

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

UNIVERSITE Dr. TAHAR MOULAY SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de

MASTER

Spécialité : PHYSIQUE

Option : Spectroscopie Moléculaire

Par

M^{elle} Hamhami Zahra

Sur le thème

**Etude variationnelle de l'excitation des ions
Hydrogénoïdes Béryllium (Be^{3+}) par impact de Protons.**

Soutenu le 23/06/2014 devant la commission d'examen:

M ^r ABBES Oukacha	Professeur (U. Saïda)	Président
M ^r LASRI Boumediene	Professeur (U. Saïda)	Encadreur
M ^r EL KEURTI Mohammed	Maître de Conférences «A » (U. Saïda)	Examineur
M ^{elle} KHELFAOUI Friha	Maitre Assistante «B » (U. Saïda)	Examinatrice

Année Universitaire 2013 - 2014

Dédicace

✚ *Par le biais de ces mots, je dédie le fruit de mes années d'études aux personnes les plus chers yeux à savoir ma mère, mon père.*

✚ *Mes sœurs.*

✚ *Mes frères et leurs petites familles sans oublier*

✚ *Mon fiancé*

✚ *spécialement a tous mes amies : Fatima, Fatiha, meriem.*

✚ *Et spécialement mon promo de 2^{ème} année master*

✚ *Qui m'ont soutenue tout au long de la réalisation de ce travail.*

✚ *Toutes ces personnes m'ont comblée de bonheur et c'est à mon tour de les remercier.*

✚ *Leur en dédie ce travail.*

Zahra

Remerciement Remerciement

Je remercie toutes les personnes ayant contribué à la réalisation de ce travail.

Je présente mes remerciements tout particulier à : professeur LASRI Boumediene pour l'honneur qu'elle nous accordé pour diriger mon mémoire.

Mes remerciements les plus vifs sont adressés également aux membres de jury, pour avoir accepté de juger mon travail.

Résumé

Dans ce travail et par le biais du formalisme du paramètre d'impact, nous avons appliqué l'approche variationnelle de Schwinger afin d'évaluer les sections efficaces totales d'excitation directe des ions Hydrogénoïdes Béryllium (Be^{3+}) par impact de protons (H^+) sachant que l'ion Béryllium étant une des impuretés principales dans les plasmas de Tokamak. L'étude a été réalisée dans la gamme d'énergie allant de 16 keV à 4 MeV incluant le domaine des énergies intermédiaires (autour de 100 keV). Les résultats obtenus s'avèrent en bon accord avec les calculs théoriques d'Ermolaev et al (1996) basés sur les méthodes des équations couplées (TCAO).

Mots clés: Collision atomique, Principe Variationnel de Schwinger, Excitation atomique, Sections efficaces.

Abstract

The Schwinger variational principle based on the fractional form in the framework of the impact parameter approach is applied to the evaluation of direct excitation cross section for the hydrogen-like beryllium ions (Be^{3+}) by protons (H^+) impact (the beryllium ion being one of the main impurities in the Tokamak plasmas). In this work, the collision energies used are between 16 keV to 4 MeV, which include the intermediate energy range (around 100 keV). Our theoretical predictions are in good agreement with available theoretical calculations, like those of Ermolaev et al based on TCAO method.

Keywords: Atomic Collision, Variational Schwinger Principle, Atomic excitation, cross section.

Liste des tableaux

IV.1	Section efficace totale d'excitation à l'état 2s (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	62
IV.2	Section efficace totale d'excitation à l'état 2p (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons.....	64
IV.3	Section efficace totale d'excitation au niveau n=2 (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	66
III.4	Section efficace totale d'excitation à l'état 3s (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	68
IV.5	Section efficace totale d'excitation à l'état 3p (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons.....	70
IV.6	Section efficace totale d'excitation à l'état 3d (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	72
IV.7	Section efficace totale d'excitation au niveau n=3 (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	74

Liste des figures

1	Les processus atomiques mono électroniques élémentaires.....	02
2	Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision (P + H).....	02
II.1	Schéma de la collision	27
IV.1	Section efficace totale d'excitation à l'état 2s (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) En fonction de l'énergie d'impact de protons.....	63
IV.2	Section efficace totale d'excitation à l'état 2p (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) En fonction de l'énergie d'impact de protons.....	65
IV.3	Section efficace totale d'excitation au niveau n=2 (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons.....	67
IV.4	Section efficace totale d'excitation à l'état 3s (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons.....	69
IV.5	Section efficace totale d'excitation à l'état 3p (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons.....	71
IV.6	Section efficace totale d'excitation à l'état 3d (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	73
IV.7	Section efficace totale d'excitation au niveau n=3 (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{2+} (1s) en fonction de l'énergie d'impact de protons	75

Table des Matières

Résumé	
Liste des tableaux	
Table des figures	
Introduction.....	01
Référence.....	09

Chapitre I

Approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions

I-1	Introductions	12
I-2	L'approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions.....	13
I-2.a	Amplitude variationnelle approchée dans le formalisme de Schwinger	18
	Références.....	22

Chapitre II

Amplitude de transition Schwinger pour l'excitation

II-1	Introduction	25
II-2	Amplitude variationnelle de Schwinger pour l'excitation directe.....	26
II-3	De l'amplitude de transition iconale à la section efficace totale l'excitation..	35
II-3.1	Amplitude de transition iconale	35
II-3.2	Sections efficaces iconales	37
	Références.....	40

Chapitre III

Evaluation de l'amplitude de transition variationnelle approchée

III-1	Calcul des éléments de matrice de Born-I.....	41
III-2	Eléments de matrice de Born-II.....	44
III-2.1	Contribution de la totalité du spectre discret de la cible.....	46
III-2.2	Contribution des états du continuum de la cible	48
III-3	Méthode d'intégration	50
III-4	Lois d'échelle	51
III-4.1	Lois d'échelle sur la charge Z_P	52
III-4.2	Lois d'échelle sur la charge Z_T	53
	Références.....	56

Chapitre IV

Excitation de l'ion Be^{3+} par impact de Protons aux énergies allant de 16 keV à 4 MeV

IV-1	Introductions	57
IV-2	Procédures théoriques	59
IV-3	Résultats.....	62
IV-4	Discussion.....	76
	Références	78
	Conclusion.....	80

Introduction

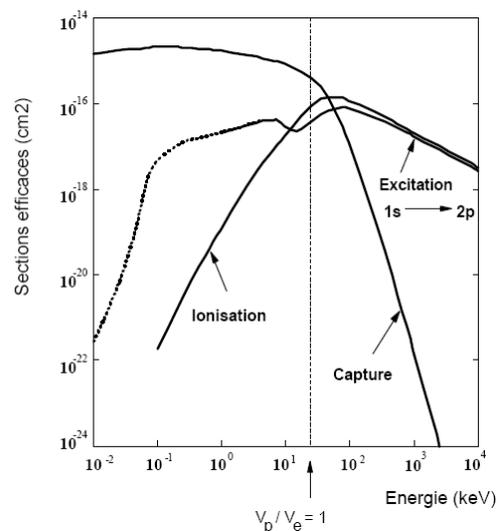
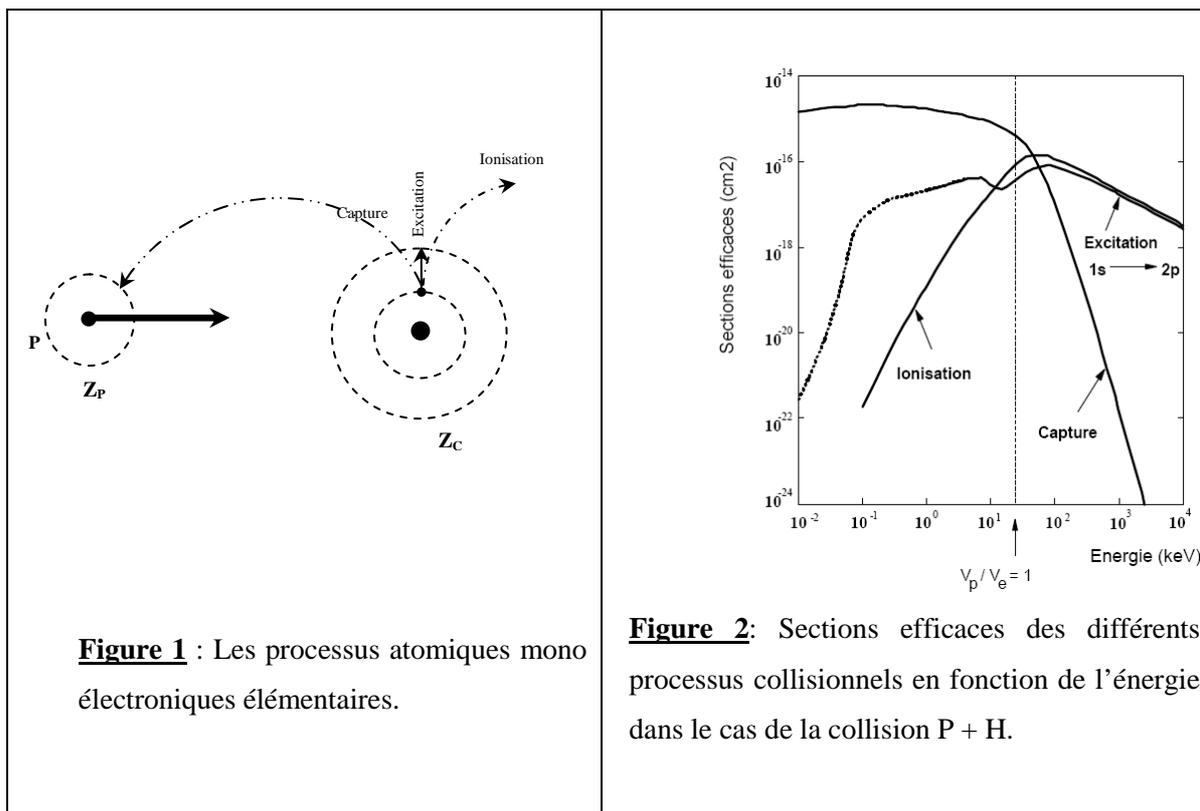
L'histoire des sciences est l'histoire de la curiosité humaine. Un des traits qui nous caractérisent est le besoin inextinguible de comprendre le monde dans lequel nous vivons. Ce besoin de savoir "pourquoi ?" et "comment ?" se dirige en parallèle avec une autre commande puissante de l'être humain, le 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 ion 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 où les sections efficaces des ces différents processus sont toutes du même ordre de grandeur (Fig.1,2).



Différentes 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 qui reste jusqu'à présent 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. Citons parmi ces théories 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.

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, 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 Mc Carroll 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" [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.

Pour cette raison, nous nous sommes intéressés dans ce mémoire 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 est 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] lors de son développement a élargi cette base de 5 états à 10 puis à 14 états. Le propagateur de Green a été développé également 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 puis aux ions hydrogénoïdes (Li^{2+} ...etc.) en collision avec des protons ensuite à l'excitation des ions heliomoïdes (Fe^{24+} , Kr^{34+} , Xe^{54+} , ...etc.) avec des noyaux de charge allant de 1 jusqu'au 54 incluant celle des gaz rares (He, N_2 , Ne, Ar, Kr et Xe) aux vitesses intermédiaires [20-27].

En effet, vu les divers prédictions théoriques qui paraissent très encourageantes pour l'atome d'hydrogène principalement et les ions hydrogénoïdes ainsi que les ions heliomoïdes étudiés, ces derniers demeurent en parfait accord avec ceux d'autres travaux théoriques fondés sur d'autres techniques récentes comme celles de Close Coupling [28-38] ainsi qu'avec la totalité des résultats expérimentaux [39-44]. 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 projectile (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], B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen [27]).

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 section efficaces lorsque Z_p tend vers l'infini, là où d'autre théorie (base d'états couplés) semblent prédire le passage par un maximum puis une décroissance de ces section 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 hydrogénoïde Be^{3+} par impact de protons d'énergie allant de 16 keV à 4 MeV. Les diverses prédictions théoriques obtenues ont été comparé avec ceux d'Ermolaev *et al* (1996) [38] obtenus en utilisant la méthode Close Coupling.

Ce sujet s'inscrit dans un vaste projet engagé dans l'équipe, visant à acquérir la meilleure expertise possible des différent 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.

Dans **le troisième chapitre**, tous nos efforts se sont concentrés, tant du point de vue des calculs analytiques que numériques, sur l'évaluation de deux sortes d'éléments de matrice: les éléments notés $(i|V|j)$, dits de premier ordre de Born (Born-I), et ceux dits de deuxième ordre de Born (Born-II), notés $(i|V G_T^+ V|j)$. Il faut ajouter que dans cette approche le propagateur de Green a été développé sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que celui du continuum de la cible. Afin de décrire d'une manière plus correcte la fonction d'onde de diffusion, nous avons élargi la base de 5 états à 10 et ensuite à 14 états. Nous avons pu également examiner dans ce chapitre en détail la contribution des états du continuum de la cible dans les sections efficaces totales d'excitation. Ces résultats ont été obtenus grâce à la simplification des calculs introduite par des lois d'échelle établies dans ce formalisme.

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 hydrogénoïde Be^{3+} par impact de protons d'énergie allant de 16 keV à 4 MeV. On discute également dans ce chapitre les divers résultats obtenus et on termine par la suite par une conclusion générale.

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, pp608-614 (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, pp 3563-3568(1979).
- [16] - R. R. Lucchese et V. McKoy, *J. Phys. B* 12 L421(1979).

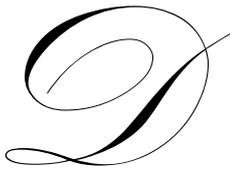
- [17] - R. R. Lucchese, D.R. Watson et V. McKoy, Phys. Rev. A 22 pp 421(1980).
- [18] - B. Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, Phys. Rev. Lett. 54 ,N :18,pp2007-2010 (1985).
- [19] - K Wohrer, A Chetioui, J P Roze, A Jolly, F Fernandez, C Stephan, BBrendlé and R Gayet, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 19 pp1997-2006 (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 bakrBelkaïd de Tlemcen (1998).
- [22] - B. Lasri ,Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakrBelkaïd de Tlemcen (2007).
- [23] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, Phys. Chem. News , Vol 20 , pp12-17 (2004).
- [24] - B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud, R. Gayet , Physical and chiminal 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] - B. Lasri, M. Bouamoud et J. Hanssen, Science, technologie & développement, éditée par l'Agence Nationale pour le Développement de la Recherche Universitaire (ANDRU), Volume 003,p 96-101,ISSN : 1112 - 7309
- [28] - N. Tochima, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 26 No 11 pp281-286(1993).
- [29] - R. Schakeshaft, Phys Rev A 18 pp1930-1934(1978). 4551. (1993).
- [30] - A. L. Ford, J. F. Reading et K. A. Hall, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 26 pp4537-
- [31] - H. A. Slim et A. Ermolaev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27, pp203-209 (1994).
- [32] - N. Toshima, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 No 5 pp131-136(1997).
- [33] - H. J. Lüdde et R. M. Dreizler, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 15,pp 2703-2711 (1982).
- [34] - Brendan M McLaughlin, Y. k. Thomas G Winterzet James F. McCann, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 1043–1059 (1997).

- [35] - F. Martin, A. Salin, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 28pp 671-683 (1995).
- [36] - A. Ermolaev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24 L495-L499 (1991).
- [37] - A. M. Ermolaev 1994 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27 L671.
- [38] - A.M. Ermolaev and A.A. Korotkov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29 (1996)
2797–2818
- [39] - C. F. Barnett , Oak Ridge National Laboratory Report No 6086 (1990)
- [40] - D. P Higgins, J. Geddes and H. B. Gilbody, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29
pp1219 –1224(1996).
- [41] - A. Donnelly, J. Geddes et H. B. Gilbody, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24pp 165-
173 (1991).
- [42] - D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, et K-H Schartner, J. Phys. B: At. Mol. Opt.
Phys. 27 pp4195 -4213(1994).
- [43] - M. Chabot, P. Nicolai, K. Wohrer, A. Chetioui, J.P. Rozet, M..F. Politis, A. Touati,
D, Vernhet, C. Stephan et R. Gayet, Nucl. Instr. and Methods in Physics Research
B 56 pp 1-4 (1991).
- [44] - M. Chabot, K Wohrert, A Chetioui, J P Rozet, A Touati, D Vernhet, M F Politis, C
Stephan, J P Grandin, a Macias, F Martin, a Riera, J L San and R Gayet, J. Phys. B:
At. Mol. Opt. Phys. 27 pp111-I25 (1994).

Chapitre I

Approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions

I-1. Introduction:



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

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

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

Cette approche appliquée aux collisions de type e^- -molécule, ion-atome et à la photo-ionisation moléculaire n'a cessé de se développer, de se raffiner et de s'étendre à d'autres domaines le long de ces dernières années, grâce aux progrès informatiques et aux divers travaux accomplis par plusieurs équipes de recherche dans le monde [9-22].

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

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

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

Dans le présent chapitre on présente les fondements théoriques de la mise en oeuvre du principe variationnel de Schwinger basé sur des équations intégrales de Lippman-Schwinger et fondé sur l'obtention d'une forme stationnaire de l'amplitude de transition en vue d'une application aux collisions de type ion-atome [18-22].

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

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

réarrangement par les équations de Lippman-Schwinger :

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

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

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

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

E est l'énergie totale du système.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

et

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

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

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

on sous une autre formulation:

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

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

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

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

On peut souligner que dans le cas où le rapport $\left| \frac{\bar{T}^{\text{BII}}}{T^{\text{BI}}} \right|$ est petit devant 1, et en utilisant le développement de l'expression (I.12) $((1-\epsilon)^{-1} \cong (1+\epsilon) \quad \epsilon < 1)$, on aura :

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

Nous remarquons que dans ce développement, les deux premiers termes correspondent à la série de Born au 2^{ème} ordre.

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

Une évaluation de l'amplitude de transition sous sa forme fractionnaire donnée par l'équation (I.8) et l'utilisation de l'approximation (I.10a,b) avec des choix plus complexes a été effectuée pour ${}^3\text{S}_1$ dans une collision nucléon-nucléon décrite par un potentiel de Yukawa [23], ou par un potentiel de Gauss [22]. Le résultat variationnel s'avère en effet être plus précis que la seconde approximation de Born. Cette affirmation est cependant sans signification à basse énergie, où la série de Born ne converge pas.

En fait, la première approximation de Born donne des sections efficaces moins précises que l'estimation variationnelle basée sur un choix simple (I.10a,b). Un tel exemple illustre les difficultés qui peuvent apparaître quand un mauvais choix des fonctions d'essai est employé dans le principe variationnel. L'application de l'expression variationnelle (I.12) aux interactions plus faibles fournit des résultats plus satisfaisants [22].

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

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

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

et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Maintenant au moyen de l'équation $\delta\Gamma_{\beta\alpha} = 0$ et en remplaçant les vecteurs $|\tilde{\psi}_{\alpha}^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_{\beta}^{-}|$ par les développements cités précédemment par les équations (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 :

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

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_{α} et V_{β} les vecteurs colonnes dont les éléments sont respectivement:

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

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

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

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

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

ou encore en utilisant les propriétés algébriques des matrices :

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

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

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 $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$.

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

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

ou sous forme matricielle :

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

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

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = (V_\beta^*)^t \cdot \tilde{a} = \tilde{b}^* \cdot V_\alpha = (V_\beta^*)^t \cdot D^{-1} \cdot V_\alpha \quad (\text{I.26})$$

ou encore sous une forme plus explicite :

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

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

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

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad (\text{I.28})$$

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

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

Références

- [1]- L. Hulthén, K. Fysiogr. Sällsk. Lund. Förh. 14, 257 (1944).
- [2]- W. Kohn, Phys. Rev. 74, 1763 (1948).
- [3]- S.I. Rubinow, Phys. Rev. 96, 218 (1954).
- [4]- T.N. Rescigno, C.W. McCurdy, A.E. Orel, and B.H. Lengsfeld III, "The Complex Kohn Variational Method," chapter 1 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco, Plenum Press, New York, 1995
- [5]- J.L. Jackson, Phys. Rev. 83, 301 (1951).
- [6]- R.K. Nesbet, Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory, Plenum Press, New York (1980).
- [7]- B.I. Schneider, "An R-Matrix Approach to Electron Molecule Collisions" chapter 8 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco, Plenum Press, New York, 1995
- [8]- J. Schwinger, Phys. Rev. 56,750 (1947).
- [9]- R.R. Lucchese, K. Takatsuka, and V. McKoy, Phys. Rep. 131, 147 (1986).
- [10]- D.K. Watson, Adv. At. Mol. Phys. 25, 221 (1988).
- [11]- M.A.P. Lima, T.L. Gibson, L.M. Brescansin, V. McKoy, and W.M. Huo, "**Studies of Elastic and Electronically Inelastic Electron-Molecule Collisions,**" in Swarm

- Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions, ed. L.C. Pitchford, B.V. McKoy, A. Chutjian, and S. Trajmar, Springer-Verlag, New York (1987), pp 239-264.
- [12]- C. Winstead and V. McKoy, "Studies of Electron-Molecule Collisions on Highly Parallel Computers," in Modern Electronic Structure Theory Vol. 2, ed. D. Yarkony, World Scientific, Singapore (1994).
- [13]- D.K. Watson and V. McKoy, Phys. Rev. A 20, 1474 (1979).
- [14]- R.R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, Phys. Rev. A 25, 2572 (1982).
- [15]- G. Bandarage and R.R. Lucchese, Phys. Rev. A 47, 1989 (1993); M.-T. Lee, K. Wang, and V. McKoy, J. Chem. Phys. 97, 3108 (1992).
- [16]- M.-T. Lee, M.M. Fujimoto, S.E. Michelin, L.E. Machado, and L.M. Bescansin, J. Phys. B. 25, L505 (1992).
- [17]- M.-T. Lee, S.E. Michelin, L.M. Bescansin, G.D. Meneses, and L.E. Machado, J. Phys. B. 28, L477 (1993).
- [18]- M. Bouamoud, "**Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif**" Thèse de doctorat d'état es-sciences, Université de Bordeaux-I (1988), Texte en français.
- [19]- R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 515-522 (1989).
- [20]- B. Lasri, "**Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation**", Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen 28 Juin (1998).

- [21]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*.
Volume 20, November 2004, p. 12 -17.
- [22]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, *Nuclear Instruments and Methods in
Physics Research B*, 251,pp66–72 (2006).
- [22]- C. J. Joachain “**Quantum Collision Theory**” (New York: North-Holland) pp 225-42
(1979).
- [23]- E. Guerjuoy, David S. Saxon, *Phy. Rev.* 94, 2 (1954).

Chapitre II

Amplitude de transition Schwinger pour l'excitation

II-1. Introduction

La compréhension des mécanismes de collisions atomiques par impact d'ions constitue l'intérêt majeur des chercheurs pour la mise à l'épreuve des méthodes théoriques et des modèles conçus pour étudier et tester ces processus de collisions. Ceci exigera une théorie fiable décrivant convenablement l'interaction des noyaux avec les électrons via la force Coulombienne à cause de sa longue portée.

Même pour les cas les plus simples, ce problème de collision ne peut pas être complètement résolu, c'est pour cette raison que la théorie des collisions s'est concentrée sur le développement des techniques, des méthodes et des approximations afin de décrire et d'expliquer avec plus d'exactitude et d'une manière plus réaliste ces divers processus de collisions.

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

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

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

Dans le formalisme du paramètre d'impact spécialement adapté à l'excitation directe, le calcul de l'amplitude de transition variationnelle a été décrit précédemment par M. Bouamoud (1988) [4], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [5], B. Lasri (1998) [6] et B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [7,8]. Ainsi, notre objectif primordial dans cette partie, est d'appliquer le principe variationnel de Schwinger à l'excitation d'un système hydrogénoïde par impact d'ions aux vitesses intermédiaires.

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

La méthode 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 de masse M_P et de charge Z_P et une cible de masse M_T et de charge Z_T .

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

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

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

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

où :

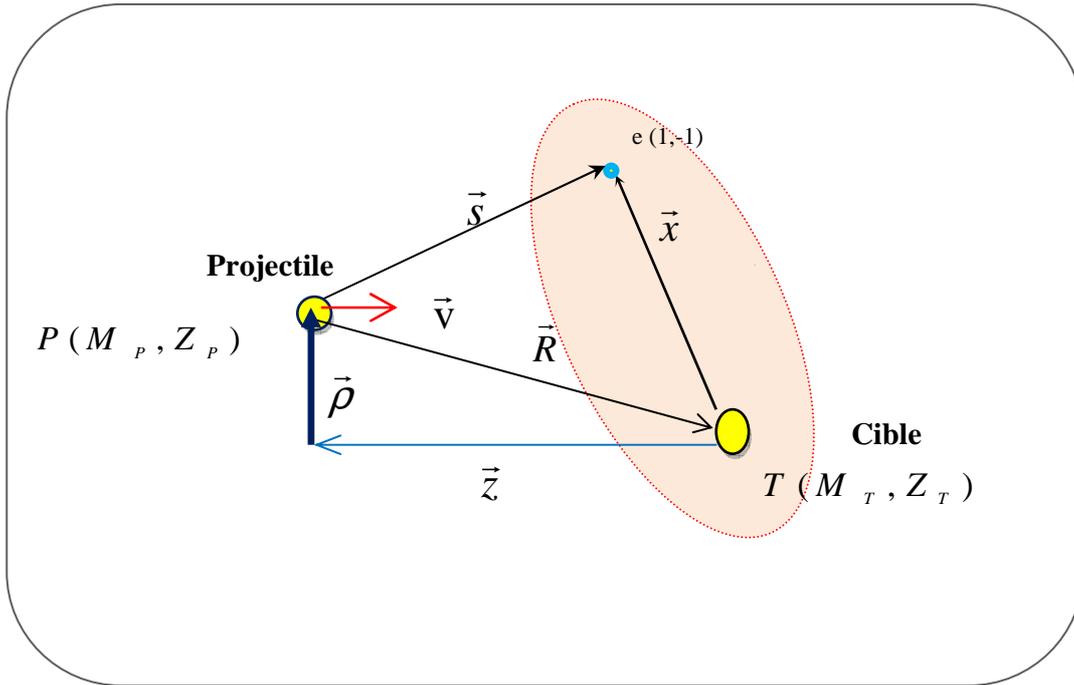
\vec{R} est la distance internucléaire.

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

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

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

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



Avec

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

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

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

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

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

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

et

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

où μ représente la masse réduite donnée par :

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

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

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

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

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

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 [9] puis en 1979, D. Z. Belkic, R. Gayet et A. Salin [10] ont montré que les sections efficaces totales sont indépendantes du potentiel inter-agrégat V_{int} donné par l'équation (II.6). 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.

Ceci nous conduit à négliger l'influence du potentiel inter-agrégat lors du calcul de l'amplitude de transition, et définir ainsi l'interaction responsable de l'excitation comme étant :

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

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

Dans une collision sans réarrangement, et selon le formalisme du paramètre d'impact, les états de diffusion $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $|\psi_\beta^-(z)\rangle$, vecteurs propres de l'hamiltonien total du système, satisfaisant respectivement aux conditions d'onde sortante et entrante sont définis grâce aux équations de Lippmann-Schwinger eiconales [8]:

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

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

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

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

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

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

Il faut signaler que les notations $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$, $|\psi_\beta^-(z)\rangle$, $|\alpha(z)\rangle$ et $|\beta(z)\rangle$ signifient que les états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $|\psi_\beta^-\rangle$ ainsi que $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ ne dépendent pas seulement des coordonnées électroniques \vec{x} mais aussi de la composante z de \vec{R} .

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

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

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

En prenant un espace de configuration, où l'origine des coordonnées est sur le noyau de la cible nous obtenons :

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

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

où ε_α et ε_β désignent respectivement les énergies propres des états φ_α et φ_β . \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_C^\pm eiconal associée à l'hamiltonien H_C (Appendice I). $G_T^+(z-z')$ 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 peut montrer directement et d'une manière générale que l'on a :

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

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

et qui donne pour $|\alpha(z)\rangle$:

$$G_T^+(z-z') |\alpha(z')\rangle = \begin{cases} -\frac{i}{v} |\alpha(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{II.15a})$$

de même pour $|\beta(z)\rangle$ on trouve :

$$G_T^+(z-z') |\beta(z')\rangle = \begin{cases} -\frac{i}{v} |\beta(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{II.15b})$$

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

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

Soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z d [\beta(z) | \psi_{\alpha}^{+}(z)] \quad (\text{II.17a})$$

ou

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z \frac{dz}{dz} d [\beta(z) | \psi_{\alpha}^{+}(z)] \quad (\text{II.17b})$$

A partir des équation (II.9a,b), (II.10), et remplaçant $\nu(z)$ par l'état initial et final, on trouve :

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

et

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

et par la suite, l'amplitude de transition se met sous la forme:

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

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

A partir des équations de Lippman-Schwinger (II.1a,b) et de l'expression (II.16) de l'amplitude de transition $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, cette dernière est écrite sous d'autres formes:

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

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

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

En remplaçant $|\alpha(z)\rangle$ dans (II.20b) par la forme donnée par l'équation de Lippman-Schwinger (II.8a), on aura:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[\psi_{\beta}^{-}(z) | V | \psi_{\alpha}^{+}(z) \right] + \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left[\psi_{\beta}^{-}(z) | V | \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^{+}(z-z') V(z') \psi_{\alpha}^{+}(z') \right] \quad (\text{II.21})$$

Et par la suite, en utilisant les relations (II.20a,b) et (II.21) il en résulte d'une façon complètement analogue à l'établissement de la forme variationnelle quantique (II.8) :

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

finalemt, et si on adopte la notation $(|)$ qui indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques ainsi que la coordonnée Z de \vec{R} c.a.d

$(k | \Theta | k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz [k | \Theta | k']$ où Θ dénote un opérateur, et pour des cas où $\alpha \neq \beta$, les expressions (II.20a,-c) et (II.22) peuvent être écrites sous une forme condensée :

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

$$= -\frac{i}{v} (\psi_{\beta}^{-} | V | \alpha) \quad (\text{II.23b})$$

$$= -\frac{i}{v} (\psi_{\beta}^{-} | V - V G_T^{+} V | \psi_{\alpha}^{+}) \quad (\text{II.23c})$$

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

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) (\beta | V | \psi_{\alpha}^{+}) \left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_{\beta}^{-} | V | \alpha)}{\left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_{\beta}^{-} | V - V G_T^{+} V | \psi_{\alpha}^{+})} \quad (\text{II.24})$$

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

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \frac{(\beta | V | \tilde{\psi}_{\alpha}^{+}) (\tilde{\psi}_{\beta}^{-} | V | \alpha)}{(\tilde{\psi}_{\beta}^{-} | V - V G_T^{+} V | \tilde{\psi}_{\alpha}^{+})} \quad (\text{II.25})$$

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

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

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

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

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

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

Remarque :

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

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

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

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

II-3. De l'amplitude de transition eikonale à la section efficace totale d'excitation:

Dans cette partie, nous allons déterminer les formes simplifiées de l'amplitude de transition et de la section efficace totale pour une excitation d'un atome par impact d'un proton ou d'un ion nu, à l'aide de l'amplitude variationnelle obtenue dans le formalisme du paramètre d'impact.

II-3.1. Amplitude de transition eikonale:

En effet l'amplitude de transition quantique correspondant au processus $\alpha \rightarrow \beta$ est donnée par :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V | \psi_{\alpha}^+ \rangle \quad (\text{II.28})$$

Au premier ordre en $\frac{1}{\mu}$ où μ représente la masse réduite du système en collision, la fonction d'onde de diffusion s'écrit [11][12] :

$$\psi_{\alpha}^+(\vec{R}, \vec{x}) \approx e^{i\vec{k}_{\alpha} \cdot \vec{R}} \psi_{\alpha}^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{II.29})$$

où ψ_{α}^{+E} est la fonction d'onde eikonale.

Par conséquent, on obtient l'amplitude de transition quantique sous sa forme eikonale, soit :

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

Où \vec{q} représente le transfert d'impulsion qui peut s'écrire grâce à ses deux composantes longitudinale et transverse par rapport à la vitesse initiale \vec{v} , soit:

$$\vec{q} = \vec{k}_{\alpha} - \vec{k}_{\beta} \quad (\text{II.31a})$$

$$\vec{q} = q_{\parallel} \vec{v} + \vec{\eta} \quad (\text{II.31b})$$

et $\vec{\eta}$ est le transfert d'impulsion transverse tel que $\vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0$.

Dans le repère du centre de masse, la conservation d'énergie s'écrit :

$$\frac{k_\alpha^2}{2\mu} + \varepsilon_\alpha = \frac{k_\beta^2}{2\mu} + \varepsilon_\beta \quad (\text{II.32})$$

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

On peut démontrer que pour des valeurs de $\mu \gg 1$, le transfert d'impulsion longitudinal prend la forme suivante :

$$q_v = \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{v} + O\left(\frac{1}{\mu}\right) \quad (\text{II.33})$$

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

$$\vec{q} \cdot \vec{R} \approx \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{v} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad (\text{II.34})$$

Maintenant, en rapportant cette expression approchée de $\vec{q} \cdot \vec{R}$ dans l'amplitude de transition donnée par la relation (II.30), on obtient la forme suivante :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} (\beta | V | \psi_\alpha^{+E}) \quad (\text{II.35})$$

où les vecteurs propres $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ vérifient l'expression :

$$\langle \vec{x}, z | k \rangle = e^{-i\frac{\varepsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \quad (\text{II.36})$$

avec ($k = \alpha, \beta$) et la notation ($| | |$) indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques et sur la composante z de \vec{R} .

Grâce à la notation : $(k | \Theta | k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz [k | \Theta | k']$ où Θ dénote un opérateur, et pour des cas où $\alpha \neq \beta$, l'expression (II.20a) devient alors :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} (\beta | V | \psi_{\alpha}^+) \quad (\text{II.37})$$

A l'aide de l'expression (II.21a) et la forme (II.36), l'amplitude de transition dans l'approximation eikonale devient [9] :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = iv \int d^2 \vec{\rho} e^{i\vec{\eta} \cdot \vec{\rho}} \rho^{2i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad (\text{II.38})$$

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-3.2. Sections efficaces eikonales :

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

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_{\alpha}}{k_{\beta}} \left| T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) \right|^2 \quad (\text{II.39})$$

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

Dans le cas où l'énergie incidente est très supérieure à la différence d'énergie $(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta})$ entre les états de la cible $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$, et dans le cas d'un faible transfert d'impulsion longitudinal $(\frac{k_{\alpha}}{k_{\beta}} \approx 1)$ l'expression (II.39) de la section efficace différentielle devient, à partir de la relation (II.32):

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

Et par conséquent, la section efficace totale sera :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\beta \int_0^\pi \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{II.41})$$

En différentiant \vec{q}^2 calculé à partir des expressions (II.31a,b), et en se basant sur un cas de faible transfert d'impulsion $\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$, nous pouvons écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \quad (\text{II.42})$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\rho_\eta \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi v} \right|^2 \quad (\text{II.43})$$

Maintenant, en remplaçant $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ par son expression (II.38), et en appliquant la transformée de Fourier à deux dimensions on obtient :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2 \rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad (\text{II.45})$$

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

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

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

On avait souligné précédemment 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.26) quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-espace vectoriel de dimension N.

Remarque :

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

Références

- [1]-R. Gayet et J. Hanssen *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 25 825-37 (1992).
- [2]- R. Gayet and J. Hanssen *Nucl. Instrum, Metlt. Phys. Res. B* 86 52-61 (1994).
- [3]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, *Phys. Rev. Lett.* 54 (1985) 2007.
- [4]- M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I, (1988),
Texte en francais.
- [5]- R. Gayet et M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 42
(1989) 515-522.
- [6]- B. Lasri, Thèse de Doctorat, Institut de Physique, Université de Tlemcen, (2007), Texte
en francais.
- [7]- B. Lasri , M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*. Volume
20, Novembre 2004, p. 12 -17.
- [8]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, *Nuclear Instruments and Methods in Physics
Research B*, 251,pp66–72 (2006).
- [9]- R. k. Janev et A. Salin, *Ann. Phys. N.Y* 73 (1972) 136.
- [10]- DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, *Phys. Report* 56 (1979) 279.
- [11]- R. McCaroll et A. Salin, *C.R. Acad. Sc. Paris* 263 (1966) 329.
- [12]- R. McCaroll et A.Salin, *J. Phys. B* 1 (1968) 163.

Chapitre III

Evaluation de l'amplitude de transition variationnelle approchée

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

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

Les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont des éléments de la base $\{|v\rangle\}$ qui sont solutions de l'équation de Schrödinger eikonale avec l'Hamiltonien H_T de la cible. Rappelons que la notation $(| |)$ signifie que l'intégration est effectuée sur la coordonnée z ainsi sur les coordonnées électroniques.

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

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

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

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

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

où :

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

ε_i et ε_j sont respectivement les énergies associées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$ et v la vitesse d'impact. On peut démontrer que $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ peut s'écrire comme suit [1,2]:

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

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

Certaines propriétés de symétrie des éléments $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ ont été démontré, il en est de même pour les éléments $(i | V | j)$ et $(i | VG_T^+ V | j)$, qui vont nous permettre d'une part de restreindre l'intervalle d'intégration sur z à des valeurs de z positives, et d'autre part, de réduire considérablement le nombre d'éléments à calculer.

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

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

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

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

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

Posons :

$$d_{ij} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v} \quad (\text{III-6})$$

il en résulte :

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

définissons la fonction $G_{ij}(x, y)$ comme :

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

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

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

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

où $G_{ij}^*(x, y)$ est la fonction conjuguée de $G_{ij}(x, y)$. Par conséquent, l'expression

(III-7) devient:

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

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

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

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

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

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

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

Nous avons alors :

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

Où

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

Est calculée numériquement et

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

Est déterminée analytiquement [2].

III-2. Éléments de matrice de Born-II:

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

Par ailleurs, La difficulté essentielle du formalisme de Schwinger consiste en l'évaluation des éléments de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$, nommés éléments de type Born-II.

Une mauvaise représentation de l'opérateur G_T^+ entraîne une erreur dans le calcul de cet élément qui modifie considérablement l'amplitude de transition et par conséquent les prédictions physiques.

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

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

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

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

En substituant l'expression de l'opérateur $G_T^+(z, z')$ (III- 15), en introduisant les relations de fermeture pour les spectres discrets ainsi que du continuum dans l'élément de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$, on obtient alors :

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

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

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

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

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

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

- $\tilde{z}_{iv} > \tilde{z}_{vj}$: dans ce cas, il est avantageux d'utiliser la forme (III-17a) pour calculer les éléments de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$. En effet l'intégration sur z' étant analytique au-delà de \tilde{z}_{vj} . L'intégration double se réduit alors à une intégrale simple dès que $z > \tilde{z}_{vj}$.
- Dans ce cas, il serait intéressant d'utiliser la forme (III-17b). Nous remarquons, en utilisant les relations de symétrie de $W_{ij}(z)$ (III-5a,d) et celles des éléments $(i|V G_T^+ V|j)$, qu'on peut toujours revenir vers la forme (III-17a).

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

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

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

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

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

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

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

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

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

III-2.1 Contribution de la totalité du spectre discret de la cible :

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

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

Où ν , l désignent respectivement le nombre quantique principal et le nombre quantique azimutal. Les contributions d'état $|\nu\rangle$ sont au calcul de $W_{\nu j}(z)$. Elles viennent

des valeurs de x où le chevauchement entre $\varphi_v(\bar{x})$ et $\varphi_j(\bar{x})$ est considérable (voir l'équation (III-3)). De-là, quand ν augmente, le domaine des contributions est localisé autour du rayon de l'orbital j . Pour $x \ll \nu^2 / Z_T$, l'énergie $E = -Z_T^2 / 2\nu^2$ est négligeable comparant par Z_T / x et $1/x^2$. La solution de l'équation (III-22) est donc :

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

J_{2l+1} désigne la fonction de Bessel régulière d'ordre $2l+1$. Seul le facteur de normalisation dépend de ν dans l'expression de $R_{\nu l}(x)$ (III-23). Donc, pour des valeurs de ν grandes et l donnée, il doit y avoir une valeur ν_0 tel que l'on peut écrire pour $\nu \geq \nu_0$

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

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

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

$$H_{ij}^{(\nu, l)} = \sum_{m=-l}^{+l} H_{ij}^{(\nu, l, m)} \quad (\text{III-25})$$

où ν, l et m sont les nombre quantiques de la fonction d'état $\varphi_\nu(\bar{x})$ et la fonction $H_{ij}^{(\nu, l, m)}$ est défini par l'équation (III-18). De ces dernières équations (III-24a,b) et (III-25), on aura pour $\nu \geq \nu_0$:

$$H_{ij}^{(\nu, l)} \approx \left(\frac{\nu_0}{\nu}\right)^3 H_{ij}^{(\nu_0, l)} \quad (\text{III-26})$$

Alors, la sommation sur les états du spectre discret pour l donnée, est :

$$\sum_{\nu=l+1}^{+\infty} H_{ij}^{(\nu, l)} = \sum_{\nu=l+1}^{\nu_0} H_{ij}^{(\nu, l)} + \nu_0^3 H_{ij}^{(\nu_0, l)} \sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} \frac{1}{\nu^3} \quad (\text{III-27})$$

On a :

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

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

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

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

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

III-2.2 Contribution des états du continuum de la cible :

Dans l'évaluation de $\left(i \left| V G_T^+ V \right| j \right)$, éléments de Born-II, donnée par l'équation (III-29), on doit calculer le second terme entre parenthèse (III-29) qui ne pourrait pas être négligeable [4]. Il faudrait déterminer avec précision la région du continuum, située au-dessus du seuil d'ionisation qui contribue effectivement. La contribution du continuum près du seuil d'ionisation pourrait être évaluée par une extension du calcul analytique du premier terme de (III-29), en remplaçant v par Z_T / ik .

Cependant, cette procédure, qui fournit le comportement de H_{ij}^k juste au-dessus du seuil d'ionisation, n'est pas faite pour ($k \gg v$) où la contribution du continuum devient négligeable.

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

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

où les fonctions d'ondes radiales $R_{vl}(x)$, $R_{kl}(x)$ sont données respectivement par :

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

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

Bien qu'on s'attende à de petites contributions du spectre de continuum, il n'y a aucune indication claire à ce propos. Pour arriver à une meilleure compréhension de ce que ces contributions pourraient être, on tiendra d'abord compte d'un intervalle du continuum aux alentours du seuil d'ionisation.

Maintenant, la contribution des états du continuum aux éléments de Born-II $(i|V G_T^+ V|j)$ sera évaluée dans un intervalle $[0, k_0]$ au-dessus du seuil d'ionisation où le prolongement du calcul analytique est plus significatif. La valeur de k_0 est reliée directement à la valeur de v_0 par la relation : $v_0 = Z_T / ik_0$.

Cette valeur (v_0) est déterminée automatiquement par le code informatique qui vérifie que, à une précision donnée, la loi en v^{-3} (équation III-29) est valable pour $v \geq v_0$. La valeur de k_0 correspond à une situation similaire. En fait, au-delà de k_0 , la contribution du continuum trouvée est moins significative que celle dans l'intervalle $[0, k_0]$.

Par la suite, la somme sur le continuum près du seuil d'ionisation peut être déduite à partir de la somme sur les états de Rydberg les plus élevées. Cette dernière peut être écrite comme :

$$\sum_{v=v_0}^{+\infty} H_{ij}^{(v,l,m)} \approx \sum_{v=v_0}^{+\infty} H_{ij}^{(v_0,l,m)} \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 \times \Delta v \approx H_{ij}^{(v_0,l,m)} \int_{v_0}^{+\infty} \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 dv \quad (\text{III-32})$$

En utilisant $v = Z_T / ik$, on obtient alors :

$$H_{ij}^{(v_0,l,m)} \int_{v_0}^{+\infty} \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 dv \rightarrow H_{ij}^{(Z_T/ik_0,l,m)} \int_{k_0}^0 \left(\frac{k}{k_0} \right)^3 \left(-\frac{Z_T}{i} \frac{dk}{k^2} \right) \quad (\text{III-33})$$

Ainsi, la somme le long du domaine du continuum, où le prolongement analytique demeure toujours valable, peut être rapprochée par :

$$\int_0^{k_0} dk H_{ij}^{(k,l,m)} \approx -\frac{Z_T}{i} \frac{H_{ij}^{(Z_T/ik_0,l,m)}}{k_0^3} \int_0^{k_0} k dk = iZ_T \frac{H_{ij}^{(Z_T/ik_0,l,m)}}{2k_0} \quad (\text{III-34})$$

En utilisant le développement de la fonction d'onde radiale d'état du continuum hydrogénoïde en puissance de $1/\nu$, on aboutit à :

$$H_{ij}^{(v,l,m)} = \frac{1}{\nu^3} \text{Exp} \left\{ -\frac{l(l+1)(2l+1)}{6\nu^2} \right\} \left[A + \frac{B}{\nu^2} + \frac{C}{\nu^4} + \dots \right] \quad (\text{III-35})$$

où A, B, C, \dots sont des constantes ne dépendant que de $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

pour des valeurs de $\nu \gg l$, le facteur exponentiel tend vers 1. On ne retient ici que le premier terme de développement :

$$H_{ij}^{(v,l,m)} \approx \frac{A}{\nu^3} \quad (\text{III-36})$$

en substituant l'expression de $H_{ij}^{(v,l,m)}$ (III-36) dans (III-33), on obtient alors :

$$\int_0^{k_0} dk H_{ij}^{(k,l,m)} \approx \frac{A}{Z_T^2} \frac{k_0^2}{2} \quad (\text{III-37})$$

III-3. Méthode d'intégration:

Dans le calcul des intégrales numériques, pour évaluer les sections efficaces totales de diffusion, nous avons utilisé la méthode d'intégration de Simpson. Cette méthode repose sur le principe de l'interpolation de la fonction f , à intégrer, entre a et b , bornes d'intégrale, par une fonction polynôme de degré 2 sur les valeurs a , b et $(a+b)/2$. Ceci nécessite que l'intervalle d'intégration soit divisé en sous-intervalles égaux dont le nombre doit être paire. Cette méthode a l'avantage, quand la précision n'est pas suffisante, de doubler le nombre d'intervalles ce qui permet d'utiliser les points déjà calculés.

en utilisant une subdivision de pas $h = (b-a)/n$, où n est un entier >0 , la formule générale de Simpson, pour une subdivision en n intervalles soit :

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{6} \left(\sum_{k=1}^n f \left(a_{k-1} + 4f \left(\frac{a_{k-1} + a_k}{2} \right) + f(a_k) \right) \right) \quad (\text{III-38})$$

où $a_k = a + kh$.

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

Dans le calcul des sections efficaces totales, données par l'expression (III-34), nous avons calculé la probabilité de transition $(\alpha \rightarrow \beta) \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2$ pour différentes valeurs du paramètre d'impact, et nous avons remarqué que sa contribution dans les sections efficaces totales se situe seulement dans un intervalle de « petits » paramètres d'impact. Ceci nous a permis, dans l'évaluation de l'intégrale sur $[0, +\infty[$, de nous limiter à l'intervalle d'intégration $[0, \rho_{\max}]$. L'équation (III-34) se réduit donc à :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{\rho_{\max}} d\rho \rho \left| a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \right|^2 \quad (\text{III-39})$$

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

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

III-4. Lois d'échelle:

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

$$V = Z_p \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \right) \quad (\text{III-40})$$

Quand on écrit explicitement les éléments de matrice Born-I et Born-II conformément aux expressions (III-2) et (III-17a, b), nous remarquons qu'il dépend des éléments donnés par l'expression (III-3) dont les fonctions d'onde $\varphi_i(\vec{x})$ et $\varphi_j(\vec{x})$ sont celles d'une cible hydrogénoïde de charge Z_T .

Définissons $B_{ij}^{[K]}(Z_p, Z_T, v, \rho)$, comme suit :

$$B_{ij}^{[K]}(Z_p, Z_T, v, \rho) = -\frac{i}{v} \left(i \left| V \prod_{i=0}^{K-1} (G_T^+ V) \right| j \right) \quad (\text{III-41})$$

III-4.1. Lois d'échelle sur la charge Z_p :

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

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha) \quad (\text{III-42})$$

Où

$$D_{ji} = \left(j | V - VG_T^+ V | i \right) \quad (\text{III-43})$$

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

$(|i\rangle, |j\rangle)$, les lois d'itération suivantes peuvent être établis pour l'élément de matrice de Born d'ordre K (Born- K) [2,4,6].:

$$B_{ij}^{[K]}(Z_p, Z_T, v, \vec{\rho}) = Z_p^K B_{ij}^{[K]}(1, Z_T, v, \vec{\rho}) \quad (\text{III-44})$$

On peut déduire les relations de proportionnalité suivantes :

$$(\beta | V | i) \propto Z_p \quad \text{et} \quad (j | V | \alpha) \propto Z_p \quad (\text{III-45})$$

$$(j | VG_T^+ V | i) \propto Z_p^2 \quad (\text{III-46})$$

Quand Z_p est assez grand, la matrice D est dominante par le second terme de Born $(j | VG_T^+ V | i)$.

En effet, D^{-1} devient proportionnel à Z_p^{-2} :

$$\lim_{Z_p \rightarrow +\infty} (D^{-1})_{ij} \propto Z_p^{-2} \quad (\text{III-47})$$

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

$$\lim_{Z_p \rightarrow +\infty} \tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = C^{ste} \quad (\text{III-48})$$

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

$$\lim_{Z_p \rightarrow +\infty} T_{\beta\alpha} = C^{ste} \quad (\text{III-49})$$

Ce comportement de l'amplitude de transition est connu sous le nom « phénomène de saturation » de la section efficace d'excitation quand la charge du projectile augmente. Il a été indiqué, pour la première fois par B. Brendlé et R. Gayet en 1985[5].

Les lois d'échelle (III-40, 41) sur Z_p représentent un avantage important du principe variationnel de Schwinger. Elles permettent dans l'étude de l'excitation d'une cible par des projectiles de charges quelconques, de déduire tous les résultats à partir du calcul des éléments de matrice pour une charge Z_p donnée.

III-4.2. Lois d'échelle sur la charge Z_T :

Pour une collision d'un projectile de charge $Z_p=1$ avec une cible hydrogénoïde de charge Z_T , on peut écrire :

$$W_{ij}(Z_T, \vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^{[Z_T]}(\vec{x}) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \right) \varphi_j^{[Z_T]}(\vec{x}) \quad (\text{III-50})$$

Où les fonctions $\varphi_j^{Z_T}(\vec{x})$ sont les fonctions hydrogénoïdes données d'une façon générale par :

$$\varphi_k(\vec{x}) \equiv \varphi_{n_k l_k m_k}(\vec{x}) = R_{n_k l_k}(x) Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) \quad (\text{III-51a})$$

La fonction radiale $R_{n_k l_k}(x)$ peut être exprimée par le polynôme de Laguerre comme suit :

$$R_{n_k l_k}(x) = e^{-\frac{Z_T x}{n_k}} \sum_{\mu=0}^{n_k - l_k - 1} B_{k\mu} x^{l_k + \mu} \quad (\text{III-51b})$$

Avec

$$B_{k\mu} \equiv B_{n_k l_k \mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(n_k + l_k)!(n_k - l_k - 1)!]^{1/2} \frac{(2Z_T)^{l_k + \mu + 3/2}}{n_k^{l_k + \mu + 2}} \frac{(-1)^\mu}{(n_k - l_k - 1 - \mu)!(2l_k + 1 + \mu)!\mu!} \quad (\text{III-51c})$$

Faisons le changement de variable suivant:

$$\vec{y} = Z_T \vec{x} \quad (\text{III-52})$$

Les éléments $W_{ij}(Z_T, \vec{R})$ s'expriment :

$$W_{ij}(Z_T, \vec{R}) = Z_T W_{ij}(1, Z_T \vec{R}) \quad (\text{III-53})$$

où $W_{ij}(1, Z_T \vec{R})$ est donnée par:

$$W_{ij}(1, Z_T \vec{R}) = \int d\vec{y} \phi_i^{[1]*}(\vec{y}) \left[\frac{1}{Z_T R} - \frac{1}{Z_T \vec{R} - \vec{y}} \right] \phi_j^{[1]}(\vec{y}) \quad (\text{III-54})$$

et $\phi_k^{[1]}(\vec{y})$ ($k=i, j$) représentent les fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène.

Le terme de Born-I qui a pour expression $-\frac{i}{v}(\beta|V|\alpha)$ devient alors:

$$B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, Z_T; v; \vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v} \right) Z_T \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i \frac{Z_T}{v} (\varepsilon_\beta^H - \varepsilon_\alpha^H) z} W_{\beta\alpha}(1, Z_T \vec{R}) \quad (\text{III-55})$$

où ε_β^H et ε_α^H désignent les énergies propres de l'atome d'hydrogène.

En utilisant les coordonnées réduites suivantes:

$$u = \frac{v}{Z_T} \quad (\text{III-56a})$$

$$\vec{\xi} = Z_T \vec{z} \quad (\text{III-56b})$$

$$\vec{\gamma} = Z_T \vec{\rho} \quad (\text{III-56c})$$

$$\vec{\mathfrak{R}} = Z_T \vec{R} = \vec{\gamma} + \vec{\xi} \quad (\text{III-56d})$$

on obtient :

$$B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, Z_T; v; \vec{\rho}) = \frac{1}{Z_T} B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, 1; u; \vec{\gamma}) \quad (\text{III-57})$$

Où

$$B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, 1; u; \vec{\gamma}) = -\frac{i}{u} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{i \frac{\varepsilon_\beta^H - \varepsilon_\alpha^H}{u} \xi} W_{\beta\alpha}(1, \vec{R}) \quad (\text{III-58})$$

Maintenant, à partir des expressions (III-17a), (III-17b) et de (III-43), on déduit que le terme de Born-II noté par $-\frac{i}{v}(\beta|V G_T^+ V|\alpha)$ sous la forme:

$$B_{\beta\alpha}^{[2]}(1, Z_T; v; \vec{\rho}) = \frac{1}{Z_T^2} B_{\beta\alpha}^{[2]}(1, 1; u; \vec{\gamma}) \quad (\text{III-59})$$

De façon analogue, on peut démontrer l'expression suivante :

$$B_{\beta\alpha}^{[k]}(1, Z_T; v; \vec{\rho}) = \frac{1}{Z_T^k} B_{\beta\alpha}^{[k]}(1, 1; u; \vec{\gamma}) \quad (\text{III-60})$$

En utilisant les deux formules (III-39) et (I-55) , on trouve :

$$B_{ij}^{[K]}(Z_P, Z_T, v, \vec{\rho}) = \left(\frac{Z_P}{Z_T}\right)^K B_{ij}^{[K]}\left(1, 1, \frac{v}{Z_T}, Z_T \vec{\rho}\right) \quad (\text{III-61})$$

Et par conséquent l'élément de matrice D_{ij} s'écrit:

$$D_{ij}(\vec{\rho}) = Z_P B_{ij}^{[1]}(1, Z_T; v; \rho) - Z_P^2 B_{ij}^{[2]}(1, Z_T; v; \rho) \quad (\text{III-62})$$

Comme conclusion à ce chapitre, on pourra dire donc que dans l'étude de l'excitation d'une cible hydrogénoïde de charge nucléaire Z_T par un projectile de charge Z_P , il suffira donc de réaliser les calculs des éléments de matrices Born-I et Born-II ($B_{ij}^{[1]}, B_{ij}^{[2]}$) pour une collision proton-atome d'hydrogène, avec la vitesse réduite $u = \frac{v}{Z_T}$ et le paramètre d'impact réduit $\gamma = Z_T \rho$.

Références

- [1] - M. Bouamoud, "Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif" Thèse de doctorat d'état es-sciences, Université de Bordeaux-I (1988).
- [2] - B. Lasri, Thèse de Doctorat, Institut de Physique, Université de Tlemcen, (2007), Texte en français
- [3] - B. H. Bransden, D P Dewangan and C J Noble, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 3563-3568 (1979).
- [4] - R. Gayet and M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **42** .515-522(1989).
- [5] - B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, *Phys. Rev. Lett.* **54**.2007(1985).
- [6] - B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **251**,pp66–72 (2006).

Chapitre IV

Excitation de l'ion Be^{3+} par impact de Protons aux énergies allant de 16 keV à 4 MeV.

Introduction.

La neutralisation des protons énergétiques ($Z_p=1$) possède une particularité très importante dans l'interprétation des expériences permettant la détermination de la fonction de distribution de l'énergie du proton (en MeV) dans les plasmas. En 1994 Korotkov et Gondhalekar[1] ont montré qu'un flux substantiel d'hydrogène neutre observé auparavant par Petrov et al en 1992 [2] et produit au centre du plasma est dû essentiellement à la neutralisation du proton énergétique ICRF en collision avec des ions hydrogènoïdes des impuretés principales, à savoir, Be^{3+} , C^5 et He^+ .

Les processus de capture, excitation et ionisation des ions hydrogènoïdes Be^{3+} (une des impuretés dans les plasmas Tokamak) par impact de protons aux énergies intermédiaires demeure un sujet de nombreux études théoriques et expérimentales durant ces dernières années, employant notamment des méthodes perturbatives et des approches quantiques. L'approche CDW (Continuum-Distorted-wave) et l'approche de Born (Boundary-corrected Born approximation) ont été révisées à diverses occasions par (Belkic et al (1979) [3]), Bransden et Mc Dowell(1992) [4], et Dewangan et Eicheler (1994) [5]). A haute énergie ces modèles avaient reproduit avec succès, dans de nombreux cas, les sections efficaces expérimentales disponibles. L'étude de la convergence de ces méthodes au sein de la théorie perturbative exige des développements et une extension à des ordres plus élevés ce qui demeure une tâche difficile.

Une nouvelle approche alternative a été mise au point utilisant une méthode basée sur une théorie semi classique nommée Close Coupling(CC) avec un développement sur une base d'orbitales atomiques (AO) où tous les ordres de la théorie de perturbation sont inclus, mais le problème principal est de construire une représentation adéquate du continuum.

En 1982 puis en 1987 Winter a calculé les sections efficaces de capture pour un processus de collisions de type $B^{Z_B^+} + H(1s)$, $Z_B=2-6$ en utilisant une base Sturmienne [6] [7].

Ermolaev et McDowell(1987) [8] ont utilisé une base d'orbitales de type Slater (STO) afin de calculer les sections efficaces de capture pour une charge $Z_B=3$, et une énergie $E \leq 3$ MeV.

Récemment et lors d'un calcul effectué par Winter et Alston(1992) [9], la gamme d'énergie a été étendue à 2 MeV dans un processus de capture pour l'ion He^+ et la convergence du calcul CC a été obtenue en se basant sur une série de 65 fonctions Sturmienne. Pour les ions hydrogènoïdes du Béryllium, la gamme d'énergie traitée par Winter était localisée entre $50 \leq E_p \leq 400$ keV qui inclue ainsi le maximum de capture.

À présent, au-delà du maximum, les sections efficaces sont estimées par le biais d'un calcul CDW1 de Mukherjee et Sil (1980) [10] et par des calculs de premier ordre nommés first-order Coulomb-Born (CB1) de Grozdanov et Kstistic (1988) [11]. Cependant, ces deux approximations donnent des sections efficaces qui diffèrent généralement l'une de l'autre par plus de 10 % d'incertitude imposée par les expériences (Jet).

Récemment, dans une gamme d'énergie plus prolongée comprise entre 0.1 MeV et 3 MeV, la section efficace de neutralisation et de l'ionisation du Béryllium par des protons a été obtenue par Ermolaev en (1994) [12] en utilisant la méthode Close Coupling à deux centres avec une base d'orbitales atomiques composée de 35 états(TCAO-35).

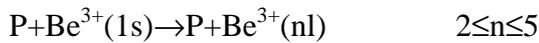
Ce n'est qu'en 1996 que les sections efficaces d'excitation et de l'ionisation du Be^{3+} ont été calculées en utilisant des développements à deux centres avec une base d'orbitales atomiques constituée de 55 états et de pseudo-états afin d'obtenir une meilleure compréhension des différences entre les traitements perturbatifs et ceux basés sur l'approche Close-Coupling [13].

Dès 1998 à nos jours, l'approche variationnelle de Schwinger développée par B. Lasri et al [14-16] apparaît comme étant un outil d'investigation très puissant qui prend le relais des traitements perturbatifs afin d'évaluer les sections efficaces totales d'excitation et d'étudier les collisions atomiques aux vitesses intermédiaires spécialement adaptées à l'excitation des ions hydrogénoïdes.

Dans le présent travail, cette méthode variationnelle fondée sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger a été testée et appliquée à l'excitation de l'ion Be^{3+} par impact de protons dans une gamme d'énergie allant de 16keV à 4 MeV. Afin de mettre en valeur nos résultats obtenus, ces derniers ont été comparés avec les seuls résultats théoriques disponibles de l'approche Close Coupling d'Ermolaev et al en (1996) [13] et qui s'avèrent généralement en très bon accord.

IV-1. Procédures théoriques :

Le processus étudié dans le cas ici présent est l'excitation directe de l'état initial de l'ion Beryllium $Be^{3+}(1s)$ par impact de protons dans une gamme d'énergies intermédiaires ($30 \leq E(\text{keV}) \leq 4000$):



En 1996, les sections efficaces totales d'excitation directe, $1s \rightarrow n=2,3$ ont été calculées par Ermolaev et al [13] en utilisant un développement à deux centres composé de 43 états (TCAO-43), 47 états (TCAO-47), ensuite 55 états (TCAO-55). Comme c'était prévu, le couplage avec la voie de capture est beaucoup plus faible pour l'excitation qu'avec l'ionisation. De même, celui entre l'excitation et l'ionisation n'est pas aussi fort et les sections efficaces totales d'excitation TCAO-43 et TCAO-55 convergent vers la même limite pour des grandes valeurs de E.

Dans notre approche variationnelle, le modèle adopté pour examiner le processus d'excitation des ions Be^{3+} par impact de protons est basé sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger. Plus de détails de cette approche sont présentés dans les chapitres précédents et déjà publiés (Lasri (1998) [14], Lasri et al (2004)[15]). Il faut dire que dans cette étude nous ne sommes pas restreints lors de notre développement à 5 états de base ($1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}$) noté Schw55 mais nous avons élargi cette base de 5 états à 10 états (Schw1010) puis à 14 états $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$ noté Schw1414 afin d'aboutir à une représentation plus judicieuse du

propagateur. Cependant, ce propagateur a été développé sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret et du continuum de la cible.

	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
1s	X	X	X	X	ζ	X	X	X	ζ	X	X	ζ	X	ζ
2s		X	X	X	ζ	X	X	X	ζ	X	X	ζ	X	ζ
2p ₀			X	X	ζ	X	X	X	ζ	X	X	ζ	X	ζ
2p ₁				X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2p ₋₁					ζ	ζ	ζ	ζ	ζ	ζ	ζ	ζ	ζ	ζ
3s						X	X	X	ζ	X	X	ζ	X	ζ
3p ₀							X	X	ζ	X	X	ζ	X	ζ
3p ₁								X	X	X	X	X	X	X
3p ₋₁									ζ	ζ	ζ	ζ	ζ	ζ
3d ₀										X	X	ζ	X	ζ
3d ₁											X	X	X	X
3d ₋₁												ζ	ζ	ζ
3d ₂													X	X
3d ₋₂														ζ

Les lois d'échelle ont joué un rôle très important dans la réduction du temps de calcul. Ainsi on peut dire, que pour étudier l'excitation d'une cible hydrogènoïdes de charge nucléaire Z_T par impact d'un projectile de charge Z_P , il suffit juste de réaliser les calculs de l'amplitude de transition $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ pour une collision proton-atome d'hydrogène, avec une vitesse réduite $u = \frac{v}{Z_T}$ et un paramètre d'impact réduit $\gamma = Z_T \rho$. Pour le cas ici présent ($P \rightarrow Be^{3+}$) $Z_P=1$ et $Z_T=4$, donc, il est déconseillé de refaire tous les calculs de nouveau pour chaque énergie, il suffit juste de reprendre les résultats concernant l'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons et les exploiter de nouveau mais avec une vitesse réduite $u = \frac{v}{4}$ et un paramètre d'impact réduit $\gamma = 4\rho$. Ainsi, pour une énergie de proton égale à 10 keV dans le cas d'une collision avec l'atome d'hydrogène va correspondre à une énergie de 160 keV pour le cas du (Be^{3+}); ce raisonnement sera valable pour chaque énergie appartenant à la gamme d'énergie considérée.

Les sections efficaces d'excitation des états nl et des niveaux n=2,3 déduites à partir de notre procédure théorique Schw-B, Schw55, Schw1010 et Schw1414 sont présentées

respectivement dans les tableaux (IV-1 à 7) ainsi que les figures (IV-1 à 7) comparées avec celle de Born-I, Born-II ainsi que ceux d'Ermolaev et al (1996) établis en utilisant la méthode Close-Coupling à deux centres avec un développement à 55 états d'Orbitales Atomiques, noté TCAO-55

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

- la première partie permet la détermination des éléments $(i | V | j)$ dit de type Born-I ainsi que les éléments de second ordre $((i | VG_T^+ V | j)$ dit de type Born-II pour différents états $|i\rangle$ et $|j\rangle$. Ces éléments vont nous servir par la suite à la détermination des éléments D_{ji} de la matrice D à inverser.
- La seconde partie permet la détermination de la matrice D à inverser, et d'obtenir les valeurs de l'amplitude de transition variationnelle $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ donnée par la relation (III-20), et par conséquent l'obtention des sections efficaces totales d'excitation après intégration sur le paramètre d'impact ρ .

IV-2. Résultats.

Tableau IV-1 : Sections efficaces d'excitation de l'état (1s, 2s) (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons

E (keV)	Ermolaev et al TCAO-55[13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1414
16	—	0,346028	2,74827	0,132817	0,0791105
30	0,364	—	—	—	—
32	—	1,06491	4,50391	1,2833	0,581424
40	0,962	—	—	—	—
50	1,53	—	—	—	—
64	—	1,83446	5,28477	4,26526	1,65825
75	2,76	—	—	—	—
96	—	1,99832	4,8486	4,73572	2,15881
100	3,34	—	—	—	—
150	3,18	—	—	—	—
160	—	1,84569	3,70852	3,73906	2,14294
200	2,7	—	—	—	—
240	—	1,54894	2,7059	2,59549	1,82167
300	2	—	—	—	—
320	—	1,30877	2,08328	1,94007	1,53069
480	—	0,985821	1,40504	1,29647	1,13222
640	—	0,786795	1,04897	0,970315	0,887181
800	—	0,653603	0,833001	0,774397	0,726043
960	—	0,558611	0,6891	0,643981	0,613214
1280	—	0,432482	0,510448	0,481449	0,466692
1600	—	0,352678	0,4045	0,384308	0,37613
2240	—	0,257512	0,28519	0,27378	0,270625
2560	—	0,226881	0,248272	0,239144	0,237157
3200	—	0,183266	0,197318	0,191226	0,190246
4000	—	0,147753	0,156901	0,152833	0,152399

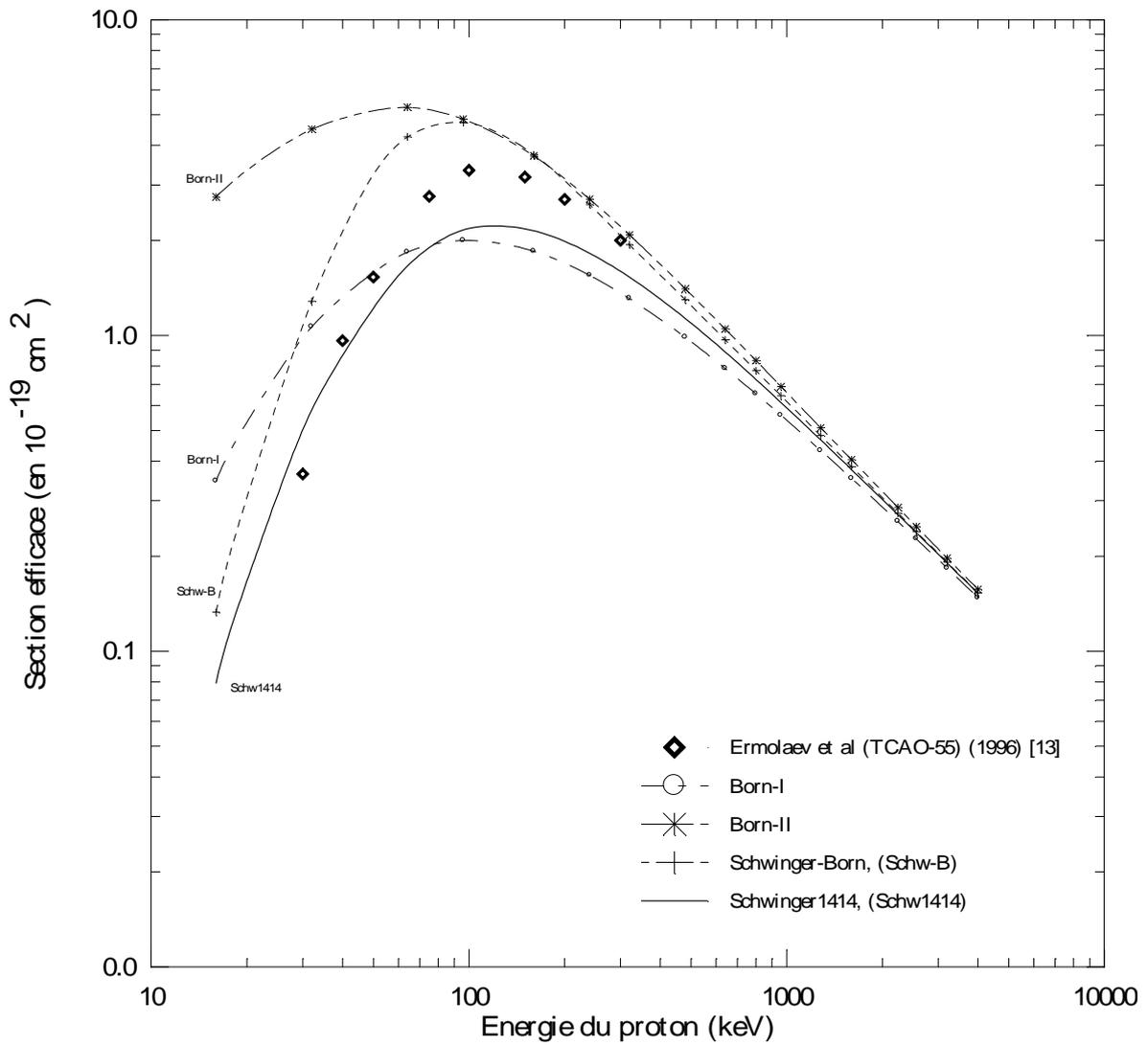


Figure IV-1. : Sections efficaces d'excitation de l'état (1s ,2s) (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons.

Tableau IV-2. : Sections efficaces d'excitation de l'état (1s, 2p) (en 10^{-19}cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons

E (keV)	Ermolaev et al TCAO-55 [13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1414
16	—	0,1701164	1,343725	0,01215309	0,07778362
30	0,094	—	—	—	—
32	—	0,976607	1,815326	0,1948188	0,1562234
40	0,267	—	—	—	—
50	0,603	—	—	—	—
64	—	3,000138	2,514048	1,312647	0,890496
75	1,85	—	—	—	—
96	—	4,463908	3,61034	2,644192	1,983638
100	3,06	—	—	—	—
150	4,66	—	—	—	—
160	—	5,91737	5,227314	4,539502	4,035838
200	5,47	—	—	—	—
240	—	6,4486	6,03906	5,55139	5,22187
300	5,96	—	—	—	—
320	—	6,46663	6,20598	5,84062	5,61729
480	—	6,08047	5,99615	5,77923	5,62474
640	—	5,60216	5,58664	5,44502	5,32989
800	—	5,16113	5,17486	5,07595	4,98708
960	—	4,77542	4,802	4,72944	4,65824
1280	—	4,15047	4,18418	4,14084	4,09235
1600	—	3,672	3,70478	3,67628	3,64117
2240	—	2,990406	3,017098	3,002338	2,98178
2560	—	2,738774	2,764951	2,753659	2,736514
3200	—	2,346735	2,365712	2,358561	2,347341
4000	—	1,99289	2,007588	2,00309	1,99543

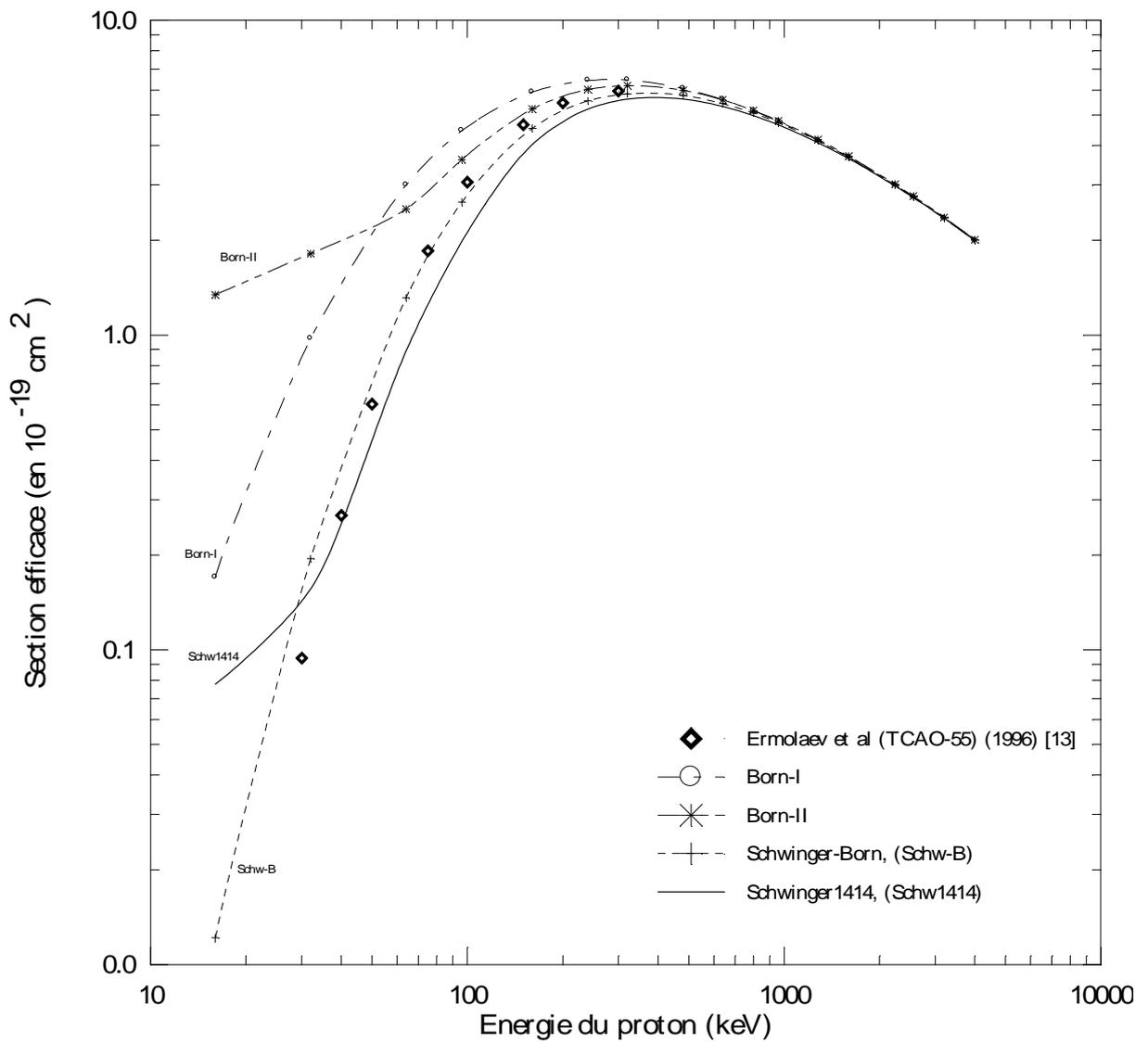


Figure IV-2. : Sections efficaces d'excitation de l'état $(1s, 2p)$ (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{3+} ($1s$) par impact de protons.

Tableau IV- 3 : Sections efficaces d'excitation au niveau $n=2$ (en $10^{-19}cm^2$) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons

E (keV)	Ermolaev et al TCAO-55 [13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1414
16	—	0,5161444	4,091995	0,1449701	0,1568941
30	0,458	—	—	—	—
32		2,041517	6,319236	1,478119	0,7376474
50	2,13	—	—	—	—
64	—	4,834598	7,798818	5,577907	2,548746
75	—	—	—	—	—
96	—	6,462228	8,45894	7,379912	4,142448
100	6,4	—	—	—	—
160	—	7,76306	8,935834	8,278562	6,178778
200	8,17	—	—	—	—
240	—	7,99754	8,74496	8,14688	7,04354
320	—	7,7754	8,28926	7,78069	7,14798
400	7,53	—	—	—	—
480		7,066291	7,40119	7,0757	6,75696
600	6,63	—	—	—	—
640	—	6,388955	6,63561	6,415335	6,217071
800	—	5,814733	6,007861	5,850347	5,713123
960	—	5,334031	5,4911	5,373421	5,271454
1000	5,31	—	—	—	—
1280	—	4,582952	4,694628	4,622289	4,559042
1600	—	4,024678	4,10928	4,060588	4,0173
2240	—	3,247918	3,302288	3,276118	3,252405
2560	—	2,965655	3,013223	2,992803	2,973671
3000	2,79	—	—	—	—
3200	—	2,530001	2,56303	2,549787	2,537587
4000	—	2,140643	2,164489	2,155923	2,147829

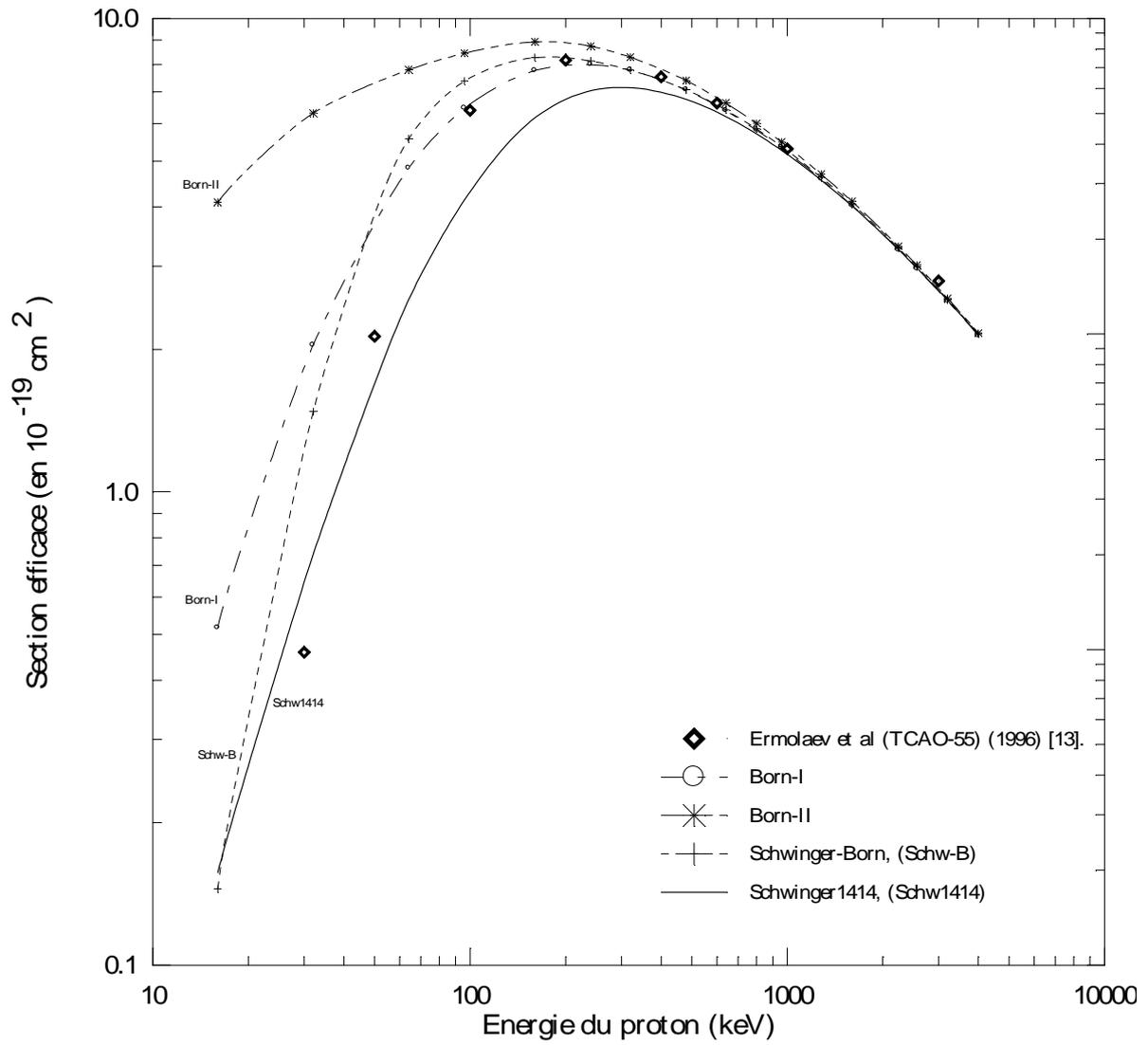


Figure IV-3. : Sections efficaces d'excitation du niveau $n=2$ (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons.

Tableau IV-4 : Sections efficaces d'excitation de l'état (1s, 3s) (en 10^{-19}cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons

E (keV)	Ermoalev et al TCAO-55 [13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1010	Schw1414
16	—	0,0348476	0,249259	0,00197171	0,0157116	0,0211907
30	0,0082	—	—	—	—	—
32	—	0,139536	0,208639	0,0214708	0,0908204	0,146226
40	0,052	—	—	—	—	—
50	0,14	—	—	—	—	—
64	—	0,298961	0,31257	0,100163	0,251465	0,301044
75	0,444	—	—	—	—	—
96	—	0,35494	0,396193	0,163479	0,35605	0,357574
100	0,654	—	—	—	—	—
150	0,704	—	—	—	—	—
160	—	0,350192	0,413086	0,213766	0,455482	0,432808
200	0,621	—	—	—	—	—
240	—	0,301891	0,359675	0,213271	0,472114	0,420796
300	0,455	—	—	—	—	—
320	—	0,257728	0,305484	0,196623	0,439927	0,382376
480	—	0,195551	0,229116	0,162875	0,346105	0,30789
640	—	0,156418	0,181091	0,136644	0,268166	0,246458
800	—	0,130041	0,148954	0,117061	0,213197	0,200604
960	—	0,111173	0,126158	0,102147	0,174498	0,16681
1280	—	0,0860766	0,0961765	0,0811686	0,125806	0,122298
1600	—	0,0701842	0,0774579	0,0671973	0,0972115	0,0953092
2240	—	0,0512302	0,0555458	0,0498873	0,0656745	0,0645825
2560	—	0,0451304	0,0483731	0,0439069	0,0565444	0,0557098
3200	—	0,036447	0,0388448	0,0358977	0,0430521	0,04317
4000	—	0,0293785	0,0310171	0,0290773	0,0332056	0,0339444

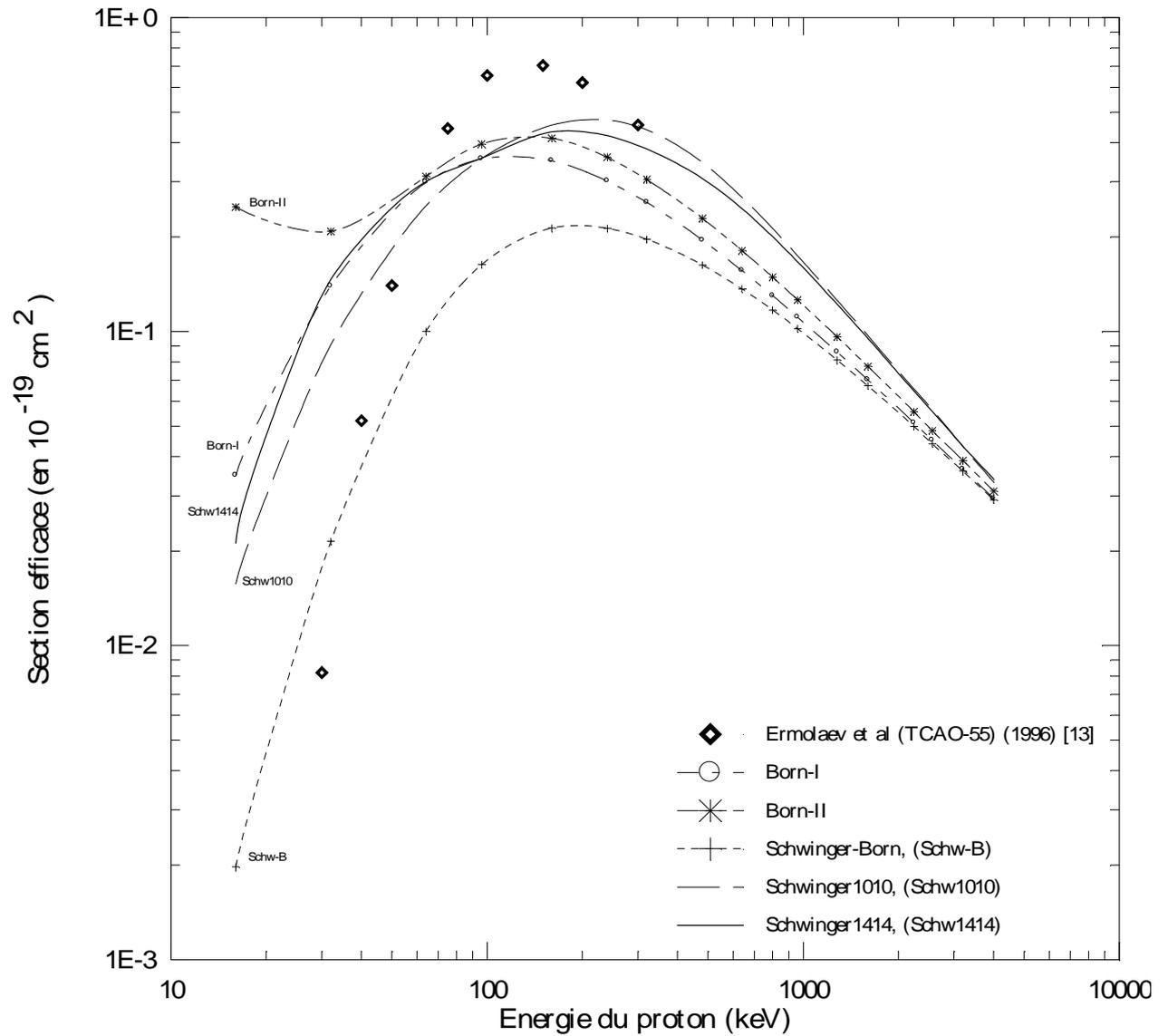


Figure IV-4 : Sections efficaces d'excitation de l'état $(1s, 3s)$ (en 10^{-19} cm^2)
De l'ion Be^{3+} ($1s$) par impact de protons.

Tableau IV-5 : Sections efficaces d'excitation de l'état (1s ,3p) (en 10^{-19}cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons

E (keV)	Ermoalev et al TCAO-55 [13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1010	Schw1414
16	—	0,01476782	0,09454674	0,00087592	0,01055542	0,02997328
30	0,0144	—	—	—	—	—
32	—	0,1118538	0,1812489	0,01476782	0,0842104	0,216197
40	0,033	—	—	—	—	—
50	0,054	—	—	—	—	—
64	—	0,4335392	0,484885	0,1839304	0,2969438	0,6629568
75	0,193	—	—	—	—	—
96	—	0,707598	0,8265012	0,4543352	0,4697868	0,880535
100	0,387	—	—	—	—	—
150	0,717	—	—	—	—	—
160	—	1,004534	1,234283	0,910457	0,677881	1,176245
200	0,905	—	—	—	—	—
240	—	1,123352	1,381158	1,174081	0,805502	1,210599
300	1,04	—	—	—	—	—
320	—	1,135472	1,381598	1,253341	0,868062	1,184641
480	—	1,070267	1,273195	1,211709	0,906015	1,110115
640	—	0,984581	1,148545	1,113431	0,889744	1,025557
800	—	0,905434	1,039564	1,016914	0,851307	0,947072
960	—	0,836574	0,948159	0,932246	0,806298	0,877803
1280	—	0,725955	0,806749	0,797479	0,718324	0,763083
1600	—	0,642069	0,703436	0,697242	0,643056	0,674036
2240	—	0,523603	0,562746	0,559306	0,529008	0,547175
2560	—	0,480095	0,51225	0,509356	0,484415	0,499503
3200	—	0,412459	0,435806	0,433935	0,417904	0,42818
4000	—	0,351462	0,368061	0,366781	0,355899	0,363195

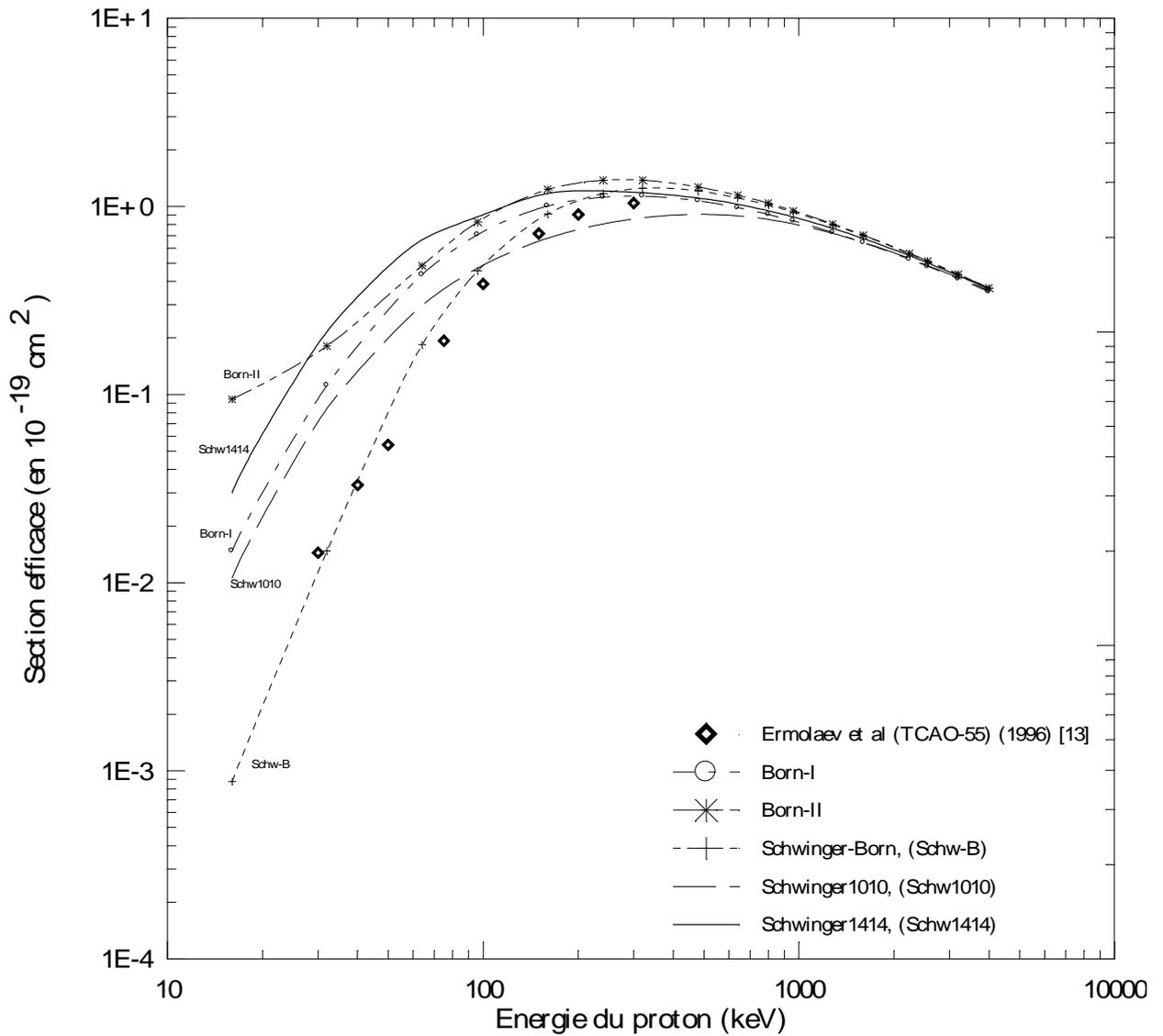


Figure IV-5 : Sections efficaces d'excitation de l'état $(1s, 3p)$ (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{3+} ($1s$) par impact de protons.

Tableau IV-6 : Sections efficaces d'excitation de l'état (1s ,3d) (en $10^{-19}cm^2$) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons

E (keV)	Ermoalev et al TCAO-55 [13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1010	Schw1414
16	—	0,00053315	0,05386611	7,68492E-06	0,00339734	0,0184207
30	0,0063	—	—	—	—	—
32	—	0,00658251	0,1281736	0,00030729	0,01579294	0,04228047
40	0,0136	—	—	—	—	—
50	0,0176	—	—	—	—	—
64	—	0,0363835	0,1009538	0,00539707	0,03771535	0,1157711
75	0,0326	—	—	—	—	—
96	—	0,06771474	0,07628974	0,01759623	0,06137882	0,2704327
100	0,0505	—	—	—	—	—
150	0,0867	—	—	—	—	—
160	—	0,1047912	0,09767626	0,04708726	0,09603028	0,3017438
200	0,111	—	—	—	—	—
240	—	0,1182417	0,1244219	0,07213766	0,1061132	0,2279528
300	0,126	—	—	—	—	—
320	—	0,1171706	0,1291725	0,0838076	0,09883832	0,1838549
480	—	0,1043488	0,1211159	0,0868421	0,07915594	0,1372954
640	—	0,0907937	0,1061163	0,0808975	0,06633687	0,1107929
800	—	0,079455	0,0923549	0,07333342	0,05826027	0,0934794
960	—	0,07028031	0,0809691	0,06618937	0,05274866	0,0807148
1280	—	0,0567161	0,0641528	0,05454485	0,04480031	0,06324533
1600	—	0,04733228	0,05270301	0,04599503	0,03890885	0,05189263
2240	—	0,03536048	0,03846789	0,03473004	0,03043434	0,0379652
2560	—	0,03133679	0,0338321	0,03082204	0,02736381	0,03347434
3200	—	0,02547861	0,02712257	0,0251842	0,02263558	0,02688311
4000	—	0,02060993	0,02168866	0,02042517	0,01862997	0,0215588

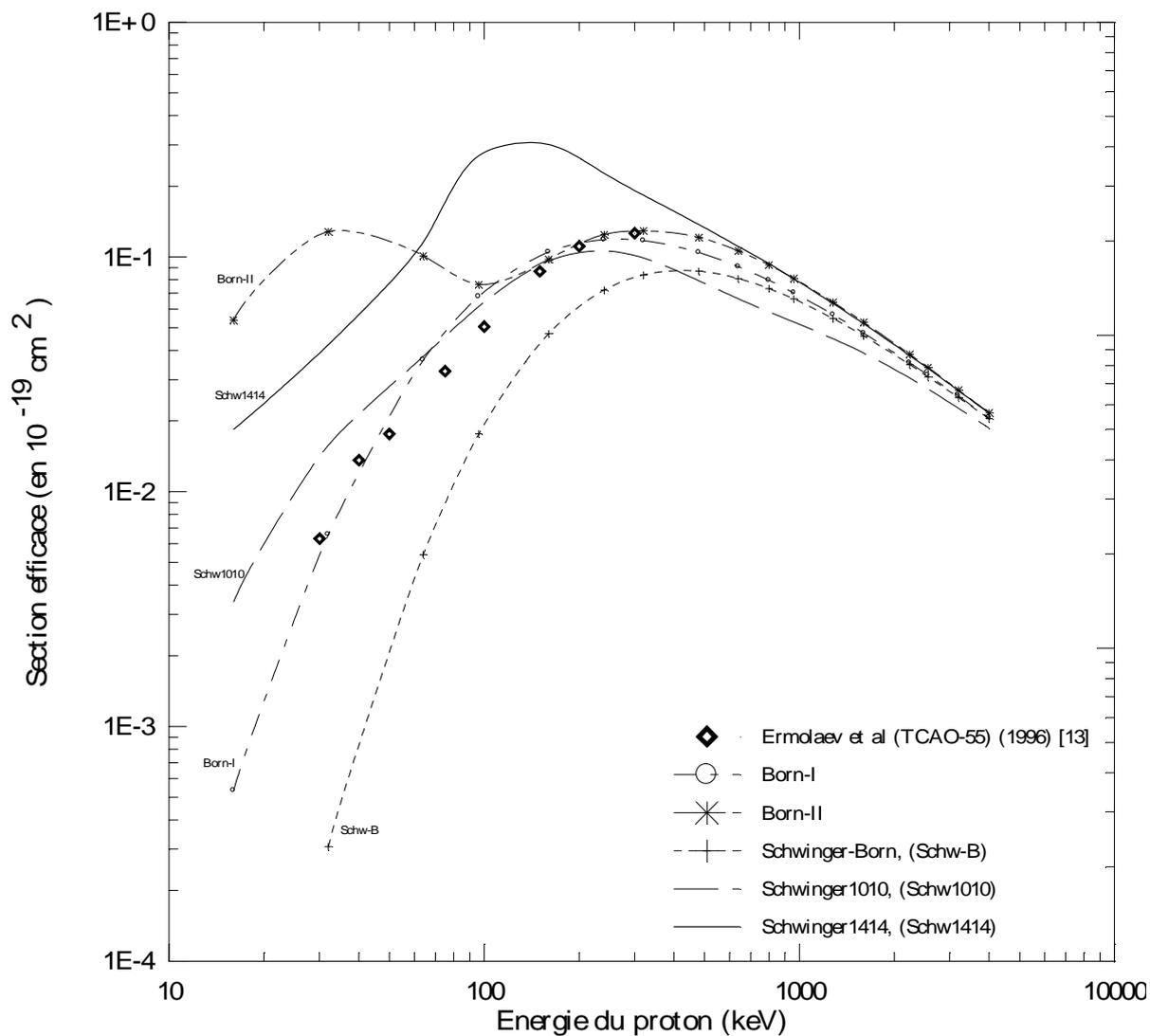


Figure IV-6 : Sections efficaces d'excitation de l'état $(1s, 3d)$ (en 10^{-19} cm^2)
De l'ion Be^{3+} ($1s$) par impact de protons.

Tableau IV-7 : Sections efficaces d'excitation du niveau $n=3$ (en 10^{-19}cm^2) de l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons.

E (keV)	Ermoalev et al TCAO-55 [13]	Born-I	Born-II	Schw-B	Schw1010	Schw1414
16	—	0,05014857	0,3976718	0,00285532	0,02966436	0,06958468
30	0,0289	—	—	—	—	—
32	—	0,2579723	0,5180616	0,04070497	0,1908237	0,4047035
40	0,0986	—	—	—	—	—
50	0,2116	—	—	—	—	—
64	—	0,7688837	0,8984088	0,2894905	0,5861241	1,079772
75	0,6696	—	—	—	—	—
96	—	1,130253	1,298984	0,6354104	0,8872156	1,508542
100	1,0915	—	—	—	—	—
150	1,5077	—	—	—	—	—
160	—	1,459517	1,745045	1,17131	1,229393	1,910797
200	1,637	—	—	—	—	—
240	—	1,543485	1,865255	1,45949	1,383729	1,859348
300	1,621	—	—	—	—	—
320	—	1,510371	1,816254	1,533772	1,406827	1,750872
480	—	1,370167	1,623427	1,461426	1,331276	1,5553
640	—	1,231793	1,435752	1,330973	1,224247	1,382808
800	—	1,11493	1,280873	1,207308	1,122764	1,241155
960	—	1,018027	1,155286	1,100582	1,033545	1,125328
1280	—	0,8687477	0,9670783	0,9331924	0,8889303	0,9486263
1600	—	0,7595855	0,8335969	0,8104343	0,7791764	0,8212378
2240	—	0,6101937	0,6567597	0,6439233	0,6251168	0,6497227
2560	—	0,5565622	0,5944552	0,5840849	0,5683232	0,5886871
3200	—	0,4743846	0,5017734	0,4950169	0,4835917	0,4982331
4000	—	0,4014504	0,4207668	0,4162835	0,4077346	0,4126458

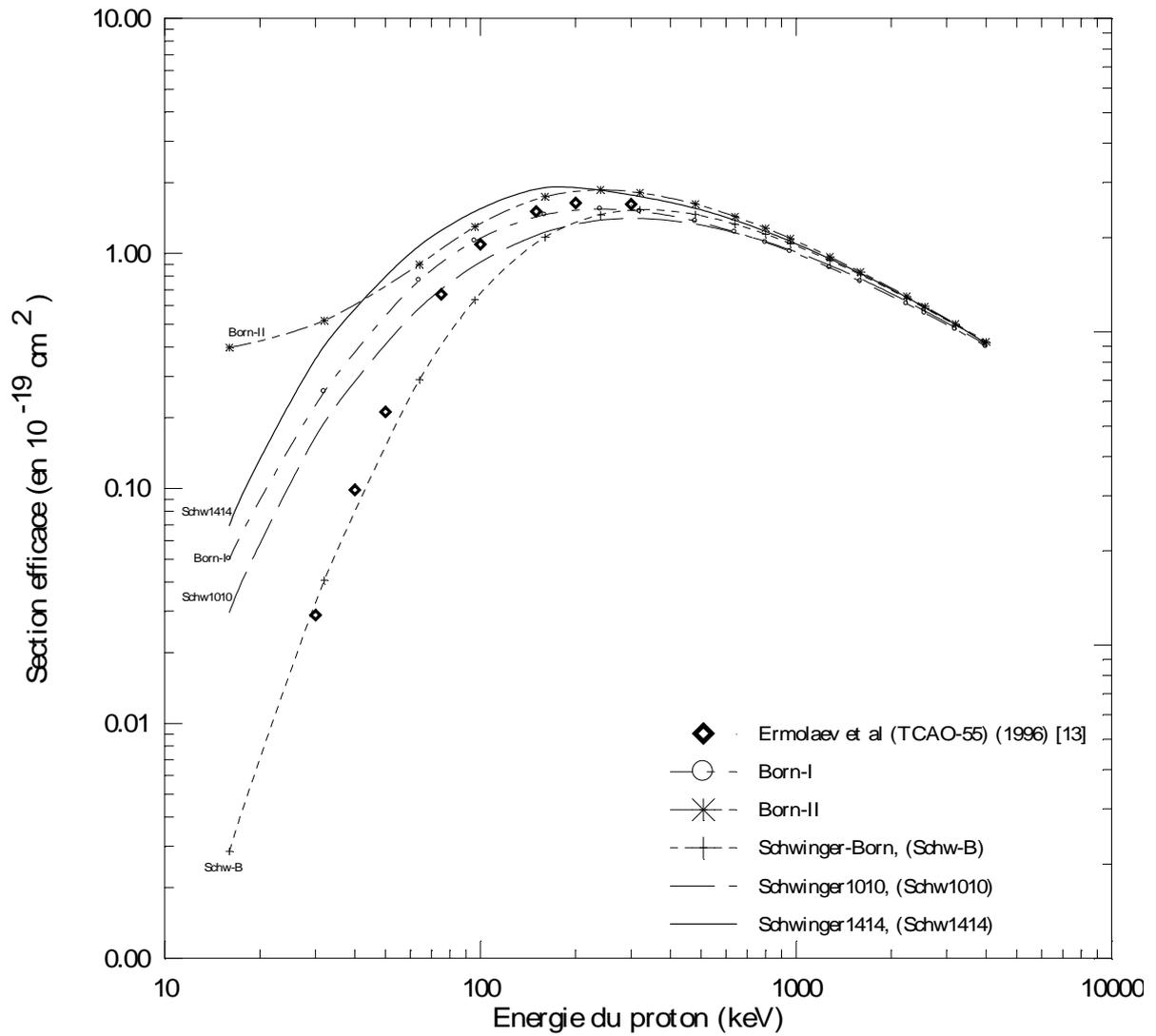


Figure IV-7 : Sections efficaces d'excitation du niveau $n=3$ (en 10^{-19} cm^2)
De l'ion Be^{3+} (1s) par impact de protons.

IV-3. Discussion:

Les résultats des sections efficaces d'excitation $\sigma_{exc}(nl)$, du Be^{3+} $n \leq 3$ par impact de protons pour une gamme d'énergie allant de 10 keV à 4 MeV sont donnés respectivement dans les tableaux 1 à 7 et représentés par les figures 1 à 7.

Sur ces mêmes figures on représente les résultats théoriques de la méthode Close-Coupling utilisant un développement à deux centres TCAO (Two Centre Atomic Orbital expansion) d'Ermolaev et al (1996) [13] avec 55 états et pseudo-états suivis de nos présents calculs : Born-I, Born-II, Schw-B, Schwinger à 5 états (Schw55) et Schwinger à 14 états (Schw1414) ; cependant pour l'excitation au niveau $n=2$, les calculs Schwinger55 ont été améliorés en élargissant la série de base $\{|i\rangle\}$ et $\{|j\rangle\}$ sur laquelle les fonctions d'ondes ont été développées de 5 états à 14 états et ainsi la base sera composée de $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$.

Dans notre cas, Le programme informatique conçu nous permet d'aboutir directement à cinq approches théoriques:

1. approximation de Born au premier ordre notée Born-I,
2. approximation de Born au deuxième ordre notée Born-II
3. approximation de Schwinger-Born (Schw-B) où $B_1 = \{|\alpha\rangle\}$ et $B_2 = \{|\beta\rangle\}$
4. approximation de Schwinger avec 10 états de base notée Schw1010. Les deux séries de base sont : $B_1 = B_2 = \{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$.
5. approximation de Schwinger à 14 états de base notée Schw1414 où $B_1 = B_2 = \{1s, 2s, 2p_0, 2p_1, 2p_{-1}, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$.

Soulignons que dans tous nos calculs Schw1010 et Schw1414, la totalité du spectre discret ainsi que celle du continuum de la cible ont été introduite dans la représentation de l'opérateur de Green.

Pour l'étude de l'excitation au niveau $n=3$ qui englobe les états 3s, 3p, 3d, nous avons opté pour l'utilisation d'une base constituée seulement de 10 états (Schw1010) que nous avons jugé suffisante pour une description assez convenable du processus d'excitation vers ces états, et par la suite la base sera composée de $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$.

Dans notre code informatique, une partie des intégrations est réalisée en utilisant la méthode de Simpson. De même une efficace procédure automatique assure une précision dans les calculs et exactitude dans les résultats.

A cause du manque de résultats expérimentaux et de calculs théoriques, et après une comparaison avec ceux d'Ermolaev et al(1996) [13], on constate que nos résultats sous-estiment légèrement les sections efficaces totales d'excitation autour du maximum (200 keV) pour le cas du niveau $n=2$ mais pour ceux de $n=3$ on distingue un parfait accord. D'autre part, les résultats qui découlent des approximations de Born-I, Schw55 et Schw1414 sont près les uns des autres à partir de 200 keV, énergie avoisinant le maximum des sections efficaces d'excitation.

Les Figures 1, 2 et 3, représentent respectivement les sections efficaces d'excitation des états 2s, 2p et du niveau $n=2$. Pour le premier cas c.à.d. l'état 2s, on peut dire que nos prédictions (Schw1414) sous-estiment celles d'Ermolaev et al (1996) [13] autour du maximum localisé aux alentours de (150 keV) tout en suivant la même allure et en restant en bon accord avec ces derniers. La totalité des approximations : Born-I, Born-II, Schwinger-B, Schw1414, TCAO-55 commence à converger vers une même valeur dès qu'on dépasse de peu le pic des sections efficaces qui est estimé vers 150 keV. Par contre pour l'état 2p on observe un très bon accord entre nos divers résultats et ceux d'Ermolev et al. De même pour l'excitation du niveau $n=2$, avec une toute légère sous-estimation de Schw1414 par rapport à TCAO-55 dans une gamme allant de 100 keV à 300 keV, mais sinon un bon accord est décelé au-delà de cette région pour toutes les prédictions théoriques présentes: Born-I, Schw-B, Schw1414.

Sur les figures 3, 4, 5, nos différents calculs théoriques des sections efficaces d'excitation des états 3s, 3p, 3d s'avèrent en parfait accord avec les résultats de TCAO-55 à part une légère surestimation des prédictions Schw1414 pour les états 3p et 3den dessous de 80 keV qui est due sûrement aux choix d'états sur lesquels la fonction d'onde était développée comme l'inclusion des états intermédiaires du niveau $n=2$ qui conduit à une surestimation des sections efficaces, ainsi que l'influence des états de capture ignorée lors du calcul surtout à basse énergie.

Références

- [1] - Korotkov A A and Gondhalekar A 1994 Proc. 21st EPS Conference on Controlled Fusion and Plasma Physics(Montpellier, 1994) Europhysics Conference Abstracts B 18 I-266.
- [2] - Petrov M P, Afanasyev V I, C Corti S, Gondhalekar A, Khudoleev A V, Korotkov A A, and Maas A C 1992 Int. Conf. on Plasma Physics (Innsbruck, 1992) Europhysics Conference Abstracts C 16 II-1031
- [3] - BelkicDz, Gayet R and Salin A 1979 Phys. Rep. 56 279
- [4] - Bransden B H and McDowell M R C 1992 Charge Transfer and the Theory of Ion-Atom Collisions (Oxford: Clarendon) ch 10
- [5] - Dewangan D P and Eichler J 1994 Phys. Rep. 247 59
- [6] - Winter T G 1982 Phys. Rev. A 25 697
- [7] - Winter T G 1987 Phys. Rev. A 35 3799
- [8] - Ermolaev A M and McDowell M R C 1987 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 L379
- [9] - Winter T G and Alston S G 1992 Phys. Rev. A 45 1562
- [10] - Mukherjee S and Sil N C 1980 J. Phys. B: At. Mol. Phys. 13 3421
- [11] - Grozdanov T P and Kristic P S 1988 Phys. Scr. 38 32
- [12] - Ermolaev A M 1994 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 27 L671
- [13] - A M Ermolaev and AAKorotkovJ. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 29 (1996) 2797-2818
- [14] - B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, Physical et Chemical News Journal. Volume 20, p12-17, November (2004).

[15] - B. Lasri, Thèse Doctorat, Université de Tlemcen (2007).

[16] -R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 .515-522(1989).

Conclusion

Générale

Dans ce travail, le principe variationnel de Schwinger a été appliqué avec succès dans l'étude de l'excitation de l'ion Be^{3+} par impact de Protons pour une large gamme d'énergie qui s'étend de 16 keV à 4 MeV. Les sections efficaces d'excitation directe déduites à partir de cette nouvelle approche montrent une convergence assez importante de l'approche variationnelle quand on augmente le nombre d'états de la cible sur lequel les fonctions d'ondes sont développées. En effet, de très bons résultats sont obtenus en élargissant la base de 5 états puis à 10 ensuite à 14 états sur laquelle le propagateur est développé.

Nos résultats théoriques demeurent en bon accord, comparés avec ceux établis récemment en 1994 et 1996 par Ermolev et al utilisant la méthode Close Coupling dans un formalisme de paramètre d'impact et en se basant sur un développement à deux centres (TCAO) avec 55 états et pseudo-états.

L'absence de données expérimentales pour ce type de processus de collisions laisse inachevée toute interprétation de la validité de chaque approximation.

L'inclusion de la contribution des états du continuum près du seuil d'ionisation dans le développement du propagateur de Green qui apparaît dans les éléments de type Born-I et Born-II aboutit à une influence quasi-nulle sur les sections efficaces totales, principalement dans la gamme des énergies intermédiaires.

A haute énergie, les diverses sections efficaces totales s'avèrent comparables; cette déduction est soutenue, bien sûr, par les nouveaux calculs Close Coupling qui ne cessent d'utiliser à chaque reprise des bases d'orbitales atomiques de plus en plus grandes. Ces grandes bases sont aussi nécessaires pour établir une meilleure exactitude dans le cas d'un

processus de capture et d'ionisation aux énergies supérieures à 1 MeV. Apparemment, pour notre procédure ici présente il n'y a aucun besoin particulier pour l'amélioration des données d'excitation directes présentes aux énergies intermédiaires, par contre aux basses énergies l'inclusion de la contribution d'au moins un état de capture ($1s$) sur le projectile peut améliorer nettement les prédictions.

La mise en œuvre de notre méthode est grandement facilitée par les relations de symétrie, les lois d'échelle sur les charges nucléaires de la cible et du projectile et grâce à l'évaluation analytique de nombreuses intégrales. La conséquence en est une économie considérable sur le temps d'ordinateurs nécessaire au calcul numérique.

Finalement, la procédure variationnelle actuelle semble être un outil d'investigation très puissant pour examiner le processus d'excitation dans des collisions atomiques aux vitesses d'impact moyennes.