$

Quand on écrit explicitement les éléments de matrice Born-I et Born-II conformément aux expressions (IV-2) et (IV-17a,b), nous remarquons qu'il dépendent des éléments donnés par l'expression (IV-3) dont les fonctions d'onde  $\varphi_i(\vec{x})$  et  $\varphi_j(\vec{x})$  sont celles d'une cible hydrogénoïde de charge  $Z_T$ . Définissons  $B_{ij}^{[K]}(Z_p, Z_T, v, \rho)$ , le  $k^{\text{ème}}$  ordre de l'élément de matrice de Born pour l'amplitude de transition, comme suit :

$$B_{ij}^{[K]}(Z_p, Z_T, v, \rho) = -\frac{i}{v} \left( i \left| V \prod_{i=0}^{K-1} (G_T^+ V) \right| j \right) \quad \text{IV-25}$$

## IV.5 Lois d'échelle sur la charge $Z_p$ :

On a déterminé, dans le chapitre précédent, la forme approchée de l'amplitude de transition pour un paramètre d'impact donné  $\vec{\rho}$ . Elle s'écrit :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left( -\frac{i}{v} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha) \quad \text{IV-26}$$

où

$$D_{ji} = \left( j | V - V G_T^+ V | i \right) \quad \text{IV-27}$$

Dans cette expression, seul le potentiel d'interaction  $V$  dépend de la charge  $Z_p$  du projectile. Alors, pour chaque couple d'état électronique hydrogénoïde de la cible

$(|i\rangle, |j\rangle)$ , les lois d'itération suivantes peuvent être établies pour l'élément de matrice de Born d'ordre  $K$  (Born-K) [5].:

$$B_{ij}^{[K]}(Z_p, Z_T, v, \vec{\rho}) = Z_p^K B_{ij}^{[K]}(1, Z_T, v, \vec{\rho}) \quad \text{IV-28}$$

On peut déduire les relations de proportionnalité suivantes :

$$(\beta | V | i) \propto Z_p \quad \text{et} \quad (j | V | \alpha) \propto Z_p \quad \text{IV-29}$$

$$(j | V G_T^+ V | i) \propto Z_p^2 \quad \text{IV-30}$$

quand  $Z_p$  est assez grand, la matrice  $D$  est dominante par le second terme de Born  $(j | V G_T^+ V | i)$ . En effet,  $D^{-1}$  devient proportionnelle à  $Z_p^{-2}$  :

$$\lim_{Z_p \rightarrow +\infty} (D^{-1})_{ij} \propto Z_p^{-2} \quad \text{IV-31}$$

Des expressions (IV-42), (IV-45) et de (IV-46), on déduit alors pour l'amplitude de transition  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  :

$$\lim_{Z_p \rightarrow +\infty} \tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = C^{ste} \quad \text{IV-32}$$

Il en résulte pour l'amplitude de Schwinger  $T_{\beta\alpha}$  :

$$\lim_{Z_p \rightarrow +\infty} T_{\beta\alpha} = C^{ste} \quad \text{IV-33}$$

Ce comportement de l'amplitude de transition est connu sous le nom « phénomène de saturation » de la section efficace d'excitation quand la charge du projectile augmente. Il a été indiqué, pour la première fois par B. Brendlé et R. Gayet en 1985 [6].

## REFERENCES

- [1 ]-J.Rangama " *Ionisation et excitation de l'atome de lithium par impact de particules chargées rapides*", *Thèse de Doctorat Es Sciences, CAEN/BASSE-NORMANDIE (1995)*.
- [2]-L. Adoui, " *Mécanismes d'excitation d'ions Ar+16 en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire*", *Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995)*.
- [3]-B. Lasri, *Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (1998)*.
- [4]-B H Bransden, D P Dewangan and C J Noble 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 3563-3568.
- [5]-R. Gayet and M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **42** .515-522 (1989)
- [6]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, *Phys. Rev. Lett.* **54**. 2007(1985).

---

# Chapitre V

## APPLICATION A L'EXCITATION DE L'ION $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$ PAR IMPACT DE DIVERS NOYAUX

*"Une expérience de physique ne peut jamais condamner une hypothèse isolée, mais seulement tout un ensemble théorique"*

*Pierre Duhem*



## V-1. Introduction:

Le développement de certains champs de la physique, et notamment de l'étude de l'irradiation de la matière biologique par les ions lourds par exemple, a rendu nécessaire le traitement de l'excitation par un projectile neutre notamment la dépendance des sections efficaces, non plus seulement en fonction de l'énergie incidente, mais aussi de la charge excitatrice. Dans ce domaine de vitesses intermédiaires. Ce phénomène reste le mal connu [1].

Le calcul de la section efficace totale de diffusion présente l'intérêt l'intérêt majeur des études faites sur les processus de collisions. En effet, plusieurs chercheurs se sont penchés sur le problème de diffusion multiple. Ce n'est qu'en 1975 que Park et ses collaborateurs ont publié les résultats expérimentaux [2], concernant des mesures de la section efficace totale de diffusion obtenues par la technique appelée « Crossed Beam ».

L'observation expérimentale du processus d'excitation d'un ion lourd par des partenaires excitateurs neutres a été réalisée grâce à l'utilisation d'un faisceau d'ions lourds. Il est de coutume, du point de vue expérimental, d'appeler projectile l'ion incident et cible le partenaire neutre [1]. La production des ions multichargés est maintenant parfaitement maîtrisée. La technique consiste à épouser le faisceau dans une mince feuille ( $1\mu$ ) d'un matériau léger (carbone, béryllium) et sélectionner l'état de charge désiré à l'aide d'un gros aimant d'analyse ( $B \approx 1$  à 2 Teslas). Les ions traversant la feuille subissent des variations continues d'état de charge par capture et ionisation au cours de collisions successives, mais il apparaît très vite un équilibre caractérisé par une proportion invariable de différents états de charge [3].

Expérimentalement il a été observé que les sections efficaces totales d'excitation des ions héliumoides et hydrogénéoides entrant en collision avec des atomes neutres ont tendance à se saturer quand la charge nucléaire des atomes augmente : Wohrer et al(1986) [4], Xiang-yuang Xu et al(1988) [5]. Ce phénomène a été modélisé théoriquement par Brendlé et Gayet (1985) [6], Bouamoud (1988) [7], Bouamoud et Gayet (1989) [8], Lasri, Bouamoud, Gayet (2004) [9].

Les procédures variationnelles basées sur le principe variationnel de Schwinger demeurent toujours un outil d'investigation très puissant pour étudier les mécanismes

d'excitation atomique par impact d'ions. Dans le formalisme du paramètre d'impact cette approche prédit avec succès le phénomène de saturation des sections efficaces totales d'excitation des ions par de projectiles neutres aux vitesses d'impact intermédiaires [4] [6-9]. Expérimentalement, les sections efficaces totales ont été déduites à partir de celles utilisées pour la production de la raie Lyman des rayons X pour des projectiles héliumoïdes et hydrogénoïdes.

Dans ce chapitre, nous nous sommes fixés comme objectif l'étude d'excitation de l'ion héliumoïde ( $\text{Ca}^{18+}$ ) entrant en collision avec divers atomes de charges allant de 1 jusqu'à 56 incluant celles des gaz rares (He, Ne, Ar, Kr, Xe).

Dans plusieurs approches théoriques, et lors de l'évaluation de l'amplitude de diffusion il y a deux sources principales d'erreurs : soit dans le choix de la méthode d'approximation adapté au calcul ou bien dans l'utilisation d'une fonction d'onde d'entrée imprécise pour décrire la cible. Récemment, le modèle variationnel basé sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger s'est avéré couronné de succès avec une bonne estimation de sections efficaces totales d'excitation des niveaux  $n=2$  et  $n=3$  de l'atome d'hydrogène par impact de protons aux énergies intermédiaires [10]. Une telle méthode présente l'avantage majeur d'être indépendante de la normalisation choisie pour les fonctions d'ondes qui sont seulement requises dans la région d'interaction. Malgré ces particularités favorables, la méthode de Schwinger était d'habitude appliquée seulement à la diffusion élastique mais rarement au calcul de sections efficaces d'excitation atomique par impact d'un électron.

Rappelons d'abord que l'amplitude de transition variationnelle de Schwinger est stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion  $|\Psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\Psi_\beta^-|$  autour de leurs valeurs exactes. D'autre part, une mauvaise évaluation de l'opérateur de Green  $G_T^+$  signifie une mauvaise évaluation des éléments de matrice de second ordre  $(i|V G_T^+ V|j)$  qui entraîne directement des erreurs fatales sur l'amplitude de transition.

## V-2. Choix du partenaire excité (projectile):

Le choix d'un ion incident à deux électrons plutôt que d'un ion hydrogénoïde pour tester le processus de simple excitation tient compte dans notre cas précis, autant de la volonté de mesurer les sections efficaces des processus doubles impliqués telle la double excitation, que du désir, déjà évoqué, de déterminer expérimentalement la section efficace du processus « concurrent » de capture-ionisation. Nous pouvons en effet voir qu'il n'est pas possible dans le cas d'un projectile hydrogénoïde de déterminer si l'état final excité  $nl$ , se désexcitant par l'émission d'une raie de type hydrogénoïde  $nl \rightarrow 1s$ , a été peuplé par l'un ou l'autre de ces deux processus. L'existence de règles de sélection sur l'excitation (non retournement de spin pour les transitions de type électrique), lève en revanche cette indétermination dans le cas d'un ion incident à deux électrons. Remarquons en effet que la simple excitation peuple, à partir de l'état fondamental singulet,  $1s^2$  ( $^1S_0$ ), essentiellement des états singlets, là où le processus de capture-ionisation peuplera statistiquement les composantes singulets et triplets des différents états excités.

Une méthode expérimentale, bien adaptée à la mesure de ces sections efficaces est la spectroscopie X des états peuplés lors de la collision. Les différents rapports de branchement (radiatif ou Auger) sont en effet connus avec une bonne précision dans le cas des états  $1s\ nl$  ou  $nl$  d'un ion à deux électrons.

## V-3. Excitation de l'ion $\text{Ca}^{18+}$ ( $1s^2$ ):

L'effet de saturation est examiné et modélisé pour l'excitation de l'ion  $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$  entrant en collision avec diverses cibles atomiques gazeuses où les charges varient entre 1 et 56 parmi elles celles de (He, Ne, Ar, Kr, Xe) à une énergie de 8.6 Mev/amu, en appliquant l'approche variationnelle de Schwinger. Dans notre traitement théorique les noyaux de ces cibles gazeuses au repos dans le repère du laboratoire représentent les projectiles excitateurs.

L'expérience a été réalisée au laboratoire Lawrence Berkeley, superHILAC, California, Etats Unis [11].

Dans notre travail, le modèle adopté pour examiner le processus d'excitation de l'ion  $\text{Ca}^{18+}$  par impact d'atomes neutres est 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 de 5 états ( $1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}$ ) notée Schw55 afin d'aboutir à une bonne représentation du propagateur  $G_T^+$  qui va nous mener sûrement à une description plus précise et assez complète de ce processus. Tous les résultats obtenus (sections efficaces totales calculées de ces approximations) ont été comparés aux données expérimentales Xiang Yuan Xu et ses collaborateurs [11].

Pour décrire l'excitation de l'ion héliumoïde  $\text{Ca}^{18+}$  on suppose que l'électron passif se comporte comme un écran par rapport à l'autre, réduisant ainsi la charge du noyau à  $Z_T=19$ . Dans ce cas, on est en présence d'une excitation d'une cible hydrogénoïde de charge nucléaire  $Z_T$  par un projectile de charge  $Z_P$ . Nous avons d'abord testé la méthode en représentant les états de diffusion  $|\Psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\Psi_\beta^-|$  respectivement par les états initial et final de la transition considérée, les sections efficaces qui en résultent sont notées Schw-Born. Donc la transition  $(1s^2) \rightarrow (1s, nl)$  se réduit à l'écriture  $1s \rightarrow nl$ .

En tenant compte des simplifications introduites par les lois d'échelle, tous les calculs concernant les sections efficaces totales d'excitation ont été réalisés pour une collision proton-atome d'hydrogène mais à une vitesse réduite  $u = \frac{v}{Z_T}$  égale à 1 a.u et pour un paramètre d'impact réduit  $\gamma = Z_T \rho$ .

Pour ce faire, le programme de calcul a été réalisé en Fortran 77 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  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\bar{\rho})$  donnée par la relation (II-24). Par conséquent l'obtention des sections efficaces totales d'excitation après intégration par la méthode du Simpson sur le paramètre d'impact  $\rho$ .

En considérant  $B_1$  et  $B_2$  deux ensembles de base, alors les cinq états de base utilisés dans l'excitation au niveau  $n=2$  sont  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$ . La matrice  $D$  à inverser 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.

$\zeta$  : 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 pour une matrice de  $5 \times 5$ , qui nécessiterait le calcul de 25 éléments, ne nécessite plus que le calcul de 11 éléments. Ceci nous a permis un gain énorme du temps de calcul machine.

Soulignons que dans ces calculs tout le spectre discret des états de la cible a été introduit ainsi que celui du continuum.

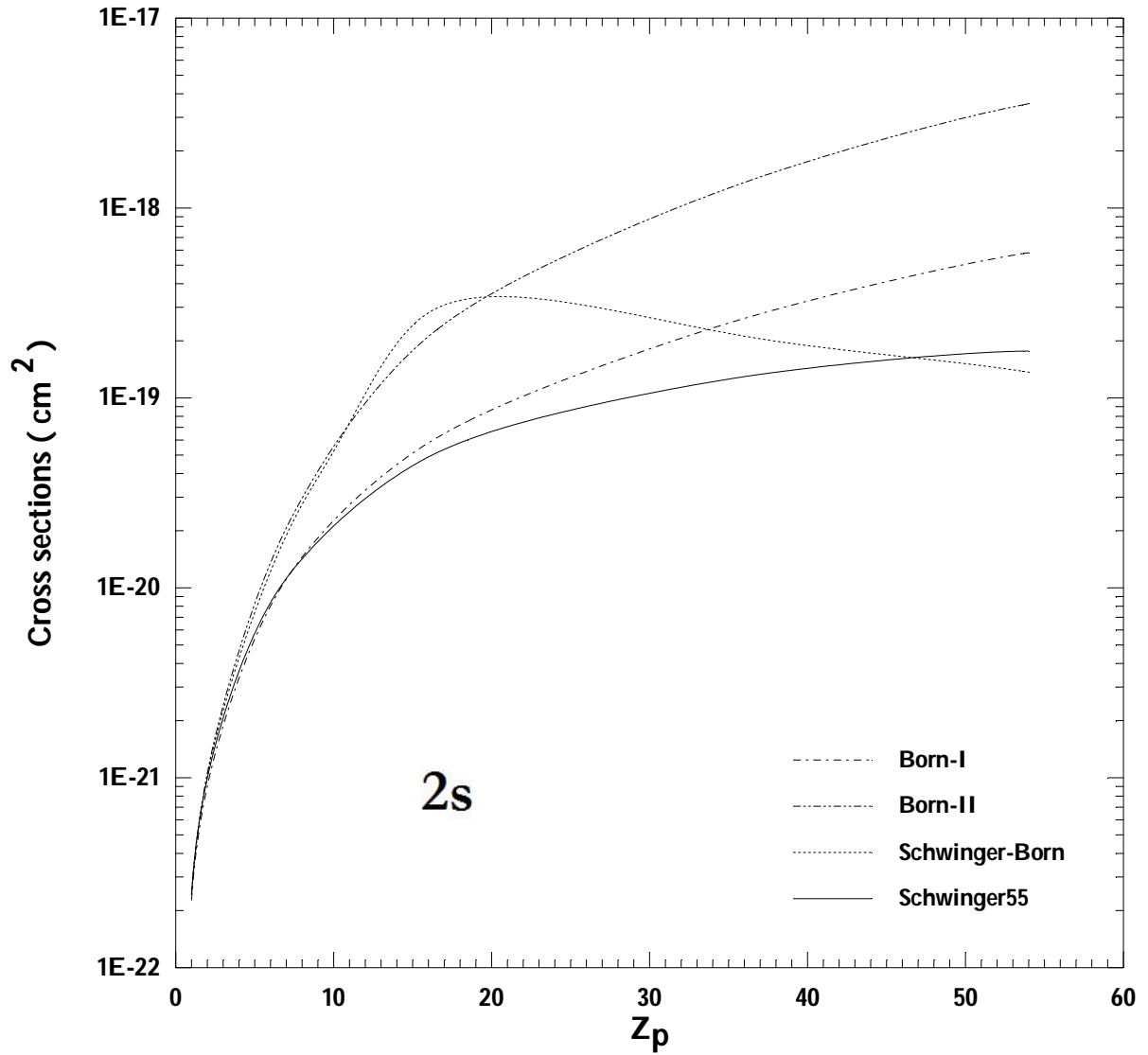
Les figures (V- 1 à 3) ainsi que les tableaux (V- 1 à 3) reproduisent respectivement les sections efficaces totales d'excitation aux niveaux  $2s, 2p, n=2$ , de l'ion héliumöide  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) par impact de noyaux de charges  $Z_p$  obtenues par les différentes approximations qui découlent de la procédure théorique du principe variationnel de Schwinger: l'approximation de Born au premier ordre (Born I), du deuxième ordre (Born II) ainsi que l'approximation de Schwinger-Born (Schw-B), l'approximation de Schwinger à 5 états (Schw55).

Sur la figures (V-3), sont représentés les résultats expérimentaux de Xiang Yan Xu et ses collaborateurs [11 relatifs aux transitions  $1s \rightarrow 2s, 1s \rightarrow 2p$  et  $n=2$ .

### V-3.1. Excitation à l'état 2s du $\text{Ca}^{18+}$ ( $1s^2$ ):

*Tableau V-1: Section efficace totale d'excitation à l'état 2s ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) à une énergie de 8.6 MeV/amu en fonction de la charge du projectile ( $Z_p$ ).*

$Z_p$	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw-55
1	$2.26415 \cdot 10^{-22}$	$2.44426 \cdot 10^{-22}$	$2.42735 \cdot 10^{-22}$	$2.40732 \cdot 10^{-22}$
2	$9.05661 \cdot 10^{-22}$	$1.06297 \cdot 10^{-21}$	$1.03714 \cdot 10^{-21}$	$9.96698 \cdot 10^{-22}$
7	$1.10943 \cdot 10^{-20}$	$2.06733 \cdot 10^{-20}$	$1.88892 \cdot 10^{-20}$	$1.12042 \cdot 10^{-20}$
8	$1.44906 \cdot 10^{-20}$	$2.96354 \cdot 10^{-20}$	$2.75341 \cdot 10^{-20}$	$1.41902 \cdot 10^{-20}$
10	$2.26415 \cdot 10^{-20}$	$5.55268 \cdot 10^{-20}$	$5.23108 \cdot 10^{-20}$	$2.11387 \cdot 10^{-20}$
16	$5.79623 \cdot 10^{-20}$	$2.10767 \cdot 10^{-19}$	$2.80512 \cdot 10^{-19}$	$4.87994 \cdot 10^{-20}$
36	$2.61736 \cdot 10^{-19}$	$1.36607 \cdot 10^{-18}$	$2.11153 \cdot 10^{-19}$	$1.29233 \cdot 10^{-19}$
54	$5.81422 \cdot 10^{-19}$	$3.54261 \cdot 10^{-18}$	$1.36582 \cdot 10^{-19}$	$1.76302 \cdot 10^{-19}$



**Figure V-1:** Section efficace totale d'excitation à l'état  $2s$  (cm<sup>2</sup>) de l'ion  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) à une énergie de  $8.6 \text{ MeV/amu}$  en fonction de la charge du projectile ( $Z_p$ ).

### V-3.2. Excitation à l'état 2p du Ca<sup>18+</sup> (1s<sup>2</sup>)

**Tableau V-1:** Section efficace totale d'excitation à l'état 2p (cm<sup>2</sup>) de l'ion Ca<sup>18+</sup> (1s<sup>2</sup>) à une énergie de 8.6 MeV/amu en fonction de la charge du projectile (Z<sub>p</sub>).

Z <sub>p</sub>	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw55
1	1.244852 10 <sup>-21</sup>	1.22898310 <sup>-21</sup>	1.22569 10 <sup>-21</sup>	1.226376 10 <sup>-21</sup>
2	4.9794110 <sup>-21</sup>	4.87052 10 <sup>-21</sup>	4.8214110 <sup>-21</sup>	4.814 10 <sup>-21</sup>
7	6.09977 10 <sup>-20</sup>	6.02033 10 <sup>-20</sup>	5.45522 10 <sup>-20</sup>	4.88356 10 <sup>-20</sup>
8	7.96705 10 <sup>-20</sup>	7.96413 10 <sup>-20</sup>	7.03099 10 <sup>-20</sup>	5.91362 10 <sup>-20</sup>
10	1.244852 10 <sup>-19</sup>	1.28946110 <sup>-19</sup>	1.07294 10 <sup>-19</sup>	7.50894 10 <sup>-20</sup>
16	3.186822 10 <sup>-19</sup>	3.824786 10 <sup>-19</sup>	2.615826 10 <sup>-19</sup>	8.66125 10 <sup>-20</sup>
36	1.439048 10 <sup>-18</sup>	2.423138 10 <sup>-18</sup>	1.172418 10 <sup>-18</sup>	8.95068 10 <sup>-20</sup>
54	3.580218 10 <sup>-18</sup>	6.18359 10 <sup>-18</sup>	3.248966 10 <sup>-18</sup>	1.016384 10 <sup>-19</sup>



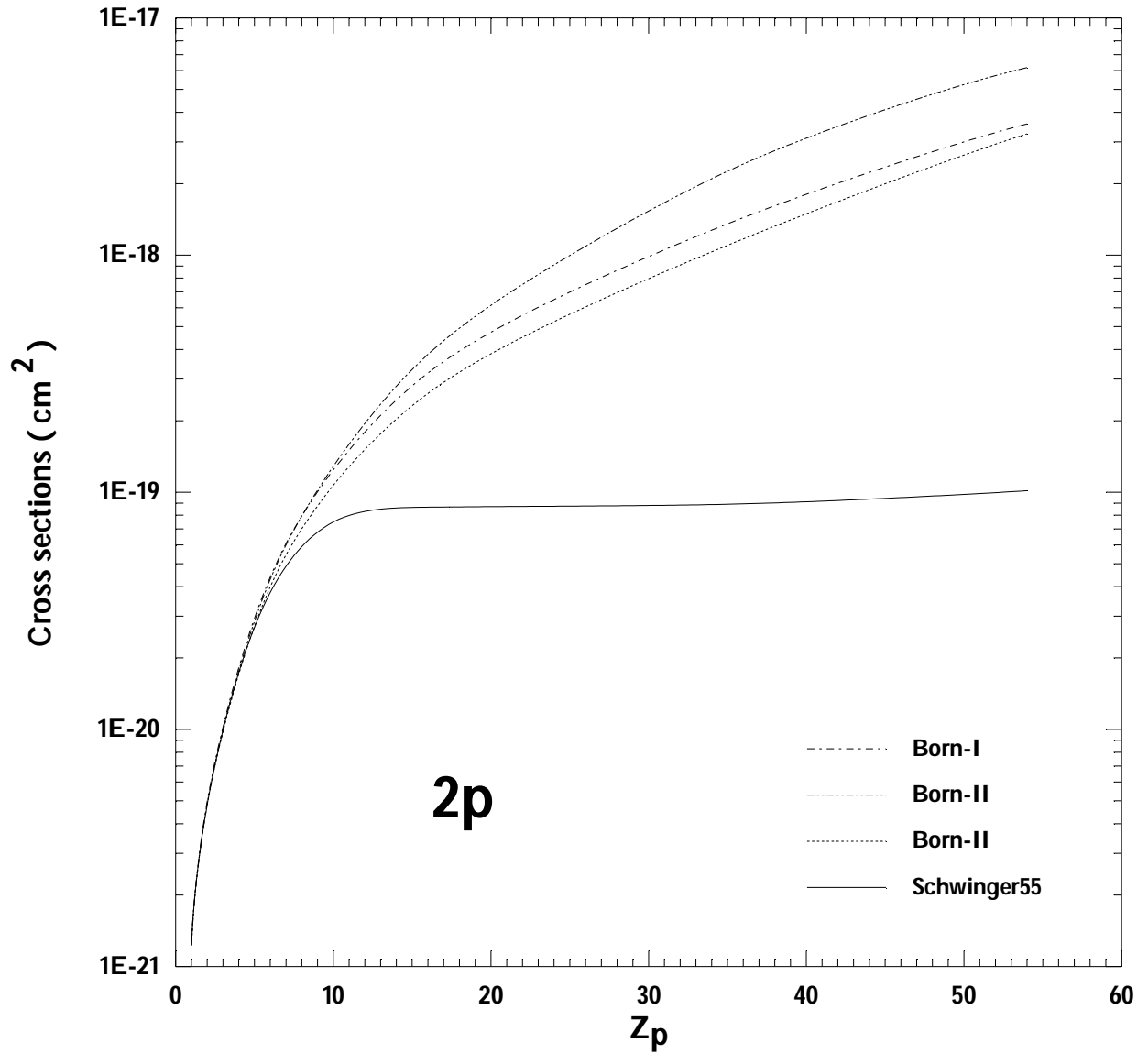
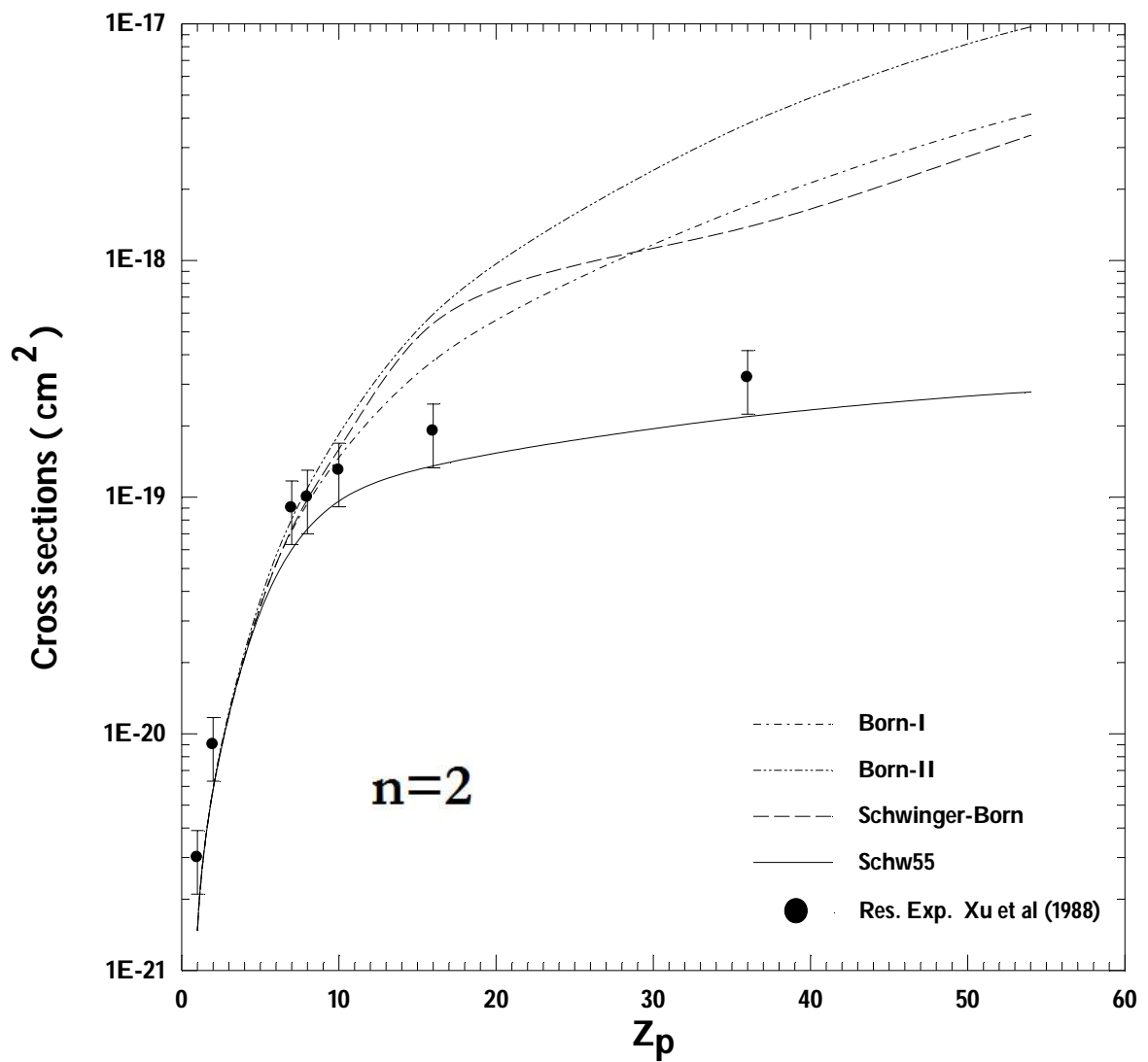


Figure V-2: Section efficace totale d'excitation à l'état 2p (cm<sup>2</sup>) de l'ion  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) à une énergie de 8.6 MeV/amu en fonction de la charge du projectile ( $Z_p$ )

### V-3.3. Excitation au niveau $n=2$ du $\text{Ca}^{18+}$ ( $1s^2$ ):

**Tableau V-3:** Section efficace totale d'excitation à l'état  $n=2$  ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) à une énergie de **8.6 MeV/amu** en fonction de la charge du projectile ( $Z_p$ )

$Z_p$	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw55	Résultats Exp Xu et al [11]
<b>1</b>	$1.471267 \cdot 10^{-21}$	$1.473409 \cdot 10^{-21}$	$1.468425 \cdot 10^{-21}$	$1.467108 \cdot 10^{-21}$	$3 \pm 0.45 \cdot 10^{-21}$
<b>2</b>	$5.885071 \cdot 10^{-21}$	$5.93349 \cdot 10^{-21}$	$5.85855 \cdot 10^{-21}$	$5.810698 \cdot 10^{-21}$	$9 \pm 2.7 \cdot 10^{-21}$
<b>7</b>	$7.2092 \cdot 10^{-20}$	$8.08766 \cdot 10^{-20}$	$7.34414 \cdot 10^{-20}$	$6.00398 \cdot 10^{-20}$	$9 \pm 2.7 \cdot 10^{-20}$
<b>8</b>	$9.41611 \cdot 10^{-20}$	$1.092767 \cdot 10^{-19}$	$9.7844 \cdot 10^{-20}$	$7.33264 \cdot 10^{-20}$	$1 \pm 0.3 \cdot 10^{-19}$
<b>10</b>	$1.471267 \cdot 10^{-19}$	$1.844729 \cdot 10^{-19}$	$1.596048 \cdot 10^{-19}$	$9.62281 \cdot 10^{-20}$	$1.3 \pm 0.39 \cdot 10^{-19}$
<b>16</b>	$3.766445 \cdot 10^{-19}$	$5.932456 \cdot 10^{-19}$	$5.420946 \cdot 10^{-19}$	$1.354119 \cdot 10^{-19}$	$1.9 \pm 0.33 \cdot 10^{-19}$
<b>36</b>	$1.700784 \cdot 10^{-18}$	$3.789208 \cdot 10^{-18}$	$1.383571 \cdot 10^{-18}$	$2.187398 \cdot 10^{-19}$	$3.2 \pm 0.6 \cdot 10^{-19}$
<b>54</b>	$4.16164 \cdot 10^{-18}$	$9.7262 \cdot 10^{-18}$	$3.385548 \cdot 10^{-18}$	$2.779404 \cdot 10^{-19}$	



*Figure V-3: Section efficace totale d'excitation au niveau  $n=2$  ( $\text{cm}^2$ ) de l'ion  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) à une énergie de  $8.6 \text{ MeV/amu}$  en fonction de la charge du projectile ( $Z_p$ ).*

## V-4. Test de convergence et discussion :

Dans notre traitement, cinq approches théoriques ont été comparés :

- Approximation de Born I (BI).
- Approximation de Born II (BII).
- Approximation de Schwinger-Born (Schw-B).
- Approximation de Schwinger à 5 états de base (Schw55).

Pour l'excitation au niveau  $n=2$ , la série de base utilisée comprendra les 5 états suivants  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$ .

Notre traitement théorique a été appliqué avec succès à l'excitation du  $\text{Ca}^{18+}$  ( $1s^2$ ) en collision avec divers atomes à 8.6 MeV/amu puisque les cibles sont des atomes neutres (He, Ne, Ar, Kr, Xe), aucun processus de capture ne peut intervenir lors de la collision.

Les sections efficaces totales d'excitation de l'ion héliumoïde  $\text{Ca}^{18+}$  par impact de divers atomes de charges allant de 1 jusqu'à 56 sont représentées dans les figures (V- 1 à 3). Sur ces figures apparaissent nos différents calculs théoriques : BornI , BornII , approximation de Schwinger-Born (Schw-B) ainsi que Schwinger55 (Schw55) avec un développement limité à 5 états de base. A titre de comparaison, nous avons inséré les résultats expérimentaux de Xu et al [11] des sections efficaces totales d'excitation aux états finaux  $2s, 2p, n=2$ .

A partir de ces figures, on remarque clairement que le principe variationnel de Schwinger prédit que la section efficace totale d'excitation est caractérisée par une faible variation à partir de  $Z_p \approx 10$  quand la charge  $Z_p$  croît ce qui se traduit par un effet de saturation.

D'autre part, en ce qui concerne l'approximation de Schwinger-Born (Schw-B) les résultats divergent et ne représentent pas bien la saturation, surtout pour l'excitation à l'état  $2p$ . Cette incapacité à reproduire le phénomène de saturation pour l'excitation à l'état  $2p$  est dû au fort couplage avec l'état  $2s$ .

Le bon accord entre nos résultats (Schw55) avec les mesures résulte du fait que pour  $Z_p > 10$  les sections efficaces totales d'excitation sont peu sensibles à des variations de la charge.

En observant les divers résultats exposés sur les figures IV-1-3 , les remarques suivantes peuvent être faites :

- Pour l'excitation du niveau  $n=2$ , la totalité des calculs donne des valeurs semblables qui demeurent en bon accord avec les résultats expérimentaux. La grande asymétrie de l'approximation de Born fait que le traitement est valable seulement pour des vitesses de collision relativement basses du système.
- En considérant des systèmes avec des cibles plus lourdes, des divergences de plus en plus prononcées de la théorie de Born apparaissent. Par contre, nos prédictions données par notre nouvelle procédure variationnelle restent en parfait accord avec l'expérience.

Le résultat le plus remarquable est la preuve expérimentale de la saturation des sections efficaces d'excitation obtenue par les prédictions théoriques de la méthode variationnelle. Dans tous les cas ici présents, les résultats donnés par Born I se trouvent loin au-dessus des résultats expérimentaux et même pour les diverses prédictions théoriques Schwinger<sup>55</sup> (Schw<sup>55</sup>). Les valeurs fournies par Born II sont même plus divergents au-dessus d'une charge  $Z_p = 10$  où les conditions de perturbations sont vérifiées.

## REFERENCES

- [1] - L. Adoui , "Mécanismes d'excitation d'ions  $Ar^{+16}$  en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire", *Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995)*.
- [2]- J.T. Park , J.E. Aldag , J.M. George et J.L. Peacher , *Phys. Rev. A 14 (1976) 608*
- [3] - J.P. Rozet , D. Vernhet , K. Woher « *Ions multichargés et tests expérimentaux des effets de diffusion multiple en collisions atomiques a moyenne et hautes vitesses d'impact* » (1986) 59-64.
- [4] - K. Woher , A. Chetioui , J.P. Rozet , A. Jolly , F. Fernandez , C. Stephan , B. Brendlé et R. Gayet , *J. Phys. B 19 (1986) 1997*.
- [5]- M. Chabot , K. Woher , A. Chetioui , J P. Rozet, A. Touati , D. Vernhet , M F. Politis , J P. Grandin , A. Macias , F. martin , A. Riera , J L. Sang and R. Gayet , « *New investigation of saturation effect in ion-atom excitation* » , *J . Phys B : At. Mol. Opt. Phys. 27 (1994) 111-125*.
- [6] - B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, *Phys. Rev. Lett. 54. 2007(1985)*.
- [7] -M. Bouamoud , « *Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif* » *Thèse de doctorat d'état es sciences , Université de Bordeaux-I (1988) , Texte en français*.
- [8] -R. Gayet and M. Bouamoud , *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 .515-522 (1989)*.
- [9] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Phys. Chemi. News, Vol 20 , pp12-17 (2004)*.
- [10] - B. Lasri, *Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (1998)*.
- [11] - Xu. Xiang-Yuan , Montenegro E C. Anholt R. Danzmann K , W E Meyerhof , A S Schlachter , B S Rude et R J McDonald (1988) *Phys. Rev. A 38 1848*.
- [12] - B.Lasri, *Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (2007)*.

# Conclusion

Dans cette étude, notre objectif était de donner un outil de calcul performant pour déterminer les sections efficaces totales d'excitation dans les interactions ions-atomes multichargés aux vitesses intermédiaires et de voir la contribution du spectre discret ainsi que celui du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation.

Nous avons appliqué avec succès la méthode variationnelle de Schwinger afin d'étudier l'excitation de l'ion  $\text{Ca}^{18+}(1s^2)$  et nous avons remarqué que la section efficace totale d'excitation se sature très rapidement à mesure que la charge  $Z_p$  augmente, contrairement à la dépendance en  $Z_p^2$  de l'approximation de Born au premier ordre, et en  $Z_p^4$  celle du deuxième ordre qui divergent toutes les deux. La section efficace totale prédite par le principe variationnel est caractérisée à partir de  $Z_p=10$ , par une faible variation quand  $Z_p$  croît.

Dans le but d'améliorer les calculs des sections efficaces totales d'excitation de l'ion heliomoïde  $\text{Ca}^{18+}$  par impact d'atomes neutres à une énergie de 8.6 Mev/amu, nous projetons d'utiliser l'approche de Schwinger1414 (Schw1414). La saturation des sections efficaces totales d'excitation de cet ion au niveau  $n=2$  illustrée dans la figure V-3 pourra être mieux présentée en effectuant un élargissement à 14 états de base (1s, 2s, 2p<sub>0</sub>, 2p<sub>+1</sub>, 2p<sub>-1</sub>, 3s, 3p<sub>0</sub>, 3p<sub>+1</sub>, 3p<sub>-1</sub>, 3d<sub>0</sub>, 3d<sub>+1</sub>, 3d<sub>-1</sub>, 3d<sub>+2</sub>, 3d<sub>-2</sub>). On projette également utiliser un développement à 10 états afin d'étudier l'excitation du niveau  $n=3$  et ainsi la base sera (1s, 3s, 3p<sub>0</sub>, 3p<sub>+1</sub>, 3p<sub>-1</sub>, 3d<sub>0</sub>, 3d<sub>+1</sub>, 3d<sub>-1</sub>, 3d<sub>+2</sub>, 3d<sub>-2</sub>).

L'élargissement de la base nous permettra une extension de la méthode aux processus d'excitation aux niveaux très élevés. Nous pourrons aussi appliquer le principe variationnel de Schwinger pour étudier des molécules en introduisant les états moléculaires.

Finalement, on peut dire que cette nouvelle procédure variationnelle semble être un outil d'investigation très puissant pour examiner le processus d'excitation dans des collisions atomiques aux vitesses d'impact intermédiaires.