

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE 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^{elle}. LAMOURI Siham

Sur le thème

**Calcul variationnel des sections efficaces totales d'excitation des ions
heliomoïdes $Xe^{52+}(1s^2)$ par impact de différents atomes.**

Soutenu le 06 /07/2021 devant le jury composé de :

M. KOUIDRI Smain	MCA	Université de Saïda	Président
M. LASRI Boumediene	Professeur	Université de Saïda	Encadreur
M ^{me} BENHALIMA Nadia	MCA	Université de Saïda	Examineur

Année Universitaire 2020 - 2021

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 d'ions $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ incidents à 25 MeV/nucléon sur des cibles atomiques de charge nucléaire croissante (allant de 1 jusqu'à 150).

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 $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ ions impinging on atomic targets with increasing nuclear charge (from 1 to 150).

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

ملخص

إنَّ الطرق النظرية المعتمد عليها في الدراسات الخاصة بالتصادمات الذرية و المرتكزة أساساً علي المبدأ التغري 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 Xe^{52+} في حالة تصادمه مع مختلف الذرات ذوات الشحن المتغيرة من 1 إلى 150 . 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 إن لم نقل تام مع المعطيات التجريبية الخاصة بإثارة المستويات الجزئية $(1s,3p), (1s,3s), (1s,2p), (1s,2s)$ الخاصة ب Xe^{52+} في المجال الطاقوي المحدّد ب 25 MeV/nucleon .

Dédicaces

Je dédie ce travail:

- ❖ A mes très chers parents source de vie, d'amour et d'affection
 - A mes chers frères et leurs enfants, source de joie et bonheur.
 - A tout ma famille, source d'espoir et de Motivation.
- ❖ A ma chère amie houda et vous cher lecteur.

Remerciements

Par la grâce d'«Allah» le tout puissant, ce travail a pu sortir à la lumière.

Un grand remerciement à Monsieur B. LASRI Professeur à l'université Dr Tahar Moulay – Saida- pour avoir proposé ce sujet, dirigé mon travail et mis à ma disposition ses connaissances scientifiques et son temps précieux ainsi que l'intérêt et l'attention qu'il a apportés à ce mémoire.

Je remercie M^r **KOUIDRI Smain**, maîtres de conférences « A » à l'université Dr Tahar Moulay de Saida, d'avoir accepté de présider le jury d'examen.

Je remercie également M^{me} N. Benhalima, maîtres de conférences « A » à l'université Dr Tahar Moulay de Saida d'avoir bien voulu examiner mon travail.

Je tiens à exprimer une profonde gratitude aux enseignants de la faculté. J'adresse mes amitiés à mes collègues de promotion Master II, Physique computationnelle.

Enfin, j'exprime mes sincères remerciements à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Table des matières

Résumé

Abstract

ملخص

Introduction générale.....01

Chapitre I: Principe variationnel de Schwinger pour la théorie de collisions

atomiques.....08

I.1- Processus élémentaires et régimes de vitesses.....09

I.2 -Approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions.....11

I.3 -Amplitude variationnelle approchée.....16

Références.....19

Chapitre II: Approche variationnel de Schwinger pour l'excitation.....20

II.1- Les ions hydrogénoïdes.....20

II.2- Amplitude variationnelle de Schwinger pour l'excitation directe.....22

II.3- Amplitude de transition.....26

II.3.1 - Amplitude de transition eikonale.....26

II.3.2 - sections efficaces eikonales.....29

Références.....31

Chapitre III: Application du principe variationnel de Schwinger a l'excitation de l'ion

Xe⁵²⁺ par impact de différents cibles atomiques de charge nucléaire croissante.....32

IV.1-introduction32

IV.2- Aspect théorique.....32

IV.5- Application : excitation de Xe⁵²⁺(1s²) par impact de différents noyaux.....33

Références.....39

Conclusion.....40

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 terme 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 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 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 hydrogénoïdes (Li^{2+} , Be^{3+} , ...etc) en collision avec des protons et à l'excitation des ions héliomoïdes (Fe^{24+} , Kr^{34+} , ...etc) avec des noyaux de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N_2 , Ne, Ar, Kr et Xe) aux vitesses intermédiaires [12].

En effet, vu les divers prédictions théoriques qui paraissent très encourageantes pour l'atome d'hydrogène principalement et les ions hydrogénoïdes (Li^{2+} , Be^{3+} , ...) ainsi que les ions héliomoïdes (Fe^{24+} , Kr^{34+} , Xe^{52+} , ...) étudiés, ces derniers demeurent en parfait accord avec ceux d'autres travaux théoriques fondés sur d'autres techniques récentes comme celles de Close Coupling [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 $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ incidents à 25 MeV/nucléon par des cibles atomiques de charge nucléaire croissante (allant de 1 jusqu'à 150).

Ce mémoire est organisé comme suit :

Après une brève introduction générale, dans un **premier chapitre** on décrit l'essentiel du principe variationnel de Schwinger avec la détermination des expressions stationnaire.

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

Dans le dernier chapitre (**chapitre III**) qui constitue l'essentiel de ce travail, nous appliquons le formalisme variationnel de Schwinger aux processus d'excitation des ions $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ incidents à 25 MeV/nucléon par des cibles atomiques de charge nucléaire croissante (allant de 1 jusqu'à 150).

On clôture ce mémoire par une conclusion générale.


Références

- [1] L. Adoui, "Mécanismes d'excitation d'ions Ar^{+16} en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire", Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995).
- [2] 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 Esearch 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 chiminal 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

Principe variationnel de Schwinger pour la théorie des Collisions atomiques

 Lorsque deux particules entre en collision, il existe des forces d'interaction répulsives, par exemple, on peut dire qu'il y a encore collision, bien que les deux particules ne se rencontrent pas ; elles peuvent s'approcher l'une de l'autre jusqu'à une distance minimum où les forces d'interaction deviennent alors très importantes. C'est le cas de la diffusion ou collision de Rutherford .

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 afin de 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 de Schrödinger {la méthode Hulthén-Khon [1-2], la méthode variationnelle dite de la matrice-R (**R-matrix**) [3-4].} et celles basées sur l'équation de Lippmann-Schwinger {la méthode variationnelle, que J. Schwinger en personne a présenté dans ses cours à l'université de Harvard et fut publiée en 1947 [5].}

I-1. Processus élémentaires et régimes de vitesses :

Le développement de ces différents champs de la physique a ainsi, ces dernières années, relancé l'intérêt d'obtenir une description aussi précise que possible de tous les processus collisionnels (ionisation, excitation, capture) [6] (*Figure I-1*).

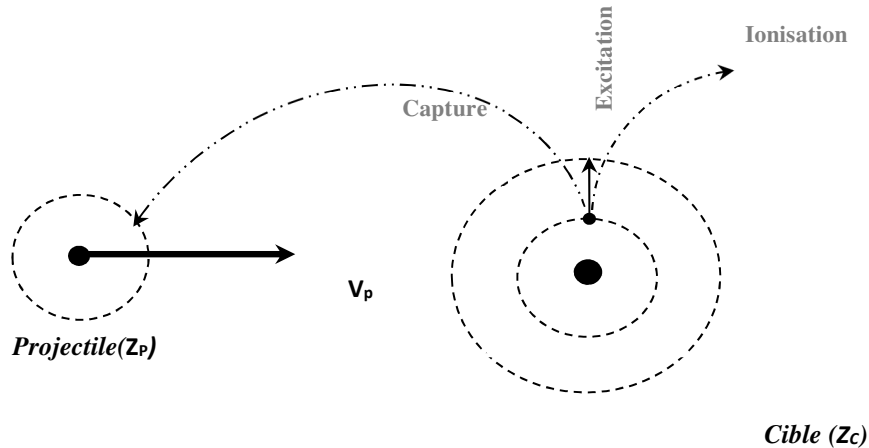


Figure I- 1 : Les processus atomiques mono électroniques élémentaires.

- **L'ionisation** : si 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.
- **L'excitation** : si 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.
- **La capture électronique** : un troisième type de processus consiste en la capture d'un électron de l'atome cible par le projectile. Ce processus intervient surtout lors d'irradiations en ions lourds [7].

En particulier dans un régime de vitesses intermédiaires (dans lequel la vitesse de collision v_{ion} est du même ordre de grandeur que celle de l'électron mis en jeu dans le processus considéré v_e), domaine où les sections efficaces de ces différents processus sont toutes du même ordre de grandeur (*Figure I-2*) [6].

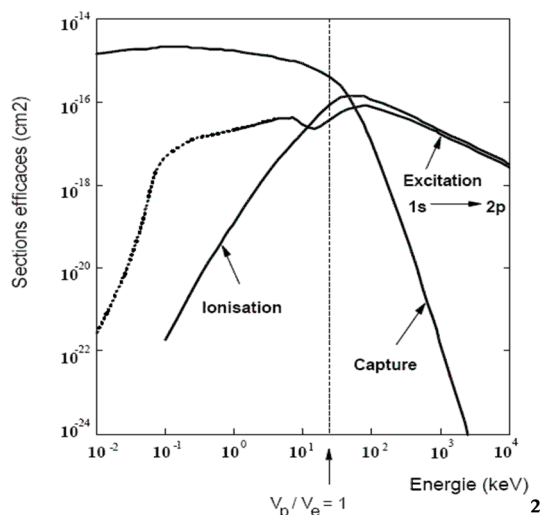


Figure I-2 : Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision $P+H$.

La théorie des collisions distingue trois régimes différents [7] selon la valeur du paramètre 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 cible, v_p la vitesse de l'ion incident (projectile V_p), Z_p et Z_T les numéros atomiques du projectile (Z_p) et de la cible.

On distingue [7]:

-La région de forte interaction, pour $k \gg 1$; ce régime, aussi appelé quasi moléculaire, est atteint pour des vitesses de collisions (V_p) inférieures à celle de l'électron actif (V_e), entre partenaires de charges nucléaires comparables ou non ou pour une asymétrie de collision du type ($Z_T \ll Z_p$). La théorie correspondante est basée sur la formation d'une quasi-molécule transitoire et la probabilité pour que l'état final d'un électron soit centré sur l'atome cible ou le projectile.

-La région perturbative, pour $k \ll 1$; ce régime, aussi appelé régime coulombien, est atteint pour des grandes vitesses de collisions ($V_e \ll V_p$) et pour des asymétries importantes ($Z_p \ll Z_T$). Dans ce domaine, une théorie perturbative est applicable.

-La région dite « intermédiaire », pour $k \approx 1$. Ce domaine est celui dans lequel s'opère le passage de processus à une diffusion à des processus à plusieurs diffusions de l'électron. La description théorique convenable est généralement basée sur un formalisme d'ondes distordues (Continuum Distorted Wave-CDW-).

I-2. L'approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions :

Comme nous l'avons signalé avant, dans notre travail, nous nous sommes intéressés à une approche appelée **principe variationnel de Schwinger** basé sur les équations intégrales de Lippmann-Schwinger et ceci dans le but d'obtenir une forme stationnaire de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes.

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

$$H = H_c + V_c \quad (\text{I-2})$$

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

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

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

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_c^+ V_c |\psi_\alpha^+\rangle \quad (\text{I-3a})$$

$$\langle\psi_\beta^-| = \langle\beta| + \langle\psi_\beta^-| G_c^- V_c \quad (\text{I-3b})$$

avec G_c^\pm l'opérateur de Green défini par [8] :

$$G_c^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (E - H_c \pm i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{I-4})$$

où E désigne l'énergie totale du système.

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

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

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

$$\begin{cases} V_c |\psi_\alpha^+\rangle = T |\alpha\rangle & (a) \\ \langle\psi_\beta^-| V_c = \langle\beta|T & (b) \end{cases} \quad (\text{I-6})$$

et en introduisant (I-6a, b) dans l'expression (I-5) on obtient deux formes d'expression de l'amplitude de transition suivantes :

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

$$= \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle \quad (\text{I-7b})$$

A partir des expressions (I-3a) et (I-3b), on peut exprimer l'amplitude de transition sous une troisième forme en multipliant par exemple (I-3a) par V_C :

$$(\text{I-3a}) \Rightarrow V_C | \psi_\alpha^+ \rangle = V_C | \alpha \rangle + V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle$$

$$\Rightarrow V_C | \alpha \rangle = V_C | \psi_\alpha^+ \rangle - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle$$

$$\Rightarrow V_C | \alpha \rangle = (V_C - V_C G_C^+ V_C) | \psi_\alpha^+ \rangle$$

et en injectant $V_C | \alpha \rangle$ de cette dernière équation dans (I-7b), on aura alors :

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

A partir d'une simple combinaison des trois formes précédentes (I-7a, b, c), une nouvelle forme de $T_{\beta\alpha}$ dite forme **bilinéaire** de l'amplitude de transition :

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

de plus, quand on utilise les vecteurs exacts $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$, la forme bilinéaire de l'amplitude de transition est exacte et stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires $|\delta\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\delta\psi_\beta^-|$ des vecteurs $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$, autour de leurs valeurs correctes. En différentiant la relation (I-8) nous obtenons :

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

Puisque $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ vérifient les équations intégrales de Lippmann-Schwinger (I-3a,b), On eut monter que l'amplitude de transition $T_{\beta\alpha}$ est stationnaire par rapport à des petite variations arbitraires des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes, c.a.d .

$$\delta T_{\beta\alpha} = 0 \quad (\text{I-10})$$

Démonstration :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_C | \psi_\alpha^+ \rangle$$

$$= \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \psi_{\beta}^{-} | Vc - VcG_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle \\
T_{\beta\alpha} &= \langle \beta | Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \psi_{\beta}^{-} | Vc | \alpha \rangle - \langle \psi_{\beta}^{-} | Vc - G_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle \\
T_{\beta\alpha} &= \left[\langle \beta | - \langle \psi_{\beta}^{-} | + \langle \psi_{\beta}^{-} | VcG_c \right] Vc | \delta\psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | Vc [| \alpha \rangle - | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + G_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle] \\
&= \langle \beta | Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | Vc | \alpha \rangle - \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle - \langle \psi_{\beta}^{-} | Vc | \delta\psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | VcG_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + \\
&\quad \langle \psi_{\beta}^{-} | VcG_c^{+} Vc | \delta\psi_{\alpha}^{+} \rangle \\
| \psi_{\alpha}^{+} \rangle &= | \alpha \rangle + G_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle \\
\langle \psi_{\beta}^{-} | &= \langle \beta | + \langle \psi_{\beta}^{-} | G_c^{+} Vc \\
T_{\beta\alpha} &= \left[\langle \beta | - \langle \beta | - \langle \psi_{\beta}^{-} | VcG_c^{+} + \langle \psi_{\beta}^{-} | VcG_c^{+} \right] Vc | \delta\psi_{\alpha}^{+} \rangle \\
&\quad + \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | Vc [| \alpha \rangle - | \alpha \rangle - G_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + G_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle] \\
\delta T_{\beta\alpha} &= 0
\end{aligned}$$

Et selon la même procédure, et à partir des trois équations (I-7a, b, c) nous déduisons une autre expression stationnaire de $T_{\beta\alpha}$, appelée forme **fractionnaire** du principe variationnel de Schwinger :

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle \langle \psi_{\beta}^{-} | Vc | \alpha \rangle}{\langle \psi_{\beta}^{-} | Vc - VcG_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle} \quad (\text{I-11})$$

En différenciant cette expression, nous obtenons :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | - \langle \psi_{\beta}^{-} | + \langle \psi_{\beta}^{-} | VcG_c^{+} \right] Vc | \delta\psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \delta\psi_{\beta}^{-} | Vc [| \alpha \rangle - | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + G_c^{+} Vc | \psi_{\alpha}^{+} \rangle] \quad (\text{I-12})$$

C'est clair que le numérateur de cette dernière fraction est identique à l'expression (I-9) qui est stationnaire ; cela vérifie la stationnarité de la forme (I-11). De plus cette forme fractionnaire présente l'avantage d'être indépendante de la normalisation choisie pour les états de diffusion. Notons que cette forme, ainsi que la forme bilinéaire (I-8), est plus sensible à la forme des états d'essais dans la région d'interaction qu'aux formes asymptotiques exactes des états de diffusion. Pour rendre cela clair, on remplace les vecteurs exacts inconnus $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $\langle\psi_{\beta}^{-}|$ dans l'expression (I-11) par les vecteurs d'essais correspondants dans l'approximation de Born, $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$, soit :

$$|\psi_{\alpha}^{+}\rangle = |\alpha\rangle \quad (\text{I-13a})$$

$$\langle\psi_{\beta}^{-}| = \langle\beta| \quad (\text{I-13b})$$

Nous obtenons alors :

$$T_{\beta\alpha}^B = \frac{\langle \beta | V_C | \alpha \rangle \langle \beta | V_C | \alpha \rangle}{\langle \beta | V_C - V_C G_C^+ V_C | \alpha \rangle} \quad (\text{I-14})$$

Dans ce traitement perturbatif, de Born, et en utilisant l'identité générale reliant les inverses de deux opérateurs [9] ainsi que l'équation (I-2), le propagateur G_C^+ peut se mettre sous la forme :

$$G^+ = G_C^+ + V_C G_C^+ V_C \quad (\text{I-15})$$

avec :

$$G^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (E - H + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{I-16})$$

est l'opérateur de Green, E et H étant respectivement l'énergie totale et l'hamiltonien total du système dont H s'écrit :

$$H = H_C + V_C = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \quad (\text{I-17})$$

en exploitant la relation (I-15), on obtient la série suivante :

$$G^+ = G_C^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_C G_C^+)^n \quad (\text{I-18})$$

qui sera ensuite injectée dans l'équation de Lippmann-Schwinger (I-3a) et par conséquent la relation (I-7a) nous donne :

$$T_{\beta\alpha} = \left\langle \beta \left| V_C \left[1 + G_C^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_C G_C^+)^n V_C \right] \alpha \right. \right\rangle \quad (\text{I-19})$$

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

$$T_{\beta\alpha}^{B1} = \langle \beta | V_C | \alpha \rangle \quad (\text{I-20})$$

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

$$T_{\beta\alpha}^{B2} = \langle \beta | V_C + V_C G_C^+ V_C | \alpha \rangle \quad (\text{I-21})$$

et ainsi de suite, l'approximation de Born au n ème ordre, consiste à ne retenir que les n premiers termes de la série (I-19), quoique l'inclusion des termes d'ordres supérieurs de cette dernière donne une meilleure représentation de la fonction d'onde de diffusion, mais augmente rapidement la difficulté des calculs numériques sur ordinateur.

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

Pour des énergies incidentes suffisamment grandes, l'approximation de Born au premier ordre donne une bonne estimation de la section efficace totale d'excitation [9].

Revenant maintenant à l'expression fractionnaire de l'amplitude de transition (I-14) qui, à l'aide des deux équations (I-20) et (I-21), s'écrit sous une autre formulation :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} \left[\frac{1}{1 - \frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{B2}}{T_{\beta\alpha}^{BI}}} \right] \quad (\text{I-22})$$

tel que :

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

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

$$T_{\beta\alpha}^{B2} = \overline{T}_{\beta\alpha}^{B2} + T_{\beta\alpha}^{BI} \quad (\text{I-23})$$

si le rapport $\frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{B2}}{T_{\beta\alpha}^{BI}}$ est petit devant l'unité, nous pouvons développer l'expression (I-22) et

obtenir $T_{\beta\alpha}^B$:

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} \left[1 + \frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}} + \dots \right] = T_{\beta\alpha}^{BII} + \dots \quad (\text{I-24})$$

dont les deux premiers termes sont identiques à la série de Born au deuxième ordre pour l'amplitude de transition (I-21).

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

I-4. Amplitude variationnelle approchée:

Nous venons de déterminer deux formes stationnaires de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations arbitraires des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes : la forme bilinéaire (I-8) et la forme fractionnaire (I-11). Ce qui signifie que l'erreur commise sur l'amplitude de transition est quadratique par rapport à celle faite sur les états de diffusion.

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

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \\ \langle\tilde{\psi}_\beta^-| = \langle\psi_\beta^-| + \langle\delta\psi_\beta^-| \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (a) \\ (b) \end{array} \quad (I-25)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \\ \langle\tilde{\psi}_\beta^-| = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j| \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (a) \\ (b) \end{array} \quad (I-26)$$

La résolution de l'équation $\delta T_{\beta\alpha} = 0$ nous donnera alors les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusions approchés. En exprimant l'amplitude de transition, donnée par l'expression (I-11) en fonction de ces vecteurs d'essais nous obtiendrons ainsi l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_C|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle \langle\tilde{\psi}_\beta^-|V_C|\alpha\rangle}{\langle\tilde{\psi}_\beta^-|V_C - V_C G_C^+ V_C|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle} \quad (I-27)$$

A partir de l'équation (I-9) et des expressions (I-25a, b), nous déduisons l'équation suivante :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle\beta| - \langle\tilde{\psi}_\beta^- - \delta\psi_\beta^- | (1 - V_C G_C^+) V_C | \delta\psi_\alpha^+ \rangle + \langle\delta\psi_\beta^- | V_C [|\alpha\rangle - (1 - G_C^+ V_C) | \tilde{\psi}_\alpha^+ - \delta\psi_\alpha^+ \rangle \right] = 0 \quad (I-28)$$

qui est satisfaite pour toutes variation au premier ordre en $|\delta\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\delta\psi_\beta^-|$. En remplaçant les vecteurs $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$ par leurs développements (I-26a, b) nous obtenons, pour les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusion approchés, les deux systèmes d'équations différentiels couplés suivants :

$$\begin{aligned}
\langle j|V_C|\alpha\rangle - \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle &= 0 & j=1,\dots,N \\
\langle \beta|V_C|i\rangle - \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle &= 0 & i=1,\dots,N
\end{aligned} \tag{I-29}$$

En définissant alors la matrice carrée D de dimension N , les vecteurs colonnes V_α et V_β dont les éléments sont respectivement :

$$\begin{aligned}
D_{ji} &= \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle & (a) \\
(V_\alpha)_j &= \langle j|V_C|\alpha\rangle & (b) \\
(V_\beta)_i &= \langle i|V_C|\beta\rangle & (c)
\end{aligned} \tag{I-30}$$

et les vecteurs colonnes \tilde{a} et \tilde{b}^* dont les éléments sont \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* , les deux systèmes d'équations couplés (I-29a, b) peuvent être exprimés sous une forme matricielle :

$$\begin{cases} V_\alpha = D.\tilde{a} & (a) \\ (V_\beta^*)^t = \tilde{b}^*.D & (b) \end{cases} \tag{I-31}$$

ou encore, en utilisant les propriétés algébriques des matrices:

$$\begin{cases} \tilde{a} = D^{-1} V_\alpha & (a) \\ \tilde{b}^* = (V_\beta^*)^t D^{-1} & (b) \end{cases} \tag{I-32}$$

qui donnent les solutions pour les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états d'essais $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$. En substituant ces derniers dans (I-27) l'expression de l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ s'écrit :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta|V_C|i\rangle \tilde{a}_i \tilde{b}_j^* \langle j|V_C|\alpha\rangle}{\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j|V_C - V_C G_C^+ V_C|i\rangle \tilde{a}_i} \tag{I-33}$$

ou également :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{[(V_\beta^*)^t . \tilde{a}] [\tilde{b}^* . V_\alpha]}{\tilde{b}^* D \tilde{a}} \tag{I-34}$$

qui s'écrit aussi à l'aide des relations (I-31a, b) :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = (V_\beta^*)^t \tilde{a} = \tilde{b}^* V_\alpha \tag{I-35}$$

en substituant les vecteurs \tilde{a} et \tilde{b}^* par leurs expressions (I-32a, b) dans cette dernière équation qui sera changée en remplaçant les éléments de la matrice D (I-30a, b, c) nous obtenons alors :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad (\text{I-36})$$

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

La solution de l'équation (I-9) peut être facilitée par sa restriction à un sous-espace vectoriel. Cependant un mauvais choix de ce sous-espace peut conduire à des états assez éloignés des véritables états de diffusion ; d'où le choix doit être pris de manière à simplifier le problème posé sans altérer les données physiques [6].

Références

- [1]- L. Hulthén, K. Fysiogr. Sällsk. Lund. Förh.257 (1944)
- [2]- W.Kohn, Phys. Rev. 74, 1763 (1948).
- [3] R.K. Nesbet , « Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory », Plenum Press , New York (1980).
- [4] - B.I. Schneider , « An R-Matrix Approach to Electron Molecule Collisions » chapter 8 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco , Plenum Press , New York (1995).
- [5] J. Schwinger, Phys. Rev. 56, 750 (1947).
- [6] L. Adoui , "Mécanismes d'excitation d'ions Ar⁺¹⁶ en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire", Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995).
- [7] A. Chetioui , A. Boissiere , A. Eschennbrenner , M.A. Herve du Penhoat , M.F. Politis , A. Touati , « Effets biologiques des rayonnements ionisants : Evénements critiques » , 1-24 Groupe du Physique des Solides , Université Pierre et Marie Curie , Campus Boucicaut , 140 rue de Lourmel , Paris 15^{ème} .
- [8] F. Khelfaoui , mémoire de magistère , Faculté des sciences et de la technologie Université Dr Moulay Tahar de Saïda (2009).
- [9] A. Kara-Hachemi , H. Hachemi , « Eléments de physique quantique » , © Office des publications Universitaires : 01-1998. Edition : 1.02.4100.

Chapitre II

Approche variationnel de Schwinger pour l'excitation

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

II-1. Les ions hydrogénoïdes :

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

Les systèmes hydrogénoïdes sont les seuls systèmes pour lesquels il est possible de déterminer les solutions exactes de l'équation de Schrödinger. Pour les systèmes les plus complexes (plus de deux particules en interaction), on ne peut déterminer que des fonctions d'onde approchées. On recherche donc les fonctions d'onde stationnaires $\Psi_{el}(r, \theta, \varphi)$ de l'électron dans le référentiel atomique, où (r, θ, φ) sont les coordonnées sphériques. On doit pour ce faire résoudre l'équation de Schrödinger pour une particule mobile soumise à une énergie potentielle coulombienne attractive due au noyau :

$$\hat{H}_{el} \Psi_{el}(r, \theta, \varphi) = E \Psi_{el}(r, \theta, \varphi) \quad (\text{II-1})$$

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

$$\hat{H}_{el} = \hat{T} + \hat{V} \quad (\text{II-2})$$

avec :

$$\begin{cases} \hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\sigma^2}{\sigma x^2} + \frac{\sigma^2}{\sigma y^2} + \frac{\sigma^2}{\sigma z^2} \right) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta & (a) \\ \hat{V} = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} & (b) \end{cases} \quad (\text{II-3})$$

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

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

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

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

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

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

$$\hat{H}_{el} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{1}{2} \Delta - \frac{Z}{r} \quad (\text{II-6})$$

II-2. Amplitude variationnelle de Schwinger pour l'excitation directe :

La collision directe, est un cas particulier de l'amplitude de transition variationnelle pour plusieurs voies de réarrangement, quand $V_i=V_f=V_c$ [2].

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) [2], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [3], B. Lasri (1998) [4], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [5] et Y. Si Abderrahmane (2008) [6]. Ainsi,

notre but dans ce mémoire, est d'appliquer le principe variationnel de Schwinger à l'excitation d'un système hydrogénoïde par impact d'ions aux vitesses intermédiaires.

La méthode eikonale, comme nous l'avons déjà mentionnée, 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 , représentée par la figure ci-dessous, (*figure II-1*), dont la séparation internucléaire est donnée par :

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \quad (\text{II.7a})$$

$$\vec{z} = \vec{v}.t \quad (\text{II.7b})$$

$$\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{II.7c})$$

où $\vec{\rho}$ est le paramètre d'impact, \vec{v} la vitesse relative du projectile, \vec{R} définit la distance internucléaire et \vec{x} , \vec{S} les positions de l'électron relatives aux noyaux T et P.

t : est le temps pris arbitrairement égal à zéro quand $\vec{R} = \vec{\rho}$, \vec{z} est la projection de \vec{R} sur le chemin du projectile.

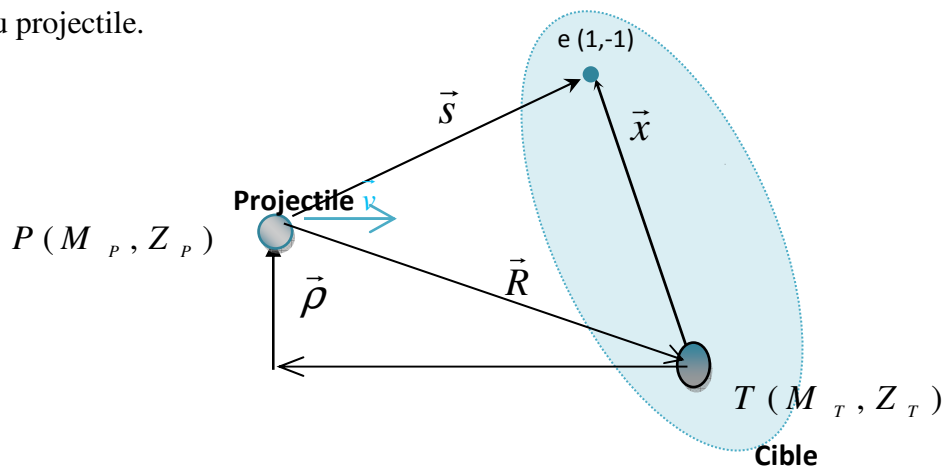


Fig. II-1 : Schéma de la collision

Dans le système du centre de masse projectile-cible le hamiltonien total du système est donné par la relation (I-2) où le hamiltonien des particules sans interaction H_C s'écrit :

$$H_C = H_T + H_P \quad (\text{II-8a})$$

avec :

$$\begin{cases} H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} & (a) \\ H_P = -\frac{1}{2\mu} \Delta_R & (b) \end{cases} \quad (\text{II-8})$$

où μ est la masse réduite du système :

$$\mu = \frac{M_P(M_T + 1)}{M_P + M_T + 1} \quad (\text{II-8d})$$

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

$$V_C = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{S} \quad (\text{II-9})$$

L'équation de Schrödinger dépendant du temps donnée par $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$ s'écrit sous une autre forme dite équation de Schrödinger de diffusion eikonale, que l'on déduit en dérivant par rapport à z au lieu de t et en utilisant l'expression (II-7b) $\vec{z} = \vec{v}t$, on aura alors:

$$\left(-i\vec{v} \frac{\partial}{\partial z} + H_T + V_C \right) | \psi(z) \rangle = 0 \quad (\text{II-10})$$

La résolution de cette dernière équation nous implique d'abords à résoudre l'équation de Schrödinger eikonale de la cible suivante :

$$\left(-i\vec{v} \frac{\partial}{\partial z} + H_T \right) | k(z) \rangle = 0 \quad (\text{II-11})$$

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

$$\langle \vec{x}, z | k(z) \rangle = e^{-i\frac{\varepsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \quad (\text{II-12})$$

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

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

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \quad (\text{II-13})$$

ce potentiel doit s'ajouté au hamiltonien H_T dans l'équation (II-11), pour obtenir les états propres eikonales de la cible, solutions de l'équation de Schrödinger eikonales de cette dernière, multipliés par un facteur de phase nommé « de coulomb »: $i \frac{Z_p(Z_T-1)}{v} \ln(vR - vz)$. Donc

l'amplitude de transition est également multipliée par un facteur de phase qui dépend du paramètre d'impact $\bar{\rho}$ donné par $\rho \frac{2iZ_p(Z_T-1)}{v}$, ce facteur et grâce à sa forme exponentielle va être négligé dans le calcul de la section efficace totale mais il sera réintroduit dans le calcul de la section efficace différentielle.

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

$$V = V_C - V_{\text{int}} = V_C - \frac{Z_p(Z_T-1)}{R} = Z_p \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right) \quad (\text{II-14})$$

L'équation de Schrödinger dans le formalisme du paramètre d'impact s'écrit alors :

$$\begin{cases} \left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\alpha^+(z)\rangle = 0 \\ \langle \psi_\beta^-(z) | \left\{ +iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} = 0 \end{cases} \quad (\text{II-15})$$

Les états $|\alpha(z)\rangle$ et $\langle \beta(z)|$ (initial et final) sont les solutions de l'équation de Schrödinger eikonale avec le seul hamiltonien H_T de la cible (II-11). Pour résoudre les équations avec second membre (II-15) il faut d'abords passé par la résolution sans second membre en faisant appel aux opérateurs de Green de la cible $G_T^\pm(z-z')$ [2] qui vérifient les équations suivantes :

$$\left(\mp iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T \right) G_T^\pm(z-z') |k(z)\rangle = -\delta(z-z') |k(z)\rangle \quad (\text{II-16})$$

avec les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} G_T^+(z) = 0 & \text{si } z < 0 & (a) \\ G_T^-(z) = 0 & \text{si } z > 0 & (b) \end{cases} \quad (\text{II-17})$$

en résolvant l'équation (II-16) on obtient les expressions eikonales des opérateurs $G_T^\pm(z-z')$:

$$\begin{cases} \langle \nu(z') | G_T^+(z-z') = -\frac{i}{v} \langle \nu(z) | \theta(z-z') & (a) \\ G_T^-(z-z') | \nu(z') \rangle = \frac{i}{v} \theta(z-z') | \nu(z) \rangle & (b) \end{cases} \quad (\text{II-18})$$

où $\theta(z-z')$ est la fonction Heaviside « du nom de Oliver Heaviside, c'est une fonction discontinue prenant la valeur 0 pour tous les valeurs réels strictement négatifs et la valeur 1 partout ailleurs » [7].

Les états de diffusion $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-(z)|$, solutions de l'équation (II-15), sont alors déterminés dans l'approximation eikonale par les équations de Lippmann-Schwinger suivantes [8] :

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z') V(z') |\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (\text{II-19a})$$

$$\langle\psi_\beta^-(z)| = \langle\beta(z)| + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z') V(z') \langle\psi_\beta^-(z')| \quad (\text{II-19b})$$

En désignant par la notation $\langle | \rangle$ l'intégration sur les coordonnées électroniques, l'amplitude de transition eikonale s'écrit :

$$\begin{cases} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)\rangle & (a) \\ a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow -\infty} \langle\psi_\beta^-(z)|\alpha(z)\rangle & (b) \\ a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle\psi_\beta^-(z)|V|\psi_\alpha^+(z)\rangle & (c) \end{cases} \quad (\text{II-20})$$

A partir des équations de Lippmann-Schwinger (II-19a, b) et des expressions (II-20a, b, c) de l'amplitude de transition $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, cette dernière est écrite sous d'autre formes prenant en considération les expressions eikonales (II-18a, b) :

$$\begin{cases} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\beta(z)|V|\psi_\alpha^+(z)\rangle & (a) \\ a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_\beta^-(z)|V|\alpha(z)\rangle & (b) \\ a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_\beta^-(z)|V \left\{ |\psi_\alpha^+(z)\rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^+(z-z') V |\psi_\alpha^+(z')\rangle \right\} & (c) \end{cases} \quad (\text{II-21})$$

La forme variationnelle eikonale de l'amplitude de transition en $\vec{\rho}$ est obtenue à l'aide de ces dernières expressions (II-21a, b, c) dans le cas où $\alpha \neq \beta$ et d'une façon complètement analogue à la forme variationnelle quantique (I-11) :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\beta(z)|V|\psi_\alpha^+(z)\rangle \left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_\beta^-(z)|V|\alpha(z)\rangle}{\left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle\psi_\beta^-(z)|V \left\{ |\psi_\alpha^+(z)\rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^+(z-z') V |\psi_\alpha^+(z')\rangle \right\}} \quad (\text{II-22})$$

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

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} \frac{(\beta|V|\psi_{\alpha}^+)(\psi_{\beta}^-|V|\alpha)}{(\psi_{\beta}^-|V - VG_T^+V|\psi_{\alpha}^+)} \quad (II-23)$$

D'une manière semblable au traitement quantique, l'expression (II-23) de l'amplitude de transition pour un paramètre d'impact donné est d'une part, stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion $|\psi_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle\psi_{\beta}^-|$ autour de leurs valeurs exactes et conduit d'autre part, à la forme approchée suivante :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i) (D^{-1})_{ij} (j|V|\alpha) \quad (II-24)$$

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

$$D_{ji} = (j|V - VG_T^+V|i) \quad (II-25)$$

II-3. Amplitude de transition :

Après avoir exprimé l'amplitude de transition dans le formalisme du paramètre d'impact (II-24), nous allons déterminer les formes simplifiées de l'amplitude de transition eikonale et de la section efficace totale pour l'excitation d'une cible atomique par impact d'un atome nu tout en prenant le développement des états de diffusion approchés $\langle\psi_{\beta}^-||\psi_{\alpha}^+\rangle$ sur une base constituée uniquement par les états liés de la cible parmi ceux intermédiaires de transition en ignorant l'inclusion des états de capture sur le projectile. 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.

II-3.1. Amplitude de transition eikonale :

Soient $\varphi_{\alpha}(\vec{x})$ $\varphi_{\beta}(\vec{x})$ les fonctions d'onde électroniques initiale et finale, fonctions propres de H_{cible} . La fonction d'onde décrivant le mouvement du projectile est fonction propre du

hamiltonien projectile H_{proj} . Comme celui-ci se réduit uniquement à un terme d'énergie cinétique, la fonction propre est une onde plane en $e^{i\vec{k}\vec{R}}$ tel que [9]: $H_{proj}e^{i\vec{k}\vec{R}} = E_{coll}e^{i\vec{k}\vec{R}}$ et ses états propres initial et final sont respectivement $|\vec{k}_\alpha\rangle$ et $|\vec{k}_\beta\rangle$

(\vec{k}_α et \vec{k}_β sont les vecteurs quantités de mouvement initial et final du projectile, E_{coll} représente l'énergie relative de collision avec $K = \sqrt{2\mu E_{coll}}$). Sachant que l'état d'un système composé de plusieurs particules s'exprime par le produit tensoriel (\otimes) des états des particules qui le constituent, l'amplitude de transition quantique prise entre l'état du système étudié avant collision ($|\alpha\rangle \otimes |\vec{k}_\alpha\rangle$) et après collision ($|\beta\rangle \otimes |\vec{k}_\beta\rangle$) s'écrit :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \vec{k}_\beta | \otimes \langle \beta | V | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (II-25a)$$

En prenant l'onde de diffusion au premier ordre d'un développement en puissance de $\frac{1}{\mu}$ du formalisme du paramètre d'impact, l'expression de $T_{\beta\alpha}$ (II-25a) se met sous les deux formes suivantes :

$$T_{\beta\alpha} = \left[\langle \vec{k}_\beta | \otimes \langle \beta | \right] V \left[|\psi_\alpha^{+E}\rangle \otimes |\vec{k}_\alpha\rangle \right] \quad (II-25b)$$

$$= \langle \vec{k}_\beta, \beta | V | \vec{k}_\alpha, \psi_\alpha^{+E} \rangle \quad (II-25a)$$

où $|\psi_\alpha^{+E}\rangle$ satisfait l'équation (II-15). En injectant la relation de fermeture dans la représentation des coordonnées électroniques $\{|\vec{R}, \vec{x}\rangle\}$ l'amplitude de transition quantique prend la forme eikonale suivante :

$$T_{\beta\alpha} = \int d^3\vec{R} d^3\vec{x} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \varphi_\beta^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (II-26)$$

La conservation de l'impulsion impose que la quantité de mouvement $\vec{q} = \vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta$ soit transférée à la cible. C'est pour cela qu'on nomme cette quantité : moment transféré qui est lui-même décomposé en deux composantes, l'une transversale $\vec{\eta}$ (orthogonale à la vitesse relative du projectile) et l'autre longitudinale $\vec{\eta}'$ (parallèle à la même vitesse) [9]. On a donc :

$$\vec{q} = \vec{\eta} + \vec{\eta}' = q_v \vec{v} + \vec{\eta} \quad (II-27)$$

la conservation de l'énergie exige :

$$\frac{k_\alpha^2}{2\mu} + \varepsilon_\alpha = \frac{k_\beta^2}{2\mu} + \varepsilon_\beta \quad (II-28a)$$

ε_α et ε_β désignent respectivement les énergies des états liés initial et final de la cible.

soit encore :

$$\frac{1}{2\mu}(k_\alpha - k_\beta)(k_\alpha + k_\beta) = \varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha \quad (II-28b)$$

or :

$$\eta' = k_\alpha - k_\beta \cos \theta = q_v \quad (II-29)$$

θ indique l'angle entre les vecteurs \vec{k}_α et \vec{k}_β . L'approximation eikonale, comme nous l'avons déjà mentionné au début de ce chapitre, s'applique à haute énergie et aux petits angles de collision. Si l'angle θ est petit alors :

$$q_v = k_\alpha - k_\beta \quad (II-30a)$$

et si l'énergie transférée est petite devant l'énergie du projectile, on obtient :

$$\frac{1}{2\mu}(k_\alpha + k_\beta) = \frac{2}{2\mu} k_\alpha \quad (II-30b)$$

où $\frac{2}{2\mu} k_\alpha = v$, à l'aide des expressions (II-28c) et (II-30a, b) la composante longitudinale du

moment transféré s'exprime :

$$q_v \approx \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{v} \quad (II-31)$$

et en utilisant les relations (II-7a, b, c) l'expression du moment transféré (II-27) se met sous la forme suivante :

$$\vec{q} \cdot \vec{R} = \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{v} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad (II-32)$$

en tenant compte de $d^3 \vec{R} = d^2 \vec{\rho} dz$ et substituons l'expression approchée de $\vec{q} \cdot \vec{R}$ (II-32) dans l'expression de l'amplitude de transition (II-26), on obtient les deux formes suivantes :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2 \vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} \int dz d^3 \vec{x} e^{i\frac{\varepsilon_\beta}{v} z} \phi_\beta^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) e^{i\frac{\varepsilon_\alpha}{v} z} \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (II-33a)$$

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2 \vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} (\beta | V | \psi_\alpha^+) \quad (II-33b)$$

L'amplitude de transition quantique approchée (II-33b) s'écrit donc, pour $\alpha \neq \beta$, en fonction de l'amplitude de transition variationnelle eikonale (II-22) comme suit :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = i\nu \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} \rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{\nu}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad (II-34)$$

où le facteur de phase $\rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{\nu}}$ dépendant du paramètre d'impact traduit la contribution du potentiel inter-agrégat (II-13) qui a été réintroduite [8].

II-3.2. Sections efficaces eikonales :

Considérons un noyau (ou un électron atomique) placé dans un faisceau de fluence Φ particules (a) par cm^2 . Supposons que toute interaction de ce noyau avec une particule (a) provoque l'émission d'une particule (b). La section efficace σ représentant la probabilité d'interaction d'une des Φ particules, la probabilité d'émission d'une particule (b) par le noyau considéré est :

$$P = \Phi \sigma \quad (II-35)$$

mais la probabilité d'émission dans telle ou telle direction n'est pas en général uniforme. Soit $d\Omega$ un angle solide élémentaire autour d'une direction donnée ; en différentiant (II-35), on peut écrire :

$$\frac{dP}{d\Omega} = \Phi \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (II-36)$$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ est différent suivant la direction considéré ; il caractérise la probabilité d'émission d'une particule (b) dans cette direction, c'est ce qu'on appelle la section efficace différentielle. Elle est donnée, pour un processus d'excitation, par la relation suivante :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_\alpha}{k_\beta} \left| T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) \right|^2 \quad (II-37)$$

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

quand l'énergie cinétique incidente est très supérieure à la différence d'énergie $\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha$ entre les états de la cible $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$, l'expression (II-28a) nous permet d'écrire :

$$\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1 \quad (II-38)$$

et on a alors :

$$d\sigma_{\beta\alpha} = d\varphi_{\beta} \sin(\theta_{\beta}) d\theta_{\beta} \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (II-39)$$

en différentiant \vec{q}^2 calculé à partir de l'expression (II-27) ainsi que celle du moment transféré ($\vec{q} = \vec{k}_{\alpha} - \vec{k}_{\beta}$) et en utilisant l'expression (II-38), nous pouvons écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_{\beta}) d\theta_{\beta} \quad (II-40)$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_{\eta} \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi v} \right|^2 \quad (II-41)$$

en remplaçant $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ par son expression (II-34) et en appliquant la transformée de Fourier à deux dimensions on obtient :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad (II-42)$$

Nous avons vu auparavant que l'amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est variationnelle, par analogie au traitement quantique, et qu'une forme approchée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est complètement déterminé par l'expression (II-24), quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous- espace vectoriel de dimension finie. Il nous suffira alors, pour calculer la section efficace totale de diffusion, de déterminer $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ qui ne nécessite aucune intégration sur le paramètre d'impact $\vec{\rho}$ et nous permet de nous affranchir d'une difficulté majeure, celle de la divergence qui apparait dans l'évaluation des éléments de matrice de type $(i | V | j)$ et $(i | VG_r^+ V | j)$ dans certains états hydrogénoïdes dégénérés ($2s$ et $2p_0$ par exemple), quand le calcul est fait de façon entièrement quantique.

Références

- [1] A. Kara-Hachemi , H. Hachemi , « Eléments de physique quantique » , © Office des publications Universitaires : 01-1998. Edition : 1.02.4100.
- [2] 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.
- [3] R. Gayet and M. Bouamoud , *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B42* .515-522 (1989).
- [4] B. Lasri, *Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen* (1998).
- [5] B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Phys. Chemi. News, Vol 20 , pp12-17* (2004).
- [6] Y. Siabderrahmane , mémoire de magistère , Faculté des sciences et de la technologie Université Dr Moulay Tahar de Saïda (2008).
- [7] http://fr.wikipedia.org/wiki/Fonction_de_Heaviside.
- [8] R. K. Janev et A. Salin, *ann. Phys. N.y* 73 (1972) 136-155.
- [9] J.Rangama " Ionisation et excitation de l'atome de lithium par impact de particules chargées rapides", Thèse de Doctorat Es Sciences, CAEN/BASSE-NORMANDIE (1995).

Chapitre III

Application du principe variationnel de Schwinger à l'excitation de l'ion Xe^{52+} par impact de différents cibles atomiques de charge nucléaire croissante

III-1. Introduction :

Dans cette partie, et dans le cadre du formalisme du paramètre d'impact, nous allons présenter à nouveau une nouvelle application du formalisme de Schwinger à l'étude de l'excitation d'ions $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ incidents à 25 MeV/nucléon par impact de différents cibles atomiques de charge nucléaire croissante (allant de 1 jusqu'au 150).

III-2. Aspect théorique :

Nous nous sommes intéressés à une approche fondée sur le principe variationnel de Schwinger et faisant appel à l'approximation iconale (Bouamoud [1], Gayet et Bouamoud [2], Lasri, Bouamoud et Gayet [3][4]). Dans l'approximation iconale on peut montrer que l'amplitude de transition $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\bar{\rho})$ où $\bar{\rho}$ est le paramètre d'impact est stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion $|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}(z)\rangle$ autour de leurs valeurs exactes. On obtient ainsi une forme approchée de $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\bar{\rho})$, en développant les états de diffusion sur les états

d'une base tronquée de dimension N . L'approximation est d'autant meilleure que N est grand.

$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ a la forme suivante :

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

où $(D^{-1})_{ij}$ est un élément de matrice défini sur la base des vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$, (D^{-1}) étant la matrice inverse de la matrice (D) qui représente l'opérateur $V - VG_T^{\pm}V$ où V est le potentiel d'interaction projectile-cible et G_T^{\pm} est l'opérateur de Green du système non perturbé. $|\alpha(z)\rangle$ et $|\beta(z)\rangle$ représentent respectivement les états initial et final de la cible; le symbole $(| |)$ indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques et la seule coordonnée z de \vec{R} .

III-3. Application : Excitation de $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ par impact de différents noyaux :

Comme application directe on se propose d'étudier l'excitation des états $(1s,2s)$, $(1s,2p)$, $(1s,3s)$, $(1s,3p)$ du Xe^{52+} par impact de noyaux nus de charge Z_P , à une vitesse correspondant à une énergie de 25 MeV/nucléon. Cette énergie correspond à une vitesse de 31.12 a.u. dans un repère galiléen lié au projectile alors que la vitesse orbitale des électrons du $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ est de l'ordre de 50 a.u. Il s'agit bien là d'une collision à vitesse intermédiaire. Pour décrire l'excitation des niveaux héliumoïdes du Xe^{52+} , on suppose que l'électron passif fait complètement écran à l'autre électron, réduisant ainsi la charge du noyau à $Z_T=53$.

L'évaluation de l'amplitude de transition variationnelle a été faite en incluant dans le développement du propagateur G_T^+ , tous les états nl du spectre discret ainsi que ceux du continuum du Xe^{52+} . Dans un premier temps, les états $|\psi_{\alpha}^+\rangle$ et $|\psi_{\beta}^-\rangle$ ont été développés sur une base de 5 états à savoir $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}\}$. Ensuite les états du continuum ont été inclus afin de comparer les différentes approximations.

Dans cette étude, quatre approches théoriques ont été comparées : l'approximation de Born au premier ordre Born I et au second ordre Born II, ainsi que l'approximation de Schwinger-Born (Schw-B), Schwinger55D (Schw55D) et Schw55C après avoir ajouté la contribution du spectre du continuum des états de la cible.

Excitation à l'état 2s du Xe^{52+} :

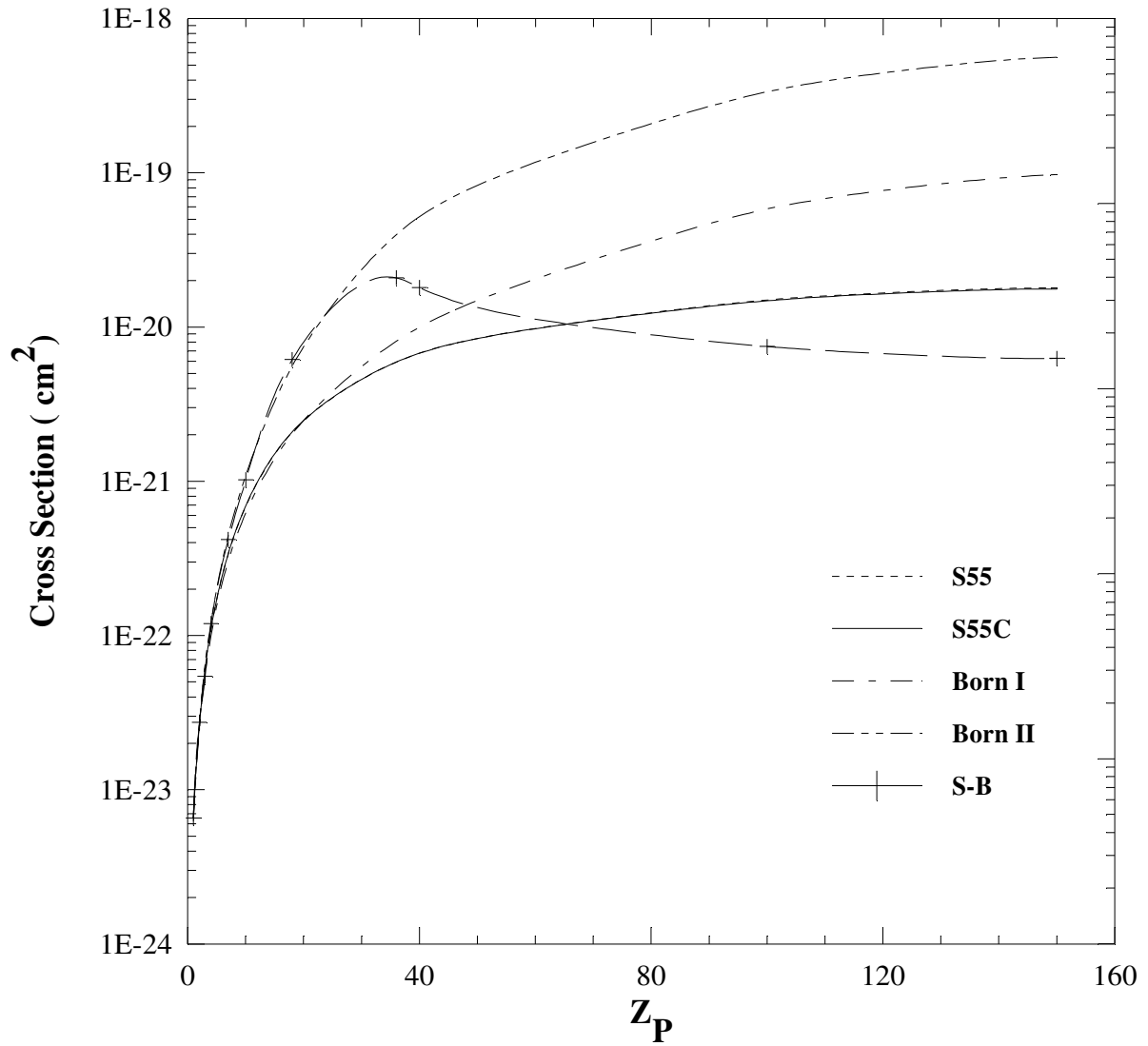


Figure 1: Sections efficaces totales d'excitation en cm^2 à l'état $(1s,2s)$ de $Xe^{52+}(1s^2)$ par impact de noyaux de charge Z_P à une énergie de $25Mev.u^{-1}$

Excitation à l'état 2p du Xe^{52+}

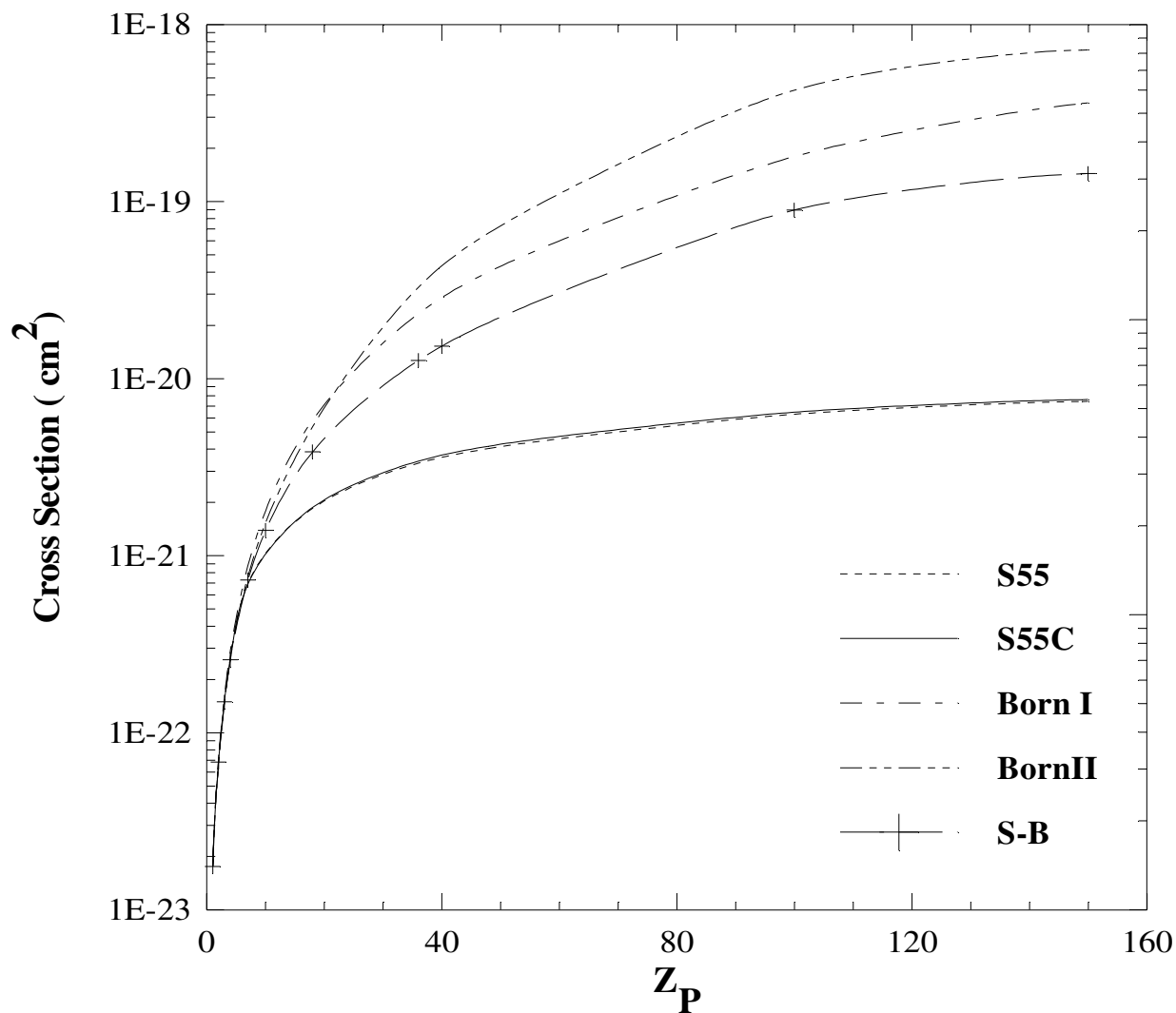


Figure 2: Sections efficaces totales d'excitation en cm^2 à l'état $(1s,2p)$ de $Xe^{52+}(1s^2)$ par impact de noyaux de charge Z_P à une énergie de $25MeV.u^{-1}$

Excitation à l'état 3s du $Xe^{52+}(1s^2)$

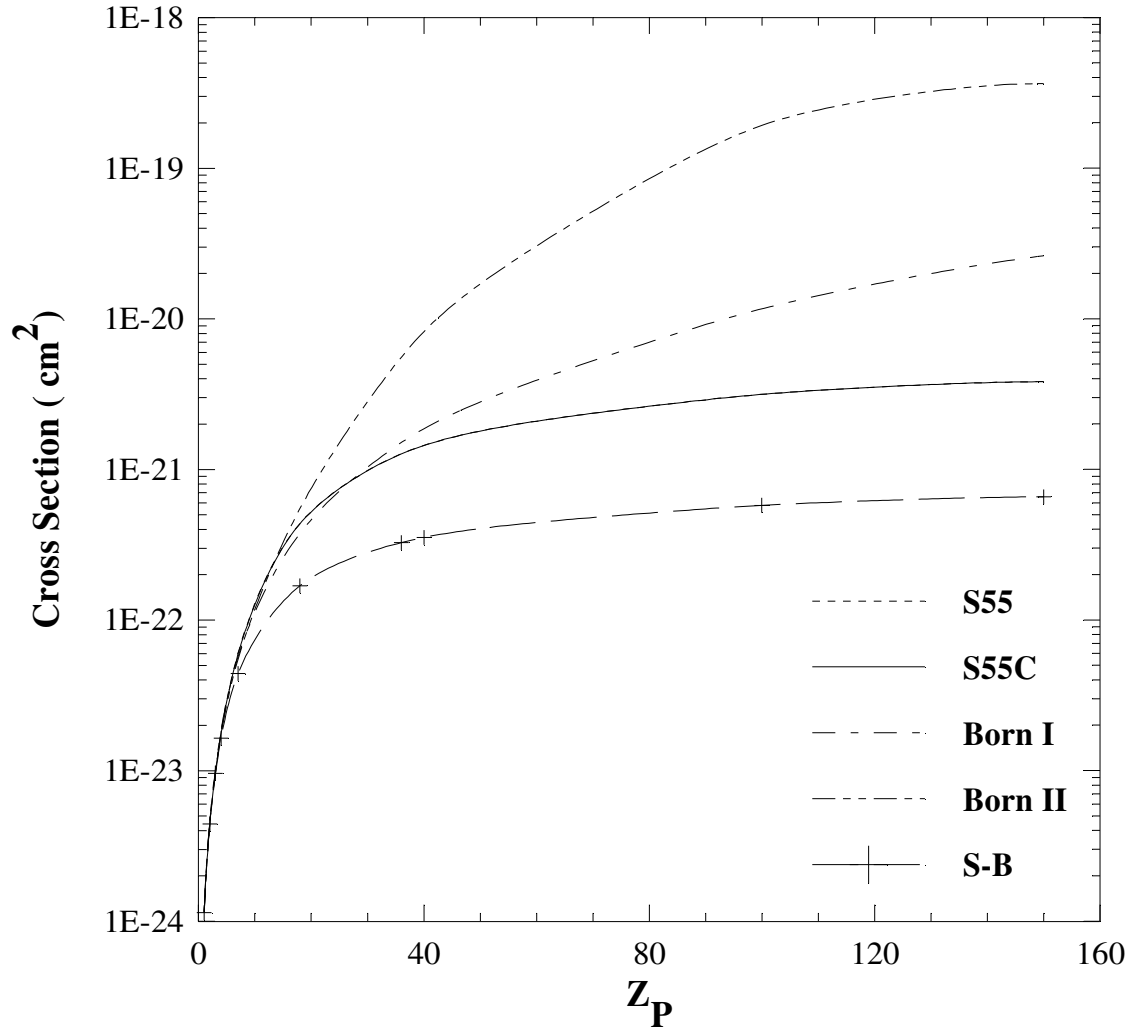


Figure 3: Sections efficaces totales d'excitation en cm^2 à l'état $(1s,3s)$ de $Xe^{52+}(1s^2)$ par impact de noyaux de charge Z_P à une énergie de $25 Mev.u^{-1}$

Excitation à l'état $3p$ du $Xe^{52+}(1s^2)$

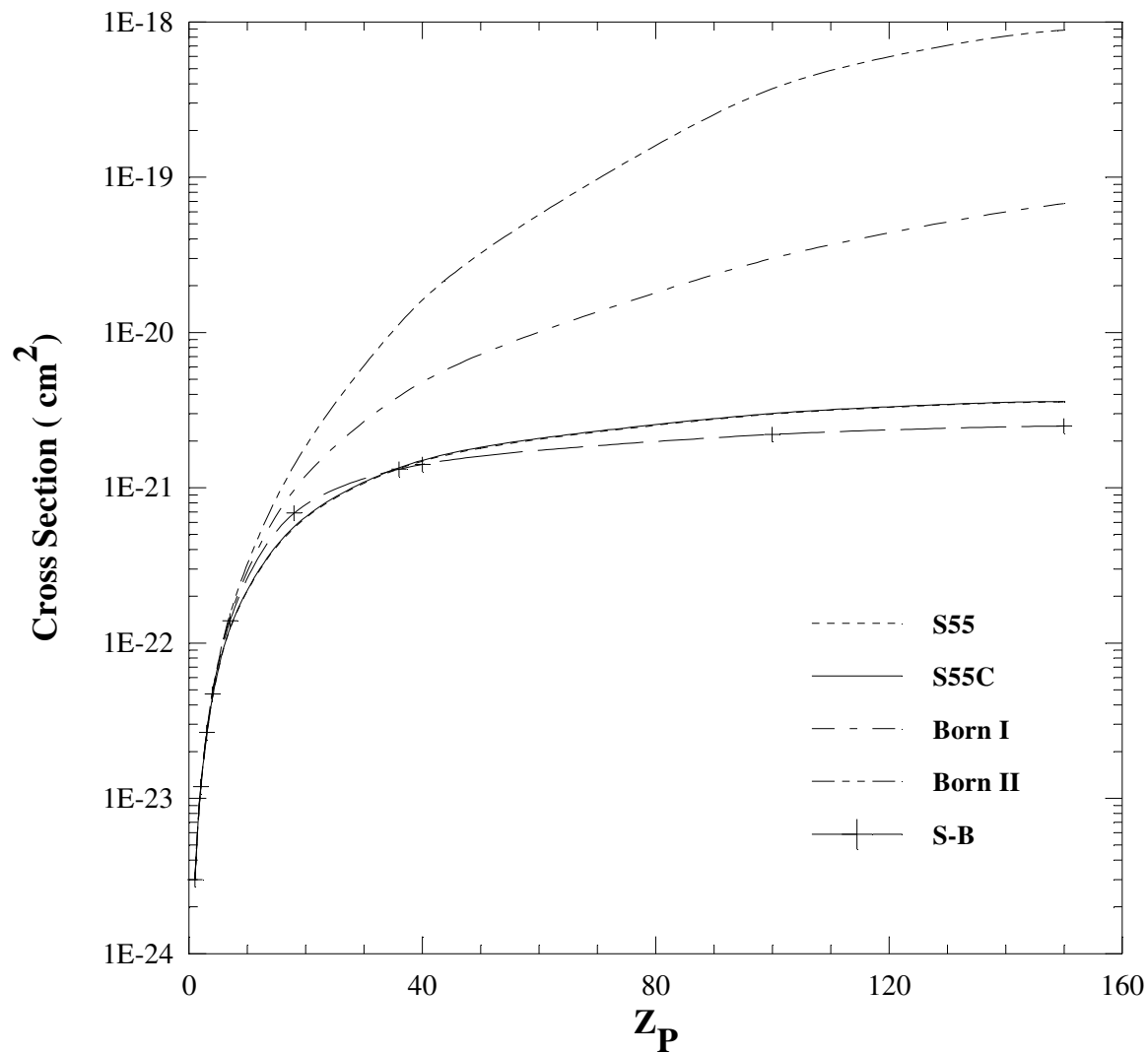


Figure 4: Sections efficaces totales d'excitation en cm^2 à l'état $(1s,3p)$ de $Xe^{52+}(1s^2)$ par impact de noyaux de charge Z_P à une énergie de $25 Mev.u^{-1}$

Interprétation des résultats :

Dans cette étude, quatre approches théoriques ont été comparées : l'approximation de Born au premier ordre Born I et au second ordre Born II, ainsi que l'approximation de Schwinger-Born} (SB), Schwinger 55 (S55) et S55C après avoir ajouté la contribution du spectre du continuum des états de la cible.

Pour l'excitation au niveau $n=2$, la série de base utilisée comprendra les 5 états suivants $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$. Notre traitement théorique a été appliqué avec succès à l'excitation du $Xe^{52+}(1s^2)$ en collision avec divers atomes à 25 MeV/u. puisque les cibles sont des atomes neutres, aucun processus de capture ne peut intervenir lors de la collision.

La figure 1 correspond à l'excitation du niveau 2s. Nous y observons un comportement de l'approximation SB semblable à celui de BII jusqu'à $Z_p = 30$ environ. Ensuite, SB passe par un maximum puis décroît pour se saturer à partir de $Z_p = 100$.

La figure 2 montre pour l'excitation du niveau 2p un comportement très différent. SB croît plus vite que S55 et se sature très lentement, bien au-delà de $Z_p = 100$, à une valeur environ 100 fois plus élevée que celle de S55.

On voit que, comme prévu, la section efficace totale d'excitation, obtenue dans l'une quelconque des approximations variationnelles se sature à mesure que la charge Z_p augmente. Dans le cadre de notre modèle, les sections efficaces totales d'excitation dépendent des seules charges nucléaires des projectiles.

Les figures 3 et 4 correspondent respectivement à l'excitation des niveaux (1s,3s) et (1s,3p). On observe bien le phénomène de saturation des sections efficaces totales d'excitation de l'ion Xe^{52+} ceci à partir d'une charge de projectile égale à 100.

On constate également que les sections S55 et S55C sont quasi-confondues ce qui montre la faible influence du continuum de Xe^{52+} sur ces transitions.

Références

- [1] 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.
- [2] R. Gayet and M. Bouamoud , *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 42 .515-522 (1989).
- [3] 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.
- [4] B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Phys. Chem. News*, 28 (2006) 97 -102.

Conclusion

Notre méthode a été appliquée à l'excitation du $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ par impact de noyaux de charge Z_P d'énergie de 25 MeV/A dans un repère lié au projectile. Nous avons comparé les différentes approximations : approximation de Born au premier ordre (Born-I), et au deuxième ordre (Born-II), approximation de Schwinger-Born (Schw-B), approximation de Schwinger avec une base de 5 vecteurs (Schw55D) et une extension de cette dernière approximation avec l'inclusion des états du continuum de la cible (Schw55C). Nous avons examiné en détail l'évolution du phénomène de saturation des sections efficaces totales d'excitations obtenues par ces différentes approches. La première conclusion est que notre méthode variationnelle prédit toujours ce phénomène de saturation quand la charge nucléaire des atomes excitateurs augmente. Par contre, l'approximation de Schwinger-Born (Schw-B) est insuffisante pour rendre compte de ce processus d'excitation.