

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

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



# MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

## MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique Computationnelle

Par

M<sup>elle</sup>. BELGRINE Fatiha

Sur le thème

**Phénomène de saturation des sections efficaces totales d'excitation des ions Heliumoïdes  $Fe^{24+}(1s^2)$  à 400 MeV par impact de différents atomes.**

Soutenu le /09/2020 devant le jury composé de :

M. MESKINE Mohammed	M.C.A	Université de Saïda	Président
M. LASRI Boumediene	Professeur	Université de Saïda	Rapporteur
M. DOUMI Bendouma	M.C.A	Université de Saïda	Examineur

Année Universitaire 2019 - 2020

## Résumé

Durant ces deux dernières décennies, les approches variationnelles fondées sur le principe variationnel de Schwinger ont prédit avec succès la saturation de la section efficace totale d'excitation d'atomes ou d'ions par des projectiles de charge nucléaire croissante. Nous présentons ici, dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact, une application du formalisme de Schwinger à l'étude de l'excitation de l'ion  $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes incluant ceux des gaz rares à une énergie de 400 MeV.

**Mots clés :** Principe variationnel de Schwinger ; Collisions atomiques ; Sections efficaces ;

## **Abstract**

In the last two decades, variational approaches to atomic collisions based on the Schwinger variational principle appeared very successful in predicting saturation of total cross sections for the excitation of atoms or ions by projectiles of increasingly charged nuclei at moderate impact velocities. In this work, an impact parameter version of the Schwinger principle is used to address the excitation of  $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$  ions impinging at 400 MeV by various atoms which include neutral gaseous (He, N<sub>2</sub>, Ne, Ar, Kr, Xe).

**Keywords:** Schwinger variational principle ; Atomic collisions ; Cross sections ;

## ملخص

إنّ الطرق النظرية المعتمد عليها في الدراسات الخاصة بالتصادمات الذريّة و المرتكزة أساساً علي المبدأ التغيري لشوينغر تعتبر ركيزة من الركائز الحديثة المعوّل عليها في حساب المقاطع الفعّالة للإثارة المباشرة للذرات عن طريق الأيونات في المجال الطاقوي المتوسط و التي بإمكانها إعطاء نتائج جدّ مشجعة خاصة فيما يتعلق بالايون الشبة الهيليومي  $Fe^{24+}(1s^2)$  في حالة تصادمه بطاقة قدرها 400 MeV مع مختلف الذرات ذوات الشحن المتغيرة . نعرض في طيات هذا المقال طريقة جديدة مرتكزة اساسا في شكلها العام على شكل كسري للمبدأ التغيري لشوينغر. النتائج و التنبؤات النظرية في توافق جيّد مع المعطيات التجريبية الخاصة بإثارة المستويات الجزئية  $(1s,2p), (1s,2s)$ .

# Dédicace

*À mon petit frère Abdel Halim et à ma grand-mère, que Dieu ait pitié d'eux.*

*A mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études,*

*À mon cher frère Kadirou et à mes chères sœurs Hiba et Hanan pour leurs encouragements permanents, et leur soutien moral, Et à toute la famille BELGRINE*

*A la famille Djenuidi Hmida et petites filles (Manel et Meriem) pour leur soutien tout au long de mon parcours universitaire,*

*Que ce travail soit l'accomplissement de vos vœux tant allégués, et le fruit de votre soutien infailible, A mes chers Amis : Sihem, Tïmo, Maria, Mokhtaria, Ismahen, Torkja, Nacira.*

*A tous la promotion master physique computationnelle*

*Merci d'être toujours présent*

**Belgrine Fatiha**

## **REMERCEMENTS**

Je tout d'abord à remercier Dieu le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce Modeste travail.

Les remerciements sont souvent l'ultime étape d'un mémoire. Pour certains, cela reste une étape difficile pour trouver les mots, de peur d'oublier quelqu'un. Pour d'autres, il s'agit de la seule page où l'on peut vraiment écrire ce qu'on veut dire en toute liberté. Je ne sais pas dans quelle catégorie me placée, mais je m'y mets avec un réel plaisir.

Je tiens en premier lieu à saluer et remercier Monsieur **LASRI BOUMEDIENE**, mon directeur de mémoire, je le remercie infiniment de m'avoir proposé ce sujet de mémoire de m'avoir encadré, orienté, aidé et conseillé.

Je remercie **M<sup>f</sup> MESKINE Mohammed**, Maitre de Conférences « A » à l'université Dr Tahar Moulay –Saïda–, d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.

Je remercie également **M<sup>f</sup> DOUMI Bendouma**, Maitre de conférences « A » à l'université Dr Tahar Moulay –Saïda– d'avoir bien voulu examiner mon travail.

Je souhaiterais adresser mes remerciements les plus sincères à tous mes professeurs et enseignants sans eux je n'en aurais pas pu réussir mes études.

J'adresse mes amitiés à mes collègues d'étude. En fin, j'exprime mes sincères remerciements à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

# Table des figures

<b>I.1</b> Présentation des processus électronique induits lors des collisions .....	8
<b>I.2</b> Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision P+H.....	10
<b>II.1</b> Système collisionnel.....	26
<b>III.1</b> Section efficace totale d'excitation par électron de l'état (1s , 2s) d'ion $Fe^{24+}$ envoyé à 400 MeV sur des noyaux de charge $Z_p$ . La section efficace totale est donnée en $cm^2$ .....	40
<b>III. 2</b> Section efficace totale d'excitation par électron de l'état (1s , 2p) d'ion $Fe^{24+}$ envoyé à 400 MeV sur des noyaux de charge $Z_p$ . La section efficace totale est donnée en $cm^2$ .....	42

# Liste des tableaux

<b>III.1</b> Résultats expérimentaux Wohrer et al.....	38
<b>III.2</b> Excitation du $Fe^{24+}(1s^2) cm^2$ de l'état (1s,2s) par impact des différents noyaux de charges $Z_p$ .....	39
<b>III.3</b> Excitation de l'état (1s , 2p) du $Fe^{24+}(1s^2) cm^2$ par impact des différents noyaux de charges $Z_p$ .....	41

# Sommaire

Résumé	
Abstract	
ملخص	
Table des figures	
Liste des tableaux	
Introduction générale.....	1
<b>Chapitre I</b> Processus élémentaires, domaines de vitesses d'impact et divers travaux.....	8
I.1 Processus mono-électroniques directs.....	8
I.1.1 Ionisation.....	9
I.1.2 Excitation .....	9
I.1.3 Capture .....	9
I.2 Domaines des vitesses d'impact... ..	9
I.2.1 Régime des faibles vitesses d'impact.....	10
I.2.2 Régime des hautes vitesses d'impact.....	10
I.2.3 Régime des vitesses d'impact intermédiaires.....	11
I.3 Principales méthodes théoriques développées.....	11
I.3.1 Approximation de Born.....	11
I.3.2 Approximation de VPS (Vainshtein , Presnyakov et Sobelman).....	13
I.3.3 Approximation des voies couplées.....	13
I.3.4 Approximation de Glauber.....	15
I.3.5 Approche variationnelle.....	16
Références.....	17
<b>Chapitre II</b> Approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions.....	18
II.1 Introduction.....	18
II.2. Approche variationnelle de Schwinger .....	19
II.3 Amplitude variationnelle approchée dans le formalisme de Schwinger.....	23

II.4. Amplitude variationnelle de Schwinger pour l'excitation directe.....	25
Remarque.....	30
Références.....	31
<b>Chapitre III</b> Excitation électronique de l'ion heliumoïdes hautement charge $Fe^{24+}$ ( $1s^2$ ) avec des atomes des gaz rares aux énergies intermédiaires : effet de saturation des sections totales d'excitation.....	33
III.1. Introduction .....	33
III.2. Excitation de l'ion $Fe^{24+}(1s^2)$ .....	35
III.2.1 Excitation de l'état ( $1s, 2s$ ) du $Fe^{24+}(1s^2)$ .....	39
III.2.2. Excitation de l'état ( $1s, 2p$ ) du $Fe^{24+}(1s^2)$ .....	41
III.3. Test de convergence et discussion .....	43
III.4. Conclusion.....	45
Références.....	45
Conclusion générale.....	46

# Introduction Générale



L'étude des collisions entre un atome cible et une particule projectile (atome, électron...) représente un problème majeur de la physique. Depuis l'interprétation en termes de mécanique classique de l'expérience de Rutherford (collision d'une particule et d'un noyau), un travail de grande ampleur a été effectué, répertoriant, caractérisant les paramètres d'un nombre élevé de processus de collisions et affinant les modèles théoriques. Outre l'intérêt intrinsèque de telles études, celles-ci sont fondamentales pour aborder la physique des milieux dilués. Donnons quelques exemples : la modélisation des milieux stellaires ou interstellaires s'appuie en grande partie sur des données collisionnelles ; il en est de même des processus atmosphériques, signalons par exemple que la cinétique d'évolution de la concentration de l'ozone atmosphérique résulte de plusieurs dizaines de mécanismes collisionnels en compétition et qu'une imprécision sur la connaissance de l'un d'eux peut modifier de façon notable la conclusion d'une modélisation. Les progrès dans les machines à plasma utilisées pour l'approche de la fusion contrôlée sont en partie conditionnés par la connaissance de mécanismes de collisions impliquant des états atomiques encore peu connus.

Les ions ont existé de tout temps, depuis les premiers instants de l'expansion de notre Univers. Les interactions entre ces ions et les autres particules existantes, que ce soient des photons, des électrons, des atomes, des molécules ou des ions, sont incessantes et participent de la construction de l'Univers.

Les collisions atomiques sont les processus les plus fondamentaux en physique quantique et présentent un intérêt essentiel 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, voir 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 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 XUV 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.

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 [1].

L'atome d'hydrogène ou, plus généralement, le système ionique à un électron présente un intérêt fondamental pour la description théorique des structures atomiques. On exigera d'une théorie fiable qu'elle décrive l'interaction des noyaux avec les électrons via la force Coulombienne, à cause du large domaine d'influence de cette force. Cependant, le problème de collision, même pour les cas les plus simples, ne peut pas être complètement résolu. C'est pour cette raison que la théorie des collisions atomiques par impact ionique, s'est concentrée sur le développement des techniques, des méthodes et des approximations dans lesquelles les divers processus de collisions peuvent être décrits convenablement.

Il y a deux situations où les approximations peuvent être employées et ainsi une grande simplification peut être faite. La première est celle où la théorie de perturbation peut être appliquée à cause du temps d'interaction court. La seconde est le cas de collisions très lentes : il y a formation d'une quasi-molécule et le mouvement lui-même peut être considéré comme une perturbation.

Dans un problème de collision, le plus important est la détermination de la fonction d'onde qui représente l'onde de diffusion, car elle contient toutes les informations nécessaires sur l'état du système. Cependant pour résoudre ce problème, diverses techniques sont développées afin d'aboutir à une solution quasi-exacte, Citons par exemple : l'approximation

de Born[2], l'approximation VPS (Vainshtein, Presnyakov et Sobelman) [3], l'approximation de Glauber[4], la méthode OHCE "One and Half Centred Expansion", la méthode SCE "Single Centred Expansion"[5-6 ]...etc..

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

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

En 1984, B. Brendlé [7] et sous la direction du Pr R. Gayet au Laboratoire des Collisions Atomiques de l'université de Bordeaux-I (France), a appliqué cette méthode à l'excitation d'ions et d'atomes par impact de noyaux nus aux vitesses intermédiaires en utilisant une base constituée seulement par deux états (initiale et finales).

En 1988, M. Bouamoud [8] a repris et développé cette méthode en utilisant une base constituée de cinq états de la cible.

En 1998, ce formalisme variationnel a été réexaminé de nouveau par Mr B. Lasri [9] en s'appuyant sur un nouveau code informatique de calcul en Fortran calculant systématiquement les sections efficaces totales d'excitation et ainsi la base a été élargie de deux à cinq états en incluant la totalité du spectre discret ainsi que celui de continuum de la cible.

Récemment, dans le but de développer et d'affiner encore plus cette approche variationnelle dans la représentation de la fonction d'onde de diffusion, B. Lasri [10] n'était pas restreints lors de son développement à 5 états de base mais il avait élargi cette base de 5 états à 10 puis à 14 états. Le propagateur de Green a été développé aussi sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que par celui du continuum de la cible. En fait, dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, la contribution des états du continuum est petite sans toutefois être complètement négligeable [11-12].

Ce nouveau modèle théorique fut appliqué avec succès par le biais du formalisme du paramètre d'impact à l'excitation de l'atome d'hydrogène principalement et ions hydrogéoïdes ( $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ , ...etc) en collision avec des protons et à l'excitation des ions helomoïdes ( $\text{Fe}^{24+}$ ,  $\text{Kr}^{34+}$ , ...etc) avec des noyaux de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He,  $\text{N}_2$ , Ne, Ar, Kr et Xe) aux vitesses intermédiaires [12].

En effet, vu les divers prédictions théoriques qui paraissent très encourageantes pour l'atome d'hydrogène principalement et les ions hydrogéoïdes ( $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ , ...) ainsi que les ions helimoïdes ( $\text{Fe}^{24+}$ ,  $\text{Kr}^{34+}$ ,  $\text{Xe}^{52+}$ , ...) étudiés, ces derniers demeurent en parfait accord avec ceux d'autres travaux théoriques fondés sur d'autres techniques récentes comme celles de Close Coupling [13] ainsi qu'avec la totalité des résultats expérimentaux [1-14]. 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) [7], K. Wohrer et al (1986) [15], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [16], B. Lasri (1998, 2007) [10-12], M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [10], B. Lasri, A Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet (2005) [17], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2006) [11], B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen [18] ).

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

Dans ce mémoire, nous nous sommes fixés l'objectif de calculer les sections efficaces totales d'excitation des ions Helimoïde  $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$  en collision avec des cibles atomiques de charge nucléaire croissante incluant ceux des gaz rares à une énergie de 400 MeV.

*Pour cette étude nous avons adopté le plan suivant :*

**Le chapitre I** décrit les Processus élémentaires dans le domaine des collisions atomiques.

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

Dans le dernier chapitre (**chapitre III**) nous appliquons le formalisme variationnel de Schwinger aux processus d'excitation des ions  $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes incluant ceux des gaz rares à une énergie de 400 MeV.

# Références

- [1] L. Adoui, "Mécanismes d'excitation d'ions  $\text{Ar}^{+16}$  en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire", Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995).
- [2] [http://fr.wikipedia.org/wiki/Max\\_Born](http://fr.wikipedia.org/wiki/Max_Born).
- [3] L. Vainshtein, L. Presnyakov et I. Sobelman, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* 45 (1963) 2015 ; *Sov. Phys. JETP* 18 (1964) 1383.
- [4] R.J. Glauber *Lecture in Theoretical Physics* 1 (1958) 315.
- [5] A. M. Ermolaev et M. R. C. McDowell, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 20 L379-L383 (1987).
- [6] J. F. Reading, A. L. Ford et R. L. Becker, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 14 pp1995-2012 (1981).
- [7] B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 2007.
- [8] 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.
- [9] B. Lasri, Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (1998).
- [10] B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Phys. Chemi. News*, Vol 20, pp12-17 (2004).
- [11] B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, « Variational approach to excitation of atomic hydrogen atoms by impact of protons at intermediate velocities », *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, Volume 251, issue 1, September 2006, p. 62-77.
- [12] B. Lasri, Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (2007).
- [13] A. Hall, J. F. Reading et A. L. Ford, *Phys. B At Mol. Opt Phys.* 29 pp1979- 1994(1996).
- [14] M. Chabot, P. Nicolai, K. Wohrer, A. Chetioui, J.P. Rozet, M.F. Politis, A. Touati, D. Vernhet, C. Stephan et R. Gayet, *Nucl. Instr. and Methods in Physics Research B* 56 pp 1-4 (1991).
- [15] K. Woher, A. Chetioui, J.P. Rozet, A. Jolly, F. Fernandez, C. Stephan, B. Brendlé et R. Gayet, *J. Phys. B* 19 (1986) 1997.

- [16] R. Gayet and M. Bouamoud , *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 42 .515-522 (1989).
- [17] B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud,R. Gayet, *Physical and chemical news* vol.28 pp97-102 (2006).
- [18] B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen, *Journal of Electron Devices*, Vol. 5, pp. 127-131(2007).

# Chapitre I

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

Lors des collisions ion-atome, une partie de l'énergie cinétique du mouvement est transférée aux deux cortèges électroniques ce qui y en résulte un réarrangement des états des électrons conduisant 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 qui réalisent ces processus (excitation, ionisation, capture) sont dit les électrons « actifs », par contre les « passifs » sont ceux qui conservent leurs états quantiques, au cours de la collision.

Afin de simplifier la compréhension de ces trois processus, on prend un modèle mono électronique.

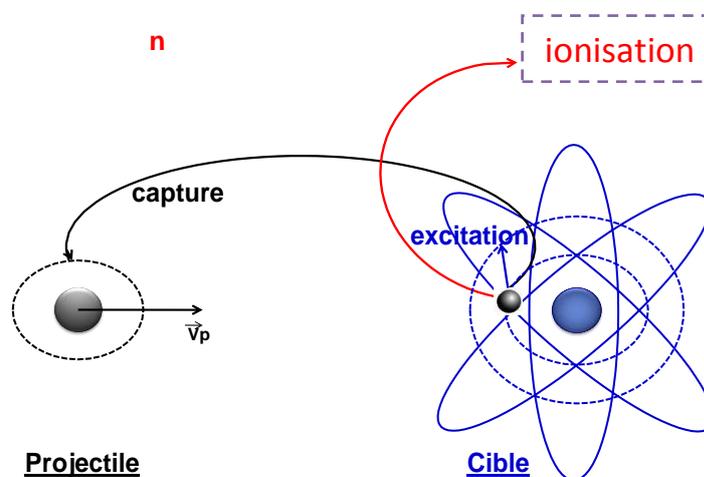


Figure 1.1 – Présentation des processus électronique induits lors des collisions

**I.1.1 Ionisation** : Dans ce processus, l'interaction est assez intense, le transfert d'énergie peut être suffisant pour arracher un électron de l'atome cible, c'est le phénomène d'ionisation.



**I.1.2 Excitation** : Au contraire, l'interaction est insuffisante pour créer une ionisation, il y a seulement excitation, processus par lequel un atome passe d'un niveau d'énergie à un niveau plus élevé.



**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. Elle aussi appelé processus de transfert de charge. Il intervient surtout lors d'irradiations en ions lourds.



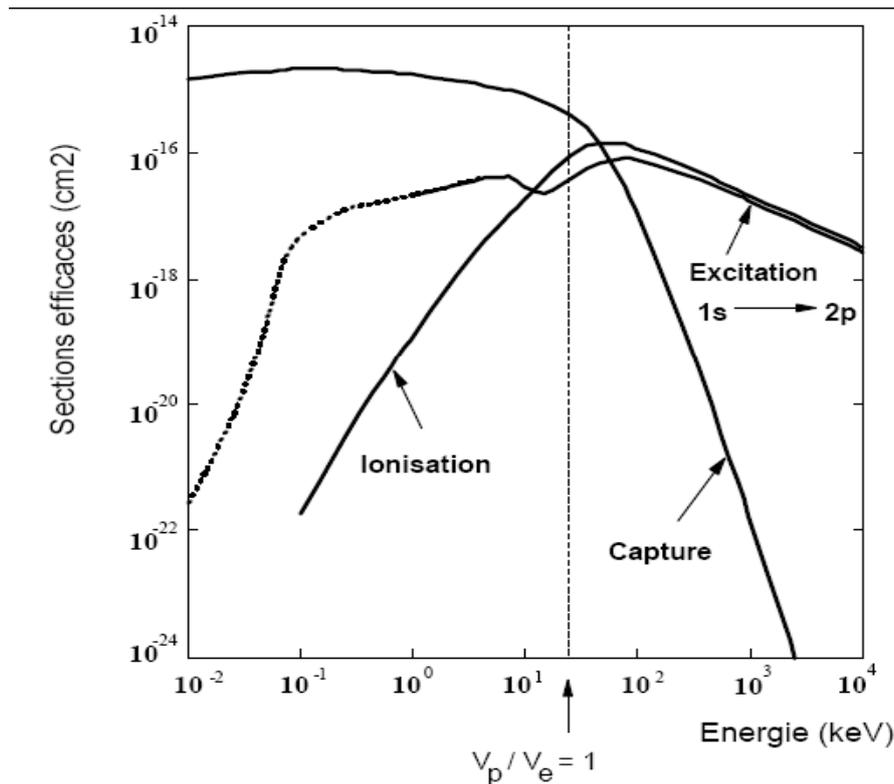
## I.2 Domaines des vitesses d'impact :

Pour chaque système collisionnel, ces divers processus sont caractérisés par des sections efficaces qui, pour un ion projectile et une cible donnée, dépendent de l'énergie de la collision comme le montre la figure (I-2) pour le cas d'un système proton sur hydrogène. Selon la vitesse du projectile ( $v_p$ ), l'importance relative de ces processus dynamique diffèrent.

La théorie des collisions classifie ainsi trois régimes selon la valeur du paramètre définie  $K$  défini comme :

$$K = \frac{Z_p}{Z_T} \times \frac{V_e}{V_p} \quad \text{I-1}$$

Où  $v_e$  est la vitesse de l'électron sur une couche atomique (ou moléculaire) cible,  $v_p$  la vitesse de l'ion incident (projectile),  $Z_p$  et  $Z_T$  sont respectivement numéros atomiques (la charge) du projectile et de la cible.



**Figure I-2 :** Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision P + H

On distingue trois régimes :

### 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 collisions ( $v_p$ ) très inférieures à celle de l'électron actif ( $v_e$ ), la théorie, adaptée à ce régime, est basée sur l'hypothèse de la formation d'un quasi-molécule transitoire au cours de la collision et fondée sur une représentation des états électroniques sur des bases 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 des hautes vitesses d'impact ( $K \ll 1$ ) :

Ce régime, appelé aussi régime perturbatif, est atteint pour des grandes vitesses de collisions ( $v_p \gg v_e$ ), et pour des grandes asymétries ( $Z_p \ll Z_T$ ). Une théorie de perturbation de premier ordre telle que l'approximation PWBA (Plane-Wave Born Approximation) devient

fiable pour une bonne évaluation des sections efficaces totales des réactions d'ionisation et d'excitation.

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

Régime quasi-symétriques, ou on distingue :

- 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. Ce processus est essentiellement dû à des électrons éjectés avec de faibles moments cinétiques autour de la cible et du projectile.

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.

## **I.3 Principales méthodes théoriques développées:**

Le plus important dans un problème de collision est la détermination de la fonction d'onde qui représente l'onde de diffusion, car elle contient toutes les informations sur l'état du système. Pour résoudre ce problème, certaines approximations ont été largement employées au cours de ces dernières décennies. Nous allons présenter brièvement les principales approximations :

### **I.3.1 Approximation de Born :**

Au début, il faut noter que 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 [2].

Dans une collision (atome-ion), 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 est :

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

Où  $|\psi_\alpha^+\rangle$  représente le vecteur propre de l'Hamiltonien total  $H$  dans la voie de sortie est 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  $V_\alpha$  Sont 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 :

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

D'où par retenir le premier terme 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 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) :

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

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.

L'approximation de Born est seulement valable et donne un bon résultat quand l'énergie cinétique de l'ion incident est très grande par rapport au potentiel d'interaction.

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

Nouvelle approche a été développée au début des années soixante par Vainshtein, Presnyakov et Sobelman « approximation **VPS** » pour traiter les déformations de la fonction d'onde sortante décrivant le système collisionnel. Elle consiste à traiter l'interaction entre le projectile et l'électron actif ainsi entre le projectile et le noyau cible afin d'être compatible avec les conditions du processus de collision. Mc Carroll et Crothers [3] ont proposé une version légèrement différente de l'approche initiale qui fut appliquée en 1966 par Mc Carroll et Salin [4] aux collisions proton-hydrogène.

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

Une autre alternative à l'approximation de Born est l'approximation des équations couplées, où la fonction d'onde de diffusion est développée sur des bases de fonctions d'onde représentant les différentes voies de réaction. Il en résulte un système d'équations différentielles couplées sur les coefficients du développement [2].

On suppose que le projectile ayant une direction rectiligne, et perpendiculaire au transfert d'impulsion de la cible, selon les équations suivantes :

$$\begin{aligned}
\vec{R} &= \vec{\rho} + \vec{z} \\
\vec{z} &= \vec{v}t \\
\vec{\rho} \cdot \vec{v} &= 0
\end{aligned}
\tag{I-12}$$

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:

$$\left\{ -i\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} + \mathbf{H}(\mathbf{z}) + V(\vec{R}(\mathbf{z})) \right\} |\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle = \mathbf{0}
\tag{I-13}$$

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 :

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

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  $\langle \chi_j |$ :

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

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

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

Avec les conditions asymptotiques:

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

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

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

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 :

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

Avec des différents choix de bases qui dépend de la vitesse qui ont été effectués :

**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.

**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].

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.

**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.

### 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 d'introduire les effets du potentiel d'interaction dans la fonction d'onde décrivant l'état final du système.

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.

### I.3.5 Approche variationnelle:

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.

Plusieurs approches ont été introduites afin d'étudier le processus collisionnel ou la majorité décrivaient les collisions a haute énergie, et en 1950 Schwinger a introduit son approche qui porte son nom (principe variationnel de Schwinger), qui a représenté vraiment un outil efficace à l'étude des collisions.

Diverses applications de ce principe ont été faites :

- Lucchese et Mc Koy [5] : 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.
- Lucchese, Watson et Mc Koy [6] : diffusion élastique d'électron par des molécules, 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.
- 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 [7].

# Références

- [1]- L . Adoui , « mécanismes d'excitation d'ion  $\text{Ar}^{+16}$  en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire », Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995) .
- [2] - B. Lasri, Thèse de doctorat, Faculté des Sciences. Université Abou bakr Belkaid de Tlemcen (2007).
- [3]- B. Mc Carroll et D. Crothers, Proc. Phys. Soc . 86 (1965) 753.
- [4]- R. McCarroll et A. Salin , Ann. Phys. (Paris) 1 (1966) 283.
- [5]- R. R. Lucchese et V. McKoy , J. Phys . B 12 (1979)L421.
- [6]- R. R. Lucchese , D.R. Watson et V. McKoy, Phys. Rev. A 22 .421 (198).
- [7]- R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 .515-522 (1989).

# Chapitre II

## Principe variationnel de Schwinger pour la théorie des collisions

### II-1. Introduction:

 Durant ces dernières décennies, les méthodes variationnelles ont prouvé leur efficacité comme étant un outil d'investigation inestimable dans la physique théorique, notamment pour l'étude des phénomènes de collisions atomiques, ainsi que pour la chimie pour résoudre par exemple le problème des états liés. Pour des problèmes collisionnels, ces méthodes variationnelles peuvent être groupées en deux catégories : celles basées sur l'équation Schrödinger et celles basées sur l'équation Lippmann-Schwinger.

La méthode Hulthén-Kohn incorporant des conditions complexes aux limites lors de son développement est répertoriée dans la première catégorie [1-3]. Une extension moderne de cette approche à l'étude des collisions de type électron-molécule a été annoncée en 1995 par Rescigno et al [4]. Cette dernière a subi plus tard une nette amélioration grâce à une méthode variationnelle dite de la matrice-R (R-matrix) [5][6]. Ceci a été récemment largement discuté par Schneider [7].

La méthode variationnelle, que Schwinger en personne a présenté dans ses cours à l'Université de Harvard et fut publiée en 1947, appartient à la seconde catégorie [8].

Cette approche appliquée aux collisions de type  $e^-$ -molécule, ion-atome et à la photoionisation moléculaire n'a cessé de se développer, de se raffiner et de s'étendre à d'autres

domaines le long de ces dernières années, grâce aux progrès informatiques et aux divers travaux accomplis par plusieurs équipes de recherche dans le monde [9-12][18-21].

Dans cette approche, les conditions correctes aux limites sont automatiquement introduites grâce à la fonction de Green. De plus des fonctions de base avec des conditions aux limites arbitraires peuvent être utilisés dans les calculs. Cette particularité permet l'utilisation d'une base  $L^2$  pour des calculs de collision et fournit une bonne motivation initiale pour appliquer cette méthode à la physique atomique et moléculaire [10][13]. Un tel succès a mené au début au développement d'une méthode itérative de Schwinger qui utilise des techniques d'expansion du centre unique (Single-Center Expansion) et aussi à une autre procédure itérative pour améliorer la série de base initiale [14]. La méthode itérative de Schwinger a été largement employée pour étudier la photoionisation moléculaire [15] et pour des collisions  $e^-$ -molécule, au niveau de l'échange statique pour des collisions élastiques. Elle est couplée avec l'approximation des ondes distordues (Distorted Wave Approximation) pour étudier la dispersion électroniquement inélastique [16][17].

A travers la quasi-totalité des travaux et des études basés sur le principe variationnel de Schwinger, il a été montré que ces approches variationnelles sont couronnées de succès dans la résolution de plusieurs problèmes en relation avec l'énergie de liaison.

D'abord, l'avantage principal de ces approches tient à leur capacité de donner satisfaction avec des fonctions d'onde d'essai qui sont une approximation raisonnable de la fonction d'onde réelle du système.

Le présent chapitre discute de la mise en oeuvre du principe variationnel de Schwinger basé sur des équations intégrales de Lippman-Schwinger et fondé sur l'obtention d'une forme stationnaire de l'amplitude de transition en vue d'une application aux collisions de type ion-atome [18-21].

## II-2. Approche variationnelle de Schwinger :

Lors d'une collision entre deux particules, les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$ , vecteurs propres de l'hamiltonien total du système satisfaisant respectivement aux conditions d'ondes entrantes et sortantes sont définis dans le cas d'une collision sans réarrangement par les équations de Lippman-Schwinger :

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_C^+ V_C |\psi_\alpha^+\rangle \quad (\text{II.1a})$$

$$|\psi_\beta^-\rangle = |\beta\rangle + G_C^- V_C |\psi_\beta^-\rangle \quad (\text{II.1b})$$

$|\alpha\rangle$  et  $|\beta\rangle$  désignent respectivement l'état initial et final de la cible et  $G_C^+$  l'opérateur de Green défini par :

$$G_C^+ = (E - H_C + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{II-1c})$$

$E$  est l'énergie totale du système.

Si on dénote par  $H_C$  l'hamiltonien des particules sans interaction et par  $V_C$  le potentiel d'interaction dans la voie c, l'hamiltonien total du système peut s'écrire :

$$H = H_C + V_C \quad (\text{II.2})$$

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

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | T | \alpha \rangle \quad (\text{II.3})$$

Par ailleurs, à partir des équations de Lippman-Schwinger (II.1a,b) on peut aussi déduire que l'amplitude de transition donnée par la relation précédente peut s'écrire sous trois formes différentes:

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{II.4a})$$

$$= \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle \quad (\text{II.4b})$$

$$= \langle \psi_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{II-4c})$$

On peut remarquer aisément qu'à partir d'une simple combinaison des expressions précédentes (II.4a-c), une nouvelle forme de  $T_{\beta\alpha}$  dite forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger [22] s'écrit:

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_C | \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle - \langle \psi_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{II.5})$$

Cette dernière expression est stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires  $|\delta\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \delta\psi_\beta^- |$  des vecteurs  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \psi_\beta^- |$  autour de leurs valeurs exactes.

En effet, en différentiant la relation (II.5), nous obtenons :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[ \langle \beta | - \langle \psi_\beta^- | + \langle \psi_\beta^- | V_C G_C^+ V_C | \delta\psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta\psi_\beta^- | V_C [ |\alpha\rangle - |\psi_\alpha^+\rangle + G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle ] \right] \quad (\text{II.6})$$

Sachant que  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle \psi_\beta^- |$  vérifient les équations intégrales de Lippman-Schwinger (II.1a,b), la relation (II.6) donne en effet :

$$\delta T_{\beta\alpha} = 0 \quad (\text{II.7})$$

On dira alors que l'erreur commise sur  $T_{\beta\alpha}$  est quadratique par rapport à celle faite sur les états de diffusion.

Notons que les équations (II.4a-c) sont des expressions exactes de l'amplitude de transition. Cela dit une amplitude exacte est obtenue quand les états de diffusion exacts  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\psi_\beta^-|$  sont utilisés.

Suivant la même procédure citée ci-dessus et à partir des équations (II.4a-c), nous serons en mesure d'obtenir une nouvelle représentation stationnaire de l'amplitude de transition  $T_{\beta\alpha}$  dite forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger :

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_C|\psi_\alpha^+\rangle\langle\psi_\beta^-|V_C|\alpha\rangle}{\langle\psi_\beta^-|V_C - V_C G_C^+ V_C|\psi_\alpha^+\rangle} \quad (\text{II.8})$$

En tenant compte des expressions équivalentes (II.4a-c) de l'amplitude de transition lors de la différentiation de cette expression, on peut toujours vérifier que :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[ \langle\beta| - \langle\psi_\beta^-| + \langle\psi_\beta^-|V_C G_C^+ V_C \right] V_C |\delta\psi_\alpha^+\rangle + \langle\delta\psi_\beta^-|V_C [|\alpha\rangle - |\psi_\alpha^+\rangle + G_C^+ V_C |\psi_\alpha^+\rangle] = 0 \quad (\text{II.9})$$

est identique à l'expression (II.6); ce qui signifie que  $T_{\beta\alpha}$  est aussi stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires des états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\psi_\beta^-|$  autour de leurs valeurs exactes.

De plus, cette forme fractionnaire présente l'avantage d'être indépendante de la normalisation choisie pour les états de diffusion.

Il est important de rappeler que ce principe variationnel, telle la forme bilinéaire donnée par l'équation (II.5), introduit automatiquement des conditions aux limites correctes (c'est à dire n'exige pas des fonctions d'onde d'essai qui satisfont les conditions aux limites comme dans le cas de méthode Hulhén-Kohn [1]) et utilise seulement des fonctions d'onde d'essai dans la région où l'interaction apparaît.

Comme une première illustration, l'approximation de Born (Born-I) consiste à remplacer, respectivement dans l'expression (II.8) les vecteurs exacts inconnus  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\psi_\beta^-|$  par les vecteurs d'essai  $|\alpha\rangle$  et  $\langle\beta|$ , soit:

$$|\psi_{\alpha}^{+}\rangle = |\alpha\rangle \quad (\text{II.10a})$$

et

$$\langle\psi_{\beta}^{-}| = \langle\beta| \quad (\text{II-10b})$$

Avec ce choix simple de fonctions d'essai, l'expression fractionnaire de l'amplitude de transition devient :

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_c|\alpha\rangle \langle\beta|V_c|\alpha\rangle}{\langle\beta|V_c - V_c G_c^+ V_c|\alpha\rangle} \quad (\text{II.11})$$

on sous une autre formulation:

$$T_{\beta\alpha} = T^{BI} \left[ \frac{1}{1 - \frac{\bar{T}^{BII}}{T^{BI}}} \right] \quad (\text{II.12})$$

tel que:

$T^{BI}$  correspond à l'approximation de Born au premier ordre pour l'amplitude de transition.

L'approximation de Born au 2<sup>ème</sup> ordre de l'amplitude de transition notée  $T^{BII}$  est telle que:

$$T^{BII} = T^{BI} + \bar{T}^{BII} \quad (\text{II.13})$$

On peut souligner que dans le cas où le rapport  $\left| \frac{\bar{T}^{BII}}{T^{BI}} \right|$  est petit devant 1, et en utilisant le

développement de l'expression (II.12) ( $(1-\varepsilon)^{-1} \cong (1+\varepsilon)$   $\varepsilon < 1$ ), on aura :

$$T_{\beta\alpha} = T^{BI} + \bar{T}^{BII} + \dots \quad (\text{II.14})$$

Nous remarquons que dans ce développement, les deux premiers termes correspondent à la série de Born au 2<sup>ème</sup> ordre.

Par conséquent, on peut conclure que dans le cas des énergies assez élevées pour lesquelles la série de Born converge, le principe variationnel de Schwinger pourrait fournir une meilleure approximation que celle de Born au 2<sup>ème</sup> ordre.

Une évaluation de l'amplitude de transition sous sa forme fractionnaire donnée par l'équation (II.8) et l'utilisation de l'approximation (II.10a,b) avec des choix plus complexes a été effectuée pour  ${}^3S_1$  dans une collision nucléon-nucléon décrite par un potentiel de Yukawa [23], ou par un potentiel de Gauss [22]. Le résultat variationnel s'avère en effet être plus précis que la seconde approximation de Born.

En fait, la première approximation de Born donne des sections efficaces moins précises que l'estimation variationnelle basée sur un choix simple (II.10a,b). Un tel exemple illustre les difficultés qui peuvent apparaître quand un mauvais choix des fonctions d'essai est employé dans le principe variationnel.

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

Comme les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\psi_\beta^-|$  ne peuvent pas être connus de façon exacte nous allons prendre comme états d'essai les vecteurs  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$  soit :

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \quad (\text{II.15a})$$

et

$$\langle\tilde{\psi}_\beta^-| = \langle\psi_\beta^-| + \langle\delta\psi_\beta^-| \quad (\text{II.15b})$$

En développant  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$  sur les états d'une base tronquée  $\{|i\rangle\}$  et  $\langle j|$  respectivement (les deux ensembles ne sont pas nécessairement identiques mais ils ont la même dimension finie N) :

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \quad (\text{II.16a})$$

$$\langle\tilde{\psi}_\beta^-| = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j| \quad (\text{II.16b})$$

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

En rapportant ces états d'essais dans l'expression (II.8) nous obtenons ainsi l'amplitude de transition approchée  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ , soit :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_C|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle \langle\tilde{\psi}_\beta^-|V_C|\alpha\rangle}{\langle\tilde{\psi}_\beta^-|V_C - V_C G_C^+ V_C|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle} \quad (\text{II.17})$$

On peut déduire à partir des équations (II.6) et (II.15a,b), l'équation suivante:

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[ \langle\beta| - \langle\tilde{\psi}_\beta^- - \delta\psi_\beta^- | (1 - V_C G_C^+) | V_C | \delta\psi_\alpha^+ \rangle + \langle\delta\psi_\beta^- | V_C [ |\alpha\rangle - (1 - G_C^+ V_C) | \tilde{\psi}_\alpha^+ - \delta\psi_\alpha^+ \rangle \right] \quad (\text{II.18})$$

Il est facile de montrer que pour toute variation en 1<sup>er</sup> ordre en  $|\delta\psi_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\delta\psi_\beta^-|$ ,  $\delta T_{\beta\alpha} = 0$ .

Maintenant au moyen de l'équation  $\delta T_{\beta\alpha} = 0$  et en remplaçant les vecteurs  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$  par les développements cités précédemment par les équations (II.16a,b), nous obtenons pour les coefficients  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j$ , composantes des états de diffusion approchés, les deux équations couplées suivantes :

$$\begin{cases} \langle j|V_C|\alpha\rangle - \sum_{i=1}^N \tilde{a}_{i\alpha} \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle = 0 \\ \langle\beta|V_C|i\rangle - \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle = 0 \end{cases} \quad (\text{II.19})$$

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

$$D_{ji} = \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle \quad (\text{II.20})$$

et par  $V_\alpha$  et  $V_\beta$  les vecteurs colonnes dont les éléments sont respectivement:

$$(V_\alpha)_j = \langle j|V_C|\alpha\rangle \quad (\text{II.21a})$$

$$(V_\beta)_i = \langle i|V_C|\beta\rangle \quad (\text{II.21b})$$

puis par  $\tilde{a}$  et  $\tilde{b}$  les vecteurs colonnes dont les éléments sont  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j$ , les deux équations couplées données par le système (II.19) peuvent être exprimées sous une forme matricielle, soit:

$$V_\alpha = D \cdot \tilde{a} \quad (\text{II.22a})$$

$$(V_\beta^*)^t = \tilde{b}^* \cdot D \quad (\text{II.22b})$$

ou encore en utilisant les propriétés algébriques des matrices :

$$\tilde{a} = D^{-1} \cdot V_\alpha \quad (\text{II.23a})$$

$$\tilde{b}^* = (V_\beta^*)^t \cdot D^{-1} \quad (\text{II.23b})$$

Ces deux équations permettent de donner les solutions pour les composantes  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j$  des états d'essai  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$ .

Enfin, en injectant ces deux états d'essai  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$  dans l'expression (II.17) de l'amplitude de transition approchée  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$  on obtient :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle\beta|V_C|i\rangle \tilde{a}_i \tilde{b}_j^* \langle j|V_C|\alpha\rangle}{\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle \tilde{a}_i} \quad (\text{II.24})$$

ou sous forme matricielle : 
$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\left[ \left( \mathbf{V}_{\beta}^* \right) \cdot \tilde{\mathbf{a}} \right] \left[ \tilde{\mathbf{b}}^* \cdot \mathbf{V}_{\alpha} \right]}{\tilde{\mathbf{b}}^* \cdot \mathbf{D} \cdot \tilde{\mathbf{a}}} \quad (\text{II.25})$$

On peut écrire aussi  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$  autrement et ceci en utilisant les deux équations (II.23a,b) :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \left( \mathbf{V}_{\beta}^* \right)^t \cdot \tilde{\mathbf{a}} = \tilde{\mathbf{b}}^* \cdot \mathbf{V}_{\alpha} = \left( \mathbf{V}_{\beta}^* \right)^t \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{V}_{\alpha} \quad (\text{II.26})$$

ou encore sous une forme plus explicite :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \langle \beta | \mathbf{V}_C | \tilde{\psi}_{\alpha}^+ \rangle = \langle \tilde{\psi}_{\beta}^- | \mathbf{V}_C | \alpha \rangle \quad (\text{II.27})$$

qui représente deux formes dites «post» et «prior» de l'amplitude de transition approchée  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$  en fonction des états d'essai de diffusion  $|\tilde{\psi}_{\alpha}^+\rangle$  et  $\langle \tilde{\psi}_{\beta}^-|$ .

Finalement, en explicitant les deux vecteurs  $\tilde{\mathbf{a}}$  et  $\tilde{\mathbf{b}}^*$  en fonction des solutions (II.23a,b) nous obtenons à partir de l'équation (II.26) :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | \mathbf{V}_C | i \rangle \left( \mathbf{D}^{-1} \right)_{ij} \langle j | \mathbf{V}_C | \alpha \rangle \quad (\text{II.28})$$

où  $D_{ji} = \langle j | \mathbf{V} - \mathbf{V}G_T^+ \mathbf{V} | i \rangle$  et  $\left( \mathbf{D}^{-1} \right)_{ij}$  désigne l'élément de matrice  $\mathbf{D}^{-1}$ , inverse de la matrice  $\mathbf{D}$  relative aux vecteurs de base  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$ .

En conclusion, nous pouvons dire que nous venons de déterminer l'amplitude de transition approchée  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$  en fonction des états de diffusion approchés qui ont été développés dans un sous espace vectoriel de dimension  $N$  finie.

## II-3. Amplitude variationnelle de Schwinger pour l'excitation directe:

Dans le formalisme du paramètre d'impact spécialement adapté à l'excitation directe, le calcul de l'amplitude de transition variationnelle a été décrit précédemment par M. Bouamoud (1988) [18], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [19], B. Lasri (1998) [20] et B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (1998) [21,22]. Ainsi, notre objectif primordial dans cette partie, est d'appliquer le principe variationnel de Schwinger à l'excitation d'un système hydrogénoïde par impact d'ions aux vitesses intermédiaires.

Comme la principale contribution à la transition considérée se produit aux petit angles (par exemple  $< 10^{-3}$  rd pour une collision de type  $\text{H}^+ \rightarrow \text{H}$  à une énergie égale à 50 Kev) on peut

considérer que le projectile décrit une trajectoire rectiligne, et donc traiter ce problème dans le cadre de l'approximation iconale.

La méthode iconale est une approche semi-classique qui consiste à supposer que les noyaux se déplacent d'une façon classique tandis que le mouvement des électrons est traité d'une manière quantique. Pour cela, considérons une collision entre un projectile de masse  $M_P$  et de charge  $Z_P$  et une cible de masse  $M_T$  et de charge  $Z_T$ .

Dans la méthode du paramètre d'impact fondée sur la description du mouvement relatif des noyaux suivant une trajectoire classique rectiligne, la séparation internucléaire est donnée par:

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \quad (\text{II.29a})$$

$$\vec{z} = \vec{v} \cdot t \quad (\text{II.29b})$$

$$\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{II.29c})$$

où :

$\vec{R}$  est la distance internucléaire.

$\vec{\rho}$  est le paramètre d'impact.

$\vec{v}$  est la vitesse relative du projectile.

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

La géométrie du système est décrite par la figure II-1 suivante :

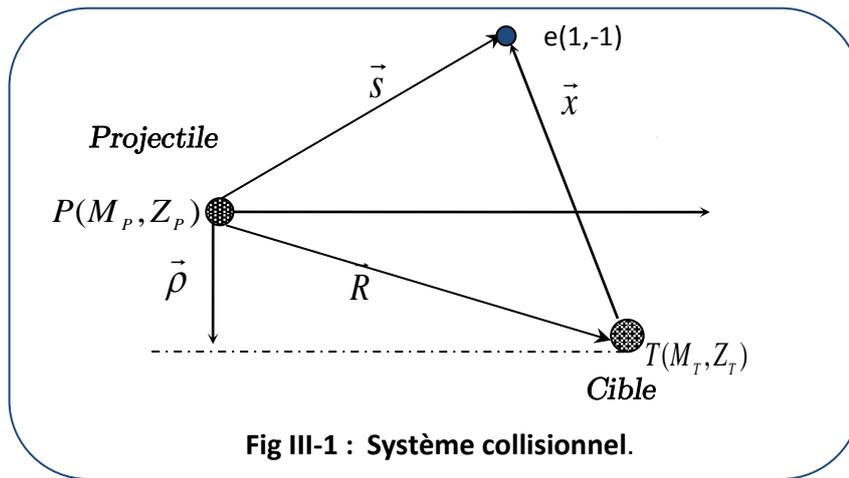


Fig III-1 : Système collisionnel.

Avec :  $\vec{x}$  la position de l'électron relative à la cible T et  $\vec{s}$  la position de l'électron relative au projectile P.

En adoptant un repère du centre de masse projectile-cible, l'hamiltonien total du système dans le cas d'une seule voie de réarrangement  $c$ , est donné par :

$$H = H_C + V_C \quad (\text{II.30})$$

$H_C$  est l'hamiltonien des particules sans interaction donné par  $H_C = H_T + T_P$ , avec :

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \quad (\text{II.31a})$$

et

$$T_P = -\frac{1}{2\mu} \Delta_R \quad (\text{II.31b})$$

où  $\mu$  représente la masse réduite donnée par :

$$\mu = \frac{M_p(M_T + 1)}{M_p + M_T + 1} \quad (\text{II.33})$$

$V_C$  est le potentiel d'interaction entre les particules en collision. Ce potentiel se met sous la forme :

$$V_C = \frac{Z_p Z_T}{R} - \frac{Z_p}{S} \quad (\text{II.34})$$

Le potentiel inter-agrégat  $V_{\text{int}}$  est défini par l'interaction coulombienne de longue portée entre le projectile et la cible, à savoir :

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_p(Z_T - 1)}{R} \quad (\text{II.35})$$

où  $Z_p$  et  $Z_T$  désignent respectivement la charge du projectile et celle de la cible.

En 1972, R. K. Janev et A. Salin [23] puis en 1979, D. Z. Belkic, R. Gayet et A. Salin [24] ont montré que les sections efficaces totales sont indépendantes du potentiel inter-agrégat  $V_{\text{int}}$  donné par l'équation (II.35). Dans le calcul de l'amplitude de transition, l'influence de ce potentiel se réduit à un facteur de phase dépendant du paramètre d'impact  $\vec{\rho}$  donné par  $\frac{2iZ_p(Z_T-1)}{\rho v}$ . Par contre sa contribution à la section efficace différentielle doit être réintroduite. Ceci nous conduit à négliger l'influence du potentiel inter-agrégat lors du calcul de l'amplitude de transition, et définir ainsi l'interaction responsable de l'excitation comme :

$$V = V_C - \frac{Z_p(Z_T - 1)}{R} \quad (\text{II.36a})$$

$$= Z_P \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right) \quad (\text{II.36b})$$

Dans une collision sans réarrangement, et selon le formalisme du paramètre d'impact, les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$  et  $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ , vecteurs propres de l'hamiltonien total du système, satisfaisant respectivement aux conditions d'onde sortante et entrante sont définis grâce aux équations de Lippmann-Schwinger iconales:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z') V(z') |\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (\text{II.37a})$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z') V(z') |\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (\text{II.37b})$$

où  $V$  est le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible.  $|\alpha(z)\rangle$  et  $|\beta(z)\rangle$  sont respectivement les états initial et final de la cible.

finalement, et si on adopte la notation  $( | )$  qui indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques ainsi que la coordonnée  $Z$  de  $\vec{R}$  c.a.d  $(k | \Theta | k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz [k | \Theta | k']$  où  $\Theta$  dénote un opérateur, et pour des cas où  $\alpha \neq \beta$ , les expressions (III.20a,-c) et (III.22) peuvent être écrites sous une forme condensée :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} (\beta | V | \psi_\alpha^+) \quad (\text{II.38a})$$

$$= -\frac{i}{v} (\psi_\beta^- | V | \alpha) \quad (\text{II.38b})$$

$$= -\frac{i}{v} (\psi_\beta^- | V - V G_T^+ V | \psi_\alpha^+) \quad (\text{II.38c})$$

Maintenant à partir de ces trois formes de  $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  et d'une façon complètement analogue à l'établissement de la forme variationnelle (II.8) dans le cas d'une collision directe (une seule voie de réarrangement), on obtient l'amplitude de transition variationnelle sous sa forme dite forme iconale du principe variationnel de Schwinger, soit:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) (\beta | V | \psi_\alpha^+) \left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_\beta^- | V | \alpha)}{\left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_\beta^- | V - V G_T^+ V | \psi_\alpha^+)} \quad (\text{II.39})$$

qui est stationnaire pour de petites variations arbitraires des états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  autour de leurs valeurs exactes. Et comme ces états de diffusion ne sont pas connus d'une façon exacte, et d'une manière quasiment similaire à la précédente établie, on aboutit à une forme approchée de l'amplitude de transition variationnelle  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \frac{(\beta|V|\tilde{\psi}_\alpha^+) (\tilde{\psi}_\beta^-|V|\alpha)}{(\tilde{\psi}_\beta^-|V-VG_T^+V|\tilde{\psi}_\alpha^+)} \quad (\text{II.40})$$

Lors du développement des états de diffusion approché  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et de  $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$  sur la base tronquée  $\{|i\rangle\}$  et  $\{|j\rangle\}$  respectivement, les deux séries de base ne sont pas nécessairement identiques mais elles doivent avoir la même dimension finie N.

Alors, en employant la condition de stationnarité,  $\delta\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = 0$ , on arrive à séparer deux séries finies d'équations linéaires pour les coefficients des développements : un pour  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et l'autre  $|\psi_\beta^-\rangle$ . La résolution de ces séries d'équations linéaires fournit des solutions approximatives de  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$ , notées  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ .

Finalement, le remplacement des états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$ , par leurs expressions approximatives dans l'équation (III.25), mène à la forme plus pratique suivante de l'amplitude de transition :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i) (D^{-1})_{ij} (j|V|\alpha) \quad (\text{II.41})$$

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

$$D_{ji} = (j|V-VG_T^+V|i) \quad (\text{II.42})$$

Dans le formalisme du paramètre d'impact, la section efficace totale est donnée par :

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

Et puisque le système présente une symétrie azimutale, la section efficace totale devient :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad (\text{II.44})$$

Cette expression détermine la section efficace totale pour un processus d'excitation. Elle reste toujours valable tant que la méthode du paramètre d'impact est justifiée.

## Remarque :

Du fait que  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  ne nécessite aucune intégration sur le paramètre d'impact  $\vec{\rho}$ , on a pu s'affranchir d'une difficulté majeure, celle de la divergence qui apparaît dans l'évaluation des éléments de matrice de type  $(i|V|j)$  et  $(i|V G_T^+ V|j)$  entre certains états hydrogènoïdes dégénérés, lors d'un calcul quantique quand on intègre sur le paramètre d'impact  $\vec{\rho}$ .

Notons que tous les états de la cible ont été pris en compte dans la représentation de l'opérateur de Green. Nous avons également trouvé un moyen d'inclure tous les états du spectre discret et ceux du continuum.

Lors du développement des états de diffusion approchés  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$  nous avons pris une base constituée seulement par l'ensemble des états de la cible (spectre discret) et nous avons ignoré l'inclusion des états de capture sur le projectile. Ceci suppose que l'effet du couplage, entre la capture et l'excitation qui existe dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, doit être faible pour que le principe variationnel reste valable et ceci est vrai lorsque la charge du projectile est plus faible que celle du noyau de la cible.

Pour évaluer l'amplitude de transition variationnelle deux sortes d'éléments matriciels doivent être calculés :

- Éléments de matrice de type  $(j|V|i)$  dit de Born-I.
- Éléments de matrice de type  $(j|V G_T^+ V|i)$  dit de Born-II.

# Références

- [1]- L. Hulthén, K. Fysiogr. Sällsk. Lund. Förh. 14, 257 (1944).
- [2]- W. Kohn, Phys. Rev. 74, 1763 (1948).
- [3]- S.I. Rubinow, Phys. Rev. 96, 218 (1954).
- [4]- T.N. Rescigno, C.W. McCurdy, A.E. Orel, and B.H. Lengsfeld III, "The Complex Kohn Variational Method," chapter 1 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco, Plenum Press, New York, 1995
- [5]- J.L. Jackson, Phys. Rev. 83, 301 (1951).
- [6]- R.K. Nesbet, Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory, Plenum Press, New York (1980).
- [7]- B.I. Schneider, "An R-Matrix Approach to Electron Molecule Collisions" chapter 8 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco, Plenum Press, New York, 1995
- [8]- J. Schwinger, Phys. Rev. 56,750 (1947).
- [9]- R.R. Lucchese, K. Takatsuka, and V. McKoy, Phys. Rep. 131, 147 (1986).
- [10]- D.K. Watson, Adv. At. Mol. Phys. 25, 221 (1988).
- [11]- M.A.P. Lima, T.L. Gibson, L.M. Brescansin, V. McKoy, and W.M. Huo, "**Studies of Elastic and Electronically Inelastic Electron-Molecule Collisions**," in Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions, ed. L.C. Pitchford, B.V. McKoy, A. Chutjian, and S. Trajmar, Springer-Verlag, New York (1987), pp 239-264.
- [12]- C. Winstead and V. McKoy, "Studies of Electron-Molecule Collisions on Highly Parallel Computers," in Modern Electronic Structure Theory Vol. 2, ed. D. Yarkony, World Scientific, Singapore (1994).
- [13]- D.K. Watson and V. McKoy, Phys. Rev. A 20, 1474 (1979).
- [14]- R.R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, Phys. Rev. A 25, 2572 (1982).
- [15]- G. Bandarage and R.R. Lucchese, Phys. Rev. A 47, 1989 (1993); M.-T. Lee, K. Wang, and V. McKoy, J. Chem. Phys. 97, 3108 (1992).
- [16]- M.-T. Lee, M.M. Fujimoto. S.E. Michelin, L.E. Machado, and L.M. Brescansin, J.Phys. B. 25, L505 (1992).

- [17]- M.-T. Lee, S.E. Michelin, L.M. Brescansin, G.D. Meneses, and L.E. Machado, J. Phys. B. 28, L477 (1993).
- [18]- 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.
- [19]- R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 515-522 (1989).
- [20]- B. Lasri, **Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation<sup>2</sup>**, Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen 28 Juin (1998).
- [21]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, Physical and Chemical News Journal. Volume 20, November 2004, p. 12 -17.
- [22]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 251,pp66–72 (2006).
- [23]- R. k. Janev et A. Salin, Ann. Phys. N.Y 73 (1972) 136.
- [24]- DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, Phys. Report 56 (1979) 279.

# Chapitre III

## **Excitation électronique de l'ion Heliumoïde hautement chargé $Fe^{24+}(1s^2)$ avec des atomes des gaz rares aux énergies intermédiaires : effet de saturation des sections efficaces totales d'excitation.**

### **III-1. Introduction :**

Durant ces dernières années, l'étude des processus de collision mono-électronique au régime de vitesses intermédiaires ont subi des développements très intensifs. Expérimentalement, il a été observé que les sections efficaces totales d'excitation des ions Heliumoïdes et Hydrogéoïdes entrant en collision avec des atomes neutres ont tendance à se saturer quand la charge nucléaire des atomes augmente (Wohrer et al (1986) [1], Xiangyuan Xu et al (1988) [2]). Ce phénomène a été modélisé théoriquement par Brendlè et Gayet 1985 [3]; Bouamoud 1988 [4], Bouamoud et Gayet 1989 [5], Lasri, Bouamoud, Gayet 2004 [6] grâce à l'approche variationnelle de Schwinger; et par (Deco et al 1986 [7], Reinhold et Miraglia 1987 [8]) grâce au formalisme des ondes distordues et même avec un calcul close coupling (Reading et al 1981 [9], Mukoyama et Lin (1989) [10]).

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 impact de projectiles neutres aux vitesses d'impact intermédiaires [1,3-6][11,12].

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 Heliumoïdes et Hydrogénoïdes.

Dans cette partie de thèse, nous nous sommes fixés l'objectif d'étudier l'excitation de l'ion héliumoïde  $Fe^{24+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 36 incluant celle des gaz rares (He,  $N_2$ , Ar et Kr) à une énergie de 400 MeV. Expérimentalement, ces atomes jouent le rôle de projectiles. En effet, à une vitesse d'impact donnée, la saturation apparaît quand la charge nucléaire du projectile augmente à une valeur comparable à (ou plus grande que) la charge nucléaire de la cible. Avec des projectiles neutres, le processus de capture électronique est fortement exclu parce que c'est un processus de deuxième d'ordre qui peut se produire seulement si au moins un électron est enlevé du projectile. Donc, le couplage entre l'excitation et les voies de capture peut être négligé, introduisant ainsi une mise en œuvre plus simple de notre approche pour étudier les processus d'excitation. De plus, négliger ce couplage présente un avantage considérable : il nous permet de faire des prédictions pour n'importe quelle charge nucléaire du projectile une fois que les calculs ont été faits pour une seule charge de projectile (Brendlé et al 1985 [3]), généralement cette charge vaut 1. Cependant, quand l'excitation est due à un ion, le processus de capture ne peut être négligé pour des vitesses d'impact plus basses que la vitesse électronique sur l'orbitale initiale (Gayet 1983 [13]).

En contradiction avec l'approximation de Born au premier ordre (Born-I), la saturation observée a été établie par Brendlé et al [3], Gayet et Bouamond [5] et Lasri et al [6] en utilisant la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger. Plus tard, une semblable saturation a été décrite par Mukoyama et Lin [10] en se référant à une méthode totalement différente, celle de Close-Couling. La convergence asymptotique des sections efficaces d'excitation obtenues dans des procédures théoriques différentes a été conceptuellement attribuée à l'incorporation des effets d'ordre plus élevés, ignorée dans la totalité des théories de premier ordre.

Les calculs théoriques ont été améliorés en incluant la contribution de la totalité du spectre discret ainsi que celui du continuum des états  $\nu l$  de la cible (états  $|\nu\rangle$ ) dans la

représentation  $G_T^+$  et ceci grâce au comportement en  $v^{-3}$  des éléments de matrice de second ordre de type Born  $(i|VG_T^+V|j)$  malgré que la contribution de cette dernière s'avère petite sans toutefois être négligeable (Lasri 1998 [11]). De plus, la base sur laquelle les fonctions d'ondes  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  ont été développées, est élargie de 5 états (1s, ns, np0, np+1, np-1) notée Schw55 afin d'aboutir à une meilleure représentation du propagateur  $G_T^+$  qui va nous mener sûrement à une description plus précise et assez complète de ce processus. Tous les résultats obtenus ont été comparés aux données expérimentales disponibles et à d'autres prédictions théoriques.

### III-2. Excitation de l'ion $Fe^{24+}(1s^2)$ :

Dans cette partie, notre modèle est appliqué de nouveau à l'excitation de l'ion  $Fe^{24+}$  en collision avec divers atomes incluant ceux des gaz rares à une énergie de 400 MeV qui va correspondre à une vitesse d'impact de 16.91 a.u. En première approximation, les électrons du projectile peuvent être considérés comme des électrons libres entrant en collision avec la cible  $Fe^{24+}$  avec une vitesse d'impact de 16.91 a.u.

Puisqu'une vitesse d'environ 22 a.u est exigée pour que des électrons libres puissent probablement exciter la raie Lyman- $\alpha$  de l'ion heliumoïde  $Fe^{24+}$ , l'électron du projectile ne va pas l'exciter directement. Pour des paramètres d'impact extrêmement inférieurs au rayon de la couche K, le noyau du projectile semble beaucoup plus probable et plus favorable à exciter directement  $Fe^{24+}$  que des électrons attachés. Ainsi, un modèle considère que l'excitation directe peut être due principalement à l'interaction coulombienne entre la cible  $Fe^{24+}$  et le noyau du projectile. Les autres processus, comme l'ionisation simultanée de  $Fe^{24+}$  et le transfert de charge à  $Fe^{24+}$  pourraient aussi être invoqués.

Cependant, la charge  $Z_T$  est déduite à partir de la table de Clementi et Roeti [35], et choisie d'une façon à être proche de la charge vue par l'électron actif (c'est l'écran total fait par l'électron passif):

$$Z_T^{eff} = \sqrt{-2\epsilon_{1s}} \quad (V-1)$$

où  $\epsilon_{1s}$ : désigne l'énergie de Hartree-fock de l'orbitale 1s dans la configuration 1s2,  $Z_T^{eff} = 25,37$ , et par conséquent la charge  $Z_T$  est donnée égale à  $Z_T = 25$ .

Dans ce qui suit nous ignorons l'électron passif ainsi la transition  $(1s2) \rightarrow (1s, nl)$  se réduit à l'écriture  $1s \rightarrow nl$ . Dans le but de décrire l'excitation de  $Fe^{24+}(1s^2)$ , nous avons

d'abord testé la méthode en représentant les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  respectivement par les états initial et final de la transition considérée, les sections efficaces qui en résultent sont notées Schw-B.

En effet, 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 0.67639 a.u, et pour un paramètre d'impact réduit  $\gamma = Z_T \rho$ .

Du fait que le choix de Brendlé [3] d'une base de deux vecteurs représentant seulement les états initial et final s'avérait insuffisant, en 1998 [11] et comme première étape nous avons élargi la base à cinq états (Schw55).

Les figures 1 et 2 ainsi que les tableaux 1, 2 et 3 reproduisent respectivement les valeurs des sections efficaces totales d'excitation des états (1s,2s), (1s,2p) de l'ion  $Fe^{24+}(1s^2)$  par impact de noyau de charge  $Z_P$  obtenues dans les différentes approches : approximation de Born au premier ordre (Born-I), de deuxième ordre (Born-II) ainsi que l'approximation de Schwinger-Born (Schw-B), l'approximation de Schwinger à 5 états (Schw55).

Dans les différents tableaux les résultats Schw55 font référence à notre approche variationnelle avec 5 états de base en incluant l'influence des états du continuum.

Pour ce faire, le programme de calcul conçu en Fortran est divisé en deux parties principales :

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

Dans un premier cas, et en utilisant un développement à 5 états noté Schw55, on considère  $B_1$  et  $B_2$  deux ensembles de base où les cinq états de base utilisés dans l'excitation du niveau  $n=2$  et  $n=3$  sont  $\{1s, 2s, np_0, np_1, np_{-1}\}$  ainsi la matrice  $D$  à inverser peut être définie comme suit :

$$\begin{array}{c} 1s \quad 2s \quad 2p_0 \quad 2p_1 \quad 2p_{-1} \\ \begin{array}{c} 1s \\ 2s \\ 2p_0 \\ 2p_1 \\ 2p_{-1} \end{array} \left[ \begin{array}{ccccc} X & X & X & X & \xi \\ & X & X & X & \xi \\ & & X & X & \xi \\ & & & X & X \\ & & & & \xi \end{array} \right] \end{array}$$

Sur la figure 2 sont représentés les résultats expérimentaux de Wohrer et al [1] relatifs aux transitions  $1s \rightarrow 2p$

Du point de vue expérimental, on envoie des ions  $Fe^{24+}$  de 400 Mev sur des cibles gazeuses de He,  $N_2$ , Ar et Kr. Dans notre traitement théorique les noyaux de ces cibles gazeuses au repos dans le repère du laboratoire représentent les projectiles excitateurs. Les sections efficaces totales d'excitations des états  $2p$  et  $3p$  sont trouvées à partir des intensités Lyman- $\alpha$  et Lyman- $\beta$  respectivement après avoir divisé par un facteur de 2 pour donner la section efficace par électron (cercles vides sur les figures). Ceci vient du fait que la probabilité  $P$  d'observer une seule transition électronique est donnée par:

$$P = 2P_E(1 - P_E)$$

où  $P_E$  est la probabilité d'exciter un seul électron, dans le cas où  $P_E$  est faible devant 1, nous obtenons  $P = 2P_E$ . Le tableau suivant donne les valeurs expérimentales des sections efficaces totales d'excitation.

**Tableau 1 : Résultats expérimentaux Wohrer et al [1]**

	He ( $10^{-21} \text{ cm}^2$ )	$N_2$ ( $10^{-20} \text{ cm}^2$ )	Ar ( $10^{-19} \text{ cm}^2$ )	Kr ( $10^{-19} \text{ cm}^2$ )
<b>2p<math>\rightarrow</math>1s</b>	$3.4 \pm 1.4$	$5.8 \pm 2.6$	$1.0 \pm 0.45$	$1.1 \pm 0.6$
<b>3p<math>\rightarrow</math>1s</b>	$0.65 \pm 0.29$	$0.80 \pm 0.44$	$0.14 \pm 0.08$	$0.13 \pm 0.07$

Les sections efficaces par électrons sont extraites après soustraction de la contribution du double processus simultané d'ionisation de  $Fe^{24+}$  par un atome du gaz et de la capture d'un électron à partir de celui-ci (cercle plein sur les figures).

### III-2.1. Excitation de l'état $(1s,2s)$ du $Fe^{24+}(1s^2)$ :

Table III-2 : Excitation du  $Fe^{24+}(1s^2)$  ( $cm^2$ ) de l'état  $(1s,2s)$  par impact des différents noyaux de charges  $Z_P$ .

$Z_P$	Born I	Born II	Schw-B	Schw55
1	$1.15257 \cdot 10^{-22}$	$1.26386 \cdot 10^{-22}$	$1.25402 \cdot 10^{-22}$	$1.23163 \cdot 10^{-22}$
2	$4.61028 \cdot 10^{-22}$	$5.58597 \cdot 10^{-22}$	$5.44173 \cdot 10^{-22}$	$5.08655 \cdot 10^{-22}$
3	$1.03731 \cdot 10^{-21}$	$1.39543 \cdot 10^{-21}$	$1.33-227 \cdot 10^{-21}$	————
4	$1.84411 \cdot 10^{-21}$	$2.76129 \cdot 10^{-21}$	$2.60097 \cdot 10^{-21}$	$2.01757 \cdot 10^{-21}$
5	$2.88143 \cdot 10^{-21}$	$4.8062 \cdot 10^{-21}$	$4.53337 \cdot 10^{-21}$	————
6	$4.14926 \cdot 10^{-21}$	$7.70581 \cdot 10^{-21}$	$7.44658 \cdot 10^{-21}$	————
7	$5.6476 \cdot 10^{-21}$	$1.16614 \cdot 10^{-20}$	$1.1875 \cdot 10^{-20}$	$5.85257 \cdot 10^{-21}$
8	$7.37646 \cdot 10^{-21}$	$1.68998 \cdot 10^{-20}$	$1.82465 \cdot 10^{-20}$	————
9	$9.33583 \cdot 10^{-21}$	$2.36735 \cdot 10^{-20}$	$2.61661 \cdot 10^{-20}$	————
10	$1.15257 \cdot 10^{-20}$	$3.-22607 \cdot 10^{-20}$	$3.67693 \cdot 10^{-20}$	————
11	$1.39461 \cdot 10^{-20}$	$4.2965 \cdot 10^{-20}$	$5.47375 \cdot 10^{-20}$	————
12	$1.6597 \cdot 10^{-20}$	$5.51021 \cdot 10^{-20}$	$8.53239 \cdot 10^{-20}$	$1.55392 \cdot 10^{-20}$
13	$1.94785 \cdot 10^{-20}$	$6.95605 \cdot 10^{-20}$	$1.-22324 \cdot 10^{-19}$	————
16	$2.95058 \cdot 10^{-20}$	$1.24-228 \cdot 10^{-19}$	$1.58991 \cdot 10^{-19}$	————
18	$3.73433 \cdot 10^{-20}$	$1.69763 \cdot 10^{-19}$	$1.47847 \cdot 10^{-19}$	$2.91007 \cdot 10^{-20}$
20	$4.61028 \cdot 10^{-20}$	$2.-2214 \cdot 10^{-19}$	$1.29074 \cdot 10^{-19}$	————
26	$7.79138 \cdot 10^{-20}$	$4.23554 \cdot 10^{-19}$	$8.66307 \cdot 10^{-20}$	————
28	$9.03616 \cdot 10^{-20}$	$5.05035 \cdot 10^{-19}$	$7.84902 \cdot 10^{-20}$	————
30	$1.03731 \cdot 10^{-19}$	$5.92857 \cdot 10^{-19}$	$7.21027 \cdot 10^{-20}$	————
34	$1.33237 \cdot 10^{-19}$	$7.78759 \cdot 10^{-19}$	$6.28291 \cdot 10^{-20}$	————
36	$1.49373 \cdot 10^{-19}$	$8.74799 \cdot 10^{-19}$	$5.93865 \cdot 10^{-20}$	$6.29631 \cdot 10^{-20}$
40	$1.84285 \cdot 10^{-19}$	$1.07024 \cdot 10^{-18}$	$5.40495 \cdot 10^{-20}$	$6.83626 \cdot 10^{-20}$
$\infty$	————	————	$2.58241 \cdot 10^{-20}$	$1.21584 \cdot 10^{-19}$

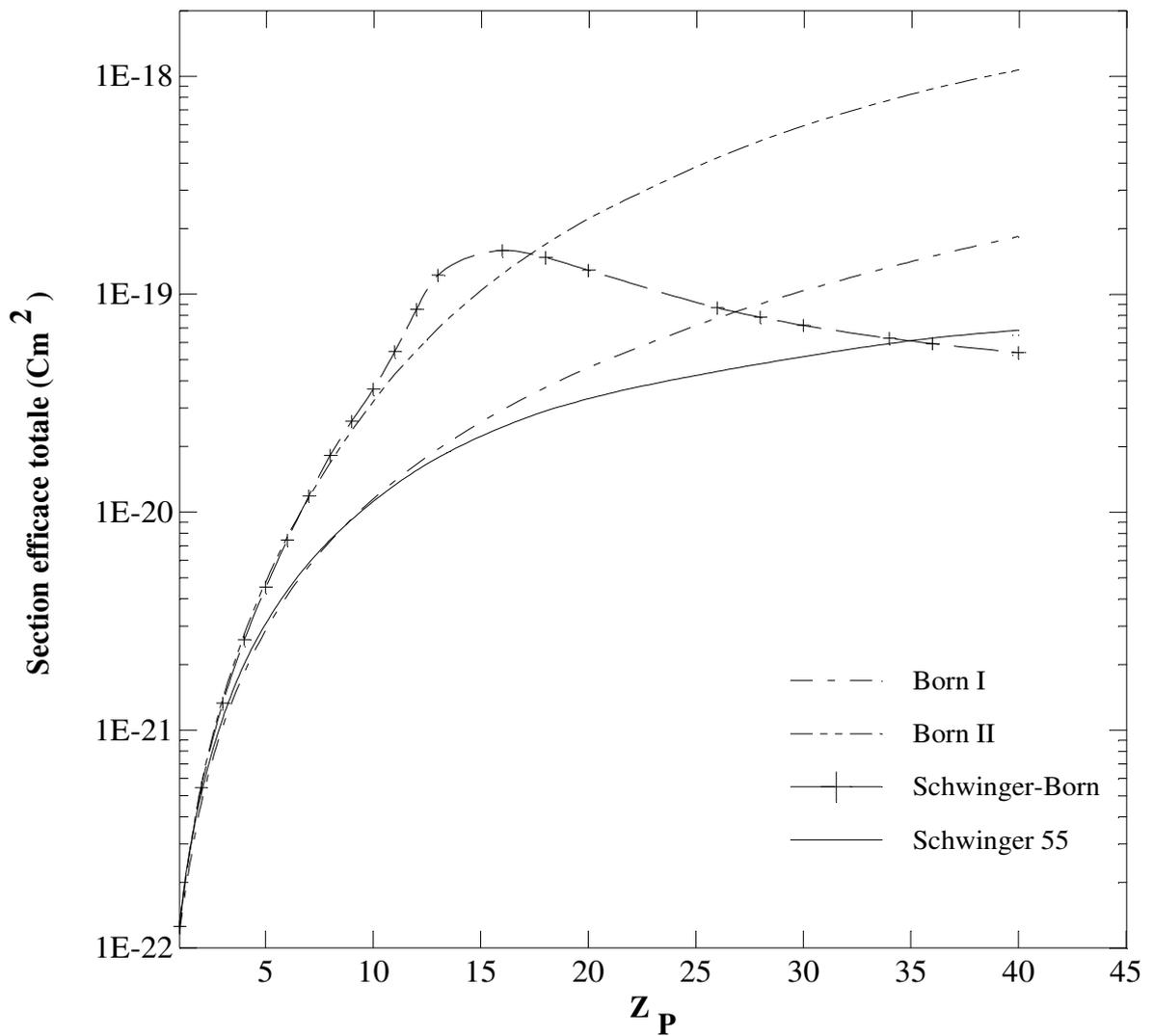


Figure 1 : Section efficace totale d'excitation par électron de l'état (1s, 2s) d'ion  $Fe^{24+}$  à 400 MeV par des noyaux de charge  $Z_P$  à 400 MeV. La section efficace totale est donnée en  $cm^2$ .

**III-2.2. Excitation de l'état (1s,2p) du  $Fe^{24+}(1s^2)$ :**Tableau III-3: Excitation de l'état (1s , 2p) du  $Fe^{24+}(1s^2)$  ( $cm^2$ ) par impact des différents noyaux de charges  $Z_P$  .

$Z_P$	Born I	Born II	Schw-B	Schw55
1	$4.036486 \cdot 10^{-22}$	$3.89575 \cdot 10^{-22}$	$3.880682 \cdot 10^{-22}$	$3.879678 \cdot 10^{-22}$
2	$1.614593 \cdot 10^{-21}$	$1.513255 \cdot 10^{-21}$	$1.491457 \cdot 10^{-21}$	$1.485474 \cdot 10^{-21}$
3	$3.632836 \cdot 10^{-21}$	$3.328782 \cdot 10^{-21}$	$3.227424 \cdot 10^{-21}$	————
4	$6.45838 \cdot 10^{-21}$	$5.82767 \cdot 10^{-21}$	$5.52806 \cdot 10^{-21}$	$5.37386 \cdot 10^{-21}$
5	$1.00912 \cdot 10^{-20}$	$9.03516 \cdot 10^{-21}$	$8.33988 \cdot 10^{-21}$	————
6	$1.453134 \cdot 10^{-20}$	$1.301023 \cdot 10^{-20}$	$1.162153 \cdot 10^{-20}$	————
7	$1.977878 \cdot 10^{-20}$	$1.784568 \cdot 10^{-20}$	$1.534139 \cdot 10^{-20}$	$1.07824 \cdot 10^{-20}$
8	$2.583354 \cdot 10^{-20}$	$2.366796 \cdot 10^{-20}$	$1.947568 \cdot 10^{-20}$	————
9	$3.26955 \cdot 10^{-20}$	$3.063736 \cdot 10^{-20}$	$2.40067 \cdot 10^{-20}$	————
10	$4.036486 \cdot 10^{-20}$	$3.89479 \cdot 10^{-20}$	$2.89219 \cdot 10^{-20}$	————
11	$4.884142 \cdot 10^{-20}$	$4.88273 \cdot 10^{-20}$	$3.42129 \cdot 10^{-20}$	————
12	$5.81253 \cdot 10^{-20}$	$6.05371 \cdot 10^{-20}$	$3.987454 \cdot 10^{-20}$	$1.535708 \cdot 10^{-20}$
13	$6.82165 \cdot 10^{-20}$	$7.36941 \cdot 10^{-20}$	$4.590488 \cdot 10^{-20}$	————
16	$1.03334 \cdot 10^{-19}$	$1.252671 \cdot 10^{-19}$	$6.62211 \cdot 10^{-20}$	————
18	$1.307821 \cdot 10^{-19}$	$1.685178 \cdot 10^{-19}$	$8.1667 \cdot 10^{-20}$	$2.01008 \cdot 10^{-20}$
20	$1.614593 \cdot 10^{-19}$	$2.204406 \cdot 10^{-19}$	$9.87076 \cdot 10^{-20}$	————
26	$2.728664 \cdot 10^{-19}$	$4.313106 \cdot 10^{-19}$	$1.603236 \cdot 10^{-19}$	————
28	$3.164604 \cdot 10^{-19}$	$5.24474 \cdot 10^{-19}$	$1.847304 \cdot 10^{-19}$	————
30	$3.632836 \cdot 10^{-19}$	$6.31379 \cdot 10^{-19}$	$2.112702 \cdot 10^{-19}$	————
34	$4.666178 \cdot 10^{-19}$	$8.96099 \cdot 10^{-19}$	$2.711678 \cdot 10^{-19}$	————
36	$5.23128 \cdot 10^{-19}$	$1.056164 \cdot 10^{-18}$	$3.046734 \cdot 10^{-19}$	$3.093672 \cdot 10^{-20}$
40	$6.45838 \cdot 10^{-19}$	$1.381073 \cdot 10^{-18}$	$3.788162 \cdot 10^{-19}$	$3.280604 \cdot 10^{-20}$
$\infty$	————	————	$2.238684 \cdot 10^{-18}$	$6.30186 \cdot 10^{-20}$

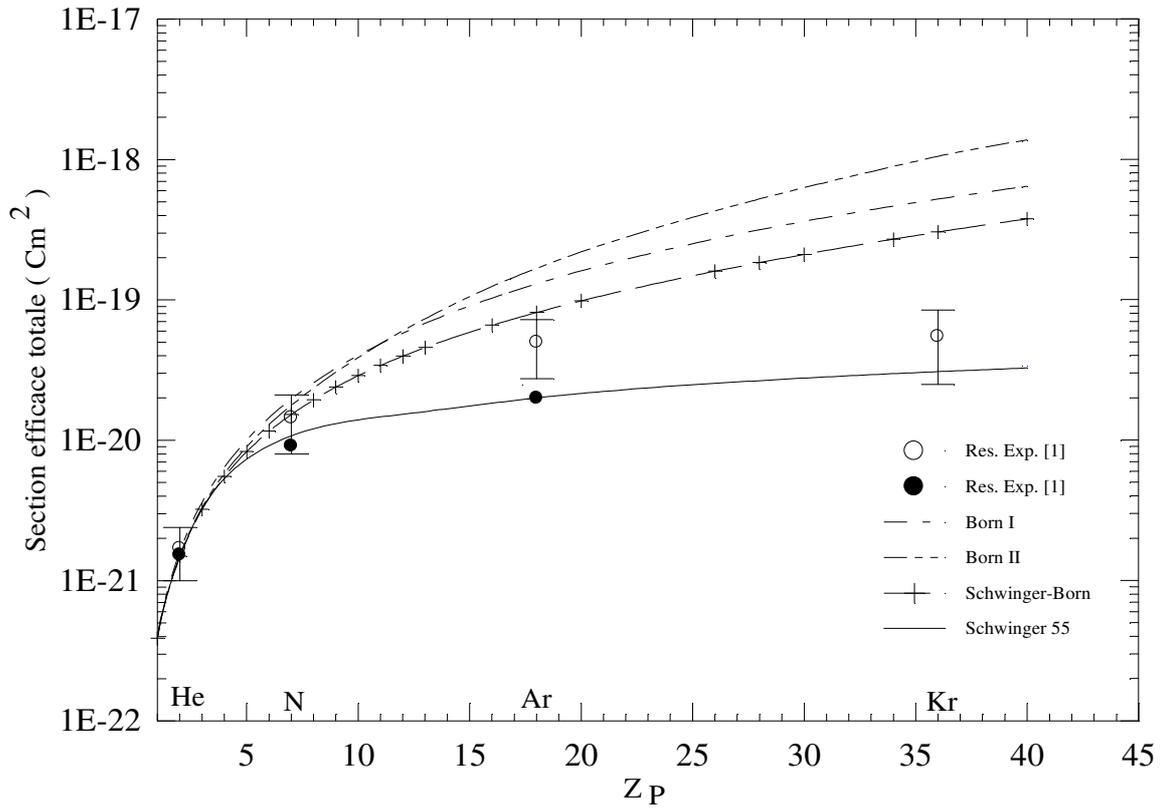


Figure 2. Section efficace totale d'excitation par électron de l'état  $(1s, 2p)$  d'ion  $Fe^{24+}$  à 400 MeV par des noyaux de charge  $Z_p$  à 400 MeV. La section efficace totale est donnée en  $cm^2$

- : Résultats expérimentaux de la section efficace totale d'excitation directe obtenus après substraction de la contribution de la cascade (10% pour He et N, et 20% pour Ar) ainsi que l'estimation de la contribution du double processus d'ionisation et de la capture (30% pour N, 50% pour Ar).

### III-3. Test de convergence et discussion :

L'examen minutieux des équations déterminant les éléments de Born montre que ces éléments matriciels sont d'importance capitale, non seulement quand  $W_{ij}(\rho, z)$  est considérable, mais aussi quand l'exponentielle n'oscille pas trop. i.e quand  $\varepsilon_i \approx \varepsilon_j$ . Au début, l'étude de l'excitation de  $Fe^{24+}(1s^2)$  a été faite avec une série de base  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$  limitée à l'état l'initial  $1s$  et aux états dégénérés du niveau étudié. Cependant, pour l'excitation aux niveaux  $(1s, nl)$  où  $n=2,3$  et  $l=0,1$ , la série de base utilisée comprendra les 5 états suivants  $\{1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}\}$ .

Dans notre traitement, un tel test de convergence a été envisagé en considérant trois séries d'approximations pour les fonctions  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  :

1.  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  sont remplacées respectivement par seulement les états  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$ . Cette procédure est appelée l'approximation Schwinger-Born (Schw-B).
2.  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  sont développées sur une base constituée de 5 états  $\{1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}\}$  avec  $n=2,3$ , cette dernière est nommée Schwinger55 (Schw55) avec une inclusion totale de tout le spectre discret ainsi que celui du continuum des états de la cible.

Notre traitement théorique a été appliqué avec succès à l'excitation de  $Fe^{24+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes légers à 400 MeV (la partie basse de la gamme d'énergie intermédiaire). Puisque les cibles sont des atomes neutres, aucun processus de capture ne peut intervenir lors de la collision.

Les sections efficaces d'excitation totale de l'ion Héliumoïde  $Fe^{24+}(1s^2)$  par impact de divers noyaux de charge allant de 1 jusqu'à 36 incluant celles des gaz rares He,  $N_2$ , Ar et Kr sont représentées dans les figures 1 et 2. Sur ces figures apparaissent nos différents calculs théoriques : Born-I et Born-II, approximation de Schwinger-Born (Schw-B) ainsi que Schwinger55 (Schw55) (Lasri et al [6]) avec un développement limité à 5 états de base. A titre de comparaison, nous avons inséré les résultats expérimentaux de Wohrer et al [1].

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  $Z_P=7$  quand la charge  $Z_P$  croît ce qui se traduit par un effet de saturation.

Il faut noter, que les projectiles sont des noyaux nus. Du fait que pour des systèmes où  $Z_P \ll Z_T$  la voie de capture est beaucoup moins probable que l'excitation nous fait négliger la voie de capture. Cependant ce raisonnement ne vaut plus pour des noyaux comme celui de Ar

dont la charge nucléaire n'est pas suffisamment petite devant celle du  $Fe^{24+}$ , et de Kr dont la charge nucléaire est même plus grande. Toutefois les expériences ont été menées avec des projectiles atomiques sans lacunes dans les couches électroniques ; ce qui nous permet de dire que la voie de capture est fortement inhibée, et par conséquent la comparaison avec le modèle théorique garde toujours son sens.

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

Le bon accord entre nos résultats (Schw55) avec les mesures expérimentales pour des valeurs de  $Z_P$  grandes ( $Z_P=36$ ) résulte du fait que pour  $Z_P > 7$  les sections efficaces totales d'excitation sont peu sensibles à des variations de la charge.

A cause des faibles vitesses relatives, les électrons du projectile ne peuvent pas exciter l'ion d'une façon directe, il en résulte que la couche K du  $Fe^{24+}$  est assez compacte pour considérer que l'excitation est due essentiellement à la charge  $Z_P$  du noyau projectile.

En observant les divers résultats exposés sur la figure 2, les remarques suivantes peuvent être faites.

1. Pour le système  $Fe^{24+} \rightarrow He$ , 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 ( $Z_T/Z_P = 0.08$ ).
2. 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 calculs ainsi que nos prédictions données par notre nouvelle procédure variationnelle demeurent en parfait accord avec l'expérience.

Notons que dans le cas de la collision  $Fe^{24+} \rightarrow Kr$ , les sections efficaces d'excitation expérimentales annoncées dans les figures 2 représentent des valeurs maximales puisque la contribution en cascade et l'influence du processus double n'a pas été soustraites

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 Schwinger55 (Sch55). Les valeurs fournies par Born-II sont même plus mauvaises en dessous d'une charge  $Z_P > 3$  où les conditions de perturbation sont vérifiées.

### III-4. Conclusion :

Les sections efficaces d'excitation aux états  $2p$  du projectile  $Fe^{24+}$  à 400 MeV entrant en collision avec diverses cibles incluant He, Ne, Ar et Kr ont été mesurées et leur dépendance à la charge nucléaire de la cible examinée. Les électrons de la cible sont attendus à jouer un rôle mineur pour que cette dépendance semble être la dépendance de charge excitatrices. L'effet principal des électrons doit empêcher la capture électronique à partir de l'ion  $Fe^{24+}$  l'ion vers la cible. Alors la comparaison avec les théories qui négligent la voie de transfert de charge est faite pour les collisions des ions  $Fe^{24+}$  avec des cibles nues. Parmi ces calculs la méthode basée sur le principe variationnel de Schwinger permet une étude systématique de la dépendance des sections efficaces d'excitation sur la charge excitatrice  $Z_T$ . Cette théorie prévoit que les sections efficaces tendent vers une limite finie quand la charge  $Z_T$  augmente (en contradiction avec la dépendance en  $Z_T^2$  de la première approximation de Born), une particularité établie par les résultats expérimentaux.

Du côté théorique, les calculs atomiques et moléculaires Close-Coupling ont été développés. Tandis qu'un accord excellent est observé entre l'expérience et les résultats des calculs atomiques, une nouvelle compréhension du mécanisme d'excitation est établie par le biais d'un calcul moléculaire où les effets physiques conduisant à la saturation sont la délocalisation du nuage électronique aux petites distances internucléaires, où il est montré que les transitions peuvent avoir lieu et un plus grand flux de probabilité vers un nombre croissant de voies intermédiaires.

Notre nouvelle approche théorique prévoit une convergence raisonnable de la procédure variationnelle pour une augmentation des états de base sur lesquels les fonctions d'onde de diffusion sont développées. Comme prévu, de très bons résultats sont obtenus quand les séries de base utilisées sont limitées à l'état initial, l'état final ainsi que d'autres états dégénérés.

Bien que ce soit une amélioration, l'inclusion de la contribution du spectre du continuum lors du développement du propagateur dans les éléments de Born de second ordre s'avère négligeable. De bons résultats sont obtenus lors de l'utilisation d'un développement à 5 états de base.

Finalement, on pourra 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.

# Références

---

- [1] - K. Wohrer, A. Chetoui, J. P. Rozet, A. Jolly, F. Fernandez, C. Stephan, B. Brendlé, R. Gayet, J. Phys. B, 19 (1986) 1997.
- [2] - 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
- [3] - B. Brendlé, R Gayet, J P Rozet et K Wohrer 1985 Phys. Rev. Lett. 54 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 42 515-522 (1989).
- [6] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, Physical et Chemical News Journal. Volume 20, p12-17, November (2004).
- [7] - G. R. Deco, P. D. Fainstein and R. D. Rivarola 1986 J. Phys. B; At. Mol. Phys. 19 213
- [8] - C. O. Reinhold et J. E. Miraglia 1987 J. Phys. B: At. Mol Phys. 20 1069
- [9] - J. F. Reading, A. L. Ford et R. L. Becker 1981 J. Phys. E: At. Mol. Phys. 14 1995
- [10] - T Mukoyama et Lin C D 1989 Phys Lett. 141A 138.
- [11] - B. Lasri, Thèse de Magistère, Université de Tlemcen, (1998).
- [12] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, Physical et Chemical News Journal. Volume 28, Mars (2006), p 97-102 .
- [13] - R. Gayet, Nuclear Science Applications 1 555-67 (1983).
- [14] - M. Chabot, P. Nicolai, K. Wohrer, A. Chetoui, J.P. Rozet, M..F. Politis, A. Touati, D, Vernhet, C. Stephan et R. Gayet Nucl. Instr. and Methods in Physics Research B 56/57 1-4 (1991).
- [15] - R. D. Piacentini et A. Salin 1976 J. Phys. E; At. Mol Phys, 9 959.
- [16] - L. F. Errea, C. Harel, H. Join, J. M. Maidagan, L. Mender, Pons Band Riera A 1992 Phys. Rev. A 46 5617.

# Conclusion générale

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.

Nous avons appliqué avec succès la méthode variationnelle de Schwinger afin d'étudier l'excitation l'ion héliumoïde  $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 36 incluant celle des gaz rares (He, N<sub>2</sub>, Ar et Kr) à une énergie de 400 MeV 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.

Dans le but d'améliorer les calculs des sections efficaces totales d'excitation de l'ion héliumoïde  $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$ , on peut utiliser l'approche de Schwinger1414 (Schw1414) en effectuant un élargissement de 5 états de base à 14 états ( $1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{-1}, 3d_{+2}, 3d_{-2}$ ).

Notre nouvelle approche théorique prévoit une convergence raisonnable de la procédure variationnelle pour une augmentation des états de base sur lesquels les fonctions d'onde de diffusion sont développées et un bon accord a été décelé entre les résultats obtenues et ceux expérimentaux de K. Wohrer *et al.*

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