

UNIVERSITE Dr. TAHAR MOULAY- SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

En PHYSIQUE

Option : **Physique des matériaux**

Par

M^r MARBOUH NORREDINE

Sur le thème

Excitation électronique des ions Heliumoïdes $\text{Si}^{12+}(1s^2)$ par impact d'atomes de gaz rares aux énergies intermédiaires: effet de saturation des sections efficaces totales d'excitation

Soutenu le **16/06/2014** devant la commission d'examen:

M ^r ELKEURTI Mohammed	Maître de Conférences «A » (U. Saïda)	Président
M ^r LASRI Boumediene	Professeur (U. Saïda)	Encadreur
M ^r OUAHRANI Tarik	Maître de Conférences «A » (EPST-Tlemcen)	Examineur
M ^{elle} KHELFAOUI Friha	Maitre Assistante «B » (U. Saïda)	Examinatrice

Année Universitaire 2013 - 2014

Résumé

Durant ces dernières années, les approches variationnelles basées sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger s'avèrent un outil d'investigation très puissant qui prend le relais du traitement perturbatif dans l'étude des processus d'excitation directe des atomes par impact d'ions aux énergies intermédiaires. Ces diverses caractéristiques sont bien illustrées par un bon accord entre les résultats théoriques quand la fonction d'onde est assez bien représentée.

Dans le présent travail et en utilisant le principe variationnel de Schwinger nous avons fixé comme objectif principal la détermination des sections efficaces totales d'excitation de des ions helimoïdes Si^{12+} en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N, Ne, Ar et Xe) à une énergie de 80 MeV et ceci afin examiner par la suite le phénomène de saturation des sections efficace lorsque la charge du projectile augmente. Les divers résultats obtenus seront en bon accord avec les résultats expérimentaux de Tiwari et al (1998).

Mots Clés :

- Excitation atomique.
- phénomène de saturation des sections efficaces totales.
- Principe variationnel de Schwinger.
- Amplitude de transition.
- Sections efficaces.

Abstract

A new variational impact parameter approach to the process of direct electronic excitation of atoms by impact of ions at intermediate velocities regimes was shown to be very successful in predicting the saturation of cross sections when the projectile charge is increased. In our approach, this new procedure is based on the fractional form of the Schwinger variational Principle and applied to determine the excitation cross section of Helium-like Si^{12+} ions impinging at 80 MeV on various gases (H_2 , He, N_2 , O_2 , Ne, Ar, Kr, Xe). The excitation of Si^{12+} to the levels (1s,nl) was made with a set of 5 orbitals : $\mathbf{B1} = \mathbf{B2} = \{1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}\}$ where $n=2$; this procedure was called Schw55. All obtained results stay in good agreement with experimental data of Tiwari et al (1998).

Key words:

- Atomic excitation.
- Saturation effect of excitation cross sections.
- Schwinger Variational principle.
- Transition amplitude.
- Cross sections.

ملخص

خلال السنوات الأخيرة، التقريبات التغييرية و المتركرة أساسا على العلاقة الكسرية للمبدأ التغييري لشوينغر تبقى أداة فحص مهمة في علاج التذبذب في دراسة عملية التحريض المباشر للذرات المصطدمة بايونات في طاقة متوسطة. مختلف هذه المميزات موضحة جيدا من خلال توافق جيد بين النتائج النظرية عندما توضح الدالة الموجية بشكل جيد.

في هذا العمل، نطبق المبدأ التغييري لشوينغر، نضع هدف حساب المقاطع الفعالة الكلية للتحريض لتصادم الايونات شبيهة الهيليوم Si^{12+} مع مختلف الذرات شحنتها من 1 إلى 54 التي تحوي الغازات النادرة (He, N, Ne, Ar et Xe) في طاقة 80 MeV ومن ثم فحص ظاهرة تشبع المقاطع الفعالة عندما تترابذ شحنة القذائف.

نقارن نتائجنا المحصل عليها مع النتائج التجريبية لتيواري و مساعديه (1998).

كلمات مفتاحية:

- التحريض الذري.
- ظاهرة تشبع المقاطع الفعالة الكلية.
- المبدأ التغييري لشوينغر.
- سعة التحول.
- المقاطع الفعالة.

Dédicaces

Ce travail est dédié à la mémoire de mon père et je le dédie aussi :

- ❖ A ma famille :
 - Mes parents.
 - Mes frères.
 - Mes sœurs.
- ❖ A tout mes enseignants du primaire à l'université.
- ❖ A tout mes amis et mes collègues.

Remerciements

Au nom du dieu le tout puissant je commence ce modeste travail par remercier monsieur **LASRI BOUMEDIENE** Professeur à l'université Dr Tahar Moulay de Saïda, de m'avoir proposé ce sujet prodigieux, de m'avoir entouré par son générosité,

Sa modestie, et notamment son savoir, et d'avoir dirigé ce travail, que j'aurai voulu qu'il ne se termine plus à cause des bons et chaleureux moments qu'on a passé ensemble. Travailler avec lui a été un grand plaisir pour moi, je profite de cette occasion de lui exprimer mon profond respect.

J'adresse mes remerciements à une dame noble que je la considère entant que ma sœur ainée c'est bien M^{elle} **F. KHELFAOUI** maître assistante à l'université Dr Tahar Moulay de Saïda. Qui aimait mon bien, me dirigeait vers la bonne voie, et de m'avoir fait connaître le Professeur **LASRI.BOUMEDIENE**. Ainsi M^{me} **F. Laabani**

Je remercie monsieur **M. ELKEURTI**, maître de conférences A à l'université Dr Tahar Moulay de Saïda d'avoir accepté de présider le jury d'examen. Ainsi monsieur **OUAHRANI Tarik**, Maître de Conférences A à l'école préparatoire en Sciences et Technique de Tlemcen et M^{elle} **Khelfaoui Friha**, Maître assistante à l'Université de Saïda

Nos plus sincères remerciements et la gratitude avec le plus profond respect à tout nos enseignants.

J'adresse mes amitiés à mes collègues de la promotion : O. Mebkhout, M. Belfodil, M. Tabti, M. Ouiss, M. Bouzanda, A. Zouaoui, A. Benslimane, A. Maamar, J. Zaidi, A. Nezai, M. Bouazza, S. Belhadi, Y. Chami, A. Youcef, Z. Faid, A. Allou, S. Moussaoui, A. Saada A. Aissaoui, H. Aissaoui, M. Aissaoui, H. Kadda, B. Kadi, Z. Hamhami, et tous mes amis sans exception.

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 figures

I-1	Schéma de la collision.....	4
I-2	Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision P+H.....	6
III-1	Système collisionnel dans l'approximation Eikonale	23
V-1	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau 2s de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	48
V-2	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau 2p de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	50
V-3	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau n=2 de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	52
V-4	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau 3s de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	54
V-5	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau 3p de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	56
V-6	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau 3d de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	58
V-7	Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau n=3 de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV	60

Liste des tableaux

V-A	Résultats expérimentaux de Tiwari et al (1998) pour l'état 2s	45
V-2.1	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau 2s de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	47
V-2.2	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau 2p de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	49
V-2.3	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau n=2 de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	51
V-2.4	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau 3s de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	53
V-2.5	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau 3p de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	55
V-2.6	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau 3d de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	57
V-2.7	Section efficace totale d'excitation en (cm ²) au niveau n=3 de Si¹²⁺ (1s ²) par impact de noyaux de charge (Z _p) à une énergie de 80 MeV	59

Sommaire

Résumé

Abstract

ملخص

Table des figures

Liste des tableaux

Introduction générale.....	1
Chapitre I Processus élémentaires, domaines de vitesses d'impact et divers travaux.....	4
I.1 Processus mono-électroniques directs.....	4
I.1.1 Ionisation.....	5
I.1.2 Excitation	5
I.1.3 Capture	5
I.2 Domaines des vitesses d'impact... ..	5
I.2.1 Régime des faibles vitesses d'impact.....	6
I.2.2 Régime des hautes vitesses d'impact.....	6
I.2.3 Régime des vitesses d'impact intermédiaires.....	7
I.3 Principales méthodes théoriques développées.....	7
I.3.1 Approximation de Born.....	7
I.3.2 Approximation de VPS (Vainshtein , Presnyakov et Sobelman).....	9
I.3.3 Approximation des voies couplées.....	9
I.3.4 Approximation de Glauber.....	11
I.3.5 Approche variationnelle.....	12
Références.....	13
Chapitre II Approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions.....	14
II.1 Formes stationnaires de l'amplitude de transition.....	14
II.1.1 Forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger.....	16
II.1.2 Forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger.....	16

II.2 Amplitude variationnelle approchée dans le formalisme de Schwinger.....	18
Références.....	21
Chapitre III Amplitude de transition de Schwinger pour l'excitation	22
III.1 Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact.....	22
III.2 Amplitude de transition.....	28
III.2.1 Amplitude de transition eikonale.....	28
III.2.2 Sections efficaces eikonales.....	30
Références.....	32
Chapitre IV Calcul de l'amplitude de transition variationnelle.....	33
IV.1 Calcul des éléments de matrice de Born I	33
IV.2 Calcul des éléments de matrice de Born II	36
IV.2.1 Contribution de la totalité du spectre discret de la cible.....	38
IV.2.2 Contribution des états du continuum de la cible.....	39
IV.3 Méthode d'intégration.....	40
Références.....	42
Chapitre V L'effet de saturation des sections efficaces totales d'excitation de l'ion Si^{12+}	43
V.1 Introduction.....	43
V.2 Excitation de l'ion Si^{12+} ($1s^2$) et une brève des résultats expérimentaux.....	44
V.2.1 Excitation à l'état 2s du Si^{12+}	47
V.2.2 Excitation à l'état 2p du Si^{12+}	49
V.2.3 Excitation au niveau n=2 du Si^{12+}	51
V.2.4 Excitation à l'état 3s du Si^{12+}	53
V.2.5 Excitation à l'état 3p du Si^{12+}	55
V.2.6 Excitation à l'état 3d du Si^{12+}	57
V.2.7 Excitation au niveau n=3 du Si^{12+}	59
V.3 Résultats et discussion.....	61
Références.....	63
Conclusion	64

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.

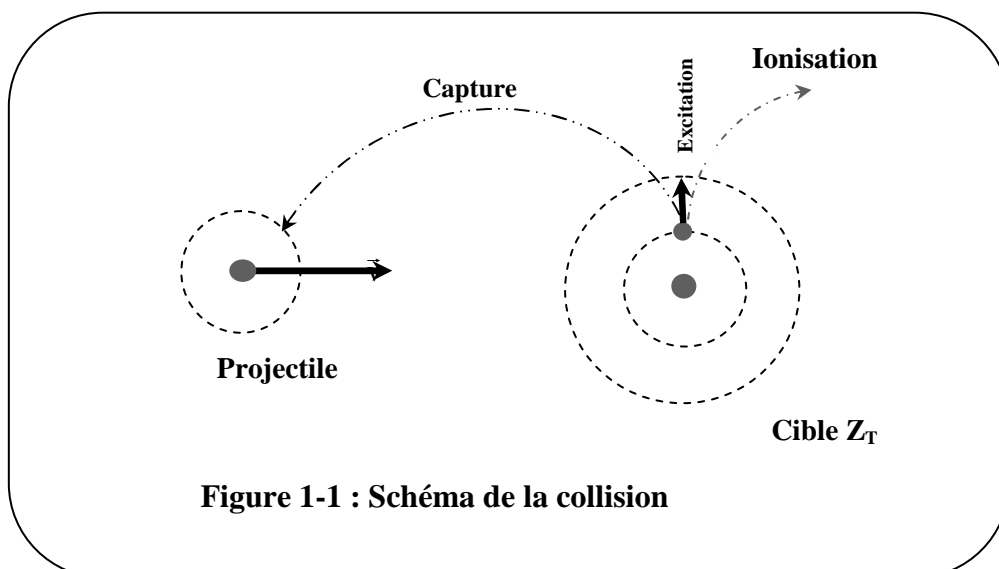


Figure 1-1 : Schéma de la collision

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 donnés, 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 classe 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.

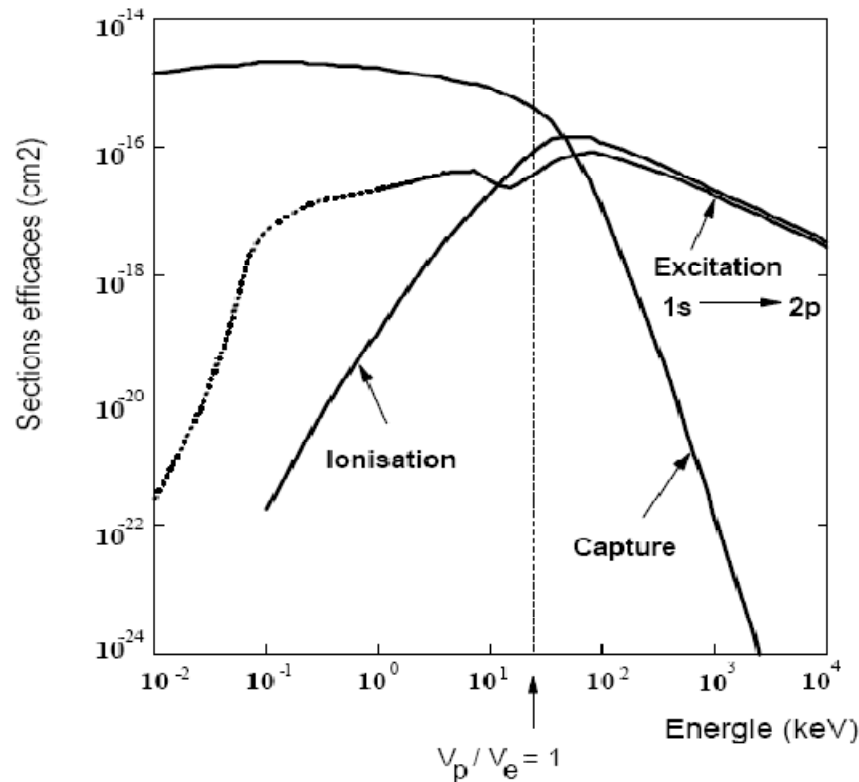


Figure I-2 : Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision P + H

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'une 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_α 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_β 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 :

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

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) :

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

Et ainsi de suite, le $N^{\text{ième}}$ 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 :

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

Où \vec{R} est la distance du projectile-cible, \vec{v} est la vitesse incidente du projectile, $\vec{\rho}$ désigne le paramètre d'impact et t est le temps pris arbitrairement égale à zéro quand $\vec{R} = \vec{\rho}$.

L'équation de Schrödinger peut se mettre sous:

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

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

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

Où ε_k désigne l'énergie propre de l'état propre $|\chi_k\rangle$.

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

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

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

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

Avec les conditions asymptotiques:

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

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

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

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

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

Avec des différents choix de bases qui dépend de la vitesse qu'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 la quelle 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 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

Approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions

 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-Khön [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 Schwinger en personne a présentée dans ses cours à l'université de Harvard et fut publiée en 1947 [5].}

Une des plus intéressantes approches est celle proposée par J. Schwinger, d'où l'appellation « principe variationnel de Schwinger », pour calculer l'amplitude de diffusion. Elle est ainsi basée sur les équations intégrales Lippmann-Schwinger.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Avec G_c^+ l'opérateur de Green définit par [6] :

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

Où E désigne l'énergie totale du système.

Définissons l'opérateur de transition T par :

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

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

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

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

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

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

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

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

II-1.1 Forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger :

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

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

De plus, quand on utilise les vecteurs exacts $|\Psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \Psi_\beta^-|$, la forme bilinéaire de l'amplitude de transition est exacte et stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires $|\delta\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \delta\psi_\beta^-|$ des vecteurs $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \psi_\beta^-|$, autour de leurs valeurs exactes. En différentiant l'expression (II-7), nous obtenons :

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

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

la relation (II-8) donne alors :

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

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

II-1.2 Forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger:

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

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

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

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

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

Jusqu'à présent, les principes variationnels que nous venons d'examiner sont « exacts » en ce sens qu'ils font usage des solutions $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ des équations de Lippmann-Schwinger. On obtient des formules approchées en remplaçant dans les expressions stationnaires de $T_{\beta\alpha}^B$ les fonctions d'onde inconnues $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ par les fonctions d'essai connues.

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

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

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

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

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

On sous une autre formulation :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} \left[\frac{1}{1 - \frac{T_{\beta\alpha}^{BI}}{T_{\beta\alpha}^{BI}}} \right] \quad \text{II-14}$$

Tel que :

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

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

$$\begin{aligned}\bar{T}_{\beta\alpha}^{BII} &= \langle \beta | V_C G_C^+ V_C | \alpha \rangle \\ &= T_{\beta\alpha}^{BII} - T_{\beta\alpha}^{BI}\end{aligned}\quad \text{II-16}$$

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

Si le rapport

$$\frac{\bar{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}} < 1 \quad \text{II-17}$$

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

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{B1} + \bar{T}_{\beta\alpha}^{B2} + \dots \quad \text{II-18}$$

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

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

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

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

Et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$V_\alpha = D.\tilde{a} \quad \text{II-26a}$$

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

Ou encore, en utilisant les propriétés algébriques des matrices:

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

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

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

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

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

ou sous forme matricielle :

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

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

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

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

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

Où $(D^{-1})_{ij}$ est l'élément de la matrice D^{-1} relatif aux vecteurs de base $|i\rangle$ et $|j\rangle$. Nous venons

de déterminer l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ en fonction des états de diffusion approchés qu'on a développée dans un sous-espace vectoriel de dimension finie.

Références

- [1]- L. Hulthén, K. Fysiogr. Sallsk. Lund. Forh.257 (1944).
- [2]- W.Kohn , phys. Rev .74 , 1763 (1948) .
- [3]- R.K. Nesbet , << Variational Methods in Electron –Atom Scattering Theory >>, Plenum press, New York (1980) .
- [4]- B.I. Schneider,<< An R-Matrix Approach to Electron Molecule Collision >> chapitre 8 in Computational Methods for Electron- Molecule Collisions Edited by W .M. Huo and F .A. Gianturco , Plenum Press , New York (1995).
- [5]- J.Schwinger, Phys. Rev. 56, 750 (1947).
- [6]- F.Khelfaoui , mémoire de magistère, Faculté des sciences et de la technologie Université Dr Moulay de saida (2009).

Chapitre III

Amplitude de transition de Schwinger pour l'excitation

La description des processus élémentaires intervenant dans les collisions atomiques à hautes vitesses d'impact est souvent faite par le biais d'un traitement perturbatif. Le mécanisme d'excitation dans les collisions ion-atomes a été largement étudié lorsque l'influence du partenaire exciteur est une petite perturbation, et quand l'approximation de Born est valable.

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

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

Pour cette étude théorique il existe deux approximations :

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

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

La méthode eikonale est une approche semi-classique car elle consiste à supposer que les noyaux se déplacent d'une façon classique tandis que le mouvement des électrons est traité d'une manière quantique. Pour cela, considérons une collision entre un projectile de masse

M_p et de charge Z_p et une cible de masse M_T et de charge Z_T , représentée par la figure ci-dessous, (figure III-1), dont la séparation internucléaire est donnée par :

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

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

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

\vec{R} : la distance internucléaire.

$\vec{\rho}$: paramètre d'impact.

\vec{v} : vitesse d'impact.

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

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

Géométriquement, on représente le système collisionnel comme suit :

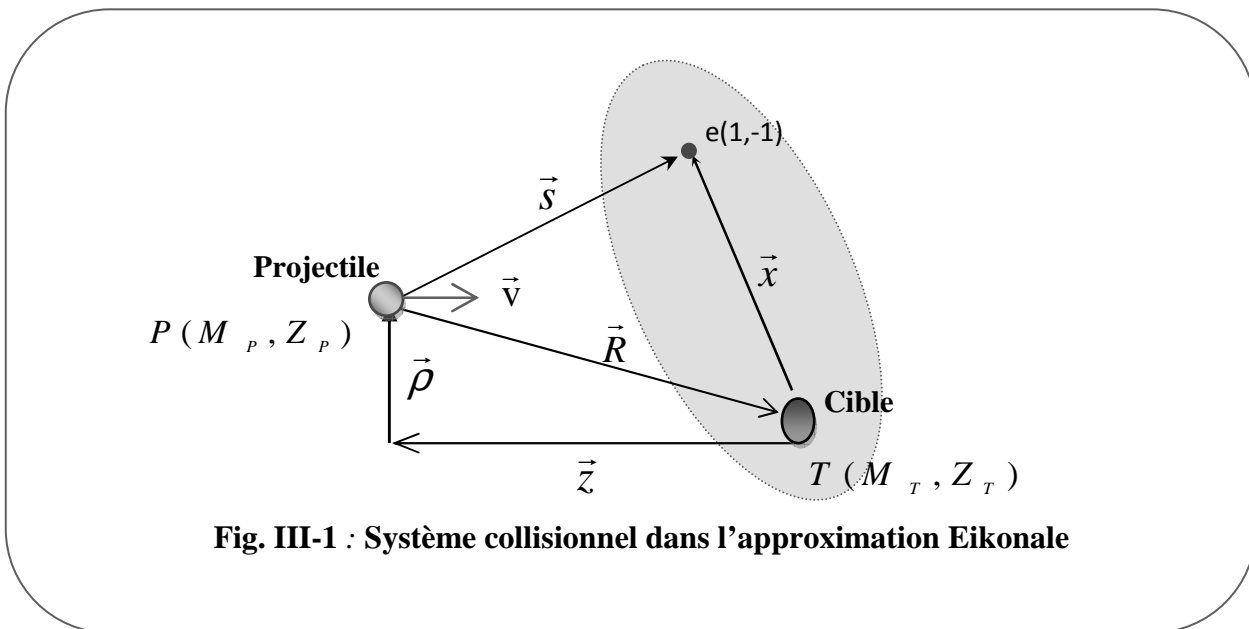


Fig. III-1 : Système collisionnel dans l'approximation Eikonale

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

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

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

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

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

Avec :

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

Et

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

Où μ représente la masse réduite du système :

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

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

$$V_C = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{S} \quad \text{III-5}$$

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

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

Pour résoudre l'équation (III-6), nous implique d'abords à résoudre l'équation de Schrödinger eikonale de la cible suivante :

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

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

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

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

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

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

Ce potentiel doit s'ajouté au hamiltonien H_T dans l'équation (III-7), pour obtenir les états propres eikonales de la cible, solutions de l'équation de Schrödinger eikonales de cette dernière, multipliés par un facteur de phase nommé « de coulomb »: $i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v} \ln(vR - vZ)$ avec $R - Z = \rho$. Donc l'amplitude de transition est également multipliée par un facteur de phase

qui dépend du paramètre d'impact $\bar{\rho}$, 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 :

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

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

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \langle \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle = 0 \quad \text{III-11a}$$

Et

$$\left\{ iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \langle \psi_{\beta}^{-}(z) \rangle = 0 \quad \text{III-11b}$$

Sachant que les états $|\alpha(z)\rangle$ et $\langle\beta(z)|$ sont respectivement les états initial et final de la cible.

Ils sont aussi des solutions de (III-7). Nous pouvons résoudre les deux équations différentielles

(III-11a, b) avec leurs conditions initiales, en invoquant les opérateurs de Green de la cible, solutions des équations suivantes :

$$\left(\mp i v \frac{\partial}{\partial Z} + H_T \right) G_T^\pm(Z - Z') |k(Z')\rangle = -\delta(Z - Z') |k(Z')\rangle \quad \text{III-12}$$

Avec les conditions initiales suivantes :

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

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

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

$$\langle v(z') | G_T^+(z - z') = -\frac{i}{v} \langle v(z) | \theta(z - z') \quad \text{III-14a}$$

$$G_T^-(z - z') |v(z')\rangle = \frac{i}{v} \theta(z - z') |v(z)\rangle \quad \text{III-14b}$$

Où $\theta(Z - Z')$ est la fonction Heaviside « du nom de Oliver Heaviside, c'est une fonction discontinue prenant la valeur 0 pour tous les valeurs réels strictement négatifs et la valeur 1 partout ailleurs » [3].

Les états de diffusion $|\Psi_\alpha^+(Z)\rangle$ et $\langle\Psi_\beta^-(Z)|$, solutions de l'équation (III-11a, b), sont alors déterminés dans l'approximation eikonale par les équations de Lippmann-Schwinger suivantes [4] :

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

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

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

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

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

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

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

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

De façon analogue, nous obtenons :

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

Et

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

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

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

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 :

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

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

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

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 $\langle j|$:

$$D_{ji} = \left(j | V - VG_T^+V | i \right) \quad \text{III-21}$$

III-2. Amplitude de transition :

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

III.2.1 Amplitude de transition eikonale :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

la conservation de l'énergie exige :

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

ε_{α} et ε_{β} sont les énergies des états liés initial et final de la cible. Sachant que l'approximation eikonale est valable à haute énergie et aux petites angles de collision, l'angle θ (entre les vecteurs \vec{k}_{α} et \vec{k}_{β}) est petit et l'énergie transférée est petite devant l'énergie du projectile, alors la composante longitudinale du moment transféré s'exprime :

$$q_v \approx \frac{\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\alpha}}{v} \quad \text{III-27}$$

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

$$\vec{q}\cdot\vec{R} = \frac{\varepsilon_{\beta} - \varepsilon_{\alpha}}{v} z + \vec{\eta}\cdot\vec{\rho} \quad \text{III-28}$$

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

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

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

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

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

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 (III-9) qui a été réintroduite [4].

III.2.2 Sections efficaces eikonales :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Nous avons vu auparavant que l'amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est variationnelle, par analogie au traitement quantique, et qu'une forme approchée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est complètement déterminé par l'expression (III-20), quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-espace vectoriel de dimension finie. Il nous suffira alors, pour calculer la section efficace totale de diffusion, de déterminer $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ qui ne nécessite aucune intégration sur le paramètre d'impact $\vec{\rho}$ et nous permet de nous affranchir d'une difficulté majeure, celle de la divergence qui apparait dans l'évaluation des éléments de matrice de type $(i|V|j)$ et $(i|V G_T^+ V|j)$ entre certains états hydrogénoïdes dégénérés (2s et 2p₀ par exemple), quand le calcul est fait de façon entièrement quantique.

Références

[1]- A. Kara-Hachemi , H. Hachemi « Eléments de physique quantique » , © Office des publications Universitaires : 01-1998. Edition : 1. 02.4100.

[2]- 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]- http://fr.Wikipedia.org/Wiki/Fonction_de_Heaviside.

[4]- R. K. Janev et A. Salin, ann. Phys. N .y 73(1972)136-155.

Chapitre IV

Calcul de l'amplitude de transition

Variationnelle

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

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

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

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

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

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

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

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

Où :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Posons :

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

Il en résulte :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- $[\tilde{z}_{ij}, +\infty[$ dans lequel l'intégration est faite analytiquement.

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

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

Et par la suite nous aurons :

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

Où

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

Est calculée numériquement et

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

Est déterminée analytiquement [2].

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Posons :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Où v, l et m sont les nombres quantiques de la fonction d'état $\varphi_v(\vec{x})$ et la fonction $\mathcal{H}_{ij}^{(v,l,m)}$ est définie par l'équation (IV-18). A partir des équations précédentes (IV-24a,b) et (IV-25), on aura pour $v \geq v_0$:

$$\mathcal{H}_{ij}^{(v,l)} \approx \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 \mathcal{H}_{ij}^{(v_0,l)} \quad \text{IV-26}$$

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

$$\sum_{v=l+1}^{+\infty} \mathcal{H}_{ij}^{(v,l)} = \sum_{v=l+1}^{v_0} \mathcal{H}_{ij}^{(v,l)} + v_0^3 \mathcal{H}_{ij}^{(v_0,l)} \sum_{v=v_0+1}^{+\infty} \frac{1}{v^3} \quad \text{IV-27}$$

On a :

$$\sum_{v=v_0+1}^{+\infty} \frac{1}{v^3} = \zeta(3) - \sum_{v=1}^{v_0} \frac{1}{v^3} \quad \text{IV-28}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

IV.3 Méthode d'intégration:

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

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

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

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

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

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

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

Références

- [1]- R. K. Janev et A. Salin, ann. Phys. N .y 73(1972)136-155.
- [2]- B. Lasri, « Nouvelle approche du principe variationnel de SDchwinger, application à l'excitation atomique aux énergies intermediaires » Thèse de doctorat, Université de Tlemcen (2007).
- [3]- B. Lasri , M . Bouamoud et R. Gayet, Phys. Chemi. News, Vol 20 , pp12-17 (2004).
- [4]- B. Brendlé , R. Gayet et K. Woher , Phys . Rev. Lett. 54 (1985) 2007.

Chapitre V

L'effet de saturation des sections efficaces totales d'excitation de l'ion Si^{12+}

V-1. Introduction :

Pendant ces dernières années, l'étude des processus 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 Hydrogénoïdes entrant en collision avec des atomes neutres ont tendance à se saturer quand la charge nucléaires des atomes augmente {Wohrer et al (1986) [1], Xiang-yuan Xu et al (1988) [2], Tiwari et al(1998) [3]}. Ce phénomène a été modélisé théoriquement par Brendlé et Gayet (1985)[4], Bouamoud (1988) [5] , Bouamoud et Gayet (1989) [6], Lasri, Bouamoud , Gayet (2004) [7] }.

Les procédures variationnelles basées sur le principe variationnel de Schwinger (PVS) 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 des projectiles neutres aux vitesses d'impact intermédiaires [1] [4] [5] [6] [7]. Expérimentalement, les sections efficaces totales ont été déduites à partir de celle utilisées pour la production de la raie Lyman des rayons X pour des projectiles Heliumoïdes et Hydrogénoïdes.

Dans cette partie de mémoire, nous nous sommes fixés l'objectif d'étudier l'excitation de l'ion $\text{Si}^{12+}(1s^2)$ en collision avec divers atomes de charge allant 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N, Ne, Ar et Xe) à une énergie de 80 MeV aux niveaux $n=2$ et $n=3$. Les

diverses prédictions théoriques ont été comparés avec les résultats expérimentaux de Tiwari et al [3]. Expérimentalement, ces atomes jouent le rôle de projectiles.

En effet à une vitesse d'impact donnée, la saturation apparait quand la charge nucléaire 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.

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

V-2. Excitation de l'ion Si^{12+} ($1s^2$) et une brève description des résultats expérimentaux :

L'effet de saturation dans l'excitation de la section efficace a été examiné pour les ions Si^{12+} entrant en collision avec un gaz d'atome cible (le nombre atomique Z allant de 2 jusqu'au 54) à une énergie de (8-12) a.u. expérimentalement et théoriquement.

L'excitation expérimentale de la section efficace a été déduite de la mesure Lyman des rayons X suivant l'atome excité. Les calculs théoriques ont été effectués en utilisant l'approximation Born-I, approximation nommée « Symmetric Eikonal Continuum Distorted Wave » (SECDW), et le principe variationnelle de Schwinger (PVS). De façon analogue à l'observation précédente des ions lourds la saturation a été découverte expérimentalement et le PVS à travers des sections dans la gamme totale des vitesses. La SECDW, ainsi a été découverte en sous-estimation les sections efficaces dans des valeurs large de Z_t dans les systèmes examinés présents, au cours de ces découvertes le rôle des effets des grands ordres dans des modèles théoriques différents ont été discutés.

D'un point de vue expérimental, l'expérience a été accomplie par Tiwari et al (1998) [3], les détails de la saturation expérimentale utilisée dans ces mesures ont été décrits précédemment par Saha et al [8]. Brièvement le faisceau des ions de Si dans l'énergie de 45-110 MeV ont été obtenus du BARC-TIFR Pelletron accelerator at Mumbai. Le faisceau a été décapé, en utilisant

une feuille de métal placé devant un aimant allume. Puisque l'expérience est difficile, elle accomplie seulement sur les états $2s$ et $3p+$.

	He	N	Ne	Ar	Xe
Résultats expérimentaux	3.1E-20	1.1E-19	1.7E-19	4E-19	9E-19
Erreurs	9E-21	5E-20	9E-20	1E-19	2E-19

Tableau V-A : Résultats expérimentaux de Tiwari et al à l'état $2s$.

Dans notre travail, le modèle adopté pour examiner le processus d'excitation de l'ion Si^{12+} par impact d'atomes neutres est basé sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger illustrée précédemment. De plus, la base sur laquelle les fonctions d'ondes $|\Psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\Psi_\beta^-|$ ont été développées, est élargie de 5 états ($1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}$) notée Schw55 pour le cas de l'excitation du niveau $n=2$ à 10 états ($1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{-1}, 3d_{+2}, 3d_{-2}$) notée Schw1010 pour le cas du niveau $n=3$ et ceci 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 (sections efficaces totales calculées de ces approximations) ont été comparés avec les résultats expérimentaux de Tiwari et al [3].

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

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

Nous avons utilisé un développement à cinq états noté Schw55, où on considère B_1 et B_2 deux ensembles de base contenant les cinq états de base utilisés pour étudier l'excitation au niveau $n=2$ $\{1s, 2s, 1p_0, 1p_{+1}, 1p_{-1}\}$. La matrice D peut être définie comme suit :

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

X : désignent les éléments à calculer.

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

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

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

X : désignent les éléments à calculer.

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

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

V-2.1. Excitation à l'état 2s du Si^{12+} :

Tableau 1: Section efficace totale d'excitation en (cm^2) à l'état 2s de Si^{12+} ($1s^2$)
par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

Z_p	Born I	Born II	Schw-B	Schw55	Tiwari	Erreur
1	1.30458E-21	1.50865E-21	1.48118E-21	1.43229E-21		
2	5.21832E-21	7.09031E-21	6.72469E-21	5.81018E-21	3.1E-20	9E-21
3	1.17412E-20	1.88671E-20	1.75551E-20	1.26035E-20		
4	2.08733E-20	3.96795E-20	3.78258E-20	2.13163E-20		
7	6.39244E-20	1.93593E-19	2.16406E-19	5.90409E-20	1.1E-19	5E-20
10	1.30458E-19	5.24532E-19	6.97556E-19	1.07025E-19	1.7E-19	9E-20
12	1.87859E-19	8.41334E-19	6.56444E-19	1.39295E-19		
14	2.55698E-19	1.23539E-18	5.41587E-19	1.69745E-19		
16	3.33972E-19	1.70982E-18	4.45988E-19	1.97649E-19		
18	4.22684E-19	2.25783E-18	3.8069E-19	2.22786E-19	4E-19	1E-19
20	5.21832E-19	2.86537E-18	3.35454E-19	2.45206E-19		
24	7.48899E-19	4.17883E-18	2.78462E-19	2.82691E-19		
29	1.02957E-18	5.81008E-18	2.3845E-19	3.18323E-19		
33	1.2371E-18	7.48364E-18	2.18487E-19	3.40082E-19		
36	1.38371E-18	8.27176E-18	2.0747E-19	3.5343E-19		
40	1.5667E-18	9.06643E-18	1.96182E-19	3.68151E-19		
43	1.71128E-18	1.06551E-17	1.89509E-19	3.77351E-19		
47	1.86258E-18	1.20956E-17	1.823E-19	3.87686E-19		
50	1.98474E-18	1.34428E-17	1.77846E-19	3.94263E-19		
52	2.0575E-18	1.41499E-17	1.75234E-19	3.98182E-19		
54	2.13215E-18	1.46103E-17	1.7286E-19	4.01777E-19	9E-19	2E-19
56	2.20962E-18	1.51246E-17	1.70696E-19	4.05082E-19		

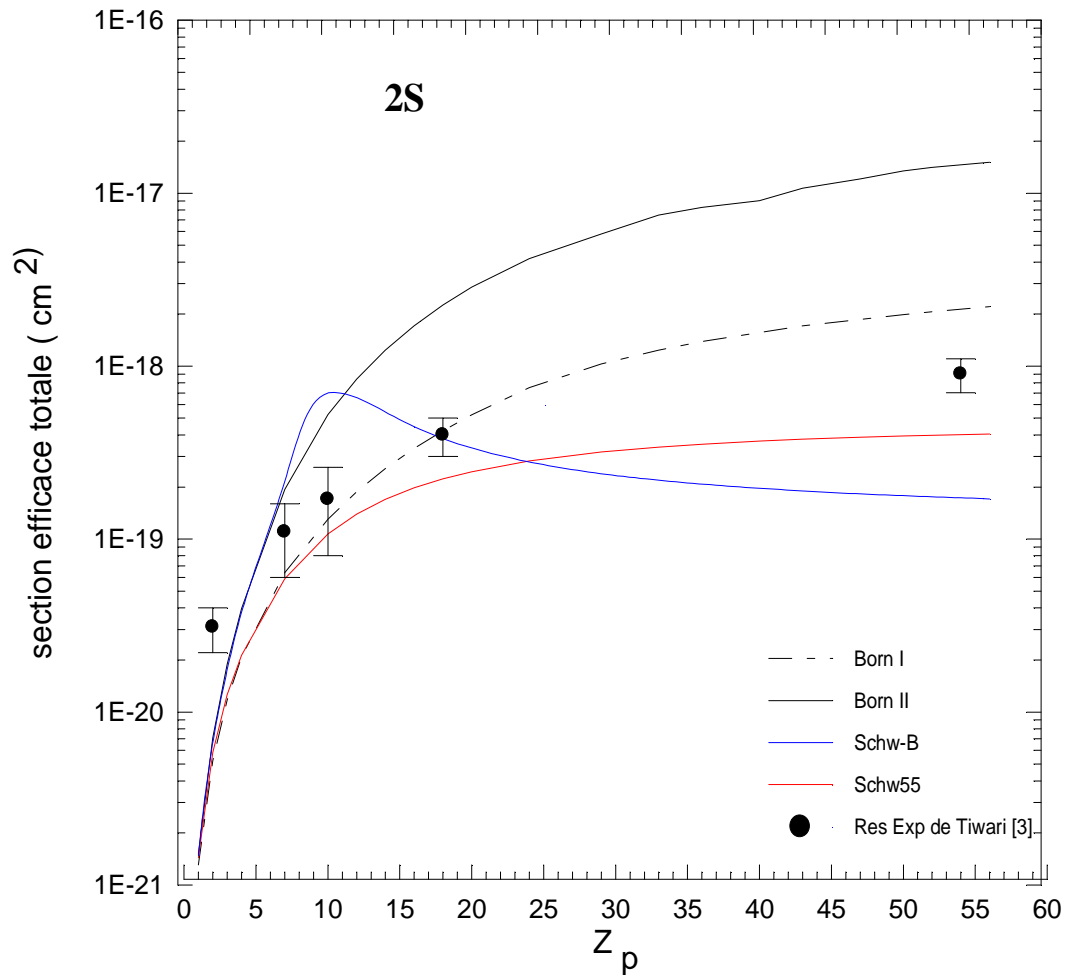
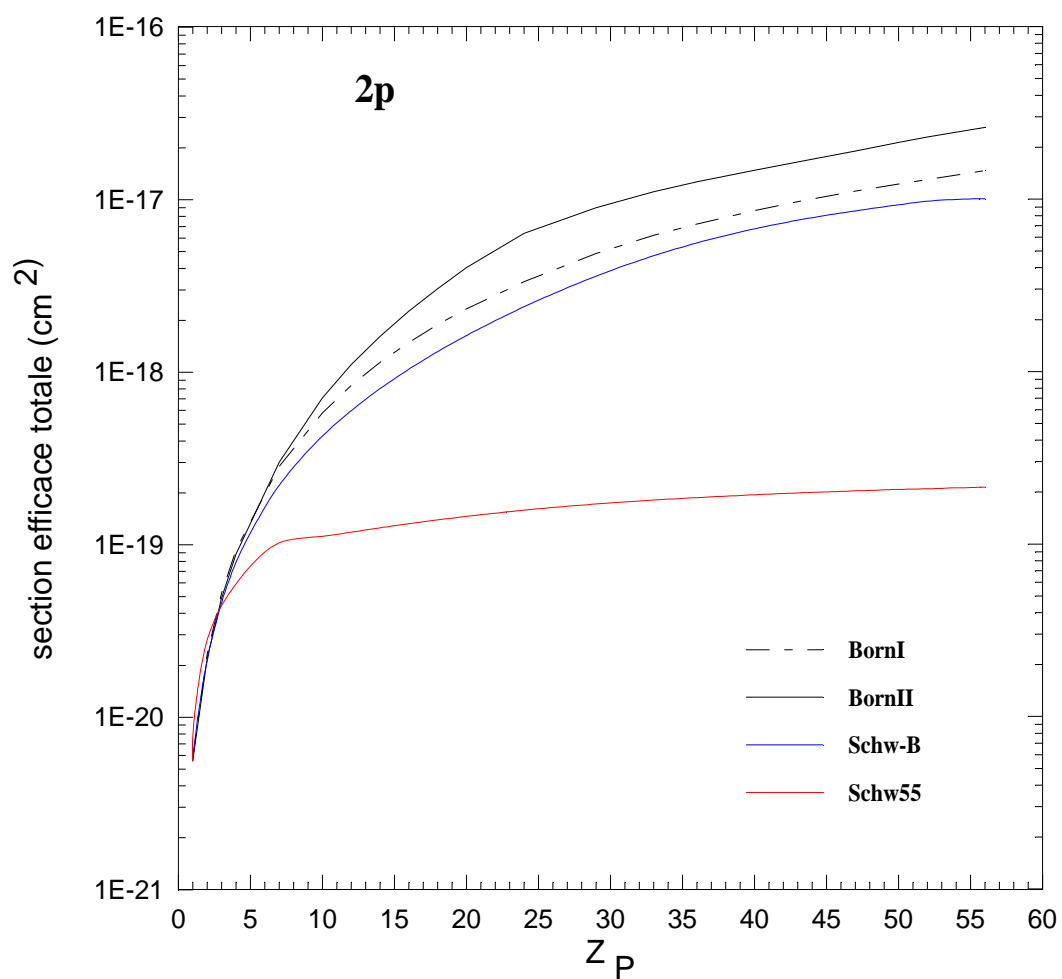


Figure V-1 : Section efficace totale d'excitation en cm^2 à l'état $2s$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

V-2.2. Excitation à l'état 2p du Si^{12+} :

Tableau 2: Section efficace totale d'excitation en (cm^2) à l'état 2p de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

Zp	Born I	Born II	Schw-B	Schw55
1	5.81632E-21	5.61824E-21	5.56887E-21	5.57234E-21
2	2.32653E-20	2.20051E-20	2.13103E-20	2.11518E-20
3	5.23468E-20	4.91897E-20	4.5996E-20	4.41852E-20
4	9.30612E-20	8.81739E-20	7.875E-20	6.8884E-20
7	2.84998E-19	3.00553E-19	2.20696E-19	1.02288E-19
10	5.81632E-19	7.09162E-19	4.25245E-19	1.11682E-19
12	8.3755E-19	1.1062E-18	5.97595E-19	1.18086E-19
14	1.14E-18	1.6146E-18	8.01115E-19	1.2498E-19
16	1.48897E-18	2.25681E-18	1.03862E-18	1.32065E-19
18	1.88448E-18	3.05132E-18	1.31339E-18	1.39084E-19
20	2.32653E-18	4.04742E-18	1.62877E-18	1.4587E-19
24	3.3502E-18	6.38294E-18	2.39259E-18	1.5841E-19
29	4.88364E-18	8.96507E-18	3.60024E-18	1.71935E-19
33	6.20772E-18	1.1137E-17	4.72361E-18	1.81144E-19
36	7.23226E-18	1.27307E-17	5.60558E-18	1.87225E-19
40	8.63795E-18	1.48688E-17	6.76336E-18	1.9439E-19
43	9.72971E-18	1.65353E-17	7.58603E-18	1.99149E-19
47	1.12269E-17	1.91888E-17	8.60729E-18	2.04799E-19
50	1.23465E-17	2.14652E-17	9.32146E-18	2.08585E-19
52	1.3125E-17	2.30858E-17	9.77741E-18	2.1092E-19
54	1.39341E-17	2.47129E-17	1.00292E-17	2.13119E-19
56	1.47736E-17	2.62692E-17	1.01077E-17	2.15191E-19



*

Figure V-2 : Section efficace totale d'excitation en cm^2 à l'état $2p$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

V-2.3. Excitation au niveau $n=2$ du Si^{12+} :

Tableau 3: Section efficace totale d'excitation en (cm^2) au niveau $n=2$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

Z_p	Born I	Born II	Schw-B	Schw55
1	7.1209E-21	7.12689E-21	7.05005E-21	7.00463E-21
2	2.848362E-20	2.909541E-20	2.803499E-20	2.696198E-20
3	6.4088E-20	6.80568E-20	6.35511E-20	5.67887E-20
4	1.139345E-19	1.278534E-19	1.165758E-19	9.02003E-20
7	3.489224E-19	4.94146E-19	4.37102E-19	1.613289E-19
10	7.1209E-19	1.233694E-18	1.122801E-18	2.18707E-19
12	1.025409E-18	1.947534E-18	1.254039E-18	2.57381E-19
14	1.395698E-18	2.84999E-18	1.342702E-18	2.94725E-19
16	1.822942E-18	3.96663E-18	1.484608E-18	3.29714E-19
18	2.307164E-18	5.30915E-18	1.69408E-18	3.6187E-19
20	2.848362E-18	6.91279E-18	1.964224E-18	3.91076E-19
24	4.099099E-18	1.056177E-17	2.671052E-18	4.41101E-19
29	5.91321E-18	1.477515E-17	3.83869E-18	4.90258E-19
33	7.44482E-18	1.862064E-17	4.942097E-18	5.21226E-19
36	8.61597E-18	2.100246E-17	5.81305E-18	5.40655E-19
40	1.020465E-17	2.393523E-17	6.959542E-18	5.62541E-19
43	1.144099E-17	2.71904E-17	7.775539E-18	5.765E-19
47	1.308948E-17	3.12844E-17	8.78959E-18	5.92485E-19
50	1.433124E-17	3.4908E-17	9.499307E-18	6.02848E-19
52	1.51825E-17	3.72357E-17	9.952644E-18	6.09102E-19
54	1.606625E-17	3.93232E-17	1.020206E-17	6.14896E-19
56	1.698322E-17	4.13938E-17	1.02784E-17	6.20273E-19

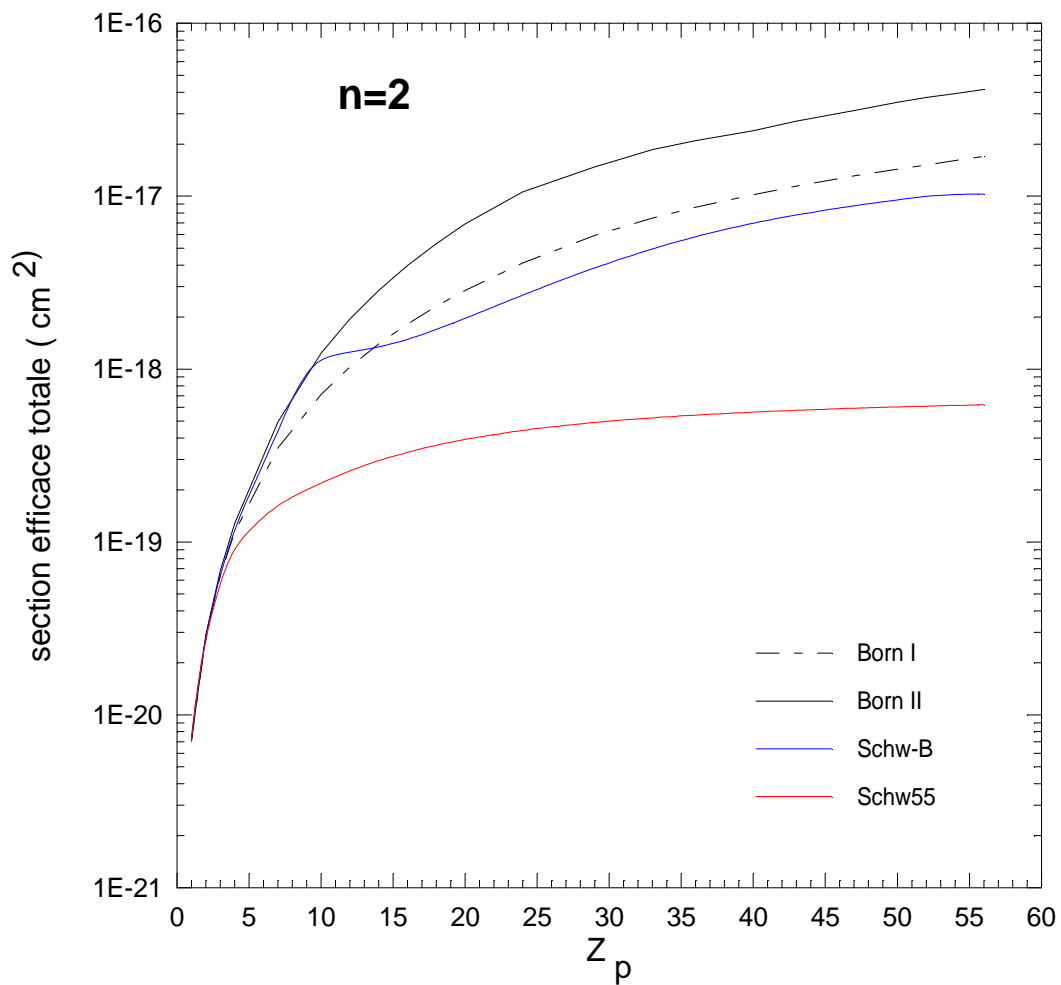


Figure V-3 : Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau $n=2$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

V-2. 4. Excitation à l'état 3s du Si^{12+} :**Tableau 4:** Section efficace totale d'excitation en (cm^2) à l'état 3s de Si^{12+} (1s^2)par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

Z_p	Born I	Born II	Schw-B	Schw1010
1	2.55467E-22	2.53673E-22	2.41542E-22	2.63081E-22
2	1.02187E-21	1.06211E-21	8.73831E-22	1.33343E-21
3	2.2992E-21	2.61927E-21	1.73052E-21	3.62505E-21
4	4.08747E-21	5.28289E-21	2.68122E-21	6.97914E-21
7	1.25179E-20	2.59467E-20	5.5088E-21	2.01396E-20
10	2.55467E-20	8.51707E-20	7.96146E-21	3.43359E-20
12	3.67873E-20	1.63402E-19	9.37408E-21	4.32635E-20
14	5.00715E-20	2.82794E-19	1.06331E-20	5.14674E-20
16	6.53996E-20	4.60058E-19	1.17603E-20	5.88866E-20
18	8.27714E-20	7.10756E-19	1.27748E-20	6.55419E-20
20	1.02187E-19	1.05595E-18	1.36925E-20	7.14919E-20
24	1.47149E-19	2.11281E-18	1.52882E-20	8.15643E-20
29	2.14848E-19	3.50176E-18	1.69308E-20	9.1435E-20
33	2.78204E-19	4.33562E-18	1.80305E-20	9.77028E-20
36	3.31085E-19	5.02507E-18	1.87561E-20	1.01677E-19
40	4.08747E-19	6.22061E-18	1.96151E-20	1.06207E-19
43	4.72359E-19	6.86998E-18	2.01903E-20	1.09135E-19
47	5.64327E-19	7.47718E-18	2.08801E-20	1.12532E-19
50	6.37461E-19	8.02124E-18	2.13476E-20	1.14764E-19
52	6.85258E-19	8.44207E-18	2.16383E-20	1.16123E-19
54	7.32955E-19	8.91403E-18	2.19139E-20	1.17392E-19
56	7.78631E-19	9.34885E-18	2.21754E-20	1.18578E-19

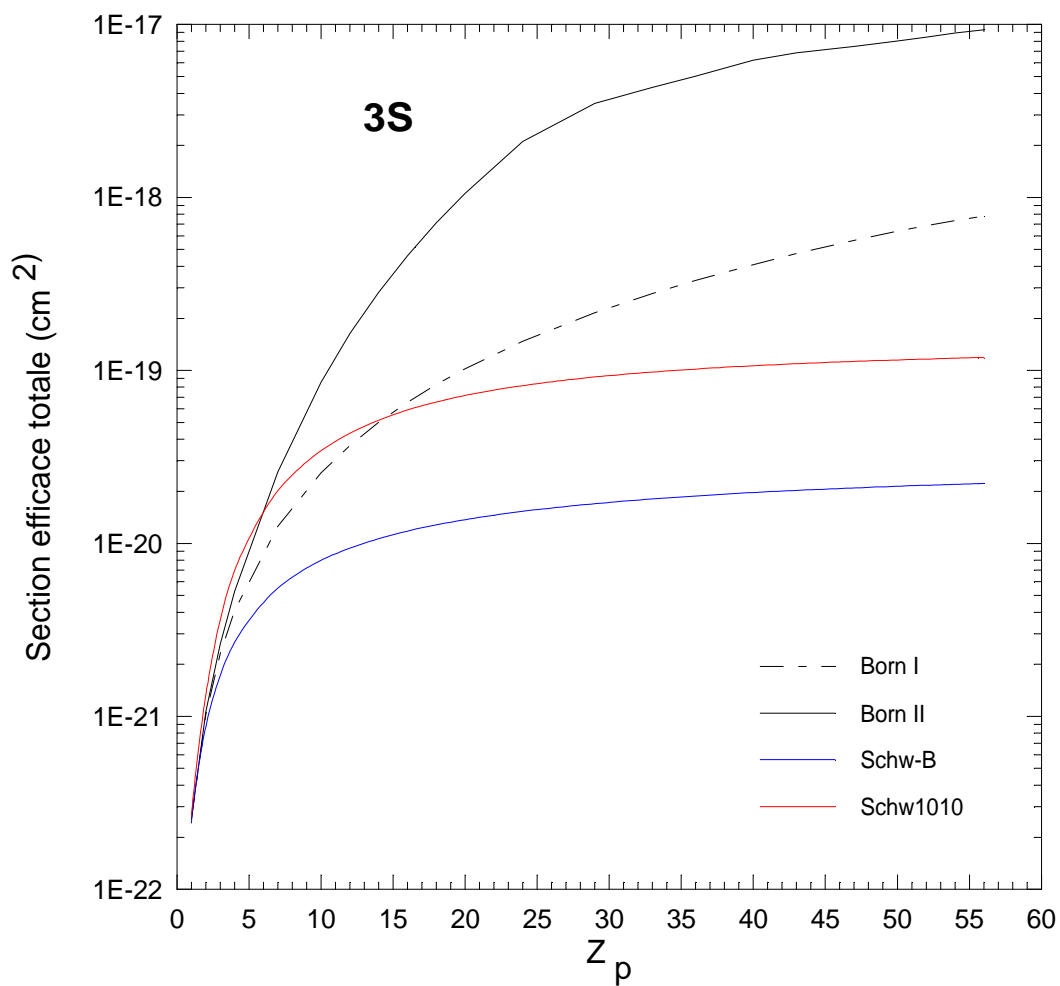


Figure V-4 : Section efficace totale d'excitation en cm^2 à l'état $3s$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

V-2. 5. Excitation à l'état 3p du Si^{12+} :

Tableau 5: Section efficace totale d'excitation en (cm^2) à l'état 3p de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.u^{-1} .

Zp	Born I	Born II	Schw-B	Schw1010
1	1.017197E-21	1.060404E-21	1.049359E-21	9.86828E-22
2	4.068786E-21	4.50149E-21	4.309528E-21	3.58716E-21
3	9.15477E-21	1.090897E-20	9.8459E-21	6.97264E-21
4	1.627513E-20	2.112968E-20	9.8459E-21	1.069349E-20
7	4.98425E-20	8.705736E-20	4.559222E-20	2.297484E-20
10	1.017197E-19	2.428624E-19	6.88202E-20	3.523212E-20
12	1.464762E-19	4.279788E-19	8.21936E-20	4.271812E-20
14	1.9937E-19	7.026768E-19	9.05724E-20	4.951332E-20
16	2.604024E-19	1.092868E-18	1.0005E-19	5.56192E-20
18	3.295714E-19	1.629326E-18	1.094227E-19	6.10827E-20
20	4.068786E-19	2.34867E-18	1.185195E-19	6.59671E-20
24	5.85904E-19	4.47641E-18	1.361745E-19	7.42583E-20
29	8.55461E-19	7.70739E-18	1.578858E-19	8.24389E-20
33	1.107726E-18	1.035875E-17	1.753448E-19	8.767461E-20
36	1.318286E-18	1.23336E-17	1.88559E-19	9.10141E-20
40	1.627513E-18	1.542218E-17	2.062742E-19	9.484269E-20
43	1.880794E-18	1.791348E-17	2.195218E-19	9.733E-20
47	2.246984E-18	2.196748E-17	2.36906E-19	1.002294E-19
50	2.542988E-18	2.495414E-17	2.493452E-19	1.021426E-19
52	2.750492E-18	2.70076E-17	2.517344E-19	1.033113E-19
54	2.966146E-18	2.924662E-17	2.528132E-19	1.044043E-19
56	3.189928E-18	3.175052E-17	2.53813E-19	1.054281E-19

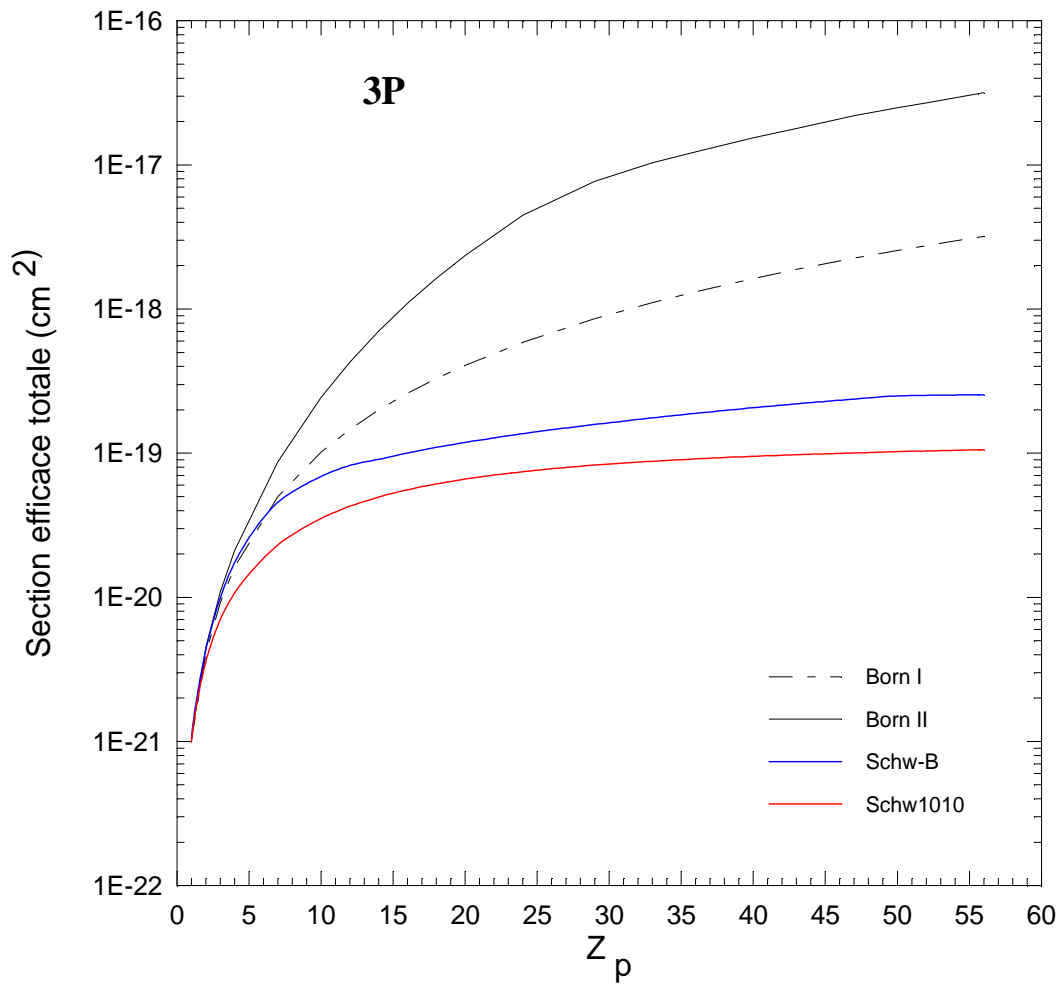


Figure V-5: Section efficace totale d'excitation en cm^2 à l'état $3p$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

V-2. 6. Excitation à l'état 3d du Si^{12+} :**Tableau 6:** Section efficace totale d'excitation en (cm^2) à l'état 3d de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

Zp	Born I	Born II	Schw-B	Schw1010
1	1.064868E-22	9.951748E-23	9.499219E-23	8.706854E-23
2	4.259466E-22	4.01062E-22	3.336247E-22	3.362641E-22
3	9.583814E-22	9.785758E-22	6.52954E-22	8.320138E-22
4	1.703786E-21	1.998604E-21	1.005094E-21	1.588393E-21
7	5.217858E-21	1.076833E-20	2.011883E-21	4.472813E-21
10	1.064868E-20	3.840648E-20	2.802242E-21	7.1356E-21
12	1.533409E-20	7.663484E-20	3.217234E-21	8.626072E-21
14	2.087139E-20	1.393904E-19	3.563165E-21	9.913954E-21
16	2.726059E-20	2.357851E-19	3.854939E-21	1.10327E-20
18	3.450168E-20	3.764097E-19	4.104004E-21	1.201141E-20
20	4.259466E-20	5.733423E-19	4.319052E-21	1.287358E-20
24	6.133636E-20	1.191829E-18	4.67169E-21	1.431953E-20
29	8.955538E-20	2.554562E-18	5.009308E-21	1.573568E-20
33	1.159641E-19	4.213729E-18	5.222416E-21	1.664149E-20
36	1.380068E-19	5.67515E-18	5.357883E-21	1.722031E-20
40	1.703786E-19	7.960358E-18	5.513208E-21	1.788583E-20
43	1.968938E-19	9.925288E-18	5.614391E-21	1.83196E-20
47	2.352291E-19	1.300567E-17	5.732832E-21	1.882705E-20
50	2.662167E-19	1.583908E-17	5.811383E-21	1.916309E-20
52	2.879399E-19	1.761393E-17	5.859578E-21	1.93689E-20
54	3.105151E-19	1.960937E-17	5.904774E-21	1.956171E-20
56	3.339423E-19	2.184303E-17	5.947275E-21	1.974274E-20

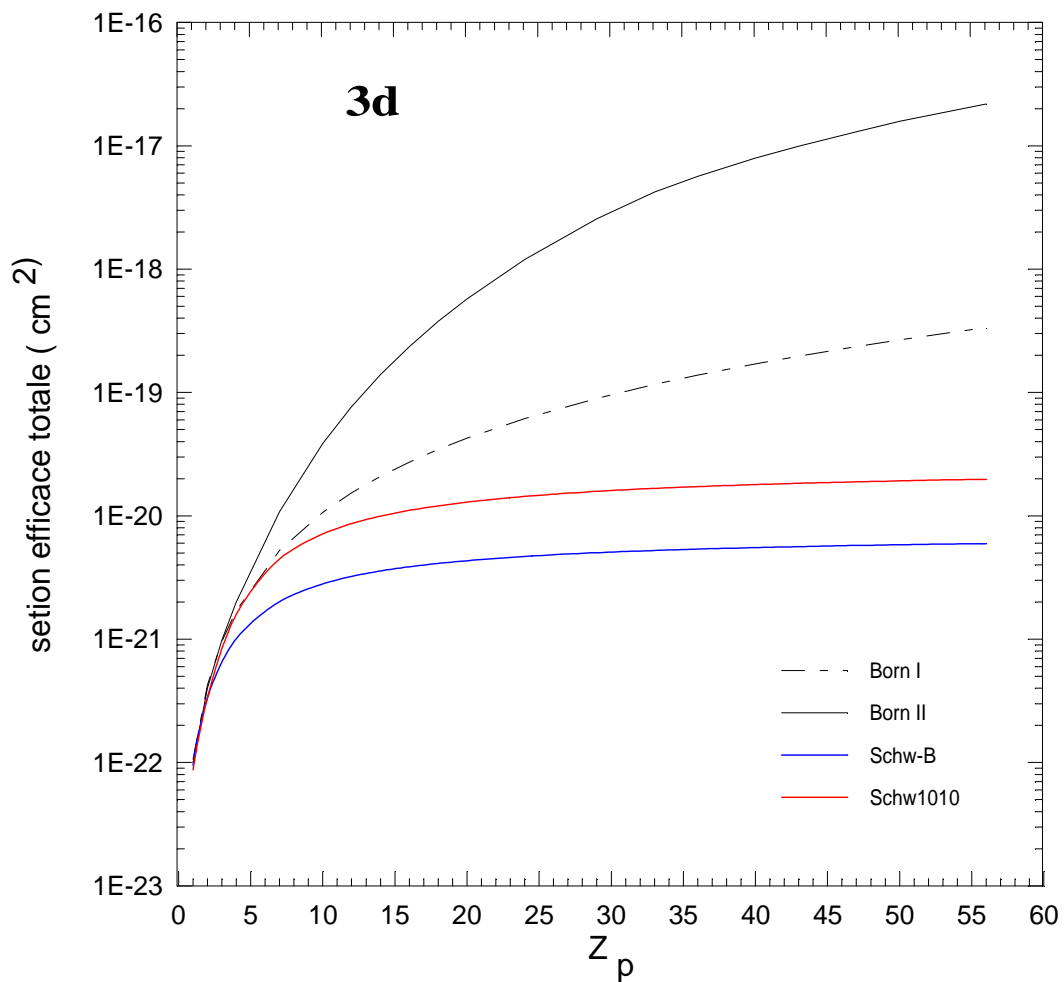


Figure V-6 : Section efficace totale d'excitation en cm^2 à l'état $3d$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV.

V-2. 7. Excitation au niveau $n=3$ du Si^{12+} :**Tableau 7:** Section efficace totale d'excitation en (cm^2) au niveau $n=3$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV

Zp	Born I	Born II	Schw-B	Schw1010
1	1.379151E-21	1.413595E-21	1.385893E-21	1.336978E-21
2	5.516602E-21	5.964662E-21	5.516984E-21	5.256854E-21
3	1.241235E-20	1.450682E-20	1.222937E-20	1.14297E-20
4	2.206639E-20	2.841117E-20	2.113936E-20	1.926102E-20
7	6.757826E-20	1.237724E-19	5.311291E-20	4.758725E-20
10	1.379151E-19	3.664396E-19	7.95839E-20	7.670362E-20
12	1.985976E-19	6.680157E-19	9.478491E-20	9.46077E-20
14	2.703129E-19	1.124861E-18	1.047687E-19	1.108947E-19
16	3.530626E-19	1.788711E-18	1.156652E-19	1.255385E-19
18	4.468445E-19	2.716492E-18	1.263015E-19	1.38636E-19
20	5.516602E-19	3.977962E-18	1.36531E-19	1.503326E-19
24	7.943894E-19	7.781049E-18	1.561344E-19	1.701421E-19
29	1.159864E-18	1.376371E-17	1.798259E-19	1.896096E-19
33	1.501894E-18	1.89081E-17	1.985977E-19	2.020189E-19
36	1.787378E-18	2.303382E-17	2.12673E-19	2.099114E-19
40	2.206639E-18	2.960315E-17	2.314025E-19	2.189355E-19
43	2.550047E-18	3.470875E-17	2.453265E-19	2.247846E-19
47	3.04654E-18	4.245033E-17	2.635189E-19	2.315884E-19
50	3.446666E-18	4.881446E-17	2.765042E-19	2.360697E-19
52	3.72369E-18	5.30636E-17	2.792323E-19	2.388032E-19
54	4.009616E-18	5.777002E-17	2.806319E-19	2.41358E-19
56	4.302501E-18	6.29424E-17	2.819357E-19	2.437488E-19

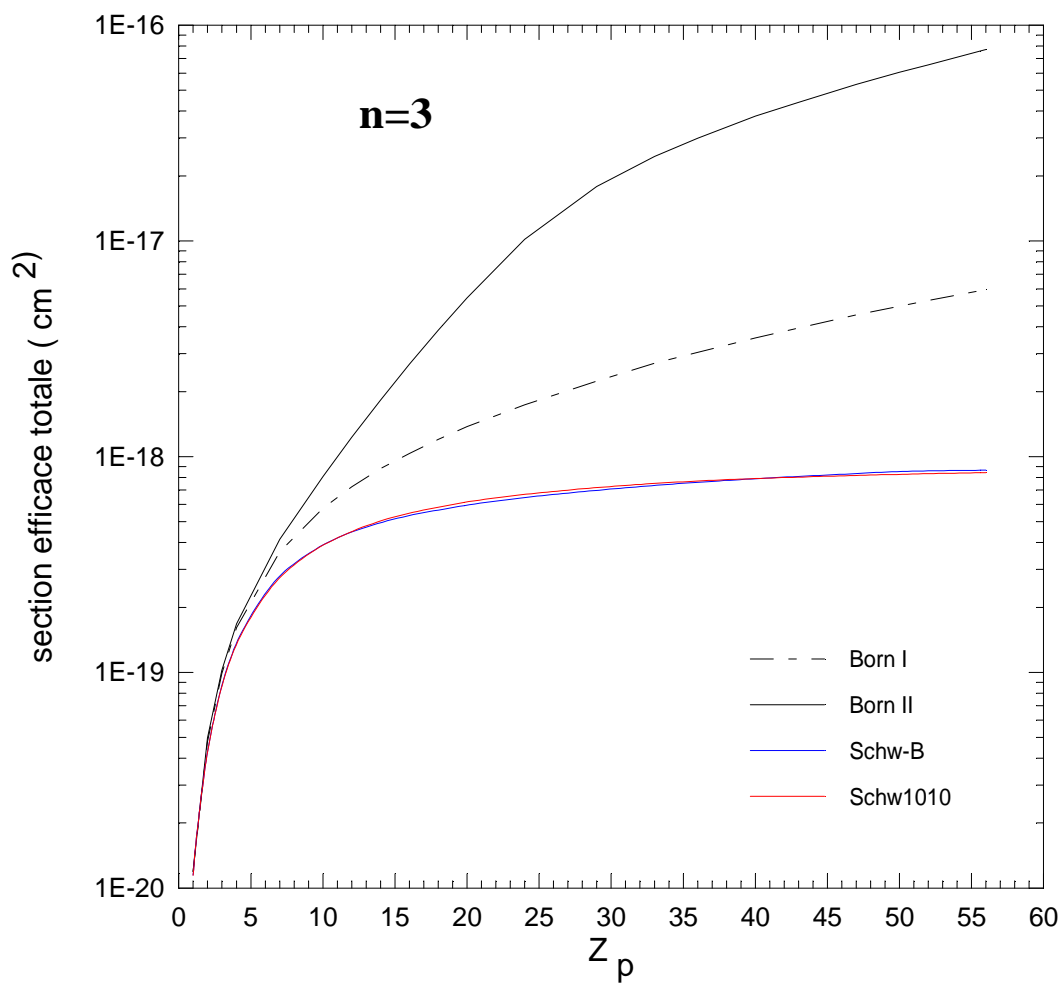


Figure V-7 : Section efficace totale d'excitation en cm^2 au niveau $n=3$ de Si^{12+} ($1s^2$) par impact de noyaux de charge (Z_p) à une énergie de 80 MeV

V-3. Résultats et discussion :

Dans notre traitement, cinq approches théoriques ont été comparés :

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

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

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

Notre traitement théorique a été appliqué avec succès à l'excitation du Si^{12+} ($1s^2$) en collision avec divers atomes à 80 MeV/u. 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 Si^{12+} ($1s^2$) par impact de divers noyaux de charge allant de 1 jusqu'à 54 incluant celles des gaz rares (He, N, Ne, Ar et Xe) à une énergie allant de 54 MeV au 110 MeV sont représentées dans les figures 1 à 7. Sur ces figures apparaissent nos différents calculs théoriques: Born-I et Born-II, approximation de Schwinger-Born (Schw-B) ainsi que Schwinger55 (Schw55) avec un développement à 5 états de base suivis de Schw1010 à 10 états de base. A titre de comparaison, nous avons inséré les résultats expérimentaux de Tiwari et ses collaborateurs des sections efficaces totales d'excitation à l'état 2s.

Dans l'approximation de Schwinger 55 (Schw55) et à partir de ces figures (V-1, V-2, V-3) nous remarquons que les sections efficaces totales d'excitation aux états 2s, 2p et au niveau $n=2$ es saturent très rapidement quand la charge Z_p du projectile augmente.

On remarque aussi que le principe variationnelle de Shwinger prédit que la section efficace totale d'excitation est caractérisé par une faible variation à partir de $Z_p=7$ quand le charge Z_p augmente, c'est l'effet de saturation.

Les figures (V-4, V-5, V-6, V-7) représentent respectivement les sections efficaces totales d'excitation des états 3s, 3p, 3d et n=3 de l'ion Si^{12+} par impact de noyaux de charge Z_p obtenues dans les différentes approches : Born I, Born II, Schw-B, Schw1010.

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 et n=2 par contre à les états 3s, 3p, 3d et n=3 où ils ont tendance à se saturer pour des valeurs de Z_p grandes.

Références

- [1]-K. Wohrer, A. Chetioui, J. P. Rozet, A. Jolly, F. Fernandez, C. Stephan, B. Brendlé et R. Gayet, J. Phys. B 19 (1986) 1997.
- [2]-Xu. Xiang-Yuan , Montenegro E C. Anholt . Danzmann K , W E Meyerhof , A S Schlachter , B S Rude et R J McDonald (1988) Phys. Rev . A 38 1848.
- [3]- Tiwari, U. et al, Phys. Rev. A 58, 4494 (1998).
- [4]-Brendlé. B, Gayet. R , Rozet, J. P. and Wohrer, K. Phys. Rev. Lett. 54, 2007 (1985).
- [5]-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.
- [6]-R. Gayet and M. Bouamoud , Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42. 515-522 (1989).
- [7]-B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet , Phys. Chemi. News, Vol 20 , pp12-17 (2004).
- [8]-A. K. Saha et al, J. Phys. B 31, 1771 (1998).

Conclusion

Dans ce travail, notre objectif principal été de donner un outil de calcul pour déterminer les sections efficaces totales d'excitation des ions helimoïdes Si^{12+} en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N, Ne, Ar et Xe) à une énergie de 80 MeV.

Nous avons appliqué avec succès l'approche variationnelle de Schwinger afin d'examiner le phénomène de saturation des sections efficaces totales d'excitation observé expérimentalement par Tiwari et al en 1998. Pour l'excitation au niveau $n=2$, la base sur laquelle les fonctions d'ondes ont été développées englobe 5 états à savoir $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}\}$, nous avons remarqué que la section efficace totale d'excitation se sature très rapidement quand la charge Z_p augmente, par contre l'approximation de Born au premier ordre et même au deuxième ordre divergent toutes les deux. Les sections efficaces totales prédites par le principe variationnel est caractérisée, à partir de $Z_p=7$, par une faible variation quand Z_p augmente, c'est ce qui est nommé phénomène de saturation des sections efficaces.

En effet, de très bons résultats ont été obtenus en utilisant une base de 5 états pour $n=2$ et puis à 10 états pour $n=3$.

Nos résultats théoriques sont en bon accord, comparés avec les résultats expérimentaux de Tiwari et al (1998).

Finalement, on peut dire que cette nouvelle approche, liée au principe variationnelle de Schwinger reste toujours un outil d'investigation très puissant pour examiner le processus d'excitation dans l'étude des collisions atomiques au régime des vitesses d'impact intermédiaires.