

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE « Dr. TAHAR MOULAY » DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



# MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

## MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Physique Computationnelle

Par

M<sup>elle</sup> BOUOKKA Ghaniyya

Sur le thème

**Excitation de l'ion Heliumoïde  $Ar^{16+}$  ( $1s^2$ ) par impact d'atomes neutres aux énergies intermédiaires : effet de saturation des sections efficaces totales d'excitation.**

Soutenu le : 21 / 06 /2022 devant le jury composé de :

|                                   |     |                                      |           |
|-----------------------------------|-----|--------------------------------------|-----------|
| Mr. MESKINE Mohammed              | Pr. | Université Dr. Tahar Moulay de Saïda | Président |
| Mr. LASRI Boumediene              | Pr. | Université Dr. Tahar Moulay de Saïda | Encadreur |
| M <sup>elle</sup> BENHALIMA Nadia | MCA | Université Dr. Tahar Moulay de Saïda | Examineur |

**Année Universitaire 2021 - 2022**

## Résumé

Durant ces deux dernières décennies, 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. De plus, ces procédures prédisent avec succès la saturation des sections efficaces totales lorsque la charge du projectile augmente. Ces diverses caractéristiques sont bien illustrées par un bon accord entre les résultats théoriques quand la fonction d'onde est assez bien représentée (5, 10 et 14 états de base) et les résultats expérimentaux de Adoui *et al.* dans la cas de l'excitation directe de  $\text{Ar}^{16+}(1s^2)$  par impact de divers noyaux de charge  $Z_p$  ( $2 \leq Z_p \leq 54$ ) incluant ceux des gaz rares (He,  $\text{N}_2$ , Ne, Ar, Kr, Xe) à une énergie de 13.6 MeV/u .

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

## Abstract

In the last two decades, The variational approaches based on the fractional form of the Schwinger variational principle appears to be a very powerful tool which relieves the perturbative treatment to investigate the direct excitation processes of atoms by impact of ions at intermediate energies. Furthermore, these procedures were shown to be very successful in predicting the saturation effect of excitation cross sections when the projectile charge is increased. These characteristics are illustrated by a good agreement between our theoretical results when the wave function is well represented (5, 10 and 14 basic sets) and the experimental data of Adoui *et al.* in the case of the direct excitation of  $\text{Ar}^{16+}(1s^2)$  by various atoms of nuclear charges  $Z_p$  ( $2 \leq Z_p \leq 54$ ) which include neutral gaseous (He,  $\text{N}_2$ , Ne, Ar, Kr, Xe) at 13.6 MeV/u.

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

## ملخص

إنّ الطرق النظرية المعتمد عليها في الدراسات الخاصة بالتصادمات الذرية و المرتكزة أساساً علي المبدأ التغري لشوينغر تعتبر ركيذة من الركائز الحديثة المعوّل عليها في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة للذرات عن طريق الأيونات في المجال الطاقوي المتوسط و التي بامكانها إعطاء نتائج جدّ مشجعة خاصة فيما يتعلق بالايونا لشبة الهيليومي  $Ar^{16+}(1s^2)$  في حالة تصادمه مع مختلف الذرات ذوات الشحن المتغيرة من 2 إلى 54 و التي تضم الغازات الخاملة (He, N<sub>2</sub>, Ne, Ar, Kr, Xe). نعرض في طيات هذا المقال طريقة جديدة مرتكزة اساسا في شكلها العام على شكل كسري للمبدأ التغري لشونغر. النتائج و النبؤات النظرية في توافق جيّد إن لم نقل تام مع المعطيات التجريبية الخاصة بإثارة المستويات الجزئية  $(1s,2p)$ ,  $(1s,2s)$  فثم الكلية ( $n=2$ ) الخاصة ب  $Ar^{16+}(1s^2)$  في المجال الطاقوي المحدد ب  $13.6 \text{ MeV/u}$ .

الكلمات المفتاحية : المبدأ التغري لشوينغر، التصادمات الذرية، المقاطع الفعالة.

## *Dédicaces*

Avec un énorme plaisir, un cœur ouvert et immense

Joie, que je dédie mon travail :

A ma CHERE MERE

A mes frères

A toute ma famille BOUOKKA

A Mes amis

A tous qui m'ont aidé de près ou de loin

**BOUOKKA GHANIYYA**

# *Remerciements*

Avant tout, je remercie Allah le tout puissant

Qui nous donné le courage, la volonté, la patience et la

Santé durant toutes ces années d'étude et que grâce à lui ce

Travail a peut-être réalisé

Je tiens à remercier particulièrement mon encadreur « **LASRI**

**BOUMEDIENE**», qui a accepté de superviser mon humble travail

Je remercie également les membres du jury, le **Professeur Meskine Mohammed** ainsi que **Mme BENHALIMA Nadia**, Maitre de conférences « A » et Chef du département de physique d'avoir accepté d'évaluer ce travail.

Mes remerciements à ma famille surtout ma mère, mes collègues et Mes amis pour leur soutien, Leur présence et leur encouragement.

Mes remerciements vont également à tous enseignants du département De physique qui n'ont pas ménagé leurs efforts.

Enfin, Je tiens à remercier tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin.

# Table des matières

## Résumé

## Abstract

## ملخص

|  |    |
|--|----|
| <b>Introduction générale</b> .....   | 01 |
| <b>Chapitre I :</b> Principe variationnel de Schwinger pour la théorie de collisions atomiques.....              | 09 |
| I.2- forme stationnaire de l'amplitude de transition .....   | 09 |
| I.3- amplitude de transition approchée.....  | 13 |
| <b>Chapitre II:</b> Principe variationnel ,de Schwinger pour l'excitation.....                                   | 16 |
| II.1- amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact.....                                     | 17 |
| II.2- Amplitude de transition eikonale et la section efficace totale d'excitation.....                           | 23 |
| II.2.1 - Amplitude de transition eikonale.....   | 23 |
| II.2.2 - sections efficaces eikonales.....   | 24 |
| <b>Chapitre III:</b> Excitation de l'ion $Ar^{16+}(1s^2)$ par impact d'atomes neutres au energies intermédiaires |    |
| III.1 Introduction.....  | 27 |
| III.2 Excitation de l'ion $Ar^{16+}(1s^2)$ .....   | 28 |
| III.2.1 Excitation à l'état 2s du $Ar^{16+}(1s^2)$ .....   | 33 |
| III.2.2 Excitation à l'état 2p du $Ar^{16+}(1s^2)$ .....   | 35 |
| III.2.3 Excitation au niveau n=2 du $Ar^{16+}(1s^2)$ .....   | 37 |
| III.3 Resultants et discussion.....  | 39 |
| <b>Conclusion générale</b> .....   | 41 |
| <b>Références</b> .....  | 44 |

# Introduction

# Générale

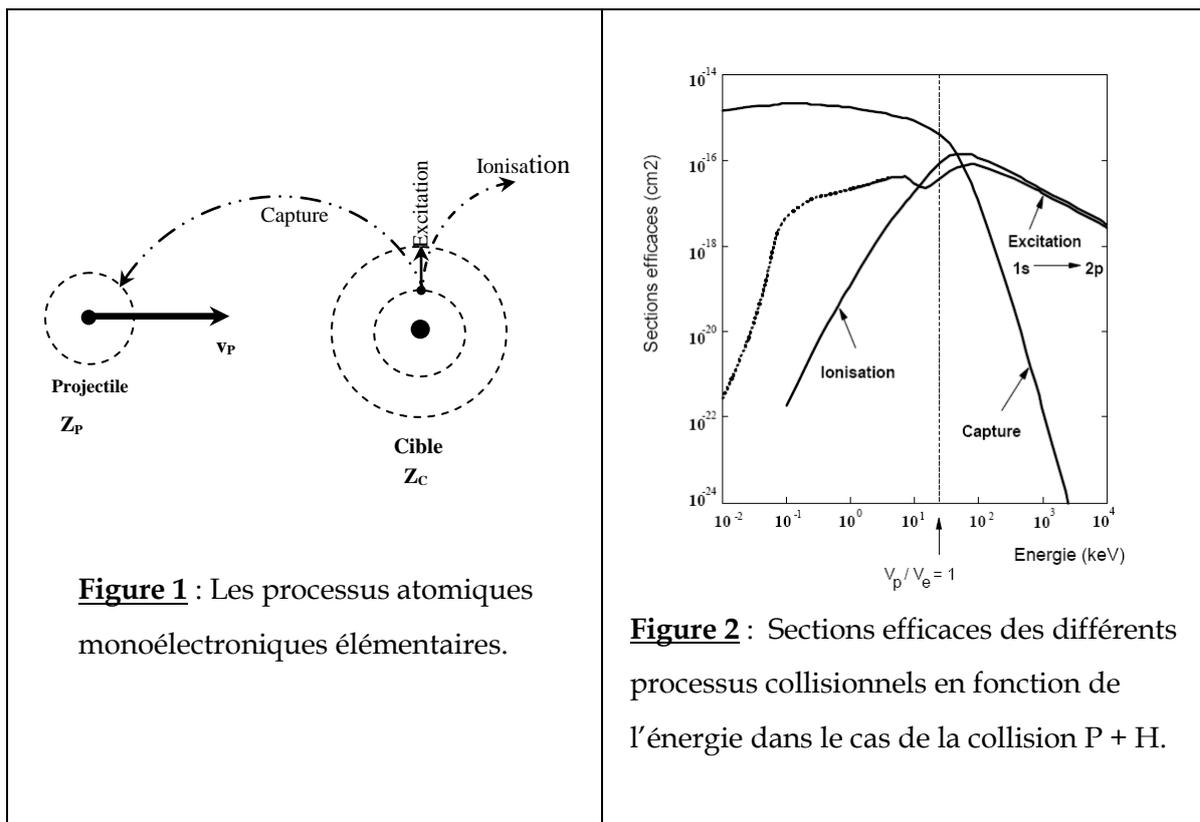
L'histoire des sciences est l'histoire de la curiosité humaine. Un des traits qui nous caractérisent est le besoin inextinguible de comprendre le monde dans lequel nous vivons. Ce besoin de savoir "pourquoi ?" et "comment ?" se dirige en parallèle avec une autre commande puissante d'un être humain, le désir de former et de contrôler notre environnement vivant.

Dans plusieurs domaines de la physique, les collisions atomiques demeurent les processus les plus fondamentaux et présentent un intérêt essentiel et assez particulier surtout en physique nucléaire et en astrophysique. Citons par exemple, les mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) en astrophysique interviennent lors de la formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs [1,2].

La connaissance de ces mécanismes permet ainsi d'analyser les phénomènes galactiques. Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, l'interaction des ions multichargés avec l'atome d'hydrogène se manifeste dans les plasmas de fusion thermonucléaire au sein des étoiles et l'étude des phénomènes d'ionisation et d'excitation est fondamentale pour le développement de la physique des plasmas de fusion, dans lesquels les collisions conduisent à la production d'ions excités dont la désexcitation se traduit par l'émission de rayons X [3]. Grâce à des méthodes performantes de spectroscopie, il est possible d'obtenir une estimation précise de la densité, de la

température ainsi que la mise en évidence des processus de transfert d'énergie au sein de ces plasmas chauds, et par conséquent la notion de section efficace totale qui a été largement étudiées en fonction des énergies d'impact est fondamentale.

Récemment, la connaissance des divers processus d'interaction entre un ions et un atome isolé (cible gazeuse) peut être considéré comme la première étape dans la compréhension profonde des interactions ion-matière complexe, et notamment des mécanismes physique lié au dépôt d'énergie des ions et à l'endommagement des matériaux inertes ou vivants sous irradiation. Le développement de ces différents champs en physique a ainsi, ces dernière années, relancé l'intérêt d'obtenir une description aussi précise que possible de tous les processus collisionnels (capture, excitation, ionisation), en particulier dans un régime de vitesses intermédiaires (dans lequel la vitesse de collision  $v$  est du même ordre de grandeur que celle de l'électron mis en jeu dans le processus considéré  $v_e$ ), domaine ou les sections efficaces des ces différent processus sont toute du même ordre de grandeur (Fig.1,2).



Différent théories développées aussi bien dans le domaine des hautes vitesses que des basses vitesses peuvent alors être étendues et testées dans ce régime de vitesses intermédiaires aujourd'hui encore le plus difficilement métrisé.

1. **Le régime dit des basses vitesses** : ou régime de forte interaction qui est atteint pour des vitesses de collision ( $v_p$ ) 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. La théorie Continuum Distorted Wave (CDW) .
2. **Le régime dit des hautes vitesses** : ou régime perturbatif est atteint pour des grandes vitesses de collision comparées à celle de l'électron actif de l'atome cible,. Dans ce domaine, la théorie de perturbation au premier ordre telle que l'approximation PWBA (Plane-Wave Born Approximation) devient fiable.
3. **Le régime dit des vitesses intermédiaires** : pour lequel les sections efficaces des différents processus atomiques sont proches de leurs valeurs maximales et sont toutes du même ordre de grandeur. Les processus multiples faisant intervenir plusieurs de ces processus simples simultanément (Capture-Ionisation, Excitation-Ionisation, Double Excitation,...) ont alors des probabilités non négligeables.

La capture électronique est le processus prédominant dans le régime des basses vitesses de collision. Par contre, l'ionisation et l'excitation sont dominantes aux hautes vitesses de collision.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

d'élaborer un outil performant et efficace à l'étude de la collision ion-atome aux vitesses intermédiaires.

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

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

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

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

Récemment, dans le but de développer et d'affiner encore plus cette approche variationnelle dans la représentation de la fonction d'onde de diffusion, B. Lasri [22] n'était pas restreints lors de son développement à 5 états de base mais il avait élargi cette base de 5 états à 10 puis à 14 états. Le propagateur de Green a été développé aussi sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que par celui du continuum de la

cible. En fait, dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, la contribution des états du continuum est petite sans toutefois être complètement négligeable [15][19].

Ce nouveau modèle théorique fut appliqué avec succès par le biais du formalisme du paramètre d'impact à l'excitation de l'atome d'hydrogène principalement et ions hydrogénoïdes ( $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ , ...etc) en collision avec des protons et à l'excitation des ions héliomoïdes ( $\text{Fe}^{24+}$ ,  $\text{Kr}^{34+}$ ,  $\text{Xe}^{54+}$ , ...etc) avec des noyaux de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He,  $\text{N}_2$ , Ne, Ar, Kr et Xe) aux vitesses intermédiaires [20-26].

En effet, vu les divers prédictions théoriques qui paraissent très encourageantes pour l'atome d'hydrogène principalement et les ions hydrogénoïdes ( $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{Be}^{3+}$ , ...) ainsi que les ions héliumoïdes ( $\text{Fe}^{24+}$ ,  $\text{Kr}^{34+}$ ,  $\text{Xe}^{52+}$ , ...) étudiés, ces derniers demeurent en parfait accord avec ceux d'autres travaux théoriques fondés sur d'autres techniques récentes comme celles de Close Coupling ainsi qu'avec la totalité des résultats expérimentaux. Cependant, on pourra dire que cette nouvelle formulation de l'approche variationnelle de Schwinger, s'avère un outil d'investigation très puissant pour étudier l'excitation électronique d'atomes par impact d'ion aux vitesses d'impact intermédiaires et de prédire également et avec succès la saturation des sections efficaces totales d'excitation quand la charge du projectiles (atomes de gaz rares) augmente (B. Brendlé *et al.* (1985) [18], K. Wohrer *et al.* (1986) [19], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [20], B. Lasri (1998, 2007) [21,22], M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [23], B. Lasri, A Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet (2005) [24], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2006) [25], B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen [26]).

Si ces différentes théories sont aujourd'hui suffisamment complètes pour pouvoir calculer les sections efficaces d'excitation dans le cas des systèmes collisionnels de type ion nu-atome hydrogénoïde, et en particulier pour le cas le plus simple entre eux celui de Proton-atome d'hydrogène, la dépendance de ces sections efficaces en fonction de la charge excitatrice n'en reste pas moins controversée, lorsque, la charge du projectile augmente.

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

Dans ce mémoire, nous nous sommes fixés l'objectif de calculer les sections efficaces totales d'excitation de l'ion heliomoïde  $Ar^{16+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N<sub>2</sub>, Ne, Ar, Kr, Xe) aux vitesses intermédiaires ( $v=23$  a.u) ce qui correspond à une énergie de 13.6 Mev/u. Nous avons comparé par la suite les diverses prédictions théoriques obtenus avec les résultats expérimentaux de Adoui *et al.* [27,28].

Ce sujet s'inscrit dans un vaste projet engagé dans l'équipe, visant à acquérir la meilleure expertise possible des différents processus fondamentaux mis en jeu lors de ces différents milieux par des ions lourds multichargés.

D'une manière générale, ce mémoire est organisé de la manière suivante :

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

Dans le second chapitre ce principe est adapté à l'excitation atomique où nous développons l'amplitude de transition variationnelle afin d'aboutir aux sections efficaces totales d'excitation des systèmes hydrogénoïdes, par impact d'ions aux vitesses intermédiaires. Le problème a été traité dans l'approximation du paramètre d'impact où le projectile est supposé décrire une trajectoire rectiligne par rapport à la cible.

Le dernier chapitre, représentant une des parties les plus importantes de notre travail, a été consacré à l'application de ce formalisme variationnel l'excitation de l'ion heliomoïde  $Ar^{16+}(1s^2)$  par impact des projectiles de charges allant de 1 jusqu'au 54 incluant celles des gaz rares (He, N<sub>2</sub>, Ne, Ar, Kr, Xe) aux vitesses intermédiaires ( $v=23$  a.u) ce qui correspond à une énergie de 13.6 Mev/u. Les divers prédictions théoriques obtenus ont été comparé avec les résultats expérimentaux de Adoui *et al.* [27,28].

# Principe variationnel de Schwinger

## I-1. INTRODUCTION:

Durant ces dernières décennies, les approches variationnelles ont prouvé leur efficacité comme étant un outil d'investigation très puissant dans la physique théorique, notamment pour l'étude des phénomènes de collisions atomiques. Couronnées de succès lors de la quasi-totalité des études faites sur les processus d'excitation directe des atomes par impact d'ions aux vitesses intermédiaires, l'avantage de ces approches tient à leurs capacités de se satisfaire d'une fonction d'onde d'essai qui soit une approximation raisonnable de la fonction d'onde réelle du problème considéré.

Parmi les nombreuses méthodes utilisés, nous nous sommes intéressés à une approche relativement nouvelle appelée principe variationnel de Schwinger basée sur les équations intégrales de Lippmann-Schwinger et ceci dans le but d'obtenir une forme stationnaire de l'amplitude de transition par rapport aux petites variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes.

Dans ce qui suit, les expressions stationnaires de l'amplitude de transition vont être établies dans le cas d'une diffusion à une seule voie de réarrangement.

## I-2. FORME STATIONNAIRE DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION:

Soit une transition qui s'effectue à une seule voie de réarrangement  $C$ , l'hamiltonien total du système en collision s'écrit comme suit :

$$H = H_C + V_C \quad (I.1)$$

Avec  $H_C$  l'hamiltonien des particules sans interaction et  $V_C$  le potentiel d'interaction entre les particules dans cette voie.

Si on désignent par les vecteurs  $|\alpha\rangle$  et  $|\beta\rangle$  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) de la cible; les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$ , vecteurs propres du hamiltonien total du système satisfaisant respectivement aux conditions d'ondes entrantes et sortantes, vérifient les équations de Lippmann-Schwinger:

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_C^+ V_C |\psi_\alpha^+\rangle \quad (I.2a)$$

$$|\psi_\beta^-\rangle = |\beta\rangle + G_C^- V_C |\psi_\beta^-\rangle \quad (I.2b)$$

Tel que  $G_C^\pm$  sont les deux opérateurs de Green appelé également propagateur, définis par :

$$G_C^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (E - H_C \pm i\varepsilon)^{-1} \quad (I.2c)$$

$E$  : étant l'énergie totale du système.

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

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

D'autre part, et à partir des expressions de Lippmann Schwinger (I.2a, b); on peut exprimer l'amplitude de transition sous les trois formes suivantes:

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

$$= \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle \quad (I.4 b)$$

$$= \langle \psi_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (I.4c)$$

On peut aisément montrer qu'à partir d'une simple combinaison des équations précédentes (I.4 a-c), l'amplitude de transition peut s'écrire sous une autre forme dite **forme bilinéaire** du principe variationnel de Schwinger [22,23] :

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

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

En différentiant la relation (I.5), nous obtenons :

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

comme les vecteurs  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  vérifient les équations intégrales de Lippmann-Schwinger (I.2a,b), la relation (I.6) donne en effet :

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

On dit que l'amplitude de transition est une forme exacte quand les états de diffusion exactes  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  sont utilisés.

De même, à partir des équations (I.4a-c), on peut déduire une autre expression de l'amplitude de transition  $T_{\beta\alpha}$ , appelée **forme fractionnaire** du principe variationnel de Schwinger soit:

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

En tenant compte des expressions équivalentes (I.4a-c) de l'amplitude de transition lors de la différentiation de cette expression, nous obtenons :

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

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

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

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

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

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

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

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle\beta|V_C|\alpha\rangle \langle\beta|V_C|\alpha\rangle}{\langle\beta|V_C - V_C G_C^+ V_C|\alpha\rangle} \quad (\text{I.11})$$

$T_{\beta\alpha}$  peut être écrite sous une autre forme:

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

Où,

$T^{BI}$  : correspond à l'approximation de Born au 1<sup>er</sup> ordre de l'amplitude de transition.

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

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

Si le rapport  $\left| \frac{\bar{T}^{BII}}{T^{BI}} \right|$  est petit devant 1, et en utilisant le développement de

l'expression (I.12), on aura :

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

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

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

### I-3. AMPLITUDE DE TRANSITION APPROCHEE:

Nous venons de déterminer deux formes stationnaires de l'amplitude de transition par rapport à des petites variations arbitraires des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes, la forme bilinéaire (I.5) et la forme fractionnaire (I.8).

Les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  ne peuvent pas être connus d'une façon exacte, nous allons prendre donc comme état d'essai les vecteurs  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$  tel que :

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

et

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

En développant ces états de diffusion dans un sous espace vectoriel de dimension  $N$  on aura :

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

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

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

En exprimant l'amplitude de transition, donnée par l'expression (I.8) en fonction de ces états d'essai, nous obtenons ainsi l'amplitude de transition approchée  $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ , soit :

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

On peut également déduire à partir des équations (I.9) et (I.15a,b), l'équation suivante:

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

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

Maintenant en remplaçant les vecteurs  $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$  et  $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$  par leurs développements (I.16a,b), nous obtenons pour les coefficients  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j$ , composantes des états de diffusion approchés, les deux équations couplées suivantes :

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

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

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

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

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

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

Ensuite par les vecteurs colonnes  $\tilde{a}$  et  $\tilde{b}$  dont les éléments sont  $\tilde{a}_i$  et  $\tilde{b}_j$ ; Les équations couplées (I.19) peuvent être exprimées sous une forme matricielle, soit:

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

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

ou encore en utilisant les propriétés algébriques des matrices :

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

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

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

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

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

Ou sous forme matricielle :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\left[ (V_\beta^*)^t \cdot \tilde{a} \right] \left[ \tilde{b}^* \cdot V_\alpha \right]}{\tilde{b}^* D \tilde{a}} \quad (\text{I.25})$$

Et en utilisant les deux équations (I.22a,b) et (I.23a), on peut écrire :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = (V_\beta^*)^t \tilde{a} = \tilde{b}^* V_\alpha \quad (\text{I.26})$$

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

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad (\text{I.27})$$

où  $(D^{-1})_{ij}$  désigne l'élément de matrice  $D^{-1}$ , inverse de la matrice  $D$  relative aux vecteurs de base  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$ .

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

# Principe variationnel de Schwinger pour l'excitation atomique

Lors d'une collision atomique, l'importance des mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) entre, par exemple une particule chargée et un atome dépend essentiellement de la vitesse de collision par rapport à la vitesse des électrons de la cible. En particulier, à haute vitesse de collision, les processus d'ionisation et d'excitation de la cible atomique sont dominants.

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

Dans ce Chapitre, nous nous intéressons à l'excitation d'un système hydrogénoïde par impact d'ions aux vitesses intermédiaires.

Comme la principale contribution à la transition considérée se produit aux petit angles ( $< 10^{-3}$  rd) pour une collision de type  $H^+ \rightarrow H$  à une énergie égale à 50 Kev [18] on peut considérer que le projectile décrit une trajectoire rectiligne, et donc traiter ce problème dans l'approximation eikonale.

## II-1. AMPLITUDE VARIATIONNELLE DANS LE FORMALISME DU PARAMETRE D'IMPACT:

L'approximation eikonale est une approche semi-classique qui consiste à supposer que les noyaux se déplacent d'une façon classique tandis que le mouvement des électrons est traité d'une manière quantique. Pour cela, considérons une collision entre un projectile P de masse  $M_P$ , de charge  $Z_P$  et une cible T de masse  $M_T$  et de charge  $Z_T$ .

Dans ce formalisme, la séparation internucléaire est donnée par:

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \quad (\text{II.1a})$$

$$\vec{z} = \vec{v} \cdot t \quad (\text{II.1b})$$

$$\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{II.1c})$$

Avec :

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

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

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

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

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

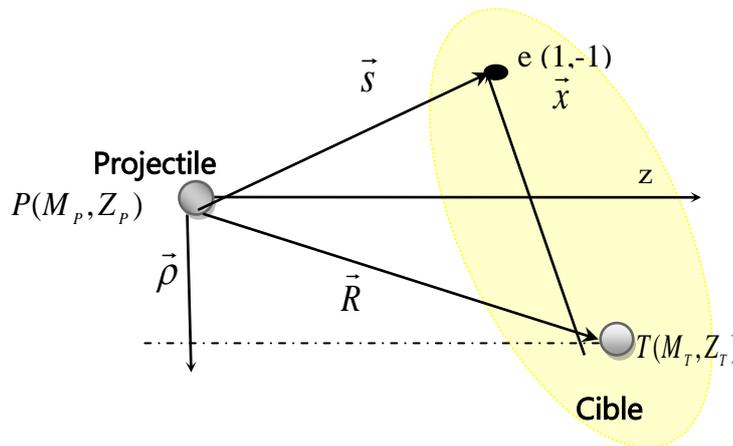


Fig. II-1 : *Système collisionnel.*

Où

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

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

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

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

$H_C$  est l'hamiltonien des particules sans interaction donné par  $H_C = H_T + H_P$

avec :

L'hamiltonien atomique qui décrit le mouvement non perturbé de la cible (en unité atomique) :

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

L'hamiltonien  $H_P$  décrit le mouvement relatif du projectile par rapport au noyau de la cible :

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

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

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

Le potentiel  $V_C$  d'interaction entre les particules en collision qui s'exprime de la façon suivante :

$$V_C = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{S} \quad (\text{II.5})$$

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

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \quad (\text{II.6})$$

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

En 1972, R. K. Janev et A. Salin [29] ainsi que Belkic, Gayet et Salin (1979) [30] ont montré que les sections efficaces totales sont indépendantes du potentiel inter-agrégat  $V_{\text{int}}$  donné par l'équation (II.6). Il faut souligner que dans le calcul de l'amplitude de transition, l'influence de ce potentiel se réduit à un facteur de phase dépendant du

paramètre d'impact  $\bar{\rho}$  donné par  $\rho = \frac{2iZ_P(Z_T-1)}{v}$ . par contre sa contribution à la section efficace différentielle doit être réintroduite.

Ces conditions 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 par :

$$V = V_C - V_{\text{int}} = V_C - \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \quad (\text{II.7a})$$

$$V = Z_P \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right) \quad (\text{II.7b})$$

les états de diffusion  $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$  et  $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ , sont déterminées par les équations eikonale de Lippmann-Schwinger [29]:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z') V(z') |\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (\text{II.8a})$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z') V(z') |\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (\text{II.8b})$$

où V est le potentiel d'interaction entre le projectile et la cible.

Ces états de diffusion sont solutions de l'équation de Schrödinger dans la méthode du paramètre d'impact, soit :

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\alpha^+(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.9a})$$

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\beta^-(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.9b})$$

Les états  $|\alpha(z)\rangle$  et  $|\beta(z)\rangle$  sont respectivement les états initial et final de la cible, solutions de l'équation de Schrödinger eikonale avec le seul hamiltonien de la cible  $H_T$ . Ce qui signifie que:

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\alpha(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.10a})$$

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\beta(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.10b})$$

En choisissant l'origine des coordonnées sur le noyau de la cible, nous aurons :

$$|\alpha(z)\rangle = \langle \vec{x}, z | \alpha(z) \rangle = e^{-i \frac{\varepsilon_\alpha z}{v}} \varphi_\alpha(\vec{x}) \quad (\text{II.11a})$$

$$|\beta(z)\rangle = \langle \vec{x}, z | \beta(z) \rangle = e^{-i \frac{\varepsilon_\beta z}{v}} \varphi_\beta(\vec{x}) \quad (\text{II.11b})$$

où  $\varepsilon_\alpha$  et  $\varepsilon_\beta$  désignent respectivement les énergies propres des états  $\varphi_\alpha$  et  $\varphi_\beta$  de la cible et  $\vec{x}$  est la distance séparant le noyau et l'électron, c'est à dire l'ensemble des coordonnées électroniques.

Les fonctions de Green  $G_T^+(z-z')$  et  $G_T^-(z-z')$  correspondent à la fonction de Green  $G_T^\pm$  eikonale associée à l'hamiltonien  $H_C$ ,  $G_T^+(z-z')$  vérifie l'équation suivante :

$$\left( -i v \frac{\partial}{\partial z} + H_T \right) G_T^+(z-z') = -\delta(z-z') \quad (\text{II.12})$$

avec les conditions initiales:

$$G_T^+(z) = 0 \quad z < 0 \quad (\text{II.13a})$$

$$G_T^-(z) = 0 \quad z > 0 \quad (\text{II.13b})$$

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

$$G_T^+(z-z') |\alpha(z')\rangle = -\frac{i}{v} |\alpha(z)\rangle \theta(z-z') \quad (\text{II.14a})$$

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

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

Maintenant, si seulement on désigne par la notation  $[ | ]$  l'intégration sur les coordonnées électroniques on peut montrer que l'amplitude de transition s'écrit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} [\beta(z) | \psi_\alpha^+(z)] = \lim_{z \rightarrow +\infty} [\psi_\beta^-(z) | \alpha(z)] \quad (\text{II.15})$$

On peut également démontrer que l'amplitude de transition se met sous une autre forme donnée par Janev et Salin [29]; soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z d[\beta(z) | \psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{II.16a})$$

En réécrivant cette expression sous la forme :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z \frac{dz}{dz} d[\beta(z) | \psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{II.16b})$$

Et en utilisant les expressions (II.9a,b) et (II.10a,b), nous aurons :

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\beta(z)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} |\beta(z)\rangle = -\frac{i}{v} H_T |\beta(z)\rangle \quad (\text{II.17})$$

et

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\beta^\pm(z)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} |\psi_\alpha^+(z)\rangle = -\frac{i}{v} (H_T + V) |\psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (\text{II.18})$$

L'équation (II.16b) devient enfin :

$$a_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[ \beta(z) |H_T + V - H_T | \psi_\alpha^+(z) \right] \quad (\text{II.19a})$$

$$= \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[ \beta(z) |V | \psi_\alpha^+(z) \right] \quad (\text{II.19b})$$

A partir des équations de Lippman-Schwinger (II.8a,b) et de l'expression (II.15) de l'amplitude de transition  $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ , cette dernière est écrite sous d'autres formes:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[ \beta(z) |V | \psi_\alpha^+(z) \right] \quad (\text{II.20a})$$

$$= \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[ \psi_\beta^-(z) |V | \alpha(z) \right] \quad (\text{II.20b})$$

$$= \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[ \psi_\beta^-(z) |V - VG_T^+ V | \psi_\alpha^+(z) \right] \quad (\text{II.20c})$$

En écrivant  $(k|\Theta|k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle k|\Theta|k' \rangle$  où  $\Theta$  dénote un opérateur, et la notation  $( \ | )$  indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques et la coordonnée  $z$  de  $\vec{R}$ , on peut écrire symboliquement la forme de  $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ , soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} (\beta |V | \psi_\alpha^+) \quad (\text{II.21a})$$

$$= -\frac{i}{v} (\psi_\beta^- |V | \alpha) \quad (\text{II.21b})$$

$$= -\frac{i}{v} (\psi_\beta^- |V - VG_T^+ V | \psi_\alpha^+) \quad (\text{II.21c})$$

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

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) (\beta | V | \psi_{\alpha}^{+}) \left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_{\beta}^{-} | V | \alpha)}{\left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_{\beta}^{-} | V - V G_T^{+} V | \psi_{\alpha}^{+})} \quad (\text{II.22})$$

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

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha) \quad (\text{II.23})$$

où  $(D^{-1})_{ij}$  représente les éléments de la matrice inverse de l'opérateur  $[V - V G_T^{+} V]$  définie sur une base des vecteurs  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$  qui vérifie l'expression (II.11a,b)

$$D_{ji} = (j | V - V G_T^{+} V | i) \quad (\text{II.24})$$

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

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

## II-2. Amplitude de transition eikonale et la section efficace totale d'excitation:

Dans ce qui suit, nous allons déterminer les formes simplifiées de l'amplitude de transition et de la section efficace totale pour un processus d'excitation d'un atome par impact de proton ou un ion nu, à l'aide de l'amplitude variationnelle obtenue dans la méthode du paramètre d'impact.

### II-2.1. Amplitude de transition eikonale:

L'amplitude de transition quantique correspondant à une transition entre  $\alpha \rightarrow \beta$  est donnée par :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V | \psi_{\alpha}^+ \rangle \quad (\text{II.25})$$

la fonction d'onde de diffusion s'écrit [6][7] :

$$\psi_{\alpha}^+(\vec{R}, \vec{x}) \approx e^{i\vec{k}_{\alpha} \cdot \vec{R}} \psi_{\alpha}^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{II.26})$$

où  $\psi_{\alpha}^{+E}$  est la fonction d'onde eikonale.

Et le vecteur propre  $\langle \beta |$  vérifie l'expression :

$$\langle \beta | \vec{x}, z \rangle = e^{i\frac{\varepsilon_{\beta}}{v}z} \varphi_{\beta}^*(\vec{x}) \quad (\text{II.27})$$

A partir de (II.20) et dans le cas où  $\alpha \neq \beta$  on obtient l'amplitude de transition quantique sous sa forme eikonale :

$$T_{\beta\alpha} = \int d\vec{R} d\vec{x} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \varphi_{\beta}^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \psi_{\alpha}^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{II.28})$$

La conservation de l'impulsion impose que la quantité de mouvement  $\vec{q} = \vec{k}_{\alpha} - \vec{k}_{\beta}$  soit transféré à la cible .c'est pour cela qu'on nomme cette quantité : moment transférée.

Le moment transférée  $\vec{q}$  est lui-même décomposé en deux composantes l'une transfert  $\vec{\eta}$  (orthogonale à la vitesse relative initiale tel que  $\vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0$ .) et l'autre longitudinale  $q_v$  (parallèle à la vitesse relative initiale) on a donc :

$$\vec{q} = \vec{k}_{\alpha} - \vec{k}_{\beta} \quad (\text{II.29a})$$

$$\vec{q} = q_v \cdot \vec{v} + \vec{\eta} \quad (\text{II.29b})$$

La conservation de l'énergie dans le repère du centre de masse, s'écrit :

$$\frac{k_{\alpha}^2}{2\mu} + \varepsilon_{\alpha} = \frac{k_{\beta}^2}{2\mu} + \varepsilon_{\beta} \quad (\text{II.30})$$

$\varepsilon_{\alpha}$  et  $\varepsilon_{\beta}$  sont les énergies des états liés initial et final.

Si l'angle  $\theta$  est petite et l'énergie transférée est petite devant l'énergie du projectile, alors elle peut s'écrire comme suit :

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

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

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

En rapportant cette expression approchée de  $\vec{q} \cdot \vec{R}$  dans l'amplitude de transition donnée par la relation (II.28), on obtient la forme suivante :

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

La notation ( | | ) indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques et sur la composante  $z$  de  $\vec{R}$ .

Dans le cas où  $\alpha \neq \beta$ , et à l'aide de l'expression (II.20a), la forme (II.33) de l'amplitude de transition dans l'approximation eikonale devient [30] :

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

Remarquons que dans cette dernière expression, la contribution du potentiel inter-agrégat

(II.6) qui se traduit par un facteur de phase  $\rho^{2i \frac{Z_P(Z_T - 1)}{v}}$  dépendant du paramètre d'impact a été réintroduite.

## II-2.2. SECTIONS EFFICACE EIKONALE:

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

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_\alpha}{k_\beta} |T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})|^2 \quad (\text{II.35})$$

où  $d\Omega$  est l'angle solide "  $\sin(\theta) d\theta d\varphi$  ".

Dans le cas d'un faible transfert d'impulsion longitudinal ( $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$ ) l'expression (II.30) de la section efficace différentielle devient :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{II.36})$$

et par conséquent, la section efficace totale s'écrit :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\beta \int_0^\pi \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{II.37})$$

En différentiant  $\vec{q}^2$  calculé à partir des expressions (II.29a,b), et en se basant sur un cas de faible transfert d'impulsion  $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$ , nous pouvons écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \quad (\text{II.38})$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\eta \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi v} \right|^2 \quad (\text{II.39})$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad (\text{II.40})$$

Où encore le système ayant une symétrie azimutale, la section efficace totale devient:

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad (\text{II.41})$$

nous avons vu, plus haut, que l'amplitude  $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  est variationnelle, et qu'une forme approchée noté  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  est complètement déterminée par l'expression (II.23) quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-espace vectoriel de dimension N.

Le chapitre suivant sera consacré à l'évaluation de deux types d'éléments de matrice:

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

Ces deux éléments sont d'une nécessité capitale pour le calcul de l'amplitude de transition  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  qui constitue une partie majeur dans la mise en œuvre du principe variationnel de Schwinger.

# Excitation de l'ion $Ar^{16+}(1s^2)$ par impact d'atomes neutres aux énergies intermédiaires.

## III-1. INTRODUCTION :

 Durant ces dernières années, l'étude des processus de collision mono-électronique au régime de vitesses intermédiaires ont subi des développements très intensifs. Expérimentalement, il a été observé que les sections efficaces totales d'excitation des ions Heliumoïdes et Hydrogéoïdes entrant en collision avec des atomes neutres ont tendance à se saturer quand la charge nucléaires des atomes augmente (Wohrer et al (1986) [19]. Ce phénomène a été modélisé théoriquement par Brendlè et Gayet 1985 [18]; Lasri *et al.* [20-26] grâce à l'approche variationnelle de Schwinger.

Récemment, les procédures variationnelles basées sur le principe variationnel de Schwinger demeurent toujours un outil d'investigation très puissant pour étudier les mécanismes d'excitation atomique par impact d'ions. Dans le formalisme du paramètre d'impact cette procédure a prédit également et avec succès le phénomène de saturation des section efficaces totales d'excitation direct des ions  $Fe^{24+}(1s^2)$ ,  $Kr^{34+}(1s^2)$ ,  $Xe^{52+}(1s^2)$  par impact des noyaux nus quand la charge du projectile augmente [18-20][21-26]. Comparée avec la majorité des résultats expérimentaux disponibles, les diverses prédictions théoriques obtenues s'avèrent très encourageantes et en parfait accord. Ceci nous a poussé

à continuer à percer dans le même axe afin d'aboutir à des résultats encore meilleurs que les précédents

Dans cette partie de mémoire, nous nous sommes fixés l'objectif d'étudier l'excitation des niveaux  $n=2$  et  $n=3$  de l'ion héliumöide  $Ar^{16+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He,  $N_2$ , Ar, Kr et Xe) à une énergie de 13.6MeV/u qui correspond à une vitesse d'impact de 23 a.u. Les diverses prédictions théoriques ont été comparés avec les résultats expérimentaux de Adoui *et al.* [27][28].

Expérimentalement, ces atomes jouent le rôle de projectiles. En effet, à une vitesse d'impact donnée, la saturation apparaît quand la charge nucléaire du projectile augmente à une valeur comparable à (ou plus grande que) la charge nucléaire de la cible. Avec des projectiles neutres, le processus de capture électronique est fortement exclu parce que c'est un processus de deuxième d'ordre qui peut se produire seulement si au moins un électron est enlevé du projectile. Donc, le couplage entre l'excitation et les voies de capture peut être négligé, introduisant ainsi une mise en œuvre plus simple de notre approche pour étudier les processus d'excitation.

### III-2. EXCITATION DE L'ION $Ar^{16+}(1S^2)$ :

Rappelons d'abord que l'amplitude de transition variationnelle de Schwinger est stationnaire par rapport à des petites variations arbitraires des états de diffusions  $|\psi_\alpha^+\rangle$  et  $|\psi_\beta^-\rangle$  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 matrices de second ordre  $(i|V G_T^+ V|j)$  qui entraîne directement des erreurs fatales sur l'amplitude de transition.

Dans le présent travail, pour l'excitation aux niveaux  $(1s, nl)$  où  $n=2,3$  et  $l=0,1$ , la série de base utilisée comprendra les 5 états suivants  $\{1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}\}$ . Plus tard et dans le but d'affiner encore plus les résultats, nous avons jugé nécessaire d'élargir la base sur laquelle le propagateur est développé afin d'aboutir à une meilleure représentation de la fonction d'onde et ainsi la série de base  $\{|i\rangle\}$  et  $\{|j\rangle\}$  a été élargie de 5 états à 10 états incluant  $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$  ensuite à 14 états incluant  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$ . Il faut dire que le développement à 10 états est spécialement adapté à l'étude de l'excitation du niveau  $n=3$ .

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.

Pour ce faire, un programme informatique a été mis au point afin de calculer les sections efficaces totales d'excitation, et ceci en intégrant sur le paramètre d'impact  $\rho$  par la méthode de Simpson l'amplitude de transition variationnelle  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  déterminée au chapitre III.

Ce programme de calcul conçu en Fortran est divisé en deux parties principales:

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

Dans un premier cas, et en utilisant un développement à 5 états noté Schw55, on considère B1 et B2 deux ensembles de base où les cinq états de base utilisés dans l'excitation du niveau  $n=2$  sont  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$  ainsi la matrice D à inverser peut être définie comme suit :

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

De même, pour la même étude du niveaux  $n=2$  on a développé les états de base sur les quatorze états de base noté Schw1414 sont  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$  et ainsi la matrice  $D$  à inverser sera donnée comme suit:

|                  | 1s | 2s | 2p <sub>0</sub> | 2p <sub>+1</sub> | 2p <sub>-1</sub> | 3s | 3p <sub>0</sub> | 3p <sub>+1</sub> | 3p <sub>-1</sub> | 3d <sub>0</sub> | 3d <sub>1</sub> | 3d <sub>-1</sub> | 3d <sub>2</sub> | 3d <sub>-2</sub> |
|------------------|----|----|-----------------|------------------|------------------|----|-----------------|------------------|------------------|-----------------|-----------------|------------------|-----------------|------------------|
| 1s               | X  | X  | X               | X                | ξ                | X  | X               | X                | ξ                | X               | X               | ξ                | X               | ξ                |
| 2s               |    | X  | X               | X                | ξ                | X  | X               | X                | ξ                | X               | X               | ξ                | X               | ξ                |
| 2p <sub>0</sub>  |    |    | X               | X                | ξ                | X  | X               | X                | ξ                | X               | X               | ξ                | X               | ξ                |
| 2p <sub>+1</sub> |    |    |                 | X                | X                | X  | X               | X                | X                | X               | X               | X                | X               | X                |
| 2p <sub>-1</sub> |    |    |                 |                  | X                | ξ  | ξ               | ξ                | ξ                | ξ               | ξ               | ξ                | ξ               | ξ                |
| 3s               |    |    |                 |                  |                  | X  | X               | X                | ξ                | X               | X               | ξ                | X               | ξ                |
| 3p <sub>0</sub>  |    |    |                 |                  |                  |    | X               | X                | ξ                | X               | X               | ξ                | X               | ξ                |
| 3p <sub>+1</sub> |    |    |                 |                  |                  |    |                 | X                | X                | X               | X               | X                | X               | X                |
| 3p <sub>-1</sub> |    |    |                 |                  |                  |    |                 |                  | X                | ξ               | ξ               | ξ                | ξ               | ξ                |
| 3d <sub>0</sub>  |    |    |                 |                  |                  |    |                 |                  |                  | X               | X               | ξ                | X               | ξ                |
| 3d <sub>+1</sub> |    |    |                 |                  |                  |    |                 |                  |                  |                 | X               | X                | X               | X                |
| 3d <sub>-1</sub> |    |    |                 |                  |                  |    |                 |                  |                  |                 |                 | X                | ξ               | ξ                |
| 3d <sub>2</sub>  |    |    |                 |                  |                  |    |                 |                  |                  |                 |                 |                  | X               | X                |
| 3d <sub>-2</sub> |    |    |                 |                  |                  |    |                 |                  |                  |                 |                 |                  |                 | ξ                |

X : désignent les éléments à calculer.

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

On rappelle une des conséquences les plus importantes des opérations de symétrie qui grâce à elles ont pu réduire et d'une manière assez considérable le temps des calculs. Ainsi une matrice de 14X14 qui nécessiterait le calcul de 196 éléments se réduit à 65 éléments à calculer seulement. Ceci nous a permis un gain énorme en temps machine pour les calculs.

Une fois les éléments  $D_{ji} = \langle j|V - VG_T^+V|i \rangle$  de la matrice  $D$  à inverser calculés, on peut déterminer la valeur de l'amplitude de transition variationnelle  $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$  et par conséquent déduire la section efficace totale d'excitation par intégration sur le paramètre d'impact  $\rho$ .

Cependant, A cause de l'influence des effets d'écran, la charge  $Z_T$  est déduite à partir de la table de Clementi ,Roeti [31] et Toshikatsu *et al.* [32], et choisie d'une façon à être proche de la charge vue par l'électron actif (c'est l'écran total fait par l'électron passif):  $Z_T^{eff} = \sqrt{-2\varepsilon_{1s}}$  où  $\varepsilon_{1s}$ : désigne l'énergie de Hartree-fock de l'orbitale 1s dans la configuration  $1s^2$ ,  $Z_T^{eff} = 17,50$ , et par conséquent on suppose que l'électron passif fait complètement écran à d'autre électron réduisant la charge du noyau  $Z_T = 17$ .

Expérimentalement, les sections efficaces totales ont été déduites à partir de celles utilisées pour la production de la raie Lyman des rayons X pour des projectiles Heliumoïdes et Hydrogéoïdes. On envoie des ions  $Ar^{16+}$  de 13.6 Mev/u correspond à une vitesse  $v = 23$  a.u sur des cibles gazeuses de He,  $N_2$ , Ar, Kr et Xe. Dans notre traitement théorique les noyaux de ces cibles gazeuses au repos dans le repère du laboratoire représentent les projectiles excitateurs. Les sections efficaces totales d'excitations des états 2p et 3p sont déduite à partir des intensités Lyman- $\alpha$  et Lyman- $\beta$  respectivement après avoir divisé par un facteur de 2 pour donner la section efficace par électron (cercles pleins sur les figures). Ceci vient du fait que la probabilité P d'observer une seule transition électronique est donnée par:

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

où  $P_E$  est la probabilité d'exciter un seul électron, dans le cas où  $P_E$  est faible devant 1, nous obtenons  $P = 2P_E$ .

Le tableau suivant donne les valeurs expérimentales des sections efficaces totales d'excitation .

|              | He<br>( $10^{-21}$ cm <sup>2</sup> ) | N <sub>2</sub><br>( $10^{-20}$ cm <sup>2</sup> ) | Ne<br>( $10^{-20}$ cm <sup>2</sup> ) | Ar<br>( $10^{-19}$ cm <sup>2</sup> ) | Kr<br>( $10^{-19}$ cm <sup>2</sup> ) | Xe<br>( $10^{-19}$ cm <sup>2</sup> ) |
|--------------|--------------------------------------|--|--------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|--------------------------------------|
| <b>2p→1s</b> | 5.6 ± 0.84                           | 5.1 ± 1.02                                       | 8.9±1.87                             | 1.46 ± 0.35                          | 2.44 ± 0.805                         | 2.42±0.7                             |

Tableau-1 : Résultats expérimentaux Adoui *et al.* [27,28]

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

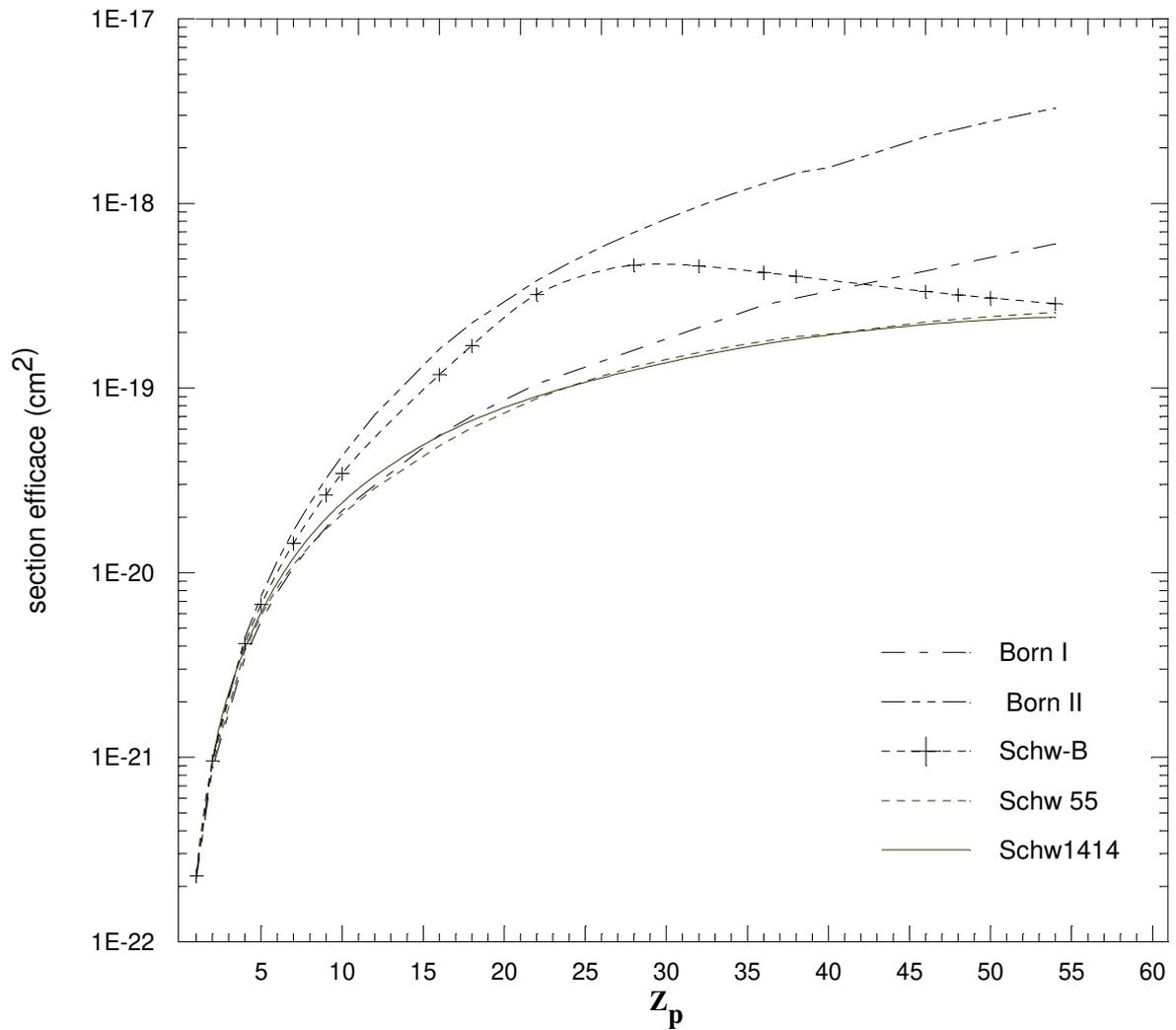
1. l'approximation perturbative de Born-I et Born-II.
2.  $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$  et  $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$  sont remplacées respectivement par seulement les états initiaux  $|i\rangle$  et  $|j\rangle$ . où  $B1 = \{|i\rangle\}$  et  $B2 = \{|j\rangle\}$  avec  $B1$  et  $B2$  sont deux ensembles de base. Cette procédure est appelée l'approximation Schwinger-Born (Schw-B).
3.  $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$  et  $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$  sont développées sur une base constituée de 5 états  $\{1s, ns, np0, np+1, np-1\}$  avec  $n=2$ , cette dernière est nommée Schwinger55 (Schw55) avec une inclusion totale de tout le spectre discret ainsi que celui du continuum des états de la cible.
4.  $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$  et  $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$  sont développés sur une base constituée de 10 états à savoir  $\{1s, 3s, 3p0, 3p1, 3p-1, 3d0, 3d1, 3d-1, 3d2, 3d-2\}$  (traitement spécialement adapté à l'étude de l'excitation du niveau  $n=3$ ) (Schw1010).
5. Finalement,  $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$  et  $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$  sont développés comme il a été mentionné au dessus sur une base constituée de 14 états (Schw1414) à savoir  $\{1s, 2s, 2p0, 2p1, 2p-1, 3s, 3p0, 3p1, 3p-1, 3d0, 3d1, 3d-1, 3d2, 3d-2\}$ .

les sections efficaces d'excitations totales de l'ion hélium  $Ar^{16+}$  par impact des divers noyaux de charges allant de 1 jusqu'à 54 incluant celle des gaz rares He,  $N_2$ , Ne, Ar, Kr et Xe sont représentés respectivement dans les tableaux III-1 à 3 et les figures III-1 à 3

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 d'un développement à 10 états de base, Schwinger1010 (Schw1010) spécialement adapté à l'excitation du niveau  $n=3$ , et enfin un développement à 14 états de base, Schwinger1414 (Schw1414).

**1. Excitation de l'état (1s,2s) du  $Ar^{16+}(1s^2)$ :**Tableau II-1 : Excitation du  $Ar^{16+}(1s^2)$  (cm<sup>2</sup>) de l'état (1s,2s) par impact des différents noyaux de charges  $Z_p$ 

| $Z_p$ | Born I                    | Born II                   | Schw-B                     | Schw55                    | Schw1414                  |
|-------|---------------------------|---------------------------|----------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 1     | 2.16854 10 <sup>-22</sup> | 2.28832 10 <sup>-22</sup> | 2.275577 10 <sup>-22</sup> | 2.25846 10 <sup>-22</sup> | 2.19458 10 <sup>-22</sup> |
| 2     | 8.67415 10 <sup>-22</sup> | 9.71445 10 <sup>-22</sup> | 9.51265 10 <sup>-22</sup>  | 9.28292 10 <sup>-22</sup> | 9.37342 10 <sup>-22</sup> |
| 4     | 3.46966 10 <sup>-21</sup> | 4.43320 10 <sup>-21</sup> | 4.13017 10 <sup>-21</sup>  | 3.77589 10 <sup>-21</sup> | 2.8304 10 <sup>-21</sup>  |
| 5     | 5.42135 10 <sup>-21</sup> | 7.43147 10 <sup>-21</sup> | 6.72545 10 <sup>-21</sup>  | 5.84739 10 <sup>-21</sup> | 4.86728 10 <sup>-21</sup> |
| 6     | 7.80674 10 <sup>-21</sup> | 1.15018 10 <sup>-20</sup> | 1.01132 10 <sup>-20</sup>  | 8.27410 10 <sup>-21</sup> | 7.5751 10 <sup>-21</sup>  |
| 7     | 1.06258 10 <sup>-20</sup> | 1.68453 10 <sup>-20</sup> | 1.44146 10 <sup>-20</sup>  | 1.10013 10 <sup>-20</sup> | 1.2037 10 <sup>-20</sup>  |
| 10    | 2.16854 10 <sup>-20</sup> | 4.28950 10 <sup>-20</sup> | 3.44426 10 <sup>-20</sup>  | 2.07243 10 <sup>-20</sup> | 2.39075 10 <sup>-20</sup> |
| 12    | 3.12270 10 <sup>-20</sup> | 7.14221 10 <sup>-20</sup> | 5.51635 10 <sup>-20</sup>  | 2.85925 10 <sup>-20</sup> | 3.0318 10 <sup>-20</sup>  |
| 16    | 5.55146 10 <sup>-20</sup> | 1.62034 10 <sup>-19</sup> | 1.18219 10 <sup>-19</sup>  | 4.86258 10 <sup>-20</sup> | 4.87808 10 <sup>-20</sup> |
| 18    | 7.02606 10 <sup>-20</sup> | 2.24954 10 <sup>-19</sup> | 1.69433 10 <sup>-19</sup>  | 6.07706 10 <sup>-20</sup> | 6.65169 10 <sup>-19</sup> |
| 20    | 8.6741510 <sup>-20</sup>  | 2.9724710 <sup>-19</sup>  | 2.3986710 <sup>-19</sup>   | 7.3943010 <sup>-20</sup>  | 7.31922 10 <sup>-20</sup> |
| 26    | 1.46593 10 <sup>-19</sup> | 5.79388 10 <sup>-19</sup> | 4.40295 10 <sup>-19</sup>  | 1.15770 10 <sup>-19</sup> | 9.90614 10 <sup>-20</sup> |
| 30    | 1.95168 10 <sup>-19</sup> | 8.22593 10 <sup>-19</sup> | 4.65821 10 <sup>-19</sup>  | 1.42776 10 <sup>-19</sup> | 1.30120 10 <sup>-19</sup> |
| 36    | 2.81043 10 <sup>-19</sup> | 1.27790 10 <sup>-18</sup> | 4.22644 10 <sup>-19</sup>  | 1.79243 10 <sup>-19</sup> | 1.72449 10 <sup>-19</sup> |
| 40    | 3.29835 10 <sup>-19</sup> | 1.55695 10 <sup>-18</sup> | 3.92771 10 <sup>-19</sup>  | 1.95378 10 <sup>-19</sup> | 1.82672 10 <sup>-19</sup> |
| 50    | 5.31497 10 <sup>-19</sup> | 2.77263 10 <sup>-18</sup> | 3.06888 10 <sup>-19</sup>  | 2.43312 10 <sup>-19</sup> | 2.23758 10 <sup>-19</sup> |
| 54    | 6.02888 10 <sup>-19</sup> | 3.28992 10 <sup>-18</sup> | 2.85911 10 <sup>-19</sup>  | 2.56992 10 <sup>-19</sup> | 2.41077 10 <sup>-19</sup> |

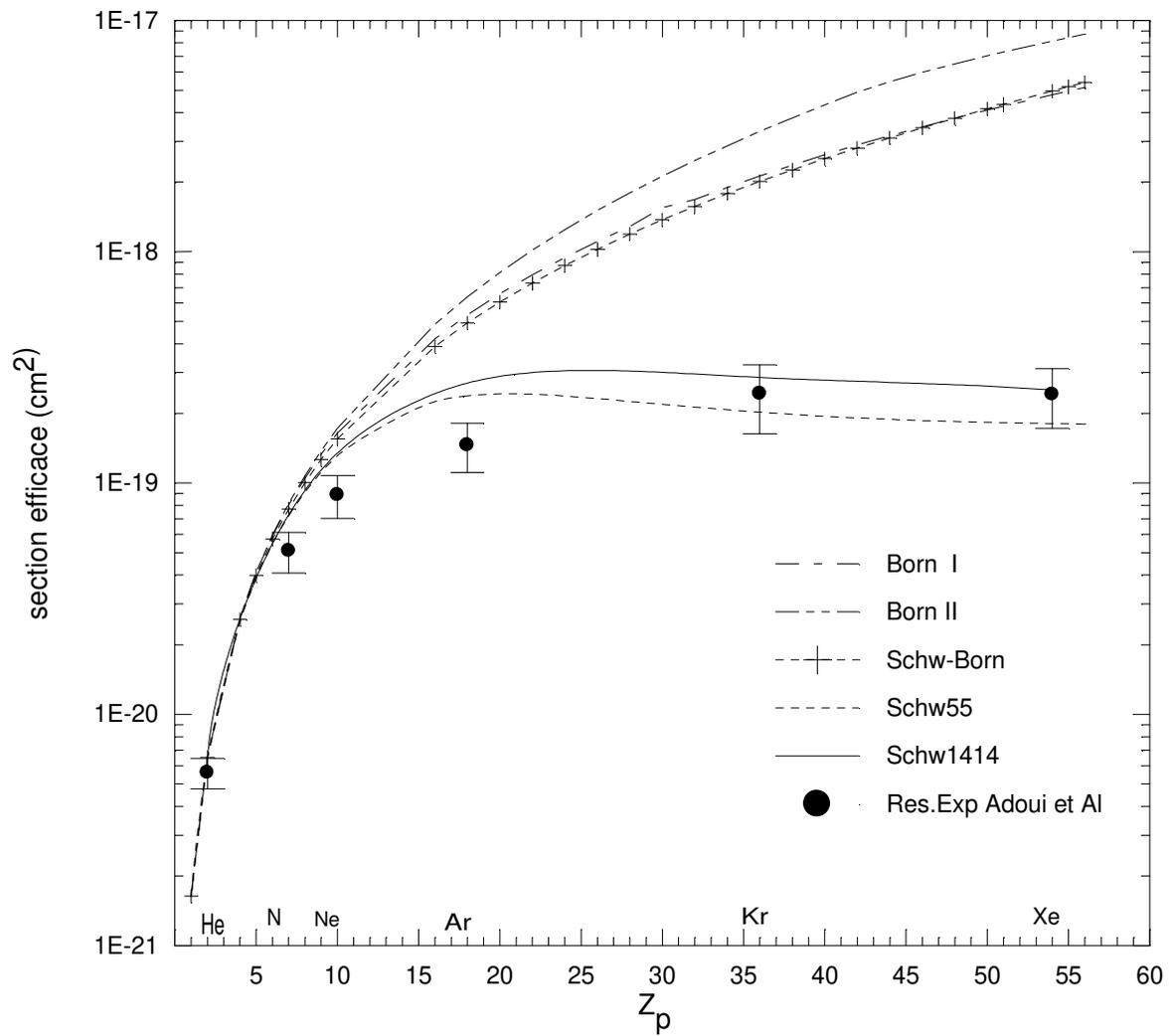


**Figure II.1 :** Section efficace totale d'excitation par électron de l'état (1s, 2s) d'ion  $Ar^{16+}$  envoyé à une vitesse  $v=23$  a.u sur des noyaux de charge  $Z_p$ .

La section efficace totale est donnée en  $cm^2$ .

**2. Excitation de l'état (1s,2p) du  $Ar^{16+}(1s^2)$ :**Tableau II-2 : Excitation du  $Ar^{16+}(1s^2)$  ( $cm^2$ ) de l'état (1s,2p) par impact des différents noyaux de charges  $Z_p$ .

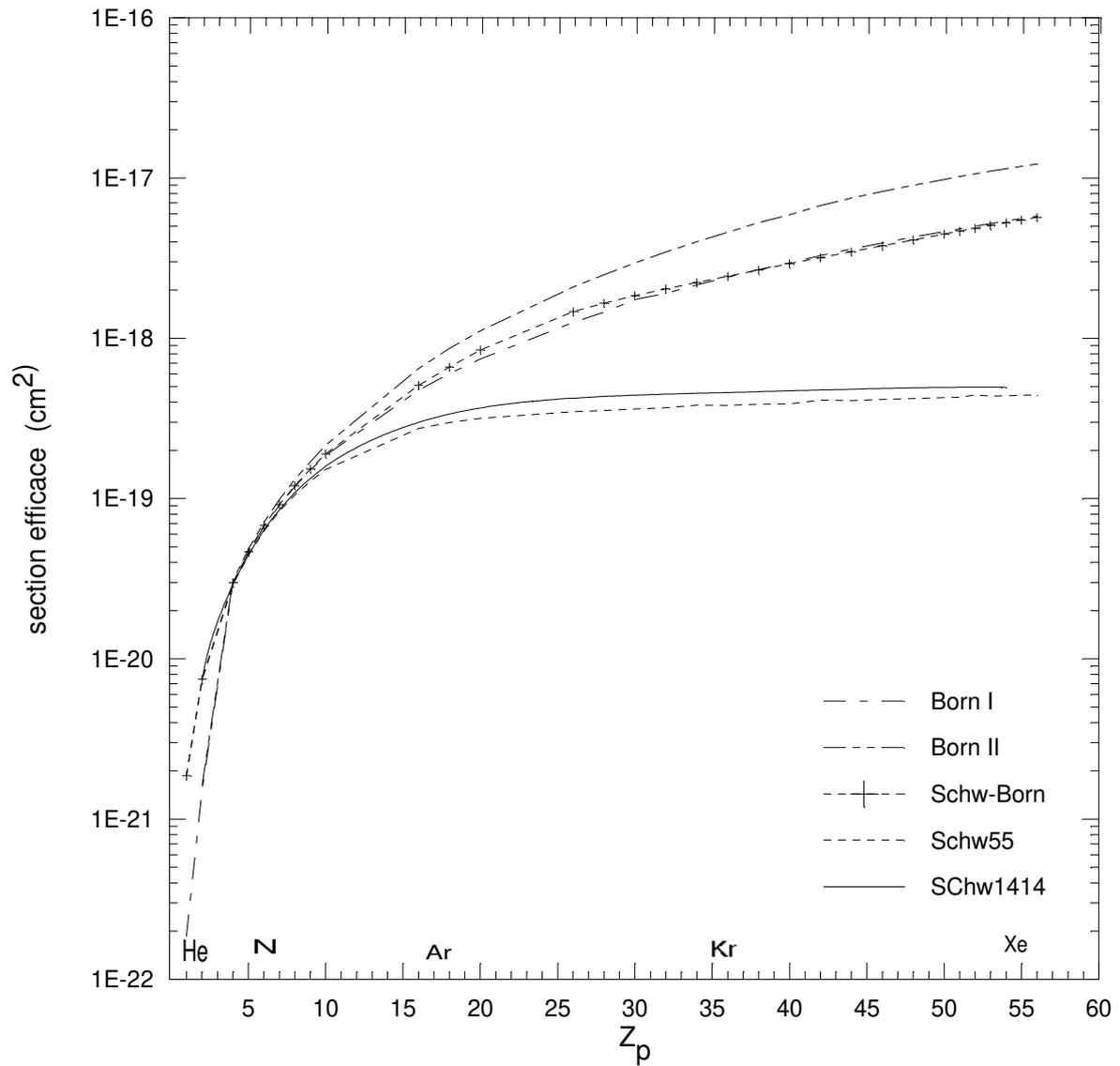
| $Z_p$ | Born I             | Born II             | Schw-Born          | Schw55             | Schw1414           |
|-------|--------------------|---------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 1     | 1.64061 $10^{-21}$ | 1.63598 $10^{-21}$  | 1.63366 $10^{-21}$ | 1.63092 $10^{-21}$ | 5.56718 $10^{-21}$ |
| 2     | 6.56230 $10^{-21}$ | 6.53659 $10^{-21}$  | 6.50101 $10^{-21}$ | 6.47123 $10^{-21}$ | 6.48966 $10^{-21}$ |
| 4     | 2.62498 $10^{-20}$ | 2.62212 $10^{-20}$  | 2.57009 $10^{-20}$ | 2.52505 $10^{-20}$ | 1.76604 $10^{-20}$ |
| 5     | 4.10154 $10^{-20}$ | 4.11336 $10^{-20}$  | 3.99163 $10^{-20}$ | 3.87442 $10^{-20}$ | 3.83013 $10^{-20}$ |
| 6     | 5.90621 $10^{-20}$ | 5.95673 $10^{-20}$  | 5.71402 $10^{-20}$ | 5.45423 $10^{-20}$ | 5.71342 $10^{-20}$ |
| 7     | 8.03902 $10^{-20}$ | 8.16701 $10^{-20}$  | 7.7332 $10^{-20}$  | 7.2221 $10^{-20}$  | 7.29578 $10^{-20}$ |
| 10    | 1.64060 $10^{-19}$ | 1.71972 $10^{-19}$  | 1.5544 $10^{-19}$  | 1.31338 $10^{-19}$ | 1.34842 $10^{-19}$ |
| 12    | 2.36248 $10^{-19}$ | 2.54732 $10^{-19}$  | 3.29552 $10^{-19}$ | 1.69862 $10^{-19}$ | 1.593 $10^{-19}$   |
| 16    | 4.19996 $10^{-19}$ | 4.85366 $10^{-19}$  | 3.90029 $10^{-19}$ | 2.24974 $10^{-19}$ | 2.39424 $10^{-19}$ |
| 18    | 5.31559 $10^{-19}$ | 6.36518 $10^{-19}$  | 4.91846 $10^{-19}$ | 2.37879 $10^{-19}$ | 2.70128 $10^{-19}$ |
| 20    | 6.56246 $10^{-19}$ | 8.14013 $10^{-19}$  | 6.05885 $10^{-19}$ | 2.42584 $10^{-19}$ | 2.74254 $10^{-19}$ |
| 26    | 1.10905 $10^{-18}$ | 1.50690 $10^{-18}$  | 1.02522 $10^{-18}$ | 2.31539 $10^{-19}$ | 2.74244 $10^{-19}$ |
| 30    | 1.54894 $10^{-18}$ | 2.11995 $10^{-18}$  | 1.37403 $10^{-18}$ | 1.48647 $10^{-19}$ | 2.83726 $10^{-19}$ |
| 36    | 2.12623 $10^{-18}$ | 3.314608 $10^{-18}$ | 2.01336 $10^{-18}$ | 2.02219 $10^{-19}$ | 2.85573 $10^{-19}$ |
| 40    | 2.62498 $10^{-18}$ | 4.32551 $10^{-18}$  | 2.52555 $10^{-18}$ | 1.9423 $10^{-19}$  | 2.74254 $10^{-19}$ |
| 50    | 4.1015 $10^{-18}$  | 7.03933 $10^{-18}$  | 4.15665 $10^{-18}$ | 1.82672 $10^{-19}$ | 2.65098 $10^{-19}$ |
| 54    | 4.78403 $10^{-18}$ | 8.15504 $10^{-18}$  | 4.9687 $10^{-18}$  | 18.0416 $10^{-20}$ | 2.52591 $10^{-19}$ |



**Figure II.2.** Section efficace totale d'excitation par électron de l'état  $(1s, 2p)$  d'ion  $Ar^{16+}$  envoyé à une vitesse  $v=23$  a.u sur des noyaux de charge  $Z_p$ . La section efficace totale est donnée en  $cm^2$ .

**3. Excitation de l'état (1s,2n) du  $Ar^{16+}(1s^2)$ :**Tableau II-3 : Excitation du  $Ar^{16+}(1s^2)$  de l'état (1s,2n) par impact des différents noyaux de charges  $Z_p$ 

| $Z_p$ | Born I                    | Born II                   | Schw-Born                 | Schw55                    | Schw1414                   |
|-------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|----------------------------|
| 1     | 1.85746 10 <sup>-22</sup> | 1.86419 10 <sup>-21</sup> | 1.86122 10 <sup>-21</sup> | 1.85677 10 <sup>-21</sup> | 5.47566 10 <sup>-21</sup>  |
| 2     | 1.52364 10 <sup>-21</sup> | 1.62510 10 <sup>-21</sup> | 7.45227 10 <sup>-21</sup> | 7.39952 10 <sup>-21</sup> | 7.427002 10 <sup>-21</sup> |
| 4     | 2.97194 10 <sup>-20</sup> | 3.06544 10 <sup>-20</sup> | 2.98310 10 <sup>-20</sup> | 2.90263 10 <sup>-20</sup> | 1.48912 10 <sup>-20</sup>  |
| 5     | 4.64367 10 <sup>-20</sup> | 4.85650 10 <sup>-20</sup> | 4.66417 10 <sup>-20</sup> | 4.45915 10 <sup>-20</sup> | 3.19127 10 <sup>-20</sup>  |
| 6     | 6.68688 10 <sup>-20</sup> | 7.10691 10 <sup>-20</sup> | 6.81515 10 <sup>-20</sup> | 6.28164 10 <sup>-20</sup> | 4.95021 10 <sup>-20</sup>  |
| 7     | 9.10160 10 <sup>-20</sup> | 9.85154 10 <sup>-20</sup> | 9.17466 10 <sup>-20</sup> | 8.32223 10 <sup>-20</sup> | 8.49948 10 <sup>-20</sup>  |
| 10    | 1.85745 10 <sup>-19</sup> | 2.14867 10 <sup>-19</sup> | 1.89882 10 <sup>-19</sup> | 1.52062 10 <sup>-19</sup> | 1.587502 10 <sup>-19</sup> |
| 12    | 2.67475 10 <sup>-19</sup> | 3.26154 10 <sup>-19</sup> | 3.84715 10 <sup>-19</sup> | 1.98454 10 <sup>-19</sup> | 1.91642 10 <sup>-19</sup>  |
| 16    | 4.75510 10 <sup>-19</sup> | 6.47400 10 <sup>-19</sup> | 5.08248 10 <sup>-19</sup> | 2.73599 10 <sup>-19</sup> | 2.98259 10 <sup>-19</sup>  |
| 18    | 6.01819 10 <sup>-19</sup> | 8.61472 10 <sup>-19</sup> | 6.61279 10 <sup>-19</sup> | 2.98649 10 <sup>-19</sup> | 3.36645 10 <sup>-19</sup>  |
| 20    | 7.42987 10 <sup>-19</sup> | 1.11126 10 <sup>-18</sup> | 8.45752 10 <sup>-19</sup> | 3.16527 10 <sup>-19</sup> | 3.533936 10 <sup>-19</sup> |
| 26    | 1.25564 10 <sup>-18</sup> | 2.08628 10 <sup>-18</sup> | 1.46551 10 <sup>-18</sup> | 3.47309 10 <sup>-19</sup> | 3.77699 10 <sup>-19</sup>  |
| 30    | 1.74410 10 <sup>-18</sup> | 2.94254 10 <sup>-18</sup> | 1.83985 10 <sup>-18</sup> | 3.61423 10 <sup>-19</sup> | 4.173286 10 <sup>-19</sup> |
| 36    | 2.40727 10 <sup>-18</sup> | 4.59250 10 <sup>-18</sup> | 2.43600 10 <sup>-18</sup> | 3.81462 10 <sup>-19</sup> | 4.58022 10 <sup>-19</sup>  |
| 40    | 2.95481 10 <sup>-18</sup> | 5.88246 10 <sup>-18</sup> | 2.91832 10 <sup>-18</sup> | 3.89608 10 <sup>-19</sup> | 4.482976 10 <sup>-19</sup> |
| 50    | 4.63299 10 <sup>-18</sup> | 9.81196 10 <sup>-18</sup> | 4.46353 10 <sup>-18</sup> | 4.25984 10 <sup>-19</sup> | 4.94472 10 <sup>-19</sup>  |
| 54    | 5.38691 10 <sup>-18</sup> | 1.14449 10 <sup>-17</sup> | 5.25461 10 <sup>-18</sup> | 4.37408 10 <sup>-19</sup> | 4.933684 10 <sup>-19</sup> |



**Figure II.3.** Section efficace totale d'excitation par électron de l'état  $(1s, 2n)$  d'ion  $Ar^{16+}$  envoyé à une vitesse  $v=23$  a.u sur des noyaux de charge  $Z_p$ .

La section efficace totale est donnée en  $cm^2$ .

### III-3. Résultats et discussion:

Les sections efficaces d'excitation totale de l'ion Héliumoïde  $Ar^{16+}(1s^2)$  par impact de divers noyaux de charge allant de 1 jusqu'à 54 incluant celles des gaz rares He,  $N_2$ , Ar, Kr et Xe sont représentées dans les figures 1 à 3. 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 Schw1414 avec un développement à 14 états de base, A titre de comparaison, nous avons inséré les résultats expérimentaux de Adoui et al [27-28].

A titre de précision, pour l'excitation du 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  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$  ensuite élargis à 14 états  $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$ . Une procédure automatique a été établie afin d'assurer plus de précision.

A partir des figures (III.1-3) nous remarquons que les sections efficaces totales d'excitation des niveaux  $(1s \rightarrow 2s)$ ,  $(1s \rightarrow 2p)$  et  $(1s \rightarrow 2n)$  seaturent très rapidement quand la charge  $Z_P$  du projectile augmente, contrairement à la dépendance en  $Z_P^2$  de l'approximation de Born I, et celle en  $Z_P^4$  du deuxième ordre qui divergent toutes les deux.

On note également à partir de ces figures que le principe variationnel de Schwinger prédit que la section efficace totale d'excitation est caractérisée par une faible variation à partir de  $Z_P=17$  quand la charge  $Z_P$  du projectile croît.

Il faut noter, que les projectiles sont des noyaux nus. Du fait que pour des systèmes où  $Z_P \ll Z_T$  la voie de capture est beaucoup moins probable que l'excitation nous fait négliger la voie de capture. Toutefois les expériences ont été menées avec des projectiles atomiques sans lacunes dans les couches électroniques; ce qui nous permet de dire que la voie de capture est fortement inhibée, et par conséquent la comparaison avec le modèle théorique garde toujours son sens.

D'autre part, en ce qui concerne l'approximation de Schwinger-Born (Schw-B) les résultats sont élevés et ne représentent pas bien la saturation, surtout pour l'excitation de l'état  $2p$ , contrairement à l'état  $3p$  où ils ont tendance à se saturer pour des valeurs de  $Z_P$

grandes. L'incapacité de l'approximation de Schwinger-Born (SB) à reproduire le phénomène de saturation pour l'excitation de l'état  $2p$  vient du fort couplage avec l'état  $2s$ ; ceci nous mène à dire que l'introduction de l'approximation de Born dans la forme variationnelle de Schwinger est une approximation encore insuffisante quand les conditions de la collision sont très éloignées d'une simple perturbation du système.

Le bon accord entre nos résultats (Schw55, Schw1414) avec les mesures expérimentales pour des valeurs de  $Z_P$  grandes ( $Z_P=54$ ) résulte du fait que pour  $Z_P > 17$  les sections efficaces totales d'excitation sont peu sensibles à des variations de la charge.

A cause des faibles vitesses relatives, les électrons du projectile ne peuvent pas exciter l'ion d'une façon directe, il en résulte que la couche K du  $Ar^{16+}$  est assez compacte pour considérer que l'excitation est due essentiellement à la charge  $Z_P$  du noyau projectile.

Dans tous les cas ici présents, les résultats donnés par Born-I, se trouvent loin au dessus des résultats expérimentaux, et même pour les diverses prédictions théoriques Schwinger55 (Sch55) et Schwinger1414 (Schw1414). Les valeurs fournies par Born-II sont même plus mauvaises et largement au dessus de nos divers prédictions théoriques ainsi que les données expérimentales et ceci commence à apparaître très clairement à partir d'une charge  $Z_P=10$  où les conditions de perturbation sont vérifiées.

# Conclusion générale

Les sections efficaces d'excitation des niveaux  $n=2$  de l'ion héliumoïde  $\text{Ar}^{16+}(1s^2)$  en collision avec divers atomes de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He,  $\text{N}_2$ , Ar, Kr et Xe) à une énergie de 13.6MeV/u qui correspond à une vitesse d'impact de 23 a.u ont été mesurées et leur dépendance à la charge nucléaire de la cible examinée. Les électrons de la cible sont attendus à jouer un rôle mineur pour que cette dépendance semble être la dépendance de charge excitatrices. L'effet principal des électrons doit empêcher la capture électronique à partir de l'ion  $\text{Ar}^{16+}(1s^2)$ . Alors la comparaison avec les théories qui négligent la voie de transfert de charge est faite pour les collisions des ions  $\text{Ar}^{16+}(1s^2)$  avec des projectile nues. Parmi ces calculs la méthode basée sur le principe variationnel de Schwinger permet une étude systématique de la dépendance des sections efficaces d'excitation sur la charge excitatrice  $Z_T$ . Cette théorie prévoit que les sections efficaces tendent vers une limite finie quand la charge  $Z_T$  augmente (en contradiction avec la dépendance en  $Z_T^2$  de la première approximation de Born), une particularité établie par les résultats expérimentaux.

Durant cette partie de mémoire, notre objectif été de donner un outil de calcul performant pour déterminer les sections efficaces totales d'excitation dans les interactions ion-atome multichargés aux vitesses intermédiaires et de voir la contribution du spectre discret ainsi que celui du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation.

La méthode basée sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger permet une étude systématique de la dépendance de la section efficace totale d'excitation en fonction de la charge excitatrice  $Z_P$  du projectile ainsi que la prédiction avec succès de la saturation des sections efficaces totales d'excitation quand la charge du projectile augmente.

Dans notre développement nous avons pu inclure tout le spectre discret des états  $nl$  de la cible dans la représentation du propagateur de Green  $G_T^+$  contenu dans les éléments de matrice de second ordre  $(j|VG_T^+V|i)$ . Ceci à été possible grâce au comportement en  $n^{-3}$  de ces éléments de matrice; aussi nous avons pu inclure le spectre du continuum et sa contribution dans les sections efficaces totales d'excitation.

Cette méthode est d'une grande facilité grâce aux relations de symétrie, aux lois d'échelles sur les charges nucléaires de la cible et du projectile et aussi à l'évaluation analytique de nombreuses intégrales. Il en résulte une économie considérable sur le temps nécessaire au calcul numérique.

Il faut noter également que la caractéristique de la saturation de la section efficace totale d'excitation quand la charge du projectile augmente est bien illustrée par un bon accord entre les résultats théoriques et les résultats expérimentaux correspondant à l'excitation de l'ion  $Ar^{16+}(1s^2)$  par les atomes He,  $N_2$ , Ar, Kr et Xe.

Enfin, on peut dire que les méthodes variationnelles fondées sur le principe **variationnel** de Schwinger peuvent donc êtres un outil d'investigation très puissant qui prend le relais de traitements perturbatifs dans l'étude des collisions atomiques aux vitesses intermédiaires.

# Références

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

- [18] - Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, Phys. Rev. Lett. 54 ,N :18,pp2007-2010 (1985).
- [19] - K Wohrer, A Chetioui, J P Roze, A Jolly, F Fernandez, C Stephan,B Brendlé and R Gayet, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 19 pp1997-2006 (1986) .
- [20] - R. Gayet and M. Bouamoud ,Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 pp515-522 (1989).
- [21] - B. Lasri , Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (1998).
- [22] - B. Lasri , Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen (2007).
- [23] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, Phys. Chemi. News , Vol 20 , pp12-17 (2004).
- [24] - B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud,R. Gayet , Physical and chimical news vol.28 pp97-102 (2006).
- [25] - B. Lasri, M. Bouamoud, R. Gayet, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 251, pp66-72 (2006).
- [26] - B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen, Journal of Electron Devices, Vol. 5, pp. 127-131(2007).
- [27] - L. Adoui , D. Vernhet , K. Wohrer , J. Plante , A. Chetioui , J.P. Rozet ,I. Despiney , C. Stephan , A. Touati , J.M. Ramillo , A. Cassimi , .P. Grandin ,M. Cornille ,Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 98 pp312-315 (1995).
- [28] - L. Adoui, "Mécanismes d'excitation d'ions  $Ar^{+16}$  en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire", Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995).
- [29] - R. K. Janev et A. Salin , ann. Phys. N.y 73 ,136-155(1972).
- [30] - Dz. Belkic, R. Gayet et A. Salin , phys. Report 56pp 279-369(1979).
- [31] - E. Climenti et D.L. Raimondi ,vol 38,N 11,pp2686-2689(1963).
- [32] - K.Toshikatsu, H.Tatewaki J.Thakkar , physical reviw A vol 47,N° 5,pp 4510-4512(1993).