



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

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

THÈSE

Présentée à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

DOCTORAT EN SCIENCES

Spécialité: Physique Théorique

Par :

M^{me} BENMANSOUR Nour El Houda
Epouse BENMEDJAHED

Sur le thème

**Etude des processus collisionnels dans le
formalisme variationnel : Effets des états du
continuum de la cible dans les sections efficaces.**

Soutenue publiquement le 30/06/2018 à Tlemcen devant le jury composé de :

INAL Mokhtar Kemal	Professeur	Université de Tlemcen	Président
BOUAMOUD Mammar	Professeur	USTO Oran	Directeur de thèse
LIANI Bachir	Professeur	Université de Tlemcen	Examinateur
HOUARI Ahmed	Professeur	C.U.Maghnia Tlemcen	Examinateur
ILES Nadia	MCA	ESGEE Oran	Examinatrice

*Laboratoire de Physique théorique
BP 119, 13000 Tlemcen - Algérie*

A la mémoire de mon père.

A la mémoire de mon frère Mohammed.

Remerciements

Cette thèse a été effectuée au Laboratoire de Physique Théorique **LPT** de l'Université de Tlemcen.

J'exprime mes sincères remerciements à mon directeur de thèse, **Mr. BOUAMOU MAMMAR** Professeur à l'USTO –Oran : je vous suis infiniment reconnaissante pour vos idées et conseils, ainsi que pour votre aide précieuse quotidienne sans lesquelles ce travail n'aurait pas été mené à terme.

Ma respectueuse reconnaissance va également à **Mr. INAL Mokhtar Kemal** Professeur à l'Université de Tlemcen, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider ce jury.

Je suis aussi très honorée de compter **Mr. LIANI Bachir**, Professeur de l'Université à Tlemcen, parmi les membres du jury de cette thèse. Ce fut un véritable plaisir de Travailler au laboratoire **LPT** sous sa direction, aussi bien sur le plan humain que scientifique.

J'exprime mes chaleureux remerciements pour **Mr. HOUARI Ahmed** Professeur au Centre Universitaire de Maghnia-Tlemcen, qui a eu l'obligeance de juger la présente thèse et d'accepter de siéger en qualité d'examineur dans ce jury.

Je suis également honorée de compter **Mme ILES Nadia** Maître de Conférence A à l'Ecole Supérieure en Génie Electrique et Energétique -Oran, parmi les membres de ce jury.

Un merci spécial à **Mr. SAHLAOUI Mohammed** Maître de Conférence A à L'Ecole Supérieure en Sciences Appliquées-Tlemcen, pour son aide précieuse et constante concernant les calculs analytiques et la programmation Fortran.

Je remercie tous les membres du laboratoire **LPT**, en particulier le chef d'équipe des 'collisions atomiques' **Mr LASRI Boumediene** pour sa gentillesse et son aide lors de la rédaction de l'article.

Je remercie **TOUIEB Yahia** l'ingénieur de laboratoire pour sa gentillesse et serviabilité.

J'adresse un grand merci à toute ma famille qui a toujours été présente lorsque j'en ai eu besoin, en particulier à **ma mère**, mes deux frères **Abderrahim** et **Najib**, à ma soeur **Hafida** et à tous ceux qui me sont chers.

Je réserve ma dernière et spéciale mention à mon mari **Omar** pour son soutien moral.

Sommaire

Introduction générale.....	1
Chapitre I. Généralité sur les collisions par des ions.....	5
I.1.Introduction.....	5
I.2. Processus collisionnels et Régimes de vitesses.....	5
I.3.Principales approches théoriques.....	8
I.3.1.Approximation de Born.....	9
I.3.2.Approximation de Born aux ondes distordues.....	12
I.3.3.Méthode des équations couplées.....	12
I.3.4 Approximation Eikonale.....	14
I.3.5 Méthode CTMC.....	16
I.3.6 Traitement variationnel de l'excitation.....	16
Bibliographie.....	19
Chapitre II. Principe variationnel de Schwinger.....	21
II.1.Introduction.....	21
II.2. Amplitude de transition directe de Schwinger sans réarrangement.....	21
II.2.1.Forme stationnaire de l'amplitude de transition.....	21
II.2.2.Amplitude de transition approchée.....	24
II.3.Traitement variationnel de Schwinger pour l'excitation.....	28
II.3.1.Méthode du paramètre d'impact.....	28
II.3.2.Amplitude de transition eikonale.....	36
II.3.3.Section efficace d'excitation.....	38
Bibliographie.....	41
Chapitre III. Calcul de l'amplitude de Transition variationnelle.....	42
III.1. Détermination des éléments de matrice de Born de premier ordre.....	42
III.2. Détermination des éléments de matrice de Born de deuxième ordre.....	45
III.3. Calcul des éléments $W_{ij}(\vec{R})$.....	49
III.3.1. Les éléments discret-discret.....	49
III.3.2. Les éléments discret-continu.....	55
III.3.3. Les éléments continu-continu.....	58

Bibliographie.....	62
Chapitre IV. Excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons.....	63
IV.1 Introduction.....	63
IV.2. Notre Méthode variationnelle.....	64
IV.3. Résultats et discussions.....	67
IV.3.1. les sections efficaces totales d'excitation des états 2s et 2p.....	67
IV.3.1.a.Interprétation des résultats.....	68
IV.3.2.Excitation du niveau n=4.....	78
IV.3.3.Les Sections efficaces de l'émission Balmer- α	80
Bibliographie.....	84
Conclusion générale.....	86
Appendices.....	88
Appendice I.....	88
Appendice II.....	93
Publications.....	102

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale :

Les collisions atomiques concernent l'étude des phénomènes induits par le mouvement relatif de particules chargées (atomes, ions, électrons et ...) en interaction. Cette étude a été consacrée en particulier à la collision entre des ions projectiles et des cibles atomiques.

Cette discipline a joué un rôle absolument déterminant dans la physique depuis plusieurs décennies, par le développement de modèles sophistiqués et l'élaboration des protocoles et dispositifs expérimentaux à haute résolution. L'objectif de ce cheminement théorique et expérimental est la description de la structure électronique de ces systèmes atomiques neutres ou chargés, et l'étude de la dynamique des processus induits lors de leur interaction [1].

La collision proton-hydrogène reste une référence pour le développement de nouvelles théories de diffusion atomique. Il y a trois processus inélastiques de base: l'excitation de la cible, la capture d'électrons par le projectile et l'ionisation directe.

L'étude de ces processus fondamentaux de collision atomique entre le proton et l'atome d'hydrogène présente un grand intérêt dans diverses branches de la physique comme les plasmas astrophysiques et la physique des plasmas de fusion thermonucléaire.

Aux vitesses intermédiaires de collision, les trois processus peuvent avoir un ordre de grandeur comparable [2], et par conséquent concourir. Ce problème a été résolu avec l'approximation des ondes couplées, mais les résultats obtenus ne sont pas toujours convaincants. En effet, le comportement de la fonction d'onde électronique est plus compliqué comparé aux énergies basses où le transfert d'électrons est dominant, et à des énergies élevées où l'excitation ou l'ionisation de l'atome d'hydrogène sont les résultats dominants des collisions. D'autre part, aux énergies intermédiaires, la fonction d'onde de diffusion doit décrire tous ces processus.

Le présent travail concerne une étude théorique de l'excitation atomique par impact de protons aux énergies intermédiaires, dans le formalisme variationnel basé sur le principe variationnel de Schwinger.

Le but de ce travail est d'apprécier la contribution des états du continuum de la cible dans le calcul des sections efficaces totales d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons aux énergies intermédiaires où il existe un fort couplage entre les voies d'excitation et de capture. Des états exacts du continuum de la cible ont été introduits dans le

développement de la fonction d'onde totale de diffusion dans le but de décrire les états de capture. En effet les transitions vers les états du continuum de la cible seront possibles une fois qu'une voie de capture d'électrons est ouverte.

Cette méthode variationnelle a été introduite [3] afin d'étudier l'excitation électronique directe des atomes hydrogénoïdes par l'impact des ions à des vitesses intermédiaires. Il a été montré que la prédiction de la saturation des sections efficaces totales d'excitation était très satisfaisante lorsque la charge du projectile augmente même dans le cas de l'excitation des ions héliumoïdes en collision avec divers atomes de gaz rares comme $\text{Fe}^{+24}(1s^2)$ à 400 MeV [4], Kr^{+34} à 34 MeV / nucléon [5] et à 13,6 MeV/ u pour $\text{Ar}^{+16}(1s^2)$ [6]. Cependant, ces résultats ont été obtenus en négligeant le couplage entre les canaux d'excitation et de capture à cause des projectiles neutres. En effet, la structure électronique complète des atomes les empêche de capturer un électron de l'ion héliumoïde, rendant ainsi le processus de capture négligeable. En outre, négliger ce couplage présente un avantage notable: il conduit à des lois d'échelle relatives à la charge nucléaire du projectile, qui sont si utiles pour étudier l'excitation atomique dans les collisions d'atomes par des ions. Ils nous permettent de faire des prédictions pour toute charge nucléaire quelconque d'un projectile une fois que les calculs ont été effectués pour une charge déterminée d'un projectile. L'objectif de notre approche actuelle est de préserver cet avantage.

Dans le cas de l'excitation de l'atome d'hydrogène par des impacts de protons à des vitesses intermédiaires et basses, il ne devrait pas être possible d'ignorer le couplage entre les voies d'excitation et de capture qui devient important dans ces domaines d'énergie. Nous avons tenté de décrire ce couplage fort en essayant d'estimer la contribution des états continus exacts de la cible dans les sections efficaces. Ainsi, au lieu d'inclure les états de capture du projectile dans le développement de la fonction d'onde de diffusion, il est intéressant d'ajouter seulement les états continus de la cible dans ce développement. Cette procédure nous permet de profiter des fameuses lois d'échelle de notre modèle variationnel.

Les résultats obtenus sont encourageants et satisfaisants. De plus, des améliorations significatives seront exposées.

Cette thèse est organisée comme suit :

Le chapitre 1 traite des généralités sur les collisions atomiques. Nous présentons tout d'abord, les principaux processus collisionnels et les régimes des vitesses induits lors de collisions atomiques et moléculaires. Nous exposons également quelques méthodes théoriques et divers travaux effectués sur les processus collisionnels atomiques.

Nous développons dans le chapitre 2 la forme de l'amplitude de transition variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact, afin de calculer les sections efficaces totales d'excitation.

Le Chapitre 3 concerne un traitement analytique et numérique sur la détermination de deux types d'élément de matrice : le premier est de la forme $\langle i|V|j\rangle$ dit Born I et le deuxième est de la forme $\langle i|VG_T^{\pm}V|j\rangle$ dit deuxième ordre de Born. il faut noter que le propagateur de Green est développé sur la base complète des états du spectre discret de la cible ainsi que sur les états du continuum proches du seuil d'ionisation.

Dans le chapitre 4 nous avons utilisé notre approche variationnelle pour calculer d'une part les sections efficaces totales d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons et d'autre part pour évaluer les sections efficaces de l'émission Balmer α dans une collision proton –atome hydrogène.

Nos résultats théoriques sont comparés avec des méthodes théoriques ainsi qu'avec plusieurs résultats expérimentaux.

Ce manuscrit s'achève par une conclusion générale et quelques suggestions concernant ce travail.

Bibliographie

- [1] Hicham Agueny, “Etude théorique des processus électroniques ayant lieu au cours de collisions atomiques et moléculaires : approches non perturbatives“ Université Pierre et Marie Curie -Paris VI; Université Moulay Ismaïl (Meknes, Maroc). Faculté des sciences (2014).
- [2] R. Gayet. Nucl. Sci. Appl, 1 (1983) 555.
- [3] M. Bouamoud and R. Gayet. France: Doctorat d’Etat Thesis. Edited by Cnrs-Inist, Phys. At. Mol., N 88 BOR10576, Vandoeuvre-lé-Nancy. 1988.
- [4] R. Gayet and M. Bouamoud. Nucl. Instr. Meth. B: Beam Interact. Mater.Atoms, 42 (1989) 515.
- [5] M. Chabot, P. Nicolai, K. Wohrer, A. Chetioui, J.P. Rozet, M.F. Politis, A. Touati, D. Vernhet, C. Stephan, and R. Gayet. Nucl. Inst. Meth. B, 56 (1991)1-4.
- [6] L. Adoui, M. Chabot, A. Chetioui, et al. Nucl. Inst. Meth. B: Beam Interact. Mater. Atoms, 87 (1994) 45.

CHAPITRE I
GÉNÉRALITÉS SUR LES
COLLISIONS PAR DES IONS

I.1 Introduction :

La théorie des collisions est l'un des champs disciplinaires le plus intéressant de la physique moderne. Elle a été développée au début du XX^{ème} siècle avec notamment l'avènement de la mécanique quantique et la naissance du modèle atomique.

Cette théorie étudie les phénomènes collisionnels entre les atomes, les molécules et les ions.

La théorie des collisions s'applique dans plusieurs domaines intéressants : la physique des plasmas, l'astrophysique, la fusion thermonucléaire et la radiobiologie.

I.2 Processus collisionnels et Régimes de vitesses :

Suivant les interactions qui se manifestent dans les collisions ion-atome ou ion-molécule, différents processus mono-électronique peuvent se produire. Citons comme exemples les trois types de processus fondamentaux élémentaires : l'excitation, l'ionisation et la capture électronique. Ces processus sont présentés sur la figure 1:

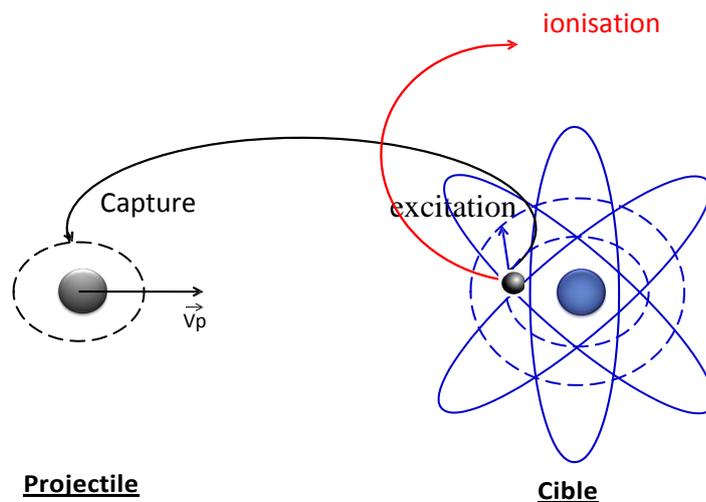


Figure 1 : Les processus atomiques mono-électroniques élémentaires

Ionisation : Au cours d'une collision entre une particule incidente A (*ion*) en mouvement, que l'on appelle *projectile*, et une autre particule B (*atome*), que l'on appelle *cible*, un électron de la cible est éjecté dans le continuum.



Excitation : L'un des deux partenaires de la collision se retrouve après la collision dans un état différent de son état initial. Il est passé d'un état initial à un état final moins lié.



Capture : un ou plusieurs électrons de la cible sont capturés par le projectile lorsqu'il passe près de la cible. Le processus de simple capture est le passage d'un électron d'une orbitale de l'atome cible vers une orbitale du projectile sans émission simultanée de lumière.



Ces processus collisionnels sont déterminés par des sections efficaces, l'une des caractéristiques physiques la plus préférée pour quantifier une collision à une énergie d'impact donnée. A titre d'exemple la figure 2 montre l'évolution des sections efficaces des mécanismes d'interactions (excitation, capture et ionisation) entre un proton et un atome d'hydrogène en fonction du domaine d'énergie.

L'influence relative de ces processus élémentaires varie avec le rapport entre la vitesse du projectile v_p et la vitesse de l'électron actif de la cible v_e . Généralement, trois régimes de vitesses (ou d'énergies) peuvent être classés selon la valeur du paramètre k défini par la formule :

$$K = \frac{Z_c v_e}{Z_p v_p} \quad (I.1)$$

où Z_p et Z_c sont respectivement la charge du projectile et de la cible. v_e est la vitesse initiale de l'électron actif et v_p est la vitesse du projectile.

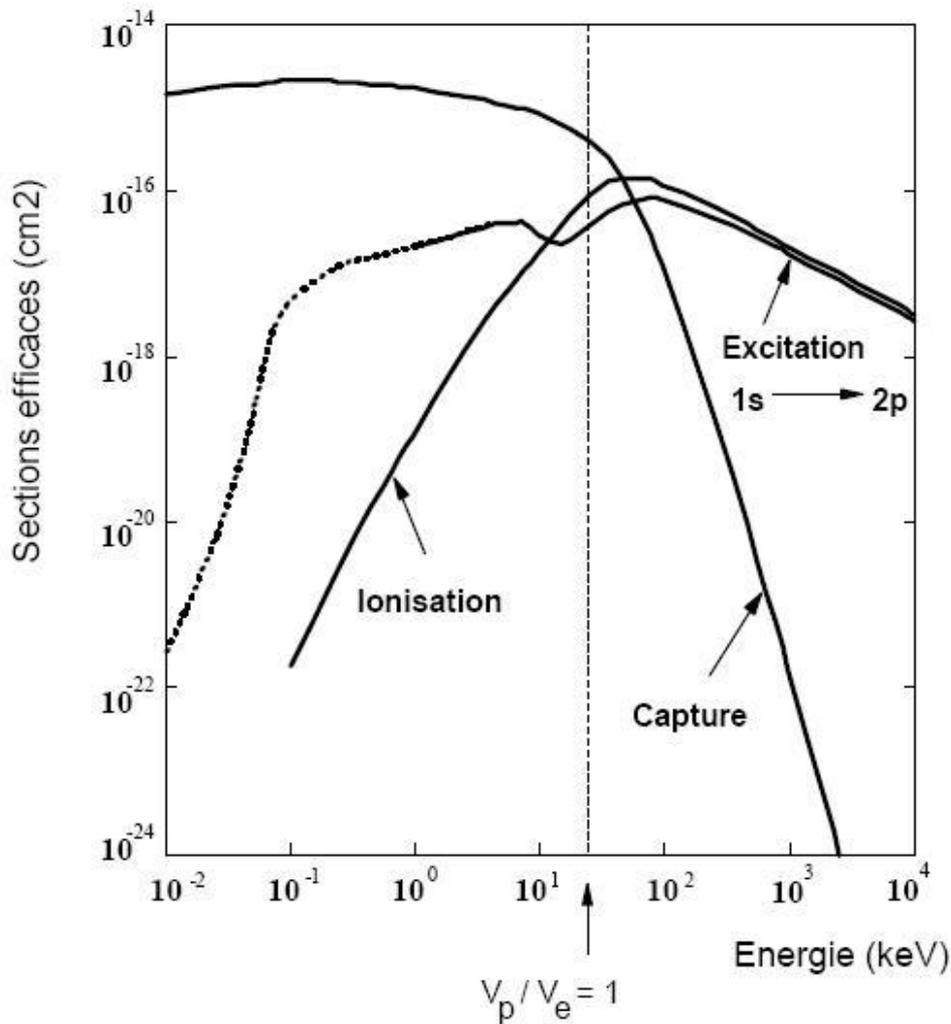


Figure 2 : Sections efficaces des trois processus collisionnels en fonction de l'énergie d'impact pour le système $\{H^+ + H\}$ [1].

Nous pouvons voir clairement ces trois domaines de vitesses sur la figure 2.

- Régime des basses vitesses d'impact ($K \gg 1$) :** Dans ce domaine dit moléculaire, la vitesse d'impact étant faible devant la vitesse de l'électron actif (v_e), qui est localisé à la fois autour des deux centres des partenaires de collision. Les états électroniques dans ce régime sont représentés par une base moléculaire introduite par l'approximation moléculaire qui est basée sur l'hypothèse de la formation d'une quasi-molécule transitoire au cours de la collision.

- **Régime des hautes vitesses ($K \ll 1$)** : ce régime dit « perturbatif » est atteint pour des vitesses de collision très grandes comparées à celle de l'électron actif de l'atome cible. Dans ce domaine de vitesses où les processus d'ionisation et d'excitation sont mis en jeu, l'interaction est très courte. La théorie des perturbations au premier ordre décrit le couplage entre ces deux voies d'ionisation et d'excitation.
- **Régime des vitesses intermédiaires ($K \approx 1$)** : Dans ce régime, les vitesses de l'électron actif et de collision sont voisines. L'électron peut d'une part passer d'un état de l'atome cible vers un autre, et d'autre part peut être capturé par le projectile. En effet l'aspect moléculaire d'une collision lente reste partiellement vrai en régime des vitesses intermédiaires. Pour des systèmes quasi-symétriques, ce domaine des vitesses est caractérisé par un fort couplage entre les deux voies de capture et d'excitation. Une approche naturelle permet de dire que l'ionisation n'est autre que le prolongement de l'excitation dans le continuum de la cible ou comme celui de la capture dans le continuum du projectile [2].

I.3 Principales Approches Théoriques :

Le but principal de l'étude théorique de la collision ion- atome est d'établir une relation entre les états initial et final du système. Cela est exprimé par ce qu'on appelle l'amplitude de diffusion. En effet la connaissance du comportement de la fonction d'onde qui représente l'onde de diffusion permet de calculer la section efficace, qui n'est autre que le carré de l'amplitude de diffusion.

Le problème important maintenant, dans une interaction entre une cible atomique et un ion incident, consiste à la détermination de la fonction d'onde qui contient toute l'information sur l'état du système et partant sur les possibilités de transition.

Certaines méthodes approximatives sont alors nécessaires pour résoudre ce problème.

Dans ce qui suit nous allons exposer les principales méthodes théoriques les plus utilisées au cours de ces dernières décennies, pour étudier les processus d'excitation faisant intervenir essentiellement des systèmes légers.

I.3.1 Approximation de Born :

Cette approximation est valable quand l'énergie cinétique de l'ion incident est très grande par rapport au potentiel d'interaction ; ce qui permet de considérer ce dernier comme une faible perturbation de l'hamiltonien total du système en collision.

L'approximation de Born est donc une approche perturbative qui consiste à développer la fonction d'onde ou l'amplitude de diffusion sous forme d'une série en puissance du potentiel d'interaction, sachant que l'ordre correspondant à la série de Born représente le nombre d'interactions du projectile avec la cible : une seule interaction pour la première approximation de Born, deux interactions pour la deuxième etc ... [3].

L'approximation de Born du premier ordre est la plus fréquemment utilisée en vue de sa simplicité de mise en œuvre. Elle est valable pour des collisions atomiques avec des ions de haute énergie et elle donne une bonne estimation de la section efficace totale d'excitation.

Il faut savoir que l'approximation de Born d'ordre n veut dire que nous avons tenu compte des n premiers termes du développement. Il est évident que l'inclusion des termes supérieurs du développement nous permet de mieux décrire le processus de collision, mais malheureusement la difficulté des calculs tant analytiques que numériques sur ordinateur augmente rapidement.

Nous noterons que la convergence de la série de Born n'a jamais été démontrée formellement dans le cas du potentiel coulombien.

Considérons la transition d'un électron de l'état initial $|\varphi_i\rangle$ de la voie d'entrée, à l'état final $|\varphi_f\rangle$ de la voie de sortie, dans une collision d'une cible atomique avec un ion incident.

L'Hamiltonien total du système est défini par :

$$H = H_0 + V = H_i + V_i = H_f + V_f \quad (\text{I.2})$$

où :

H_0 est l'hamiltonien des particules libres.

H_i et H_f désignent respectivement les hamiltoniens des particules sans interaction dans la voie d'entrée et dans la voie de sortie.

V , V_i et V_f sont respectivement les potentiels d'interaction entre les particules libres, entre les agrégats de la voie d'entrée et entre les agrégats de la voie de sortie.

Les états $|\varphi_{i,f}\rangle$ sont les vecteurs propres des hamiltoniens respectifs H_i et H_f .

L'élément de matrice de transition T_{fi} s'écrit sous la forme :

$$T_{fi} = \langle \varphi_f | V_f | \psi_i^+ \rangle \quad (\text{I.3})$$

où $|\psi_i^+\rangle$ est le vecteur propre de l'hamiltonien total H , satisfaisant au comportement asymptotique d'onde sortante, et vérifiant l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$|\psi_i^+\rangle = (1 + G^+ V_i) |\varphi_i^+\rangle \quad (\text{I.4})$$

où :

$$G^+ = (E - H + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{I.5})$$

G^+ est l'opérateur de Green appelé propagateur.

E est l'énergie totale du système.

En utilisant l'identité générale ci-dessous entre deux opérateurs P et Q admettant chacun un inverse :

$$P^{-1} = Q^{-1} + Q^{-1}(Q - P)P^{-1} \quad (\text{I.6a})$$

$$= Q^{-1} + P^{-1}(Q - P)Q^{-1} \quad (\text{I.6b})$$

et à l'aide de l'expression (I.2) G^+ peut se mettre sous la forme

$$G^+ = G_i^+ + G_i^+ V_i G^+ \quad (\text{I.7a})$$

$$G^+ = G_f^+ + G_f^+ V_f G^+ \quad (\text{I.7b})$$

où

$$G_i^+ = (E - H_i + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{I.7c})$$

$$G_f^+ = (E - H_f + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{I.7d})$$

En utilisant l'une ou l'autre des deux relations, on obtient les séries de Born pour T_{fi} .

A partir de (I.7a) on obtient :

$$G^+ = G_i^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_i G_i^+)^n \quad (\text{I.8})$$

En substituant cette dernière expression de G^+ dans l'équation (I.4), la relation (I.3) nous donne :

$$T_{fi} = \langle \varphi_f | V_f [1 + G_i^+ \sum_{n=0}^{+\infty} (V_i G_i^+)^n V_i] | \varphi_i \rangle \quad (\text{I.9})$$

Si l'on ne retient que le premier terme de cette série, on obtient l'approximation de Born au 1^{er} ordre :

$$T_{fi}^{B1} = \langle \varphi_f | V_f | \varphi_i \rangle \quad (\text{I.10})$$

De même, l'approximation de Born au 2^e ordre revient à ne retenir que les deux premiers termes de la série (I.9):

$$T_{fi}^{B2} = \langle \varphi_f | V_f + V_f G_i^+ V_i | \varphi_i \rangle \quad (\text{I.11})$$

Et ainsi de suite, l'approximation de Born au "N^{ème}" ordre, consiste à ne retenir que les N premiers termes de la série (I.9).

En général, l'approximation de Born donne un bon résultat pour les hautes énergies d'incidence. Le domaine de validité de cette approximation dépend aussi de la charge effective exercée par des électrons particuliers dans leur orbitale initiale. Ainsi dans n'importe quelle collision donnée, la PWBA (l'approximation de Born utilisant l'onde plane) peut être valide pour l'interaction d'électrons dans certains noyaux, mais pas dans d'autres. La vitesse de collision doit être plus grande que les vitesses électroniques orbitales [4].

I.3.2 Approximation de Born aux ondes distordues :

L'approximation de Born aux ondes distordues (Distorted wave Born approximation DWBA) est basée sur une théorie perturbative où l'influence des électrons de la cible sur ceux incidents et actifs est incluse dans les fonctions d'ondes. Les électrons incident, diffusé et éjecté sont donc représentés par des ondes distordues calculées dans le potentiel d'échange de l'atome (les électrons incidents) et aussi de l'ion (diffusé et éjecté). Ce formalisme est valable dans le domaine des énergies intermédiaires jusqu'aux hautes énergies du projectile.

Cependant, bien que cette approximation tienne compte de l'interaction des électrons libres avec les électrons de la cible, elle reste une approximation de premier ordre puisque elle considère que le projectile n'interagit qu'une seule fois avec la cible.

A basse énergie du projectile, l'interaction avec les électrons de la cible n'est plus négligeable comme dans le cas de l'approximation de Born. La fonction d'onde du projectile subit alors l'effet d'un potentiel de distorsion avant et après la collision avec la cible. Ce potentiel est de courte portée et devient pratiquement nul au delà d'une certaine distance.

Au contraire, à une énergie incidente et diffusée très haute, les effets de distorsion et d'échange deviennent faibles.

I.3.3 Méthode des équations couplées :

L'approximation des ondes couplées est une approche numérique qui consiste à développer la fonction d'onde de diffusion sur des bases de fonctions d'onde représentant les différentes voies de réactions. Nous obtenons un système d'équations différentielles couplées sur les coefficients du développement.

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

Précisons que dans l'application de cette méthode, il ne peut être question d'introduire qu'un nombre limité de fonctions de base, et le problème lié à la stabilité des résultats obtenus en fonction du nombre d'états pris en compte reste posé.

Nous allons maintenant traiter cette approximation dans le formalisme du paramètre d'impact. Ce formalisme est fondé sur la description du mouvement relatif des particules lourdes (les noyaux) suivant une trajectoire classique rectiligne. Ceci est valable lorsque l'énergie relative de la particule incidente est suffisamment élevée pour que la diffusion s'effectue aux petits angles.

La trajectoire est décrite par les équations suivantes :

$$\vec{R} = \vec{b} + \vec{v}t \quad (\text{I.12a})$$

Avec :

$$\vec{b} \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{I.12b})$$

où :

R : est la distance projectile-cible.

\vec{v} : est la vitesse incidente du projectile.

\vec{b} : désigne le paramètre d'impact.

Cette méthode sera illustrée dans ce qui suit par l'étude de la collision de l'atome d'hydrogène par un proton. Dans ce système l'équation de Schrödinger est donnée par :

$$\left(H_t + V(t) - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(\vec{b}, \vec{r}, t) = 0 \quad (\text{I.13})$$

Avec :

$$V(t) = \frac{1}{R(t)} - \frac{1}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|} \quad (\text{I.14})$$

où :

H_t est l'hamiltonien de la cible.

\vec{r} représente les coordonnées électroniques.

Considérons une base orthonormée $\{\varphi_i\}$ des états électroniques propres de H_t tels que :

$$\langle \varphi_j | H_t | \varphi_k \rangle = \varepsilon_k \delta_{kj} \quad (\text{I.15})$$

La fonction d'onde totale $\Psi(\vec{b}, \vec{r}, t)$ peut être approchée par un développement sur la base $\{\varphi_i\}$ de la forme :

$$\Psi(\vec{b}, \vec{r}, t) = \sum_j a_j(\vec{b}, t) \varphi_j(\vec{r}) e^{-i\varepsilon_j t} \quad (\text{I.16})$$

Portant l'expression (I.16) de $\Psi(\vec{b}, \vec{r}, t)$ dans l'équation (I.13) on obtient un système d'équations différentielles couplées sur les fonctions $a_j(\vec{b}, t)$:

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_j(\vec{b}, t) = \sum_k V_{jk}[\vec{R}(t)] \exp\{i(\varepsilon_j - \varepsilon_k)t\} a_k(\vec{b}, t) \quad (\text{I.17})$$

Où les éléments de matrice V_{jk} sont donnés par :

$$V_{jk}[\vec{R}(t)] = \int d\vec{r} \varphi_j^*(\vec{r}) V[\vec{R}(t), \vec{r}] \varphi_k(\vec{r}) \quad (\text{I.18})$$

Avec les conditions asymptotiques :

$$a_j(\vec{b}, -\infty) = \delta_{ij} \quad (\text{I.19})$$

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

De l'équation (I.17), on obtient par simple intégration:

$$a_j(\vec{b}, t) = \delta_{ij} - i \int_{-\infty}^t dt \sum_k V_{jk}[\vec{R}(t)] \exp\{i(\varepsilon_j - \varepsilon_k)t\} a_k(\vec{b}, t) \quad (\text{I.20})$$

La probabilité de transition P_{fi} dans un état final f est alors donnée par :

$$P_{fi} = |a_f(\vec{b}, +\infty)|^2 \quad (\text{I.21})$$

I.3.4 Approximation Eikonale:

Cette approximation déforme l'onde plane représentant le projectile pour prendre 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.

Parmi les différentes formulations de l'approximation eikonale, l'approximation de Glauber [5], [6] est utilisée quand l'ion incident n'a pas de structure électronique (un ion nu). Elle est très satisfaisante en physique nucléaire et en physique des particules ; et dans les collisions atomiques quand l'énergie incidente est suffisamment grande.

Dans l'approximation de Glauber le projectile est supposé se déplacer en ligne droite et le transfert d'impulsion de la cible est supposé être perpendiculaire à la trajectoire du projectile.

Considérons une transition de l'atome cible induite par le potentiel d'interaction V entre la cible et le projectile.

L'élément de matrice de transition s'écrit :

$$T_{fi} = \int d\vec{r} \int d\vec{b} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \varphi_f^*(\vec{r}) V(\vec{b}, z, \vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \exp\left\{-i\vec{q} \cdot \hat{v}_i z - \frac{i}{v_i} \int_{-\infty}^z dz' V(\vec{b}, z', \vec{r})\right\} \quad (\text{I.22})$$

où $\vec{q} = \vec{p}_i - \vec{p}_f$, \vec{p}_i et \vec{p}_f étant les impulsions respectives initiale et finale de la particule relative incidente dans le système du centre de masse.

$\vec{R} = \vec{b} + z \hat{v}_i$, \vec{b} étant le paramètre d'impact et \hat{v}_i un vecteur unitaire dirigé suivant le vecteur de la vitesse associé à la particule relative incidente.

\vec{r} et \vec{R} représentent respectivement les coordonnées électroniques et celles du projectile par rapport à la cible.

L'approximation de Glauber consiste à négliger le terme $\exp\{-i\vec{q} \cdot \hat{v}_i z\}$ dans la relation (I.22) ; ce terme contient le transfert d'impulsion longitudinal et l'approximation revient à ne tenir compte que du transfert transverse. Ce qui revient à poser

$$\exp\{-i\vec{q} \cdot \hat{v}_i z\} = 1$$

et l'amplitude de transition T_{fi} devient, après intégration sur z :

$$T_{fi} = i v_i \int d\vec{r} \int d\vec{b} \varphi_f^*(\vec{r}) \Gamma(\vec{b}, \vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{b}} \quad (\text{I.23a})$$

où

$$\Gamma(\vec{b}, \vec{r}) = 1 - \exp\{i \chi(\vec{b}, \vec{r})\} \quad (\text{I.23b})$$

Avec :

$$\chi(\vec{b}, \vec{r}) = -\frac{1}{v_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz' V(\vec{b}, z', \vec{r}) \quad (\text{I.23c})$$

En utilisant l'orthogonalité des fonctions φ_i et φ_f , et en portant (I.23b) dans (I.23a), T_{fi} devient :

$$T_{fi} = i v_i \left\{ \delta_{if} \int d\vec{b} e^{i\vec{q}\cdot\vec{b}} - \int d\vec{r} \int d\vec{b} \varphi_f^*(\vec{r}) e^{i\chi(\vec{b},\vec{r})} \varphi_i(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{b}} \right\} \quad (\text{I.24})$$

où

$$\delta_{if} = \begin{cases} 0 & \text{si } \varphi_i \neq \varphi_f \\ 1 & \text{si } \varphi_i \equiv \varphi_f \end{cases}$$

I.3.5 Méthode CTMC :

A cause des complexités intrinsèques des méthodes quantiques et semi-classiques dans la modélisation des collisions des particules lourdes, la méthode Classical Trajectory Monte Carlo dénommée CTMC est la plus utilisée, vue sa simplicité et sa précision de mise en œuvre dans de très vastes domaines, afin de simuler les interactions entre ces particules.

La méthode CTMC est une méthode classique proposée au milieu des années soixante par Abrines et Percival [7]. Elle est valable dans les domaines d'énergies mettant en œuvre les processus allant du transfert de charge jusqu'à l'ionisation directe.

Le principe de base de cette méthode consiste à résoudre les équations du mouvement lié pour chaque particule. Elle a été utilisée pour étudier les collisions ion-atome ou ion-molécule [8, 9].

Mentionnons que la résolution des équations du mouvement pour un système de plusieurs électrons rend la mise en œuvre de cette méthode trop compliquée.

I.3.6 Traitement variationnel de l'excitation:

Nous nous sommes intéressés pour notre travail actuel à une méthode non fondée sur une théorie de perturbations, le principe variationnel de Schwinger, dont l'application est plus aisée.

Lucchese et Mc.Moy [10] ont présenté, pour la première fois, une application du principe variationnel de Schwinger à la diffusion e-He. Leurs résultats étaient très encourageants. Ils ont montré que la méthode variationnelle de Schwinger peut fournir des solutions excellentes

au problème de diffusion sans toujours nécessiter des développements sur des bases importantes.

Par la suite, Lucchese, Watson et Mc.Moy[11] ont développé cette approche dans le cas particulier e-molécule. Leur méthode s'est avérée très simple dans la mesure où elle éliminait tout couplage.

En outre, leur travail a tendance à montrer que l'amplitude de diffusion du principe de Schwinger converge rapidement par rapport à la base sur laquelle la fonction d'onde de diffusion est développée, lorsque cette base est judicieusement choisie.

En 1984, B. Brendlé [12-14], a développé cette méthode pour l'étude de l'excitation d'ion et d'atomes par collision avec des noyaux nus aux vitesses intermédiaires et a montré l'existence d'une remarquable stabilité des résultats vis-à-vis des différentes bases choisies.

L'expression de l'amplitude de transition issue du principe de Schwinger étant stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusions, on s'attend à ce que celle-ci soit bien approchée pour un nombre assez faible de vecteurs de base d'énergies voisines de celles des états initial et final, bien que le choix de Brendlé ne satisfasse pas exactement les conditions asymptotiques.

Brendlé a alors testé la stabilité des résultats obtenus en restreignant encore plus le nombre des états de la base, dans la détermination des sections efficaces totales des sous-niveaux 3p de Fe^{24+} par impact de noyaux de charges Z_p . Il a montré que la restriction de la base à deux vecteurs représentant les seuls états initial et final de la transition considérée donne des résultats dont l'erreur par rapport à l'ensemble de la base est meilleure que 10%.

Par la suite M. Bouamoud [15],[16] a développé une méthode variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact, basée sur le principe variationnel de Schwinger, pour calculer les sections efficaces totales d'excitation d'atomes (ions) hydrogénéoïdes par impact d'ions aux énergies intermédiaires. Il a utilisé une base de cinq états liés de la cible dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion, tout en développant aussi le propagateur de Green sur une base complète d'états liés constituée par l'ensemble du spectre discret de la cible.

En 1998, B. Lasri a adapté ce modèle variationnel pour étudier l'excitation de systèmes hydrogénéoïdes de charge nucléaire Z_T en collision avec des protons et avec des noyaux nus de charge $Z_p \leq Z_T$ aux vitesses intermédiaires [17-20]. Il a ainsi élargi cette base de 5 états à 14 états de la cible et a introduit aussi le continuum de la cible [4] proche du seuil d'ionisation dans la base de développement du propagateur de Green.

Dans notre présente étude, dans un premier temps et dans le but de voir l'effet d'une base élargie dans la description de la fonction d'onde totale de diffusion, nous avons augmenté la base de 14 états à 30 états en incluant les états électroniques $4n$ de la cible. Il s'est avéré que cet élargissement de la base n'a pas apporté de résultats escomptés dans l'amélioration des valeurs des sections efficaces totales d'excitation dans le domaine des énergies intermédiaires. En effet il existe un fort couplage entre les voies d'excitation et de capture dans ce domaine d'énergies (figure 2).

Par la suite, dans le but de développer cette approche variationnelle afin de l'appliquer au calcul des sections efficaces totales d'excitation d'atomes par impact d'ions, nous avons introduit les états exacts du continuum de la cible dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion pour décrire les états de capture. Les résultats obtenus sont encourageants.

Cette approche variationnelle liée au principe de Schwinger, s'avère un outil d'investigation très puissant qui prend le relais des traitements perturbatifs dans l'étude des collisions atomiques aux vitesses intermédiaires.

Bibliographie:

- [1] W. Fritsch and C.D Lin ,Phys. Rep, 202 (1991) 1.
- [2] R. Schakeshaft, Phys Rev A, 18 (1978) 1930.
- [3] C. Dal. Cappello, A. Haddadou, F. Menas et A. C. Roy, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, 44 (2011) 15204.
- [4] B. Lasri, “Nouvelle approche du principe variationnel de Schwinger : application à l’excitation atomique aux énergies intermédiaires “Thèse de doctorat en sciences, Université de Tlemcen (2007).
- [5] R. J. Glauber ,Lecture in Theoretical Physics, 1 (1958) 315.
- [6] V. Franco et B.K. Thomas, Phys. Rev. A, 4 (1971) 945.
- [7] R. Abrines and I. C. Percival. Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons. Proc. R. soc. Lond , 88 (1966)8 61.
- [8] L. F. Errea, C. Illescas, L. Méndez, B. Pons, I. Rabadán, and A. Riera., Phys. Rev. A, 76 (2007) 040701-1.
- [9] K. Igenbergs, J. Schweinzer, A. Veiter, L. Perneczky, E. Frühwirth, M. Wallerberger, R. E. Olson, and F. Aumayr, J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys, 45 (2012)065203.
- [10] R. R. Lucchese et V. McKoy, J. Phys. B, 12 (1979) L421.
- [11] R. R. Lucchese, D.R. Watson et V. McKoy, Phys. Rev. A , 22 (1980) 421.
- [12] B. Brendlé,“Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d’excitation“ Thèse de troisième cycle, Université de bordeaux-I, 1984.
- [13] B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, Phys. Rev. Lett, 54 (1985) 2007.
- [14] K. Wohrer, A. Chetioui, J.P. Rozet, A. Jolly. F. Fernandez, C. Stephan. B. Brendlé et R. Gayet, J. Phys. B ,19 (1986) 1997.
- [15] 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 des sciences, Université de Bordeaux-I (1988).

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

[17] B. Lasri, 'Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation' Thèse de Magistère,

[18] B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, Physical and Chemical News Journal, 20 (2004) 12.

[19] B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud and R. Gayet, Physical and Chemical NewsJournal, 28(2006) 97.

[20] B .Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 251(2006) 66.

CHAPITRE II
PRINCIPE VARIATIONNEL DE
SCHWINGER

II.1 Introduction :

Les méthodes variationnelles sont souvent utilisées afin de résoudre des problèmes liés à la détermination des énergies de liaison.

L'avantage de l'approche variationnelle tient à sa capacité de se satisfaire d'une fonction d'onde d'essai qui soit une approximation raisonnable de la fonction d'onde réelle du problème considéré.

Parmi les nombreuses méthodes utilisées nous nous sommes intéressés à un aspect basé sur les équations intégrales: le principe variationnel de Schwinger.

Le principe variationnel de Schwinger est fondé sur l'obtention d'une forme stationnaire de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations de la fonction d'onde des états de diffusion.

Nous allons tout d'abord établir des expressions stationnaires de l'amplitude de transition dans le cas d'une diffusion à une seule voie.

II.2 Amplitude de Transition de Schwinger sans réarrangement :

II.2.1 Forme stationnaire de l'amplitude de transition :

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

$$H = H_c + V_c \tag{II.1}$$

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

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

Les états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $|\psi_\beta^-\rangle$ vecteurs propres de l'hamiltonien total du système satisfaisant respectivement aux conditions d'onde sortante et entrante, vérifient les équations intégrales de Lippmann-Schwinger :

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_c^+ V_c |\psi_\alpha^+\rangle \tag{II.2a}$$

$$|\psi_{\beta}^{-}\rangle = |\beta\rangle + G_c^{-} V_c |\psi_{\beta}^{-}\rangle \quad (\text{II.2b})$$

avec :

$$G_c^{\pm} = (E - H_c \pm i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{II.3})$$

où E désigne l'énergie totale dans le système du centre de masse.

A partir des expressions (III.2a) et (III.2b) on peut exprimer l'amplitude de transition sous les différentes formes suivantes:

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

De ces représentations intégrales de l'amplitude de transition, nous sommes maintenant capables d'écrire le principe variationnel pour $T_{\beta\alpha}$ sous la forme :

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

Qui est une autre représentation de l'amplitude de transition. C'est une forme exacte de l'amplitude quand les vecteurs exact $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ sont utilisés, et qui est stationnaire par rapport à de petites variations arbitraires $|\delta\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\delta\psi_{\beta}^{-}\rangle$ des vecteurs $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ autour de leurs valeurs correctes.

En différenciant la relation (II.5), on obtient :

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

Comme les vecteurs $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $\langle\psi_{\beta}^{-}|$ satisfont aux équations (II.2a) et (II.2b) de Lippmann-Schwinger, la relation (II.6) entraîne :

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

L'expression (II.5), qui est bilinéaire en $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$, est bien stationnaire et est appelée bilinéaire du principe variationnel de Schwinger.

De même, à partir des représentations (II.4) de $T_{\beta\alpha}$, nous déduisons une autre expression stationnaire de $T_{\beta\alpha}$, appelée forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger soit :

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

En différenciant cette expression, et en tenant compte des formes équivalentes (II.4) de l'amplitude de transition, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \delta T_{\beta\alpha} &= [\langle\beta| - \langle\psi_\beta^-| + \langle\psi_\beta^-| V_c G_c^+] V_c |\delta\psi_\alpha^+\rangle + \langle\delta\psi_\beta^-| V_c [|\alpha\rangle - |\psi_\alpha^+\rangle + G_c^+ V_c |\psi_\alpha^+\rangle] \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

Qui est identique à l'expression (II.6), et qui vérifie bien la stationnarité de la forme (II.8) de $T_{\beta\alpha}$. de plus cette forme fractionnaire présente l'avantage d'être indépendante de la normalisation choisie pour les états de diffusion.

Notons que cette forme, comme la forme bilinéaire(II.5), est plus sensible à la forme des états d'essais dans la région d'interaction qu'aux formes asymptotiques exactes des états de diffusion.

Comme première illustration de la forme variationnelle (II.8), remplaçons dans cette expression les vecteurs exacts inconnus $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ par les vecteurs d'essais correspondants, dans la première approximation de Born, $|\alpha\rangle$ et $\langle\beta|$, soit :

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

et

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

Nous obtenons alors :

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

Soit encore :

$$T_{\beta\alpha} = T^{B1} \left[\frac{1}{1-\bar{T}^{B2}/T^{B1}} \right] \quad (\text{II.12})$$

Où T^{B1} correspond à l'approximation de Born au 1^{er} ordre de l'amplitude de transition. l'approximation de born au 2^{eme} ordre est donnée par :

$$T^{B2} = T^{B1} + \bar{T}^{B2}. \text{ Si le rapport } \left| \bar{T}^{B2}/T^{B1} \right| \text{ est petit devant l'unité, nous pouvons développer}$$

l'expression (II.12) et obtenir $T_{\beta\alpha}$:

$$T_{\beta\alpha} = T^{B1} + \bar{T}^{B2} + \dots \quad (\text{II.13})$$

Dont les deux premiers termes sont identiques à la série de Born au deuxième ordre pour l'amplitude de transition.

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

II.2.2 Amplitude de transition approchée :

Nous venons de déterminer deux formes stationnaires de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations arbitraires des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes : la forme bilinéaire (II.5) et la forme fractionnaire (II.8). Ce qui signifie que l'erreur commise sur l'amplitude de transition est quadratique par rapport à celle faite sur les états de diffusion.

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

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \quad (\text{II.14a})$$

et

$$\langle \tilde{\psi}_\beta^- | = \langle \psi_\beta^- | + \langle \delta\psi_\beta^- | \quad (\text{II.14b})$$

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

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \quad (\text{II.15a})$$

et

$$\langle \tilde{\psi}_\beta^- | = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j| \quad (\text{II.15b})$$

La résolution de l'équation (II.6) ou (II.9) nous donnera alors les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusion approchés.

Et, en exprimant l'amplitude de transition, donnée par l'expression (II.8) ou l'expression (II.5), en fonction de ces vecteurs d'essais, nous obtiendrons ainsi, par la suite, l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$.

A partir de l'équation (II.6) et des expressions (II.14a) et (II.14b), nous déduisons l'équation suivante :

$$[\langle \beta | - \langle \tilde{\psi}_\beta^- - \delta\psi_\beta^- | (1 - V_c G_c^+)] V_c |\delta\psi_\alpha^+\rangle + \langle \delta\psi_\beta^- | V_c [|\alpha\rangle - (1 - G_c^+ V_c) |\tilde{\psi}_\alpha^+ - \delta\psi_\alpha^+\rangle] = 0 \quad (\text{II.16})$$

Qui est satisfaite pour toutes variations au premier ordre en $|\delta\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \delta\tilde{\psi}_\beta^- |$. Et en remplaçant les vecteurs $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_\beta^- |$ par leurs développements (II.14a) et (II.14b), nous obtenons, pour les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusions approchés, les équations couplées suivantes :

$$\langle j | V_c | \alpha \rangle - \sum_i \tilde{a}_i \langle j | V_c - V_c G_c^+ V_c | i \rangle = 0 \quad (\text{II.17a})$$

$$\langle \beta | V_c | i \rangle - \sum_j \tilde{b}_j^* \langle j | V_c - V_c G_c^+ V_c | i \rangle = 0 \quad (\text{II.17b})$$

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

$$D_{ji} = \langle j | V_c - V_c G_c^+ V_c | i \rangle \quad (\text{II.18})$$

$$(V_\alpha)_j = \langle j|V_c|\alpha\rangle \quad (\text{II.19a})$$

$$(V_\beta)_i = \langle i|V_c|\beta\rangle \quad (\text{II.19a})$$

Et les vecteurs colonnes $\tilde{\alpha}$ et $\tilde{\mathbf{b}}$ dont les éléments sont $\tilde{\alpha}_i$ et $\tilde{\mathbf{b}}_j$, on peut exprimer les équations (II.17a) et (II.17b) sous la forme matricielle :

$$V_\alpha = D\tilde{\alpha} \quad (\text{II.20a})$$

$$(V_\beta^*)^t = \tilde{\mathbf{b}}^* D \quad (\text{II.20b})$$

ou encore :

$$\tilde{\alpha} = D^{-1} V_\alpha \quad (\text{II.21a})$$

$$\tilde{\mathbf{b}}^* = (V_\beta^*)^t D^{-1} \quad (\text{II.21b})$$

Qui donnent les solutions pour les composantes $\tilde{\alpha}_i$ et $\tilde{\mathbf{b}}_j^*$ des états d'essais $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$.

En substituant ces derniers dans l'expression(II.8), l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ s'écrit :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle\beta|V_c|i\rangle \tilde{\alpha}_i \tilde{\mathbf{b}}_j^* \langle j|V_c|\alpha\rangle}{\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \tilde{\mathbf{b}}_j^* \langle j|V_c - V_c G_c^+ V_c|i\rangle \tilde{\alpha}_i} \quad (\text{II.22})$$

ou encore :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{[(V_\beta^*)^t \cdot \tilde{\alpha}] [\tilde{\mathbf{b}}^* \cdot V_\alpha]}{\tilde{\mathbf{b}}^* D \tilde{\alpha}} \quad (\text{II.23})$$

Qui s'écrit à l'aide des relations (II.21a) et (II.21b) :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = (V_{\beta}^*)^t \cdot \tilde{\alpha} = \tilde{b}^* \cdot V_{\alpha} \quad (\text{II.24})$$

Ou sous forme explicite :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_c | \tilde{\psi}_{\alpha}^+ \rangle = \langle \tilde{\psi}_{\beta}^- | V_c | \alpha \rangle \quad (\text{II.25})$$

En explicitant les matrices $\tilde{\alpha}$ et \tilde{b}^* en fonction des solutions (II.21a) et (II.21b), nous obtenons, à partir de (II.24) :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_c | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V_c | \alpha \rangle \quad (\text{II.26})$$

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

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

Notons que la restriction de l'équation (II.6) à un sous-espace très limité de l'espace vectoriel des états de diffusion peut faciliter considérablement sa solution.

Cependant un mauvais choix de ce sous-espace peut mener à des états assez éloignés des véritables états de diffusion. Ce sous-espace sera donc pris de façon à simplifier le problème jusqu'à le rendre soluble sans néanmoins altérer trop profondément les données physique.

II.3 Traitement variationnel de Schwinger pour l'excitation :

Nous nous intéresserons, dans cette étude, à l'excitation d'un système hydrogéoïde par impact d'ions, aux vitesses intermédiaires. Comme la principale contribution à la transition considérée se produit aux petits angles (par exemple $< 10^{-3}$ rd pour une collision de type

$H^+ \rightarrow H$ à une énergie égale à 50 KeV) [1] on peut considérer que le projectile décrit une trajectoire rectiligne, et donc traiter ce problème dans le cadre de l'approximation iconale.

II.3.1 Méthodes du paramètre d'impact :

La méthode eikonale est une méthode très satisfaisante en physique atomique, nucléaire et en physique des particules. C'est une approximation semi-classique qui consiste à supposer que les noyaux se déplacent classiquement tandis que le mouvement des électrons est traité de façons quantique. Cette méthode a été développée par Glauber [2]

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:

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \quad (\text{II.27a})$$

$$\vec{z} = \vec{v} \cdot t \quad (\text{II.27b})$$

$$\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \quad (\text{II.27c})$$

où :

\vec{R} : la distance internucléaire.

$\vec{\rho}$: le paramètre d'impact.

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

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

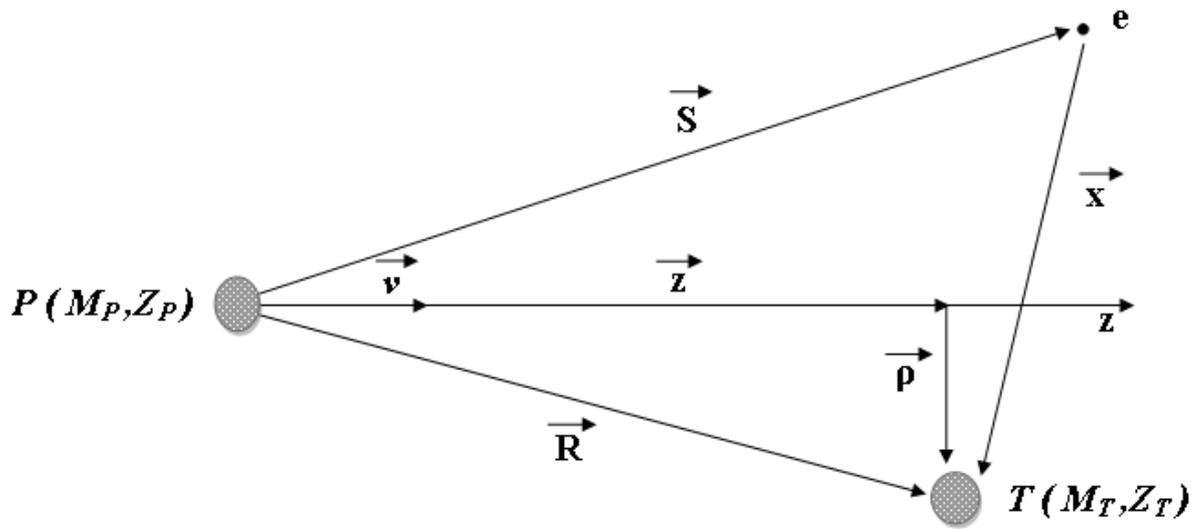


Figure II.1 : Système projectile-cible

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

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

Le Hamiltonien total du système dans la voie c (quelconque) est donné par :

$$H = H_c + V_c \quad (\text{II.28})$$

H_c est l'hamiltonien des particules sans interaction donnée par $H_c = H_T + T_P$

Avec :

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \quad (\text{II.29})$$

et

$$T_P = -\frac{1}{2\mu} \Delta_R \quad (\text{II.30})$$

où μ représente la masse réduite donnée par :

$$\mu = \frac{M_P(M_T+1)}{M_P+M_T+1} \quad (\text{II.31})$$

V_c est le potentiel d'interaction entre les particules dans cette voie. Ce potentiel se met sous forme :

$$V_c = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{S} \quad (\text{II.32})$$

En 1972 Janev et Salin [3] ainsi que Belkic, Gayet et Salin (1979) [4] ont montré que les sections efficaces totales sont indépendantes du potentiel interagrat donnée par :

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_P(Z_T-1)}{R} \quad (\text{II.33})$$

Il faut noter aussi que dans le calcul de l'amplitude de transition, l'influence de ce potentiel se réduit à un facteur de phase dépendant du paramètre d'impact $\bar{\rho}$ donné par $\rho^{2iZ_P(Z_T-1)/V}$; et que sa contribution à la section efficace différentielle doit être réintroduite si nécessaire. Ceci nous incite à ignorer le potentiel interagrat lors du calcul de l'amplitude de transition, et ainsi définir l'interaction responsable de l'excitation par :

$$V = V_c - \frac{Z_P(Z_T-1)}{R} \quad (\text{II.34a})$$

$$V = Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right) \quad (\text{II.34b})$$

Soient $|\alpha(z)\rangle$ et $|\beta(z)\rangle$ respectivement les états initiale et final de la cible, solutions de l'équation de Schrödinger eikonale avec le seul Hamiltonien de la cible H_T :

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\alpha(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.35a})$$

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\beta(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.35b})$$

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

$$\alpha(z) = \langle \vec{x}, z | \alpha(z) \rangle = e^{-i\frac{\epsilon_\alpha}{v}z} \varphi_\alpha(\vec{x}) \quad (\text{II.36a})$$

$$\beta(z) = \langle \vec{x}, z | \beta(z) \rangle = e^{-i\frac{\epsilon_\beta}{v}z} \varphi_\beta(\vec{x}) \quad (\text{II.36b})$$

Où ϵ_α et ϵ_β désignent respectivement les énergies propres des états φ_α et φ_β , et \vec{x} l'ensemble des coordonnées électroniques.

Dans la méthode 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, satisfont respectivement aux conditions d'onde sortante et entrante. Il faut ajouter que les notations $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ et $|\alpha(z)\rangle$ et $|\beta(z)\rangle$ veut dire 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 R .

Les états de diffusion $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ sont déterminés par les équations de Lippman-Schwinger eikonales suivantes [5] :

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

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

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

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\alpha^\pm(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.38a})$$

$$\left\{-iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V\right\} |\psi_{\beta}^{\pm}(z)\rangle = 0 \quad (\text{II.38b})$$

Les fonctions de Green $G_T^+(z - z')$ et $G_T^-(z - z')$ correspondent à la fonction de Green G_c^{\pm} eikonal associée à l'hamiltonien H_c et vérifiant les équations suivantes :

$$\left\{-iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z)\right\} G_T^+(z - z') = -\delta(z - z') \quad (\text{II.39})$$

En utilisant les conditions initiales :

$$G_T^+(z) = 0 \quad z < 0 \quad (\text{II.40a})$$

$$G_T^-(z) = 0 \quad z > 0 \quad (\text{II.40b})$$

En résolvant l'équation (II.39) pour le propagateur de Green G_T^+ , il est simple de montrer que :

$$G_T^+(z - z') |\alpha(z')\rangle = -\frac{i}{v} |\alpha(z)\rangle \theta(z - z') \quad (\text{II.41a})$$

$$G_T^+(z - z') |\beta(z')\rangle = -\frac{i}{v} |\beta(z)\rangle \theta(z - z') \quad (\text{II.41b})$$

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

Ce qui donne :

$$G_T^+(z - z') |\alpha(z')\rangle = \begin{cases} -\frac{i}{v} |\alpha(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{II.42a})$$

de même pour $\beta(z)$ nous aurons :

$$G_T^+(z - z')|\beta(z')\rangle = \begin{cases} -\frac{i}{v}|\beta(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{II.42b})$$

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

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} [\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)] = \lim_{z \rightarrow +\infty} [\psi_\beta^-(z)|\alpha(z)] \quad (\text{II.43})$$

On peut également démontrer que l'amplitude de transition se met sous une autre forme donnée par Janev et Salin [3]; soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z dz [\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{II.44a})$$

En réécrivant cette expression sous la forme :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z dz [\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{II.44b})$$

et en utilisant les expressions (II.35a, b) et (II.38a, b), nous aurons :

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\beta(z)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} |\beta(z)\rangle = -\frac{i}{v} H_T |\beta(z)\rangle \quad (\text{II.45})$$

et

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\beta^\pm(z)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} |\psi_\alpha^+(z)\rangle = -\frac{i}{v} (H_T + V) |\psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (\text{II.46})$$

L'équation (II.44b) devient enfin :

$$a_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\beta(z)|H_T + V - H_T|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{II.47a})$$

$$a_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\beta(z)|V|\psi_{\alpha}^{+}(z)] \quad (\text{II.47b})$$

À partir des équations (II.47a), (II.47b) et de l'expression (II.43) de l'amplitude de transition $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, cette dernière est écrite sous d'autres formes :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\beta(z)|V|\psi_{\alpha}^{+}(z)] \quad (\text{II.48a})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\psi_{\beta}^{-}(z)|V|\alpha(z)] \quad (\text{II.48b})$$

$$= \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\psi_{\beta}^{-}(z)|V - VG_T^{+}V|\psi_{\alpha}^{+}(z)] \quad (\text{II.48c})$$

$$\text{En écrivant } \langle k|\Theta|k' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle k|\Theta|k' \rangle \quad (\text{II.49})$$

où Θ dénote un opérateur, et la notation $(\quad | \quad)$ indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques et la coordonnée z de \vec{R} , on peut écrire symboliquement les trois formes équivalentes de $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} (\beta|V|\psi_{\alpha}^{+}) \quad (\text{II.50a})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} (\psi_{\beta}^{-}|V|\alpha) \quad (\text{II.50b})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} (\psi_{\beta}^{-}|V - VG_T^{+}V|\psi_{\alpha}^{+}) \quad (\text{II.50c})$$

A partir de ces trois formes de $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ et d'une façon complètement analogue à l'établissement de la forme variationnelle dans le cas d'une collision directe (une seule voie

de réarrangement), on obtient l'amplitude de transition variationnelle de Schwinger sous sa forme eikonale :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) (\beta|V|\psi_{\alpha}^{+}) \left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_{\beta}^{-}|V|\alpha) / \left(-\frac{i}{v}\right) (\psi_{\beta}^{-}|V - VG_T^{+}V|\psi_{\alpha}^{+}) \quad (\text{II.51})$$

Du fait que les états de diffusion ne sont pas connus d'une façon exacte, on prendra comme états d'essai les vecteurs $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ tels que :

$$|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = |\psi_{\alpha}^{+}\rangle + |\delta\psi_{\alpha}^{+}\rangle \quad (\text{II.52a})$$

$$|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle = |\psi_{\beta}^{-}\rangle + |\delta\psi_{\beta}^{-}\rangle \quad (\text{II.52b})$$

Ces états sont développés par la suite dans un sous espace vectoriel de dimension N :

$$|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \quad (\text{II.53a})$$

$$|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j |j\rangle \quad (\text{II.53b})$$

De manière similaire au traitement quantique, l'expression de l'amplitude de transition $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ donnée par la relation (II.51) est stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ autour de leurs valeurs exactes.

L'insertion des solutions de l'équation $\delta a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = 0$ dans l'expression de l'amplitude de transition approchée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ donnée par :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) (\beta|V|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}) \left(-\frac{i}{v}\right) (\tilde{\psi}_{\beta}^{-}|V|\alpha)}{\left(-\frac{i}{v}\right) (\tilde{\psi}_{\beta}^{-}|V - VG_T^{+}V|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+})} \quad (\text{II.54})$$

Conduit à la forme :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i)(D^{-1})_{ij} (j|V|\alpha) \quad (\text{II.55})$$

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

$$D_{ji} = (j|V - VG_T^+V|i) \quad (\text{II.56})$$

Remarque :

Lors du développement des états de diffusion approchés $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ nous avons pris une base constituée seulement par les états de la cible et nous avons ignoré l'inclusion des états de capture sur le projectile. Ceci suppose que l'effet de 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 fiable et ceci est vrai lorsque la charge du projectile est plus faible que celle du noyau.

II.3.2 Amplitude de transition eikonale :

Nous essayons de déterminer les formes simplifiées de l'amplitude de transition et de la section efficace totale dans le cas d'un processus d'excitation d'un atome par impact d'un proton ou d'un ion nu, à l'aide de l'amplitude variationnelle obtenue dans la méthode du paramètre d'impact. En effet l'amplitude de transition quantique correspondant au processus $\alpha \rightarrow \beta$ est donnée par :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta|V|\psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{II.57})$$

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 [4] [5] :

$$\psi_\alpha^+(\vec{R}, \vec{x}) \approx \text{Exp}(i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}) \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{II.58})$$

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

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

$$T_{\beta\alpha} = \int d\vec{R} d\vec{x} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \varphi_{\beta}^* V(\vec{R}, \vec{x}) \psi_{\alpha}^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{II.59})$$

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} :

$$\vec{q} = \vec{k}_{\alpha} - \vec{k}_{\beta} \quad (\text{II.60a})$$

$$\vec{q} = q_v \cdot \hat{v} - \vec{\eta} \quad (\text{II.60b})$$

où $\vec{\eta}$ 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 :

$$\frac{k_{\alpha}^2}{2\mu} + \epsilon_{\alpha} = \frac{k_{\beta}^2}{2\mu} + \epsilon_{\beta} \quad (\text{II.61})$$

où ϵ_{α} et ϵ_{β} désignent respectivement les énergies des états liés initial et final.

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

$$q_v = \frac{\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\alpha}}{v} + O\left(\frac{1}{\mu}\right) \quad (\text{II.62})$$

et en utilisant la relation $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$ on aboutit à :

$$\vec{q}\vec{R} \approx \frac{\epsilon_{\beta} - \epsilon_{\alpha}}{v} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad (\text{II.63})$$

En reportant cette expression approchée de $\vec{q}\vec{R}$ dans l'amplitude de transition donnée par la relation (II.58), on obtient la forme suivante :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}} (\beta|V|\psi_{\alpha}^{+E}) \quad (\text{II.64})$$

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

$$\langle \vec{x}, z | k \rangle = e^{-i\frac{\epsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \quad (\text{II.65})$$

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

Dans le cas où $\alpha \neq \beta$ et à l'aide de l'expression (II.48a) la forme (II.63) de l'amplitude de transition dans l'approximation eikonale devient [6] :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = iv \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}} \rho^{2i\frac{z_P(z_T-1)}{v}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad (\text{II.66})$$

Notons que dans cette dernière expression, nous avons réintroduit le facteur de phase $\rho^{2i\frac{z_P(z_T-1)}{v}}$ représentant la contribution du potentiel interagrat (II.59).

II.3.3 Section efficace d'excitation :

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

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_{\alpha}}{k_{\beta}} |T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})|^2 \quad (\text{II.67})$$

où $d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\varphi$ représente l'angle solide.

Dans le cas où l'énergie incident est très supérieure à la différence d'énergie ($\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta$) entre les états de la cible $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ et à partir de la relation (II.60) on se permet d'écrire dans le cas de faible transfert d'impulsion longitudinale :

$$k_\alpha/k_\beta \approx 1 \quad (\text{II.68})$$

Ce qui conduit à la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right| \quad (\text{II.69})$$

et par conséquent, la section efficace totale sera donnée par :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\beta \int_0^\pi \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{II.70})$$

En différentiant \vec{q}^2 calculé à partir des expressions (II.59a) et (II.60b), et en utilisant la relation (II.68), nous pouvons écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \quad (\text{II.71})$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\rho_\eta \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{II.72})$$

En remplaçant $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ par son expression (II.66), et en appliquant la transformée de Fourier à deux dimensions nous aurons pour la section efficace totale :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\vec{\rho} |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad (\text{II.73})$$

Puisque le système présente une symétrie azimutale on aura :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad (\text{II.74})$$

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.

Nous avons 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.54) quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-espace vectoriel de dimension N .

Remarque :

Pour calculer la section efficace totale de diffusion, Il faut déterminer $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ qui ne nécessite aucune intégration sur le paramètre d'impact $\vec{\rho}$, nous permet de nous 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 états hydrogénoïdes dégénérés lors d'un calcul fait d'une façon complètement quantique quand on intègre sur le paramètre d'impact $\vec{\rho}$.

Bibliographie:

- [1] B. Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, Phys. Rev. Lett, 54 (1985) 2007.
- [2] R. J. Glauber, Lectures in Theoretical Physics, ed. by W. E. Brittin and L. G. Dunham, Interscience Publishers, Inc., New York, Volume I (1959) 315.
- [3] R. K. Janev et A. Salin, Ann. Phys. N.Y, 73 (1972) 136.
- [4] DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, phys. Report, 56 (1979) 279.
- [5] R. McCarroll et A. Salin, J. Phys, B1 (1968) 163.
- [6] R. McCarroll et A. Salin, C. R. Acad. Sci. Paris, 263 (1966) 329.

CHAPITRE III

CALCUL DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION VARIATIONNELLE

Afin de déterminer l'amplitude $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, il faut évaluer les deux types d'éléments de matrice : $\langle i|V|j\rangle$ et $\langle i|VG_T^+V|j\rangle$ dit de Born1 et Born2, respectivement. A partir d'ici nous désignons les états de transition initial et final par i et j , tel que les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont solutions de l'équation iconale de Schrödinger avec l'Hamiltonien H_T de la cible voir les deux équations (II.35a, b).

Rappelons que la notation $(\int | \int)$ signifie qu'une intégration est effectuée sur la composante z , \vec{R} et les coordonnées électronique \vec{x} de la cible.

III.1 Détermination des éléments de matrice de Born de premier ordre :

Notons que les éléments matriciels de Born1 sont donnés par :

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

soit :

$$\langle \vec{x}, z|k\rangle = e^{-i\frac{\epsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \quad \text{avec } k = i, j \quad (\text{III.2})$$

L'équation (III.1) devient alors:

$$\langle i|V|j\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int d\vec{x} e^{i\frac{\epsilon_i}{v}z} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) e^{-i\frac{\epsilon_j}{v}z} \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{III.3})$$

Où v est la vitesse d'impact, ϵ_i et ϵ_j désignent les énergies liées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$, respectivement.

On suppose :

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{III.4})$$

Nous aurons donc :

$$\langle i|V|j\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i\frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{v}z} W_{ij}(\vec{\rho}, z) \quad (\text{III.5})$$

Dans l'appendice I, nous montrons que $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ est sous la forme :

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = e^{i(m_j - m_i)\varphi_R} W_{ij}(\rho, z) \quad (\text{III.6})$$

où φ_R est l'angle azimutal relatif au vecteur $\vec{\rho}$, m_i et m_j sont respectivement les nombres quantiques magnétiques des états électronique $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$.

Les différentes symétries des éléments W_{ij} (voir l'appendice (II)) sont :

$$W_{ij}(z) = W_{ij}^*(z) \quad (\text{III.7a})$$

$$W_{ij}(z) = W_{ji}(z) \quad (\text{III.7b})$$

$$W_{ij}(-z) = (-1)^{l_i - l_j - m_i - m_j} W_{ij}(z) \quad (\text{III.7c})$$

$$W_{-i, -j}(z) = (-1)^{m_i - m_j} W_{ij}(z) \quad (\text{III.7d})$$

Les indices $-i, -j$ apparaissant dans le membre de gauche dans la relation (III.7d), signifient respectivement le changement simultané de m_i et m_j en $-m_i$ et $-m_j$.

L'usage de ces propriétés de symétrie conduit à une réduction notable en temps de calcul informatique et en espace de stockage en mémoire. Elle permet d'une part, de restreindre l'intervalle d'intégration sur z , $]-\infty, +\infty[$, à z positif seulement, d'autre part de réduire de manière appréciable le nombre d'éléments de matrice à calculer numériquement.

Posons :

$$d_{ij} = \frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{v} \quad (\text{III.8})$$

Nous avons alors :

$$(i|V|j) = \left[\int_{-\infty}^0 dz + \int_0^{+\infty} dz \right] e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad (\text{III.9})$$

Si la fonction $G_{ij}(x, y)$ est définie comme :

$$G_{ij}(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad (\text{III.10})$$

En utilisant les expressions (III.7a, d), on obtient les propriétés suivantes pour la fonction G_{ij} :

$$G_{ij}(-x, -y) = (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(x, y) \quad (\text{III.11})$$

$$G_{ij}(x, y) = G_{ji}^*(x, y) \quad (\text{III.12})$$

où G_{ij}^* (G_{ji}^*) étant la fonction conjuguée de G_{ij} (G_{ji})

L'expression (III.9) devient alors:

$$(i|V|j) = G_{ij}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(0, +\infty) \quad (\text{III.13})$$

Nous voyons, comme on l'a prononcé auparavant, que l'intégration dans l'intervalle $]-\infty, +\infty[$ est transformée en une seule intégration dans l'intervalle $[0, +\infty[$.

Pour faire le calcul $G_{ij}(0)$ dans l'expression (III.13), nous avons fractionné l'intervalle d'intégration sur z en deux : un intervalle $[0, \tilde{z}_{ij}[$ aussi petit que possible où l'intégration est effectuée numériquement, et un autre $[\tilde{z}_{ij}, +\infty[$ dans lequel l'intégration est faite d'une façon analytique. Ce choix des intervalles vient du fait que, à ρ donné et pour des valeurs de z suffisamment grandes (z étant ici positif), on peut définir une forme asymptotique plus simple, $W_{ij}^{as}(\rho, z)$ de $W_{ij}(\rho, z)$. Pour une transition donnée $j \rightarrow i$, la région asymptotique est définie par une valeur $\tilde{z}_{ij} \geq 0$ telle que :

$$W_{ij}(\rho, z) \approx W_{ij}^{as}(\rho, z) \quad \left(z \geq \tilde{z}_{ij} \text{ et } \tilde{z}_{ij} \geq \frac{3}{2}\rho \right) \quad (\text{III.14})$$

Nous avons alors :

$$G_{ij}(0, +\infty) = G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij}) + G_{ij}^{as}(0, \tilde{z}_{ij}) \quad (\text{III.15})$$

où :

$$G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij}) = \int_0^{\tilde{z}_{ij}} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(Z) \quad (\text{III.16})$$

et

$$G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}) = G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}, +\infty) = \int_{\tilde{z}_{ij}}^{+\infty} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}^{as}(Z) \quad (\text{III.17})$$

Notons que la fonction $G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij})$ est calculée d'une façon numérique, par contre la fonction $G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij})$ est déterminée analytiquement.

III.2 Détermination des éléments de matrice de Born de deuxième ordre :

Nous avons vu précédemment que l'amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, 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 précédemment, 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 principe variationnel de Schwinger consiste en l'évaluation des éléments de matrice $(i|VG_T^\dagger V|j)$. une mauvaise représentation de l'opérateur G_T^\dagger entraîne une erreur dans le calcul de ces éléments qui altère profondément l'amplitude de transition $T_{\beta\alpha}$, et par conséquent les prédictions physiques.

Conscient de ce problème, et dans le souci de développer et de mettre au point un formalisme capable de décrire de façon appropriée les phénomènes physiques, nous avons investi tous nos efforts, tant du point de vue analytique que numérique, dans une représentation adéquate de G_T^\dagger ; et par la même occasion dans une bonne évaluation des éléments $(i|VG_T^\dagger V|j)$.

Pour ce faire, nous allons développer l'opérateur eikonal G_T^\dagger sur une base complète constituée par les états électroniques de la cible, états propres de H_T .

On peut montrer que l'opérateur G_T^\dagger peut s'écrire sous la forme :

$$G_T^\dagger(z, z') = -\frac{i}{v} \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{z'}^z H_T(u) du\right) \theta(z - z') \quad (\text{III.18})$$

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

En remplaçant l'opérateur G_T^\pm par sa forme (III.18) dans l'élément de matrice $(i|VG_T^\pm V|j)$ et en introduisant les relations de fermeture :

$$\sum_\nu |v\rangle\langle v| = 1 \text{ et } \int d\nu |v\rangle\langle v| = 1 \quad (\text{III.19})$$

Nous pouvons alors écrire

$$(i|VG_T^\pm V|j) = [\Sigma + f]_\nu (i|V|v) \left(-\frac{i}{v}\right) \theta(z - z') (v|V|j) \quad (\text{III.20})$$

Le symbole $[\Sigma + f]_\nu$ englobe tous les états discrets et les états du continuum de la cible [1-5].

Nous remarquons que les vecteurs $|v\rangle$, comme les vecteurs $|j\rangle$, ont la forme :

$$\langle \vec{x}, z|k\rangle = e^{-i\frac{\epsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \text{ avec } (k = \nu, j) \quad (\text{III.21})$$

En simplifiant l'expression (III.20), et en utilisant la propriété de la fonction θ :

$$\theta(z - z') = \begin{cases} 1 & z \geq z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{III.22})$$

Nous pouvons alors exprimer le terme $(i|VG_T^\pm V|j)$ sous les deux formes suivantes :

$$(i|VG_T^\pm V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) [\Sigma + f]_\nu \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{\nu j}z'} W_{\nu j}(z') \quad (\text{III.23a})$$

ou

$$(i|VG_T^\pm V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) [\Sigma + f]_\nu \int_{-\infty}^{+\infty} dz' e^{id_{ij}z'} W_{\nu j}(z') \int_{z'}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \quad (\text{III.23b})$$

En développant les régions asymptotiques par les valeurs $\tilde{z}_{i\nu}$ et $\tilde{z}_{\nu j}$ suivant l'expression (III.14), deux cas peuvent être considérés :

a) $\tilde{z}_{i\nu} > \tilde{z}_{\nu j}$

Dans ce cas il est avantageux d'utiliser la relation (III.23a) pour calculer les éléments de matrice $(i|VG_T^\dagger V|j)$. En effet l'intégration sur z' est analytique au-delà de $\tilde{z}_{\nu j}$. L'intégration double se limite alors à une intégrale simple dès que $z > \tilde{z}_{\nu j}$

b) $\tilde{z}_{i\nu} < \tilde{z}_{\nu j}$

Dans ce cas il serait important d'utiliser la forme (III.23b). nous remarquons, en utilisation les relations de symétrie de W_{ij} (III.7a-d) et celles des éléments $(i|VG_T^\dagger V|j)$ déterminées dans l'annexe A-I, qu'on peut toujours revenir vers la forme (III.23a).

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

Nous avons alors, en ne considérant plus maintenant que le cas $\tilde{z}_{i\nu} > \tilde{z}_{\nu j}$:

$$(i|VG_T^\dagger V|j) = \left(-\frac{i}{\nu}\right) [\Sigma + \int]_{\nu} H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) \quad (\text{III.24})$$

où

$$H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{\nu j}z'} W_{\nu j}(z') \quad (\text{III.25})$$

En utilisant les propriétés de symétrie de W_{ij} et de la fonction G_{ij} définie par l'expression

(III.10) nous pouvons écrire:

$$H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) = G_{\nu j}^*(0, +\infty) \{ (-1)^{l_{\nu}+l_j+m_{\nu}-m_j} G_{i\nu}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{i\nu}^*(0, +\infty) \} + H_{ij}^{\nu}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j+1} H_{ij}^{\nu*}(0, +\infty) \quad (\text{III.26})$$

où :

$$H_{ij}^{\nu}(0, +\infty) = H_{ij}^{\nu}(0, \tilde{z}_{\nu j}) + H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{\nu j}, \tilde{z}_{\nu i}) + H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{\nu i}, +\infty) \quad (\text{III.27})$$

avec

$$H_{ij}^{\nu}(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) G_{\nu j}(0, z) \quad (\text{III.28})$$

Les intégrales de l'expression (III.27) ont les trois caractéristiques suivantes :

- 1)- $H_{ij}^{\nu}(0, \tilde{z}_{\nu j})$ est le résultat d'une intégration double numérique.
- 2)- $H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{\nu j}, \tilde{z}_{\nu i})$ est le résultat d'une intégration simple numérique.
- 3)- $H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{\nu i}, +\infty)$ se réduit à une expression analytique appelé $H_{ij}^{\nu as}(\tilde{z}_{\nu i})$ qui est définie comme suit :

$$H_{ij}^{\nu as}(\tilde{z}_{\nu i}) = \int_{\tilde{z}_{\nu i}}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}^{as}(z) G_{\nu j}^{as}(z) \quad (\text{III.29})$$

où :

$G_{\nu j}^{as}(z)$ est donnée par l'expression (III.17).

Pour effectuer la sommation sur les états électroniques $|i\rangle$ indiquée par l'expression (III.24), nous avons mis au point une méthode systématique qui garantit la stabilité des résultats pour chaque couple d'états $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

A des valeurs de ν , nombre quantique principal des états $|\nu\rangle$, très grandes, nous avons remarqué que des erreurs d'arrondis entraînent une instabilité des calculs. Ainsi pour prendre en compte l'ensemble des états du spectre discret, nous avons cherché une méthode de développement en $1/\nu^3$, comme celle introduite par Bethe et Salpeter [6] qui nous permet de limiter les calculs numériques à des états de ν pas trop élevé.

III.3 Calcul des éléments $W_{ij}(\vec{R})$:

III.3.1 Les éléments discret-discret

Les éléments $W_{ij}(\vec{R})$ sont donnés par la relation :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{III.30})$$

où :

$$V(\vec{R}, \vec{x}) = Z_p \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} \right] \quad (\text{III.31})$$

et

$\varphi_i^*(\vec{x})$ et $\varphi_j(\vec{x})$ sont des fonctions hydrogéoïde données par :

$$\varphi_k(\vec{x}) \equiv \varphi_{n_k l_k m_k}(\vec{x}) = R_{n_k l_k}(x) Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) \quad (\text{II.32a})$$

$$R_{n_k l_k}(x) = e^{-\frac{Z_T x}{n_k}} \sum_{\mu=0}^{n_k-l_k-1} B_{k\mu} x^{l_k+\mu} \quad (\text{II.32b})$$

$$B_{k\mu} \equiv B_{n_k l_k \mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(n_k + l_k)! (n_k - l_k - 1)!]^{1/2} \frac{(2Z_T)^{l_k+\mu+\frac{3}{2}}}{n_k^{l_k+\mu+2}} \frac{(-1)^\mu}{(n_k-l_k-1-\mu)!(2l_k+1+\mu)!\mu!} \quad (\text{III.32c})$$

$Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x})$ est une harmonique sphérique dont l'expression est :

$$Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) = \left[\frac{2l_k+1}{4\pi} \right]^{1/2} \left[\frac{(l_k-m_k)!}{(l_k+m_k)!} \right]^{1/2} (-1)^{m_k} P_{l_k}^{m_k}(\cos \theta_x) e^{im_k \varphi_x} \quad (\text{III.32d})$$

où θ_x et φ_x sont les angles polaires relatifs au vecteur \vec{x} .

$P_{l_k}^{m_k}$ est la fonction de Legendre s définie par [7, 8]:

$$P_{l_k}^{m_k}(x) = (1 - x^2)^{\frac{m_k}{2}} \frac{d^{m_k}}{dx^{m_k}} P_{l_k}(x) \quad \text{pour } m_k \geq 0 \quad (\text{III.32e})$$

$$P_{l_k}^{-m_k}(x) = (-1)^{m_k} \frac{(l_k - m_k)!}{(l_k + m_k)!} P_{l_k}^{m_k}(x) \quad \text{pour } -m_k < 0 \quad (\text{III.32f})$$

où $P_{l_k}(x)$ est le polynôme de Legendre.

Les deux expressions (III.1) et (III.2) nous permettent d'écrire :

$$W_{ij} = Z_p \left[\frac{\delta_{ij}}{R} - I(\vec{R}) \right] \quad (\text{III.33a})$$

où :

$$I(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{III.33b})$$

Si on fait le développement multipolaire de $\frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|}$ (voir [9]) :

$$\frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{x}) \quad (\text{III.33c})$$

où $r_{<}$ et $r_{>}$ désignent respectivement le plus petit et le plus grand des modules R et x ,
l'intégrale (III.34b) devient :

$$I(\vec{R}) = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} L_l(R) Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{R}) \cdot J \quad (\text{III.34a})$$

avec :

$$L_l(R) = \int_0^{+\infty} dx x^2 R_i(x) R_j(x) \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} \quad (\text{III.34b})$$

et J une intégrale bien connue :

$$J = (-1)^{m_i} \int d\hat{x} Y_l^m(\hat{x}) Y_{l_i}^{-m_i}(\hat{x}) Y_{l_j}^{-m_j}(\hat{x}) \quad (\text{III.34c})$$

qui est égale à :

$$J = (-1)^{m_i} \left[\frac{(2l+1)(2l_i+1)(2l_j+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \quad (\text{III.34d})$$

Suivant les propriétés des coefficients 3J de Wigner nous avons les règles de sélection suivantes pour que J soit $\neq 0$:

$$l + l_i + l_j = 2p \quad p \in N \quad (\text{III.35a})$$

$$|l_i - l_j| \leq l \leq l_i + l_j \quad (\text{III.35b})$$

$$m = m_i - m_j \quad (\text{III.35c})$$

Revenons à l'intégrale radiale et considérons d'abord le cas $l = 0$:

$$L_0(R) = \frac{1}{R} \int_0^R dx x^2 R_i(x) R_j(x) + \int_R^{+\infty} dx x R_i(x) R_j(x) \quad (\text{III.36a})$$

$$L_0(R) = \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{1}{R} \int_R^{+\infty} dx x^2 R_i(x) R_j(x) + \int_R^{+\infty} dx x R_i(x) R_j(x) \quad (\text{III.36b})$$

En explicitant les fonctions radiales $R_i(x)$ et $R_j(x)$ suivant l'expression (III.33b), nous obtenons :

$$L_0(r) = \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{e^{-\alpha_{ij}R}}{R} \sum_{\mu, \nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N_0-1)!}{(\alpha_{ij})^{N_0}} \sum_{p=0}^{N_0-1} C_{N_0}(p) (\alpha_{ij} R)^p \quad (\text{III.36c})$$

avec

$$\alpha_{ij} = Z_T \left(\frac{1}{n_i} + \frac{1}{n_j} \right) \quad (\text{III.36d})$$

$$N_0 = l_i + l_j + \mu + \nu + 3 \quad (\text{III.36e})$$

$$C_{N_0}(p) = \begin{cases} 1 & \text{pour } p = 0 \\ \frac{1}{p!} + \frac{1}{N_0-1} \frac{1}{(p-1)!} & \text{pour } 1 \leq p \leq N_0 - 1 \end{cases} \quad (\text{III.36f})$$

Pour $l \neq 0$, nous obtenons :

$$L_{l \neq 0}(r) = \sum_{\mu, \nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \int_0^{+\infty} dx \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij} x} \quad (\text{III.37})$$

L'intégrale sur x conduit aux intégrales suivantes :

$$\int_0^{+\infty} dx \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij} x} = \frac{1}{R^{l+1}} \int_0^R dx x^{N-1} e^{-\alpha_{ij} x} + R^l \int_R^{+\infty} dx x^{N-2(l+1)} e^{-\alpha_{ij} x} \quad (\text{III.38a})$$

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} dx \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij} x} = \\ \frac{1}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} \frac{(\alpha_{ij} R)^p}{p!} \right\} + R^l \frac{[N-2(l+1)]!}{\alpha_{ij}^{N-2(l+1)}} e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{q=0}^{N-2(l+1)} \frac{(\alpha_{ij} R)^q}{q!} \end{aligned} \quad (\text{III.38b})$$

où N est défini comme :

$$N = N_0 + l \quad (\text{III.38c})$$

L'équation (III.38) devient alors :

$$L_{l \neq 0}(R) = \sum_{\mu, \nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij} R)^p \right\} \quad (\text{III.39a})$$

où :

$$C_{N,l}(p) = \begin{cases} \frac{1}{p!} & \text{pour } 0 \leq p \leq 2l \\ \frac{1}{p!} - \frac{1}{(N-1)!} \frac{[N-2(l+1)]!}{[p-2(l+1)]!} & \text{pour } 2l+1 \leq p \leq N-1 \end{cases} \quad (\text{III.39b})$$

A partir des expressions (III.37b) et (III.40a), l'intégrale $I(\vec{R})$ définie par l'expression (III.35a) devient :

$$I(\vec{R}) = \frac{\delta_{ij}}{R} + \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^{m*}(\hat{R}) \cdot J$$

$$\sum_{\mu, \nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \left\{ (1 - \delta_{l,0}) - e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij} R)^p \right\} \quad (\text{III.40})$$

En explicitant $Y_l^{m*}(\hat{R})$ et l'intégrale, et en utilisant les règles de sélections (III.36a-c), nous limitons la somme sur l aux valeurs soit paires, soit impaires et la somme sur m à un seul terme ($m = m_i - m_j$).

On obtient alors, à partir de (III.34a) :

$$W_{ij}(\vec{R}) = W_{ij}(\vec{R}_0) e^{-im \varphi_R} \quad (\text{III.41a})$$

\vec{R}_0 représente le vecteur \vec{R} avec un angle $\varphi_{R_0} = 0$

où :

$$W_{ij}(\vec{R}_0) = Z_p \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} A_l^{m_i m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_i-1} \sum_{\nu=0}^{n_j-l_j-1} B_{n_i l_i \mu} B_{n_j l_j \nu} \frac{P_l^m(\cos(\theta_R))}{R^{l+1}} \times \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \left\{ e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij} R)^p - (1 - \delta_{l,0}) \right\} \quad (\text{III.41b})$$

avec :

$$A_l^{m_i m_j} = (-1)^{m_j} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \times \left[\begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \right] \quad (\text{III.41c})$$

et :

$$l_{\min} = \sup[|l_i - l_j|, |m_i - m_j|] \quad (\text{III.41d})$$

$$l_{\max} = l_i + l_j \quad (\text{III.41e})$$

L'expression (III.31) peut être écrite sous la forme :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \langle \varphi_i | V(R^{\rightarrow}, x^{\rightarrow}) | \varphi_j \rangle \quad (\text{III.42a})$$

En tenant compte du fait que \vec{R} est donné par une rotation de \vec{R}_0 d'un angle φ_R autour de l'axe z on peut alors écrire :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \langle \varphi_i | \mathfrak{R} V(\vec{R}_0, \vec{x}) \mathfrak{R}^{-1} | \varphi_j \rangle \quad (\text{III.42b})$$

où \mathfrak{R} est l'opérateur de rotation ; donné par $\mathfrak{R} = e^{-iL_z \varphi_R}$.

Il vient alors :

$$W_{ij}(\vec{R}) = e^{i(m_j - m_i)\varphi_R} \langle \varphi_i | V(\vec{R}_0, \vec{x}) | \varphi_j \rangle \quad (\text{III.42c})$$

soit :

$$W_{ij}(\vec{R}) = e^{-im\varphi_R} W_{ij}(\vec{R}_0) \quad (\text{III.42d})$$

avec:

$$m = m_j - m_i \quad (\text{III.42e})$$

De la même manière on va déduire une relation analogue pour $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$.

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \langle \beta | a(\vec{\rho}) | \alpha \rangle \quad (\text{III.43a})$$

où encore :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \langle \beta | \mathfrak{R} a(\vec{\rho}_0) \mathfrak{R}^{-1} | \alpha \rangle \quad (\text{III.43b})$$

où $\vec{\rho}_0$ désigne le paramètre d'impact, projection de \vec{R}_0 sur le plan transverse ($\varphi_R = \varphi_0$).

On aura donc :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = e^{i(m_\alpha - m_\beta)\varphi_R} \langle \beta | a(\vec{\rho}_0) | \alpha \rangle \quad (\text{III.43c})$$

qui s'écrit encore :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = e^{i(m_\alpha - m_\beta)\varphi_R} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}_0) \quad (\text{III.43d})$$

On peut également déterminer cette expression en utilisant la forme (III.12a) des W_{ij} dans l'expression (III.37) de $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$.

III.3.2 Les éléments discret-continu

Pour une transition état discret- continu de la cible, les éléments de matrice de Born I sont donnés par:

$$(i|V|c) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle i|V|c \rangle \quad (\text{III.44})$$

Il est connu que :

$$\langle \vec{x}, z|k \rangle = e^{-i\frac{\epsilon k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \quad (\text{III.45})$$

avec : $k = i, c$

En substituant (III.45) dans (III.44), on obtient :

$$(i|V|c) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int d\vec{x} e^{i\frac{\epsilon i}{v}z} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) e^{-i\frac{\epsilon c}{v}z} \varphi_c(\vec{x}) \quad (\text{III.46})$$

Notons que les éléments de matrice $W_{ic}(\vec{R})$ sont donnés par la relation suivante :

$$W_{ic}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{\rho}, \vec{x}) \varphi_c(\vec{x}) \quad (\text{III.47})$$

Où $V(\vec{R}, \vec{x})$ représente le potentiel effectif, définit par :

$$V(\vec{R}, \vec{x}) = Z_p \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} \right] \quad (\text{III.48})$$

Remplaçant (III.48) dans (III.47), nous trouvons:

$$W_{ic}(\vec{R}) = Z_p \left[\frac{\delta_{ic}}{R} - W'_{ic}(\vec{R}) \right] \quad (\text{III.49})$$

avec :

$$W'_{ic}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} \varphi_c(\vec{x}) \quad (\text{III.50})$$

Nous avons :

$$\frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} = \sum_{l=|l_i-l_v|}^{l_i+l_v} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{x}) \quad (\text{III.51})$$

L'état initial conjugué est exprimé par :

$$\varphi_i^*(\vec{x}) = R_{n_i l_i}^*(x) Y_{l_i}^{m_i^*}(\hat{x}), \quad (\text{III.52a})$$

et la fonction radiale est défini par :

$$R_{n_i l_i}^*(x) = e^{-\frac{Z_T x}{n_k}} \sum_{\mu=0}^{n_i - l_i - 1} B_{i\mu} x^{l_i + \mu} \quad (\text{III.52b})$$

La fonction radial correspondante à un état continu est donnée par :

$$F_{k, l_\nu}(x) = 2 \left[\frac{\prod_{s=1}^{l_\nu} (s^2 + \gamma^2)}{\gamma(1 - e^{-2\pi\gamma})} \right]^{1/2} \frac{(2kx)^{l_\nu}}{(2l_\nu + 1)!} e^{-ikx} {}_1F_1(l_\nu + 1 + i\gamma; 2l_\nu + 2; 2ikx) \quad (\text{III.52c})$$

Remplaçant les relations des deux fonctions radiales précédentes dans l'expression (III.50), nous obtenons l'expression de l'élément de matrice suivante:

$$W'_{ic}(\vec{R}) = \sum_{l=|l_i - l_\nu|}^{l_i + l_\nu} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} \mathcal{L}_{ic}^l Y_l^{m^*}(\hat{R}) J_{ic}^l \quad (\text{III.53})$$

Tel que l'intégrale J_{ic}^l figurant dans l'équation précédente est donné par :

$$J_{ic}^l = (-)^{m_i} \left[\frac{(2l+1)(2l_i+1)(2l_\nu+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & l_i & l_\nu \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_\nu \\ m & -m_i & m_\nu \end{pmatrix} \quad (\text{III.54})$$

La valeur de l'intégral radial \mathcal{L}_{ic}^l mentionnée dans l'équation (III.53), est exprimée par :

$$\mathcal{L}_{ic}^l = \int_0^\infty dx x^2 R_{n_i l_i}^*(x) F_{k, l_\nu}(x) \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \quad (\text{III.55})$$

Après quelque amendement L'équation (III.55) devient :

$$\mathcal{L}_{ic}^l = \frac{(2kx)^{l_\nu}}{(2l_\nu + 1)!} \left[\frac{\prod_{s=1}^{l_\nu} (s^2 + \gamma^2)}{\gamma(1 - e^{-2\pi\gamma})} \right]^{1/2} \sum_{\mu=0}^{n_i - l_i - 1} B_{i\mu} L_{ic}^{l_\mu} \quad (\text{III.56})$$

où :

$$L_{ic}^{l\mu}(R) = \int_0^\infty dx x^{l_\nu+l_i+\mu+2} \frac{r_{>}^l}{r_{>}^{l+1}} \exp\left(-\frac{Z_T x}{n_i} - ikx\right) F_1(l_\nu + 1 + i\gamma; 2l_\nu + 2; 2ikx) \quad (\text{III.57})$$

$$L_{ic}^{l\mu}(R) = \frac{\Gamma(2l_\nu+2)}{\Gamma(l_\nu+1+i\gamma)\Gamma(l_\nu+1-i\gamma)} \int_0^1 dt t^{l_\nu+i\gamma} (1-t)^{l_\nu-i\gamma} \int_0^\infty dx x^{l_\nu+l_i+\mu+2} \frac{r_{>}^l}{r_{>}^{l+1}} e^{-\left(\frac{Z_T}{n_i}+ik-2ikt\right)x} \quad (\text{III.58})$$

Pour $l = 0$

$$L_{ic}^{l\mu}(R) = \frac{\Gamma(2l_\nu+2)}{\Gamma(l_\nu+1+i\gamma)\Gamma(l_\nu+1-i\gamma)} \int_0^1 dt t^{l_\nu+i\gamma} (1-t)^{l_\nu-i\gamma} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{R} \int_0^R dx x^{N-1} e^{-\alpha_{ic} x} \\ + \int_R^{+\infty} dx x^{N-2(l+1)} e^{-\alpha_{ic} x} \end{array} \right] \quad (\text{III.59})$$

où :

$$N_0 = l_\nu + l_i + \mu + 3$$

$$N = N_0 + l$$

$$\alpha_{ic} = \frac{Z_T}{n_i} + ik - 2ikt$$

Pour $l \neq 0$

$$L_{ic}^{l\mu}(R) = \frac{\Gamma(2l_\nu+2)}{\Gamma(l_\nu+1+i\gamma)\Gamma(l_\nu+1-i\gamma)} \int_0^1 dt t^{l_\nu+i\gamma} (1-t)^{l_\nu-i\gamma} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{R} \int_0^R dx x^{N-1} e^{-\alpha_{ic} x} \\ + \int_R^{+\infty} dx x^{N-2(l+1)} e^{-\alpha_{ic} x} \end{array} \right] \quad (\text{III.60})$$

En intégrant les deux dernières intégrations dans la formule précédente par rapport x , nous obtenons :

$$L_{ic}^{l\mu}(R) = \frac{\Gamma(2l_\nu+2)}{\Gamma(l_\nu+1+i\gamma)\Gamma(l_\nu+1-i\gamma)} \int_0^1 dt t^{l_\nu+i\gamma} (1-t)^{l_\nu-i\gamma} \left[\begin{array}{l} \frac{1}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ic})^N} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ic} R} \sum_{p=0}^{N-1} \frac{(\alpha_{ic} R)^p}{p!} \right\} \\ + R^l \frac{[N-2(l+1)]!}{(\alpha_{ic})^{N-(2l+1)}} e^{-\alpha_{ic} R} \sum_{p=0}^{N-1} \frac{(\alpha_{ic} R)^p}{p!} \end{array} \right] \quad (\text{III.61})$$

Après quelque simplification, la relation (III.61) devient :

$$L_{ic}^{l\mu}(R) \frac{\Gamma(2l_\nu+2)}{\Gamma(l_\nu+1+i\gamma)\Gamma(l_\nu+1-i\gamma)} \int_0^1 dt t^{l_\nu+i\gamma} (-t)^{l_\nu-i\gamma} \left\{ -e^{-\alpha_{ic} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(P) (\alpha_{ic} R)^p \right\} \quad (\text{III.62})$$

où :

$$C_{N,l}(P) \begin{cases} \frac{1}{P!} & \text{pour } 0 \leq P \leq 2 \\ \frac{1}{P!} - \frac{1}{(N-1)!} \frac{[N-2(l+1)]!}{[N-2(l+1)]!} & \text{pour } 2l+1 \leq P \leq N-1 \end{cases} \quad (\text{III.63})$$

Soit:

$$W_{ic}(\vec{R}) = W_{ic}(\vec{R}_0) e^{im\varphi_R}$$

Tel que :

$$W_{ic}(\vec{R}_0) = z_p \frac{(2kx)^{l_v}}{(2l_v+1)!} \left[\prod_{s=1}^{l_v} (s^2 + \gamma^2) \right]^{1/2} \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} A_{l l_v}^{m m_v} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_i-1} B_{i\mu} \frac{\Gamma(2l_v+2)}{\Gamma(l_v+1+i\gamma)\Gamma(l_v+1-i\gamma)} \int_0^1 dt t^{l_v+i\gamma} (1-t)^{l_v-i\gamma} \frac{p_l^m(\cos\theta_R)}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ic})^N} \left(e^{-\alpha_{ic}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(P) (\alpha_{ic}R)^P - (1-\delta_{l,0}) \right) \quad (\text{III.64})$$

et :

$$R = \sqrt{z^2 + \rho^2} \quad (\text{III.65})$$

$$\cos\theta_R = \frac{z}{R} \quad (\text{III.66})$$

III.3.3 Les éléments continu-continu

Pour la transition d'état continu continu, les éléments du $W_{cc'}(\vec{R})$ sont donnés par la relation suivante :

$$W_{cc'}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_c^*(\vec{x}) V(\vec{\rho}, \vec{x}) \varphi_{c'}(\vec{x}) \quad (\text{III.67})$$

$$W_{cc'}(\vec{R}) = z_p \int d\vec{x} F_{k,l_v}^*(x) Y_{l_v}^{m_v^*}(\hat{R}) \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} F_{k',l_v'}(x) Y_{l_v'}^{m_v'}(\hat{x}) \quad (\text{III.68})$$

Suivant les propriétés des coefficients 3J de Winger nous avons la règle de sélection suivante:

$$|l_v - l_v'| \leq |l| \leq |l_v + l_v'| \quad (\text{III.69})$$

Si on fait un développement multipolaire de $\frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|}$ tel que

$$\frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{x}) \quad (\text{III.70})$$

L'intégrale (III.68) devient,

$$W_{cc'}(\vec{R}) = \sum_{l=|l_v-l_{v'}|}^{l_v+l_{v'}} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} \mathcal{L}_{cc'}^l(R) Y_l^{m*}(R) J_{cc'}^l. \quad (\text{III.71})$$

Notons que :

$$J_{cc'}^l = (-)^{m_i} \left[\frac{(2l+1)(2l_v+1)(2l_{v'}+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & l_v & l_{v'} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_v & l_{v'} \\ m & -m_v & m_{v'} \end{pmatrix} \quad (\text{III.72})$$

et :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{cc'}^l &= \int_0^{+\infty} dx x^2 F_{k,l_v}^*(x) F_{k',l_{v'}}(x) \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} \\ &= 4 \frac{(2k)^{l_v}}{(2l_v+1)!} \frac{(2k)^{l_{v'}}}{(2l_{v'}+1)!} \left[\frac{\prod_{s=1}^{l_v} (s^2+\gamma^2)}{\gamma(1-e^{-2\pi\gamma})} \right]^{1/2} \left[\frac{\prod_{s=1}^{l_{v'}} (s'^2+\gamma'^2)}{\gamma'(1-e^{-2\pi\gamma'})} \right]^{1/2} L_{cc'}^l \end{aligned} \quad (\text{III.73})$$

Où l'intégrale radiale est comme suit :

$$\begin{aligned} L_{cc'}^l &= \int_0^{+\infty} dx x^{2+l_v+l_{v'}} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} {}_1F_1(l_v+1+i\gamma; 2l_v+2; 2ikx) \\ &\quad \times {}_1F_1(l_{v'}+1+i\gamma'; 2l_{v'}+2; 2ik'x) \end{aligned} \quad (\text{III.74})$$

En développant les fonctions hypergéométriques, nous aurons :

$$\begin{aligned}
 L_{cc'}^l &= \frac{\Gamma(2l_v + 2)\Gamma(2l_{v'} + 2)}{\Gamma(l_v + 1 + i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 + i\gamma')\Gamma(l_v + 1 - i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 - i\gamma')} \\
 &\times \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 t_1^{l_v+i\gamma} t_2^{l_{v'}+i\gamma'} (1-t_1)^{l_v-i\gamma} \\
 &\times (1-t_2)^{l_{v'}-i\gamma'} \int_0^\infty dx x^{2+l_v+l_{v'}} e^{-ix[(k+k')-(2kt_1+2k't_2)]} \frac{r_{>}^l}{r_{>}^{l+1}}, \tag{III.75}
 \end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}
 L_{cc'}^l &= \frac{\Gamma(2l_v + 2)\Gamma(2l_{v'} + 2)}{\Gamma(l_v + 1 + i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 + i\gamma')\Gamma(l_v + 1 - i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 - i\gamma')} \\
 &\times \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 t_1^{l_v+i\gamma} t_2^{l_{v'}+i\gamma'} (1-t_1)^{l_v-i\gamma} \\
 &\times (1-t_2)^{l_{v'}-i\gamma'} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty dx x^{N_0-1} e^{-(\varepsilon+iq)x} \frac{r_{>}^l}{r_{>}^{l+1}}. \tag{III.76}
 \end{aligned}$$

Avec :

$$\begin{aligned}
 N_0 &= l_v + l_{v'} + 3 \\
 N &= N_0 + l \\
 \alpha_{cc'} &= (\varepsilon + iq) = (\varepsilon + i[(k+k') - (2kt_1 + 2k't_2)])
 \end{aligned}$$

On intégrant le dernier terme de l'équation (III.76) par rapport à x, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty dx x^{N_0-1} e^{-\alpha_{cc'}x} \frac{r_{>}^l}{r_{>}^{l+1}} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{R^{l+1}} \int_0^R dx x^{N-1} e^{-\alpha_{cc'}x} + R^l \int_R^{+\infty} dx x^{N-2(l+1)} e^{-\alpha_{cc'}x} \right] \\
 &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{cc'})^N} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{cc'}R} \sum_{p=0}^{N-1} \frac{(\alpha_{cc'}R)^p}{p!} \right\} \right. \\
 &\quad \left. + R^l \frac{[N-2(l+1)]!}{(\alpha_{cc'})^{N-2(l+1)}} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{cc'}R} \sum_{q=0}^{N-2(l+1)} \frac{(\alpha_{cc'}R)^q}{q!} \right\} \right] \tag{III.77}
 \end{aligned}$$

La Relation (III.76) devient alors :

$$\begin{aligned}
 L_{cc'}^l &= \frac{\Gamma(2l_v + 2)\Gamma(2l_{v'} + 2)}{\Gamma(l_v + 1 + i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 + i\gamma')\Gamma(l_v + 1 - i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 - i\gamma')} \\
 &\times \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 t_1^{l_v+i\gamma} t_2^{l_{v'}+i\gamma'} (1-t_1)^{l_v-i\gamma} \\
 &\times (1-t_2)^{l_{v'}-i\gamma'} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{cc'})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \{1 - e^{-\alpha_{cc'} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p)(\alpha_{cc'} R)^p\} \quad (III.78)
 \end{aligned}$$

où :

$$C_{N,l}(p) = \begin{cases} \frac{1}{p!} & \text{pour } 0 \leq p \leq 2 \\ \frac{1}{p!} - \frac{1}{(N-1)!} \frac{[N-2(l+1)]!}{[p-(2l+1)]!} & \text{pour } 2l+1 \leq p \leq N-1 \end{cases}$$

On en déduit alors $W_{cc'}(\rho, z)$ apparaissant dans l'équation (III.71) comme suit :

$$\begin{aligned}
 W_{cc'}(\rho, z) &= 4z_p \left[\frac{\prod_{s=1}^{l_v} (s^2 + \gamma^2)}{\gamma(1 - e^{-2\pi\gamma})} \right]^{1/2} \left[\frac{\prod_{s'=1}^{l_{v'}} (s'^2 + \gamma'^2)}{\gamma'(1 - e^{-2\pi\gamma'})} \right]^{1/2} \frac{(2k)^{l_v}}{(2l_v + 1)!} \frac{(2k')^{l_{v'}}}{(2l_{v'} + 1)!} \\
 &\times \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} A_{l l_v l_{v'}}^{m_v m_{v'}} \frac{\Gamma(2l_v + 2)\Gamma(2l_{v'} + 2)}{\Gamma(l_v + 1 + i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 + i\gamma')\Gamma(l_v + 1 - i\gamma)\Gamma(l_{v'} + 1 - i\gamma')} \\
 &\times \int_0^1 dt_1 \int_0^1 dt_2 t_1^{l_v+i\gamma} t_2^{l_{v'}+i\gamma'} (1-t_1)^{l_v-i\gamma} (1-t_2)^{l_{v'}-i\gamma'} \frac{P_l^m\left(\frac{z}{R}\right)}{R^{l+1}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{cc'})^N} \\
 &\times \{e^{-\alpha_{cc'} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p)(\alpha_{cc'} R)^p - (1 - \delta_{l,0})\} \quad (III.79)
 \end{aligned}$$

Bibliographie :

- [1] M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I (1988).
- [2] R. Gayet and M. Bouamoud Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 (1989) 515-522.
- [3] B. Lasri, Thèse de Magistère, Institut de Physique, Université de Tlemcen, Juin (1998).
- [4] B. Lasri , M. Bouamoud et R. Gayet, Physical and Chemical News Journal, Volume 20, (2004) 12.
- [5] B. Lasri , A. Bouserhane, M. Bouamoud and R. Gayet ,Physical and Chemical News Journal, Volume 28, Mars 2006, p. 97 -102.
- [6] H. A. Bethe et E. E. Salpeter, Springer-Verlag, Berlin, 1957
- [7] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists, Academic Press, Inc. (1985).
- [8] A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov et O.I. Marichev, Integrals and Series, Gordon and Breach Science Publishers (1992).
- [9] M. Abramowitz et I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, National Bureau of Standard 1972.

CHAPITRE IV

*EXCITATION DE L'ATOME
D'HYDROGÈNE PAR IMPACT DE
PROTONS*

IV.1 Introduction :

Le processus d'excitation atomique par impact d'ions représente un des domaines les plus importants de la physique des collisions.

Durant ces dernières décennies, la collision entre l'atome d'hydrogène et les protons a été intensivement étudiée car l'atome d'hydrogène est la cible la plus idéale pour la mise en œuvre des méthodes théoriques et des approximations conçues pour étudier et tester ces divers processus. L'analyse des informations qu'apportent ces études joue un rôle tant fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes naturels dans plusieurs domaines de la physique comme celle des plasmas, l'astrophysique et la biophysique.

Les études expérimentales et théoriques des processus collisionnels sont très nombreuses. La section efficace totale est la grandeur essentielle accessible à la théorie et à l'expérience caractérisant l'importance des différents processus collisionnels induits lors de collisions atomiques et moléculaires.

Plusieurs expériences permettent de collecter des informations détaillées sur les mécanismes physiques lors de la collision entre l'atome d'hydrogène et un proton pour une gamme d'énergie assez grande.

Dans ce contexte, nous pouvons citer les mesures expérimentales suivantes :

Morgan et al (1973) [1], Park et al (1976) [2], Donnelly et al (1991) [3], Detleffsen et al (1994) [4], Higgins et al (1996) [5].

Théoriquement, ce type de collisions constitue un défi majeur pour des théoriciens, avec la mise à l'épreuve de multiples techniques et approximations dans ce domaine de collision.

Dans ce qui suit, nous présentons plusieurs travaux théoriques de grande ampleur utilisant divers modèles :

Bouamoud (1988) [6], Bouamoud et Gayet (1988) [7], Ford et al (1993) [8], Slim et Ermolaev (1994) [9], McLaughlin et al (1997) [10], Martin (1999) [11], Lasri (1998) [12].

Dans ce chapitre nous nous sommes intéressés à l'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons à des énergies allant de 2 keV à 200 keV dans le système du Laboratoire afin de comparer nos résultats théoriques avec des données expérimentales ainsi qu'avec d'autres résultats obtenus à partir d'autres modèles théoriques et parmi lesquels nous citons ceux basés sur la méthode Close - Coupling (ondes couplées) qui continue jusqu'à ces jours à susciter un grand intérêt des chercheurs dans le monde.

IV.2 Notre méthode variationnelle:

L'objectif principal de notre travail est de développer une méthode variationnelle, basée sur le Principe Variationnel de Schwinger, afin de l'appliquer au calcul des sections efficaces totales d'excitation d'atomes par impact d'ions et qui serait valable dans un domaine d'énergie excluant un traitement de perturbation et surtout à basse énergie où il existe un couplage fort entre les voies d'excitation et de capture.

L'avantage de l'approche variationnelle tient à sa capacité de se satisfaire d'une fonction d'onde d'essai qui soit une approximation raisonnable de la fonction d'onde réelle du problème considéré.

Parmi les nombreuses méthodes utilisées nous nous sommes intéressés à un aspect basé sur les équations intégrales: le principe variationnel de Schwinger.

Le principe variationnel de Schwinger est fondé sur l'obtention d'une forme stationnaire de l'amplitude de transition par rapport à de petites variations de la fonction d'onde des états de diffusion $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$.

Ce traitement variationnel basé sur la forme fractionnaire du Principe Variationnel de Schwinger offre une approche intéressante pour des calculs de sections efficaces totales d'excitation des niveaux $n=2$ et $n=3$ de l'atome d'hydrogène par impact de protons aux énergies intermédiaires ainsi qu'aux basses énergies. Nos prédictions théoriques sont en très bon accord avec d'autres données théoriques et expérimentales.

Dans un premier temps, nous avons étudié l'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons ($ZP= ZT =1$) à des énergies variant de 2 keV à 200 keV dans le système du Laboratoire, dans le but de comparer nos résultats aux résultats théoriques et expérimentaux existants dans ce domaine d'énergies.

En 1984, Brendlé [13] a développé cette méthode pour l'étude de l'excitation d'ions et d'atomes par impact de noyaux nus aux vitesses intermédiaires en utilisant une base composée seulement de deux vecteurs représentant les seuls états initial a et final b bien que le choix de cette base ne satisfasse pas exactement les conditions asymptotiques et s'avérait insuffisante.

L'application du principe variationnel de Schwinger a été étudiée aussi par Bouamoud [6,7].

Il a développé un nouveau code informatique de calcul en Fortran qui calcule les sections efficaces totales d'excitation en utilisant une base constituée de cinq états de la cible et en

incluant la contribution de la totalité du spectre discret de cette cible dans la représentation de l'opérateur de Green.

En 1998, B. Lasri [12] a ajouté les états du continuum de la cible proches du seuil d'ionisation en plus de la totalité du spectre discret dans la représentation de l'opérateur de Green. Cependant, la contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation s'avère petite sans toutefois être négligeable. Ainsi, pour étudier l'excitation du niveau $n=2$, $n=3$ de l'atome hydrogène par impact de protons, les fonctions d'onde de diffusion $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ ont été développées sur une base composée de 5 états $\{1s, ns, np_0, np_{+1}, np_{-1}\}$.

Dans ce travail les états de diffusion ont été développés respectivement sur la base finie des vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ constitués par les états liés ainsi que ceux du continuum de la cible.

Rappelons que les états exacts du continuum de la cible ont été introduits dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion comme états intermédiaires pour décrire les états de capture. En effet, il existe un fort couplage entre les voies d'excitation et la capture électronique aux énergies intermédiaires.

Le but de ce travail est d'apprécier la contribution des états du continuum de la cible dans le calcul des sections efficaces totales d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons aux énergies intermédiaires.

Dans un premier temps nous avons élargi ainsi la base de 5 états discrets utilisée dans les précédents travaux, à 6 états puis à 7 états, c'est à dire en ajoutant un seul état du continuum puis deux états.

Les éléments de matrice qui interviennent dans l'évaluation de l'amplitude de transition liés à l'introduction des états exacts du continuum de la cible sont de deux types : éléments discret-continu et continu-continu des termes dits de Born1 et Born2. Ces derniers ont été déterminés de façon analytique et numérique dans des sous - programmes de calcul informatique et bien testés.

Le continuum a été représenté par des états exacts de la cible décrits par les fonctions hypergéométriques confluentes qui sont très difficiles à manipuler surtout quand il s'agit de calculer les éléments de matrice continu-continu.

Les calculs concernant les éléments dits de Born1 qui interviennent dans la matrice de transition variationnelle ont été effectués normalement.

Par contre nous avons trouvé certains problèmes de convergence dans l'évaluation des éléments dits de Born 2 qui sont dûs à des problèmes numériques liés au calcul d'intégrales doubles très compliquées où interviennent des produits de fonctions hypergéométriques confluentes.

Cependant nous avons trouvé des procédures pour surmonter ces problèmes de convergence et calculer ces éléments.

Nous avons élargi ensuite la base de 5 états (Schwinger 55 (S55)) à 10 états (Schwinger1010 (S1010)), puis à 11 états (Schwinger1111(S1111)) en ajoutant un seul état du continuum de la cible dans le développement de la fonction d'onde de diffusion

Enfinement et dans le but de voir l'effet d'une base élargie dans la description de la fonction d'onde totale de diffusion, nous avons augmenté la base à 14 états puis à 30 états en incluant les états électroniques n=4 de la cible. Ce développement selon notre nouvelle approche de Schwinger à 30 états sera noté par S3030 et la matrice D à inverser sera donnée comme suit :

	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	4s	4p ₀	4p ₊₁	4p ₋₁	4d ₀	4d ₊₁	4d ₋₁	4d ₊₂	4d ₋₂	4f ₀	4f ₊₁	4f ₋₁	4f ₊₂	4f ₋₂	4f ₊₃	4f ₋₃
1s	x	x	x	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
2s		x	x	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
2p ₀			x	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
2p ₊₁				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
2p ₋₁					0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3s						x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
3p ₀							x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
3p ₊₁								x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
3p ₋₁									0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3d ₀										x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
3d ₊₁											x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
3d ₋₁												0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3d ₊₂													x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
3d ₋₂														0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4s															x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
4p ₀																x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
4p ₊₁																	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
4p ₋₁																		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4d ₀																			x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0
4d ₊₁																				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
4d ₋₁																					0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4d ₊₂																						x	x	x	x	x	x	x	x	x
4d ₋₂																							0	0	0	0	0	0	0	0
4f ₀																								x	x	0	x	0	x	0
4f ₊₁																									x	x	x	x	x	x
4f ₋₁																										0	0	0	0	0
4f ₊₂																											x	x	x	x
4f ₋₂																												0	0	0
4f ₊₃																													x	x
4f ₋₃																														0

X : désignent les éléments à calculer.

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

Une fois les éléments $D_{ij} = (i|V - VG_T^+V|j)$ de la matrice D à inverser calculés, on peut déterminer la valeur de l'amplitude de transition variationnelle $\tilde{\alpha}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ (II.55) et par conséquent déduire la section efficace totale d'excitation par intégration sur le paramètre d'impact.

Rappelons que grâce à des règles de symétrie nous avons pu réduire et d'une manière assez considérable le temps de calcul. Ainsi une matrice de 30x30 qui nécessiterait le calcul de 900 éléments se réduisait à l'évaluation de 265 éléments seulement. Ceci nous a fourni un gain énorme en temps machine pour les calculs.

IV.3 Résultats et discussion :

IV.3.1 Les sections efficaces totales d'excitation des états 2s et 2p :

Les sections efficaces totales de l'excitation des sous-niveaux 2s et 2p de l'atome d'hydrogène par impacts de protons sont exposées dans les tableaux (1, 2, 3) et les figures 1-3. Elles sont comparées avec d'autres approches théoriques ainsi qu'avec des données expérimentales disponibles.

Initialement, l'étude de l'excitation de l'atome d'hydrogène a été réalisée avec une approximation appelée S55 [6, 7] (S se référant à Schwinger, 55 se référant à 5 états dans chaque ensemble de bases), où les cinq états $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$ ont été inclus dans la base finie des vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$. Récemment, pour décrire le fort couplage entre l'excitation et la capture, une tentative a été effectuée en ajoutant les états $n = 3$ comme états intermédiaires dans le développement de la fonction d'onde de diffusion, afin d'estimer les contributions des états intermédiaires de la cible dans les sections efficaces d'excitation des états 2s et 2p de l'atome d'hydrogène [14]. Cette approximation faite avec une base composée de quatorze états discrets de la cible est notée S1414 (S se référant à Schwinger, 1414 se référant à 14 états dans les deux bases).

Dans notre nouvelle méthode, les états exacts du continuum de la cible ont été introduits dans le développement de la fonction d'onde de diffusion pour estimer leur contribution dans le calcul des sections efficaces totales d'excitation à des énergies inférieures à 40 keV où les voies d'excitation et de capture deviennent compétitives. Les calculs ont été effectués en

utilisant les approximations $S66k_1$ et $S66k_2$ avec une base composée d'un ensemble de six états $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}, k_1p_0 \text{ (ou } k_2p_0)\}$. L'approximation $S77k_1k_2$ est également testée avec un ensemble composé de sept états, à savoir $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}, k_1p_0, k_2p_0\}$, (S se référant à Schwinger, $66k_1$, $66k_2$ et $77k_1k_2$ se référant respectivement, à 6 états avec un état continu d'un moment $k = k_1$ et 7 états avec deux états continus d'un moment $k = k_1$ et $k = k_2$).

IV.3.1.a Interprétation des résultats :

La figure (1) représente nos différents résultats théoriques des sections efficaces totales d'excitation vers l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de protons obtenus à partir de nos différentes approches théoriques $S55$, $S1414$, $S66k_1$, $S66k_2$, $S77k_1k_2$ et Born1 (première approximation de Born) et comparés avec les résultats expérimentaux de Morgan et al. [1] et Higgins et al. [5].

Comme première tentative et pour voir le comportement des sections efficaces à basses énergies, nous avons introduit un seul état du continuum dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion avec les moments $k = k_1 = 1$ u.a et $k = k_2 = 0.75$ u.a ce qui donne ainsi les approximations $S66k_1$ et $S66k_2$ respectivement. Ensuite, les bases ont été étendues à sept états avec l'inclusion de deux états du continuum de la cible avec les moments k_1 et k_2 . Ce choix de la valeur de k a été déduit par les travaux de *Sahlaoui et Bouamoud* [15], *Dal Cappello et al* [16] et *Benmansour et al* [17]. En effet, l'évaluation du deuxième terme de Born dans l'approximation de fermeture dépend du choix d'un paramètre appelé le paramètre moyen d'énergie d'excitation des états intermédiaires. Les valeurs de 0,5 u.a et 1 u.a ont été choisies dans les références [15] et [16]. À partir de ces travaux, nous avons constaté que la meilleure contribution de la valeur k était d'environ 1 u.a. Ainsi, dans le présent travail, deux valeurs sont prises pour k : $k = k_1 = 1$ u.a et une valeur moyenne $k = k_2 = 0.75$ u.a. Puisque les contributions des états intermédiaires les plus importantes proviennent du moment angulaire $l = 1$, les états p ont été pris en compte dans les états du continuum de la cible.

Il est important de noter la convergence des résultats de calcul des sections efficaces dans nos nouvelles approches $S66k_1$, $S66k_2$, $S77k_1k_2$. En effet, les pics sont décalés et diminués d'un facteur 2 à partir des résultats initiaux de $S55$, en s'approchant des données expérimentales situées aux environs de 40 keV.

Les sections efficaces fournies par $S77k_1k_2$ apparaissent en accord raisonnable avec les expériences à basse énergie au dessous de maximum où elles surestiment un peu les valeurs

expérimentales, alors que toutes les nouvelles approches de calcul ainsi que S55 sont en accord avec les mesures expérimentales et sont proches l'une de l'autre au-delà de 60 keV . Au-dessus de 80 keV les résultats de S1414 et de l'approximation de Born au premier ordre sont en accord avec les données expérimentales et se rapprochent de ceux des autres modèles. Examinons maintenant les résultats fournis par S1414, S66k₁ et S66k₂ à des énergies inférieures à 40 keV.

Les approches S1414 et S66k₁ ont presque le même comportement tandis que les prédictions de S66k₂ sont nettement meilleures que celles données par S1414. Cela nous amène à conclure que l'importance de la contribution d'un seul état du continuum de la cible en tant qu'état intermédiaire dans le développement de la fonction d'onde de diffusion est plus significative que le fait d'augmenter le nombre d'états de base par l'ajout de neuf états excités exacts de la cible.

Le tableau (IV-2) et la figure 2 présentent une comparaison de nos résultats des sections efficaces totales d'excitation vers sous-niveau 2s issus de l'approche S77k₁k₂ avec les mesures expérimentales de Morgan et al [1] et Higgins et al [5] (Rappelons que, dans ce cas, les données expérimentales de Morgan et al. sont restreintes à un domaine d'énergie variant de 10 à 26 keV), ainsi qu'avec ceux d'autres approches théoriques citées ci-dessous et basées sur :

- les calculs de l'approximation BCCIS (Boundary Corrected Continuum Intermediate States) de Purkait et al [18].
- les calculs Sturmian de Winter utilisant les bases couplé-Sturmian-pseudostates jusqu'à 281 états de base asymétriques [19].
- le développement à deux centres (TCES) de Shakeshaft [20] en utilisant 35 pseudo-états hydrogénoïdes avec $l \leq 2$ sur chaque centre de type Sturmian.
- l'expansion à centre unique nommée SCE (Single Center Expansion) de Ford et al. [38], qui inclut des états avec des moments angulaires jusqu'à $l = 6$.
- l'expansion asymétrique à deux centres à partir de 50 états avec $l \leq 3$ sur la cible et un état de capture dominant 1s seulement sur le projectile, appelée TCE51 de Slim et Ermolaev [9].

La tendance des données expérimentales de Higgins et al [5], y compris le pic aux environs de 40 keV, est bien confirmée par un bon accord avec nos calculs $S77k_1k_2$, bien que le maximum prévu soit légèrement à gauche de l'expérimental.

Les calculs Sturmian de Winter surestiment légèrement les résultats expérimentaux autour du pic et se situent à proximité des résultats de SCE de Ford et al à 60 keV, tandis que ceux de BCCIS de Purkait et al sont nettement inférieurs aux données expérimentales autour du pic, tombent dans les barres d'erreur inférieures à 25 keV et se situent à proximité de ceux de $S77k_1k_2$ à haute énergie ($E > 140$ keV).

Les résultats de TCES, SCE et TCE51 sont trop importants autour du pic. Bien que les sections efficaces des prédictions de Shakeshaft et les résultats de Slim et Ermolaev soient plus élevées que ceux de Ford et al pour des énergies supérieures à 40 keV, les trois théories font des prédictions comparables entre 15 et 40 keV et s'avèrent en bon accord avec les données expérimentales disponibles de Morgan et al et Higgins et al au-dessus de 25 keV.

Au-dessus de 120 keV, tous les résultats théoriques sont généralement cohérents.

Enfin, nous constatons que nos calculs variationnels obtenus par l'approche $S77k_1k_2$, sept états de base impliquant seulement deux états exacts du continuum, se situent généralement en bon accord avec les mesures expérimentales et aussi avec d'autres approches théoriques, et parfois mieux que certaines, comme la méthode de développement à deux centres TCE51 de Slim et Ermolaev faite avec une base de 50 états liés de la cible et l'inclusion de l'état de capture dominant $1s$ sur le centre du projectile.

A partir de la figure (3) qui représente les résultats des sections efficaces d'excitation du sous-niveau $2p$, et à l'exception de l'approximation de Born1, nous observons un bon accord, sur tout le domaine des énergies d'impact, entre nos nouveaux calculs de $S66k_2$ ($k_2 = 0,75$) et également ceux de $S1414$, avec les mesures expérimentales du groupe de Giessen (Detleffsen et al [4]), ainsi que celles de Morgan et al [1]. Il est intéressant de constater que les deux approches sont toujours proches l'une de l'autre et donnent un pic aux environs 60 keV. Comme l'excitation de l'état p est principalement due aux termes dipolaires, à des énergies basses (inférieures à 40 keV) plus de termes multipolaires contribuent à l'excitation du sous-niveau $2p$. Ainsi, la contribution de neuf états supplémentaires avec des moments angulaires jusqu'à $l = 2$ dans l'approche $S1414$ permet d'améliorer clairement les résultats prédits de l'approximation $S55$ dans cette gamme d'énergie.

Comme dans la figure 1 pour l'excitation de l'état 2s la même remarque peut être formulée dans ce cas: la contribution d'un seul état exact du continuum de la cible en tant qu'état intermédiaire est plus significative que neuf états excités exacts supplémentaires de la cible dans le développement de la fonction d'onde de diffusion.

La quasi-totalité des résultats donnés par les différentes théories sont inclus dans les barres d'erreur des données expérimentales disponibles avec parfois un bon accord, sauf une légère sous-estimation des calculs SCE autour du maximum et la surestimation des résultats TCE51 entre 30 keV et 50 keV qui sont opposés aux calculs Sturmian de Winter qui sous-estiment les données expérimentales entre 40 keV et 100 keV. Les prédictions de Born1 concordent avec les données expérimentales seulement au-dessus de 150 keV. Comme dans le cas de l'excitation de sous-niveau 2s, aux énergies supérieures à 100 keV, tous les résultats théoriques et les mesures expérimentales se rencontrent en général.

Ainsi, nous pouvons conclure que les calculs variationnels actuels $S77k_1k_2$ pour l'excitation de l'état 2s, $S66k_2$ ($k_2 = 0.75$) et $S1414$ pour l'excitation de l'état 2p se révèlent généralement en bon accord avec les mesures expérimentales et aussi avec d'autres approches théoriques.

Tableau IV-1 : Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de protons (en 10^{-17}cm^2)

Energie (kev)	Higgins et al	Erreur	Morgan et al	Erreur	S55	S1414	S66 k1 (k1=1)	S77k1k2	S66k2 (k2=0.75)	Born1
2					0.489465	0.370944	0.43024	0.31262	0.43346	
6			0.589	0.162	2.26419	-	2.07386	0.73607	1.02323	
8			0.6003	0.158	2.56916	2.07306	2.36213	0.85028	1.21087	
10	0.61	0.1	0.5928	0.146	2.69373	2.29763	2.46179	0.98043	1.36685	
15			0.5587	0.159	2.67232	2.50815	2.47037	1.20225	1.69426	
20	1.05	0.09	0.60014	0.16	2.49251	2.48383	2.38375	1.38805	1.88117	
25			0.515	0.16	2.28579	2.36063	2.25657	1.49219	1.94334	2.8839
30	1.25	0.11	0.587	0.146	2.08501	2.20369	2.11816	1.56266	1.90427	2.5245
40	1.39	0.08	0.862	0.21	1.73445	1.89576	1.79372	1.55416	1.68773	2.0149
50	1.32	0.07	1.04	0.26	1.46475	1.64362	1.52978	1.42567	1.48096	1.6738
60	1.22	0.08	1.06	0.265	1.26579	1.43641	1.33048	1.28918	1.29437	1.4306
70	1.12	0.07			1.11840	1.27015	1.17169	1.15312	1.16972	1.2486
75					1.05811	1.20019	1.11221	1.09113	1.11111	1.1739
80	1.04	0.07			1.00461	1.13588	1.05503	1.04615	1.05453	1.1076
85					0.956568	1.07876	1.00949	1.00121	1.00891	
100	0.87	0.07			0.838320	0.933631	0.88455	0.87457	0.88343	
105					0.805373	0.893738	0.84861	0.84218	0.84702	0.8635
125					0.697573	0.762951	0.72753	0.72523	0.72617	0.73376
145					0.615154	0.664267	0.63757	0.63558	0.63651	0.63795
150					0.597505	0.64378	0.61744	0.61742	0.61743	0.61778
160					0.565125	0.605763	0.58254	0.58254	0.58254	
200					0.464508	0.49106	0.46521	0.46521	0.46521	0.46965

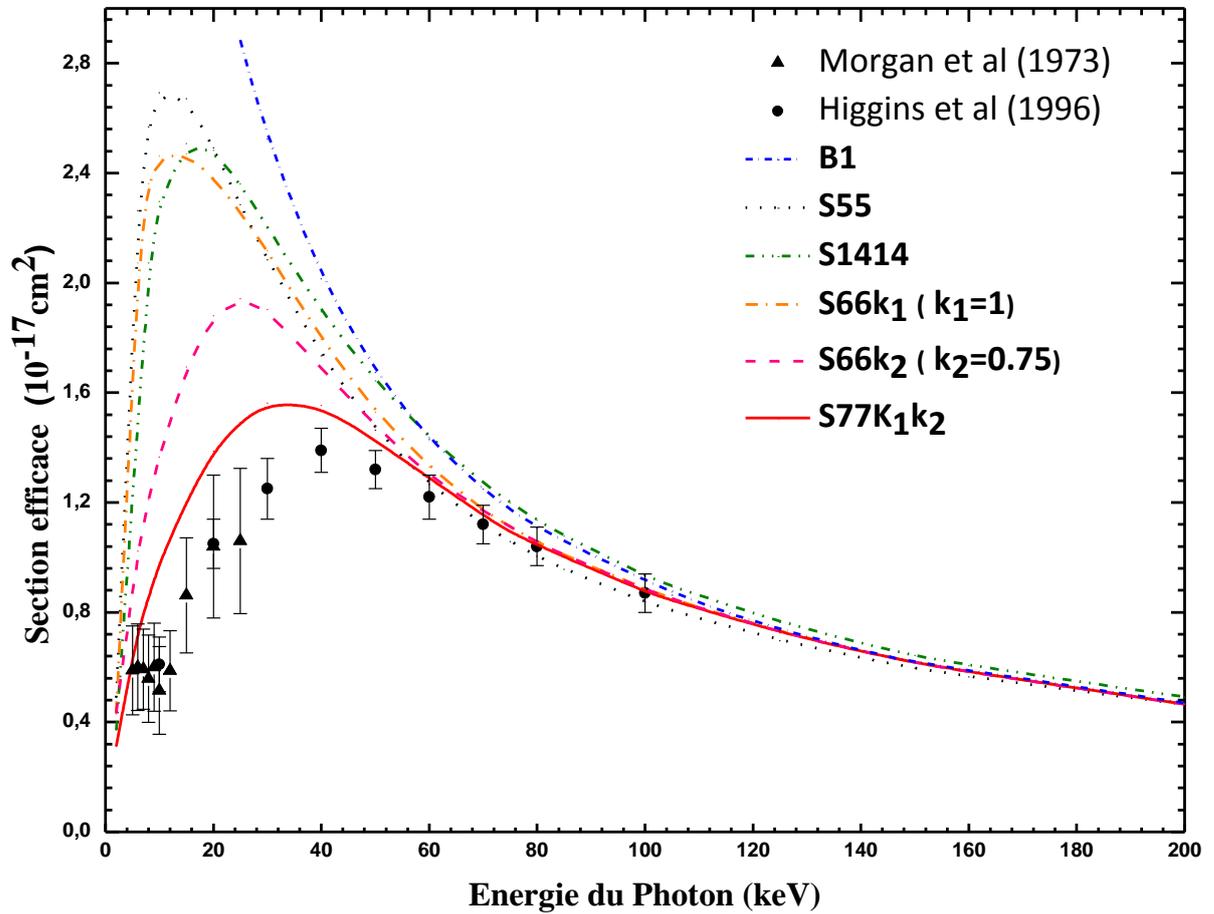


Fig. 1: Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2s de l'atome d'hydrogène en 10^{-17}cm^2 par impact de protons

Tableau IV -2 : Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de protons (en 10^{-17}cm^2)

Energie (kev)	Higgins et al	Erreur	Morgan et al	Erreur	S77k1k2	Shakeshaft	Ford et al	Slim et al	Purkait	Winter
2					0.31262					--
6			0.589	0.162	0.73607					--
8			0.6003	0.158	0.85028					--
10	0.61	0.1	0.5928	0.146	0.98043					0.48
15			0.5587	0.159	1.20225	0.88	0.95			--
20	1.05	0.09	0.60014	0.16	1.38805				0.837	--
25			0.515	0.16	1.49219	1.56				--
30	1.25	0.11	0.587	0.146	1.56266		1.8	1.73	1.02	0.88
40	1.39	0.08	0.862	0.21	1.55416	2.1		2.01	1.06	--
50	1.32	0.07	1.04	0.26	1.42567	1.79		1.98	1.04	1.63
60	1.22	0.08	1.06	0.265	1.28918	1.32	1.52	1.82	0.992	--
70	1.12	0.07			1.15312					--
75					1.09113	1.19		1.58		1.7
80	1.04	0.07			1.04615		1.24		0.873	--
85					1.00121			1.41		--
100	0.87	0.07			0.87457		1.02	1.2	0.765	1.3
105					0.84218					--
125					0.72523		0.829			--
145					0.63558	0.8		0.82		1
150					0.61742		0.694			--
160					0.58254					--
200					0.46521	0.49	0.519	0.56	0.448	--

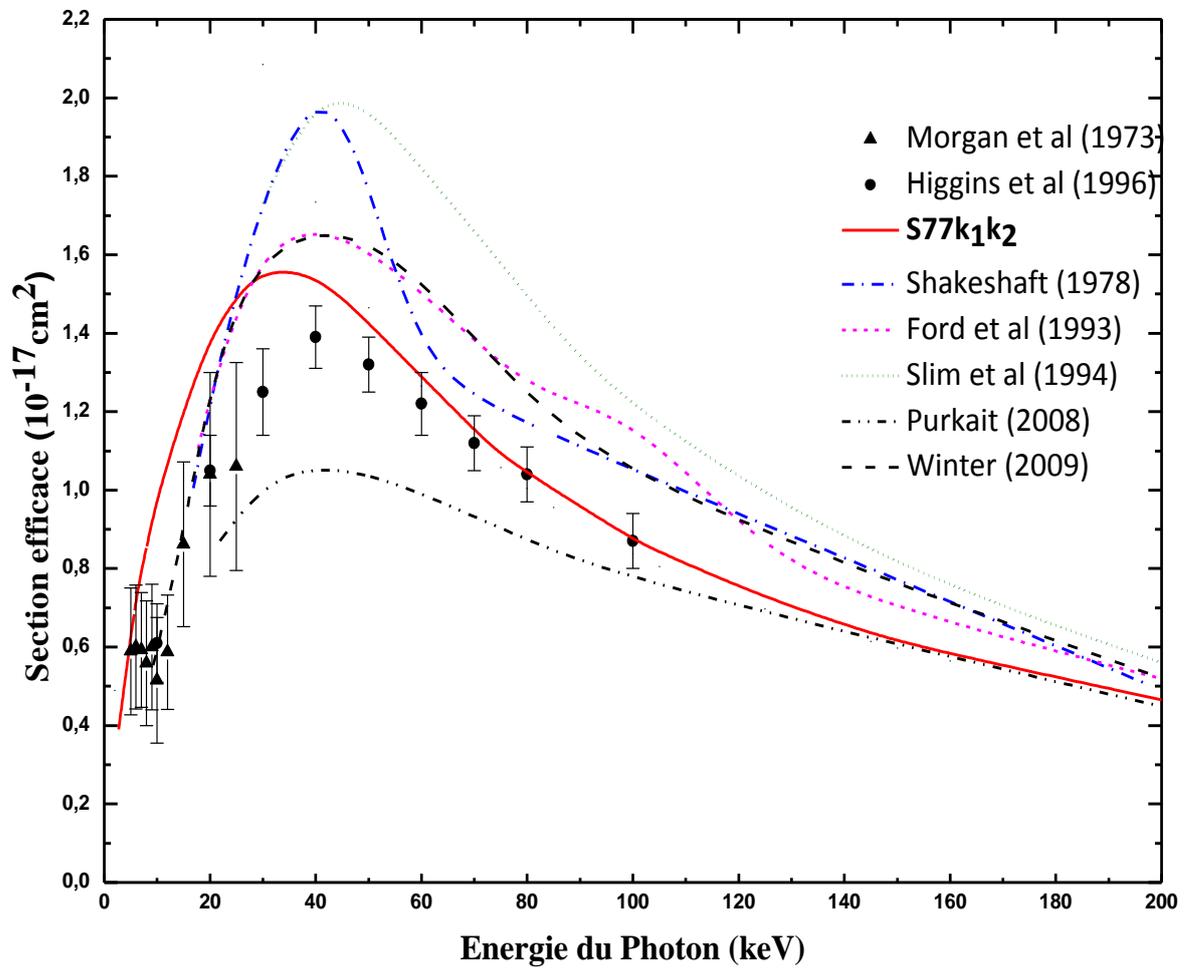


Fig. 2: Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2s de l'atome d'hydrogène en 10^{-17}cm^2 par impact de protons

Tableau IV-3 : Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de protons (en 10^{-17}cm^2)

Energie (kev)	Detleffsen et al	Erreur	Morgan et al	Erreur	S55	S1414	S66K2 (K2=0.75)	Bornl	Ford et al	Slim et al	Winter
2	--	--	--	--	0.23657	0.34407	0.20153	--	--	--	
6	--	--	--	--	0.81557	--	0.97311	--	--	--	
8	--	--	--	--	1.1292	1.17166	1.37818	--	--	--	2.21
10	--	--	--	--	1.37942	1.50882	1.67129	--	--	--	--
11	--	--	2.35	0.282	--	--	--	--	--	--	--
15	--	--	2.81	0.3372	1.86728	2.37829	2.23647	--	2.58	--	2.49
20	--	--	3.65	0.438	2.45091	3.53201	3.02931	--	--	--	--
25	--	--	--	--	3.24725	4.61194	4.03785	--	--	--	4.78
30	--	--	5.5	0.66	4.18654	5.57593	5.10741	--	5.78	6.82	--
40	6.29	0.7548			5.98966	6.98514	6.85468	--	--	8.04	--
50	8.94	1.0728			7.14437	7.7839	7.83323	--	--	8.39	7.7
60	9.25	1.11			7.65274	8.13117	8.18621	--	7.92	8.42	--
70	9.27	1.1124			7.79742	8.20589	8.25826	11.371	--	--	--
75	--	--			7.79395	8.18058	8.25487	10.986	--	8.22	7.5
80	8.66	1.039			7.75812	8.12641	8.19945	10.627	7.89	--	--
85	--	--			7.69703	8.051	8.12726	10.291	--	8.08	--
100	8.21	0.9852			7.43953	7.75242	7.75749	--	7.62	7.86	7.4
105	--	--			7.33896	7.63984	7.63496	9.1415	--	--	--
125	7.17	0.8604			6.90839	7.16879	7.12895	8.2274	7.13	--	--
145	--	--			6.4823	6.71194	6.64809	--	--	6.89	--
150	7.2	0.864			6.37988	6.60231	6.53448	7.3207	6.64	--	--
160	7.23	0.867			6.18008	6.39064	6.31577	--	--	--	--
200	6.36	0.7632	--	--	5.46727	5.64142	5.56124	6.0094	5.79	5.91	5.8

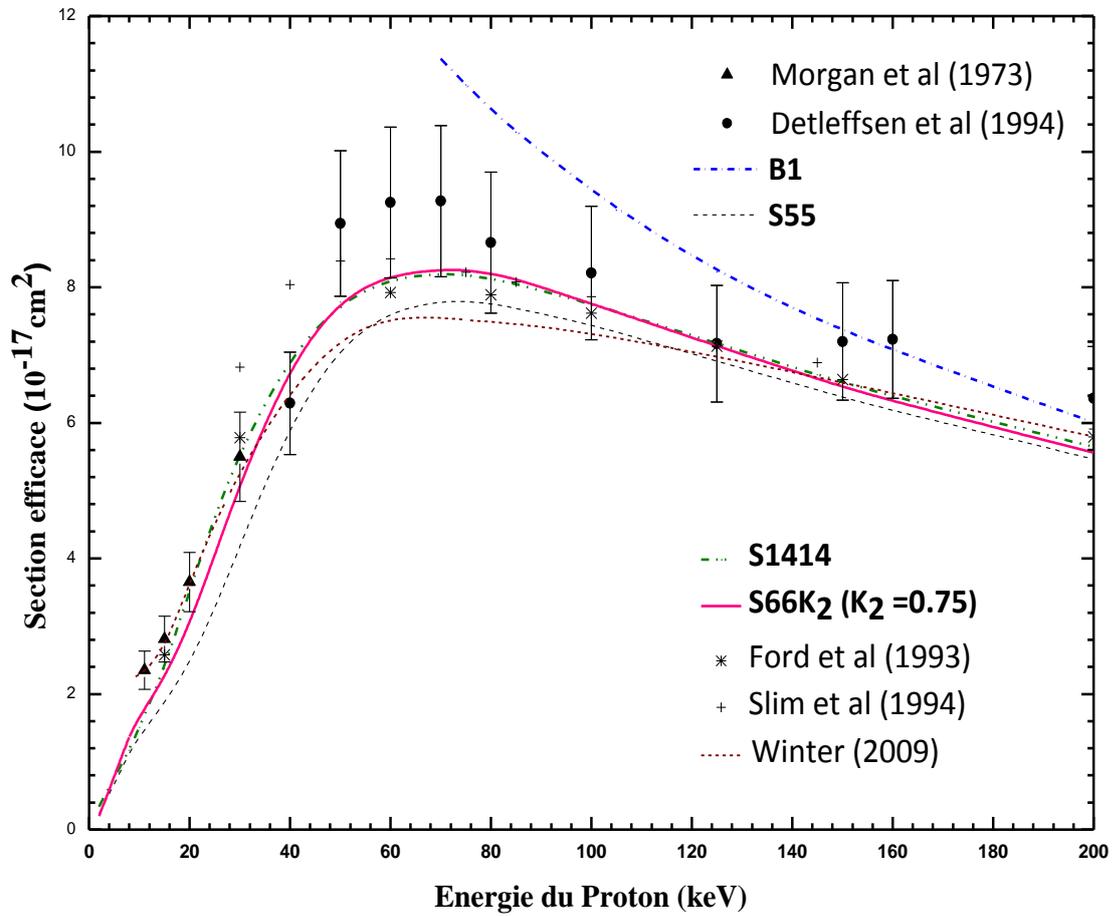


Fig. 3: Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2p de l'atome d'hydrogène en 10^{-17} cm^2 par impact de protons

IV.3.2 Excitation du niveau n=4 :

Nous avons utilisé une méthode variationnelle dans l'approximation du paramètre d'impact basée sur le principe variationnel de Schwinger qui consiste à développer la fonction d'onde de diffusion sur une base des états d'essai.

Cependant et dans le but de décrire l'excitation jusqu'à niveau n=4, nous avons inclus tous les états intermédiaires dans la représentation de la fonction d'onde ; ce qui nous donne un élargissement de base de 30 états.

Nous avons exposé dans les tableaux (IV-4, IV-5) les nouveaux résultats notés S3030 obtenus par notre nouvelle approche variationnelle utilisant une base formée de 30 états pour l'excitation du niveau n=4. Ces résultats qui concernent l'excitation de l'atome hydrogène par impact de protons aux énergies 10, 20 et 30 keV sont comparés avec divers résultats théoriques et expérimentaux disponibles.

Tableau IV-4 : Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de protons (en 10^{-17}cm^2)

Energie (kev)	Higgins et al	Erreur	Morgan et al	Erreur Morgan	S55	S1414	S3030
10	0.61	0.1	0.5928	0.146	2.69373	2.29763	2.41527
20	1.05	0.09	0.60014	0.16	2.49251	2.48383	2.55449
30	1.25	0.11	0.587	0.146	2.08501	2.20369	2.05055

Tableau IV-5 : Sections efficaces totales d'excitation de l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de protons (en 10^{-17}cm^2)

Energie (kev)	Morgan et al	Erreur Morgan	S55	S1414	S3030
10	2.3	0.28	1.37942	1.50882	1.68889
20	3.65	0.438	2.45091	3.53201	3.56431
30	5.5	0.66	4.18654	5.57593	7.10393

Nous avons observé que le fait d'augmenter la base de développement de la fonction d'onde totale de diffusion à 30 états est insuffisant pour représenter les états intermédiaires de capture du projectile. En fait l'influence de cet élargissement des états de base sur les calculs des sections efficaces totales d'excitation est très petite par rapport aux résultats des autres méthodes disponibles.

IV.3.3 Les Sections efficaces de l'émission Balmer- α :

Les sections efficaces d'émission Balmer- α peuvent être exprimées en termes des sections efficaces d'excitation des différents états de nombre l du niveau $n = 3$ comme [4]:

$$\sigma(H_\alpha) = \sigma_{3s} + B_{3p} \cdot \sigma_{3p} + \sigma_{3d} = \sigma_{n=3} - 0.88 \cdot \sigma_{3p} \quad (\text{IV .1})$$

Où $B_{3p} = 0.118$ est le rapport de branchement pour le déclin radiatif du sous-niveau 3p vers le niveau $n=2$.

La figure 4 présente les sections efficaces totales d'émission Balmer- α pour une collision proton-atome d'hydrogène en fonction de l'énergie d'impact. Les sections efficaces obtenues sont comparées avec des résultats expérimentaux ainsi qu'avec d'autres calculs théoriques existants.

Les résultats théoriques de McLaughling et al sont basés sur la méthode de close-coupling et effectués par l'approche à trois centres (TCE) [10].

Les données expérimentales de Donnelly et al [3] sont réduits de 15% (estimation des effets en cascade), tandis que les résultats expérimentaux de Detleffsen et al [4] sont obtenus par la deuxième égalité de l'équation (IV .1) dans laquelle $\sigma_{n=3}$ est tirée du travail expérimental de Park et al [2], où les sections efficaces d'excitation ont été obtenues à partir d'une analyse du spectre de perte d'énergie des projectiles dispersés rapidement. Les deux travaux expérimentaux existants de Detleffsen et al et Donnelly et al diffèrent par la grandeur des sections efficaces.

Initialement, les calculs des sections efficaces totales d'excitation du niveau $n = 3$ de l'atome d'hydrogène ont été réalisés avec l'approximation nommée S1010 [21] qui utilise une base de dix états discrets de la cible $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{-1}, 3d_{+2}, 3d_{-2}\}$.

Actuellement, les calculs ont été effectués avec une approximation S1111k₂ où un état exact de continu de la cible avec la valeur de moment $k = k_2 = 0.75$ a été ajouté dans la base de

développement de la fonction d'onde de diffusion, soit l'ensemble de onze états: $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{-1}, 3d_{+2}, 3d_{-2}, k_2p_0\}$.

Globalement, nos calculs S1010 précédents se situent dans les barres d'erreur des résultats expérimentaux de Donnely et al pour des énergies supérieures à 25 keV, tandis que les nouveaux calculs S111k₂ restent en accord avec ceux de Detleffsen et al sauf au-dessous de 20 keV où les résultats sont surestimés. Les deux approximations sont proches l'une de l'autre au-dessous de 10 keV. En conséquence, apparemment, l'inclusion d'un seul état supplémentaire du continu de la cible dans le dernier développement n'est pas encore suffisante pour décrire le fort couplage qui existe entre l'excitation et la capture dans cette gamme d'énergie.

Néanmoins, il ressort clairement de ces comparaisons que l'introduction d'un état du continu de la cible comme état intermédiaire dans le développement de la fonction d'onde de diffusion peut permettre de décrire le double processus qui peut se produire dans l'excitation du niveau $n = 3$ de l'atome d'hydrogène, aux énergies intermédiaires entre 10 et 100 keV. Par conséquent, les données expérimentales de Donnely et al pourraient être corrigées après soustraction de la contribution du double processus. Cela pourrait expliquer le grand écart observé entre ces expériences et d'autres résultats théoriques importants, sauf ceux des calculs de TCE fournis par McLaughlin et al qui sont en accord pour des énergies inférieures à 25 keV mais présentent une oscillation qui se situe entre les deux séries de données expérimentales au-dessus de cette énergie.

Les résultats de Martin et al [11] basés sur une approche des ondes couplées à centre unique utilisant des états de continuum discrétisés, ceux de Winter en utilisant des bases Sturmian de pseudo-états couplés et les résultats du code BDSCx de Tselikhovich et al sont en accord avec les données expérimentales de Detleffsen et al à faible énergie intermédiaire, mais sous-estiment quelque peu ces derniers entre 30 keV et 60 keV, bien que dans les limites des barres d'erreur. Enfin, ils se situent près de S111k₂ à 60 keV, à l'exception de ceux de Martin et al qui présentent le même comportement que l'approximation Born1 au-delà de 50 keV. À des énergies impact plus grandes ($E > 100$ keV) une convergence raisonnable est finalement affichée pour tous les calculs.

Tableau VI-6 : Sections efficaces totales d'émission Balmer- α (en 10^{-18}cm^2) pour une collision proton-atome d'Hydrogène

Energie (kev)	Donnelly et al	Erreur	Detleffsen et al	Erreur	S1010 '(Ancien)	Born1	S1010	S1111	Martin	Purkait	tseliakhovitch	Winter	McLaughlin
8	--	--	--	--	--	14.32258	6.85169	6.65255			--	--	--
10	--	--	--	--	7.89	14.6821	7.96711	7.36619		--	2.6956	3.4	4.02
15	4.9725	0.59	--	--	10.04	14.1488	9.98986	8.18618		--	3.4802	3.9	5.54
20	7.8625	0.83	5.71	2.65	11.25	13.0274	11.24974	8.62433	--	5.277	4.989	--	7.66
25	11.8235	0.63	6.52	2.74	--	-	12.01171	8.85125	--	--	6.8378	7.2	9.92
30	14.739	1.21	7.91	2.9	12.49	10.9105	12.41929	9.00613	7.5	6.9316	7.333	--	11.78
40	15.419	0.54	9.98	3.08	12.6	9.30283	12.56687	9.02103	7.9	7.5094	7.7862	--	12.99
50	13.991	0.66	10.15	3.16	12.25	8.09824	12.21871	8.48106	7.76	7.6474	--	8	11.94
60	13.243	0.62	8.45	3.09	11.65	7.17723	11.62385	7.912	7.25	5.5928	7.7196	--	8.78
70	11.5345	0.68	9.5	4.02	10.96	6.44071	10.94812	7.48034	6.75	--	--	--	6.39
75	--	--	7.02	2.8	--	-	10.4549	7.38711	--	--	--	7	6.07
80	10.183	0.72	7.21	2.82	10.24	5.84845	10.24126	7.10224	6.03	7.3056	7.9468	--	6.1
85	--	--	8.99	4.2	--	--	9.89508	6.92535	--	--	2.6956	--	6.31
100	8.823	0.57	--	--	8.9	4.94799	8.90141	6.39602	5.31	6.983	3.4802	6	7.11
105	--	--	6.72	3.67	--	--	8.5918	6.21825	--	--	4.989	--	--
125	--	--	6.2	2.7	--	--	7.47438	5.50431	--	--	6.8378	--	--
145	--	--	--	--	--	--	6.54716	4.82956	--	--	7.333	--	7.35
150	--	--	4.38	2.5	--	--	6.34164	4.67368	--	--	7.7862	--	--
160	--	--	5.15	2.58		--	5.95929	4.37527	--	--	--	--	--
200	--	--	3.2	2.03	--	2.83125	4.73503	3.48584	2.74	5.76	7.7196	--	4.35

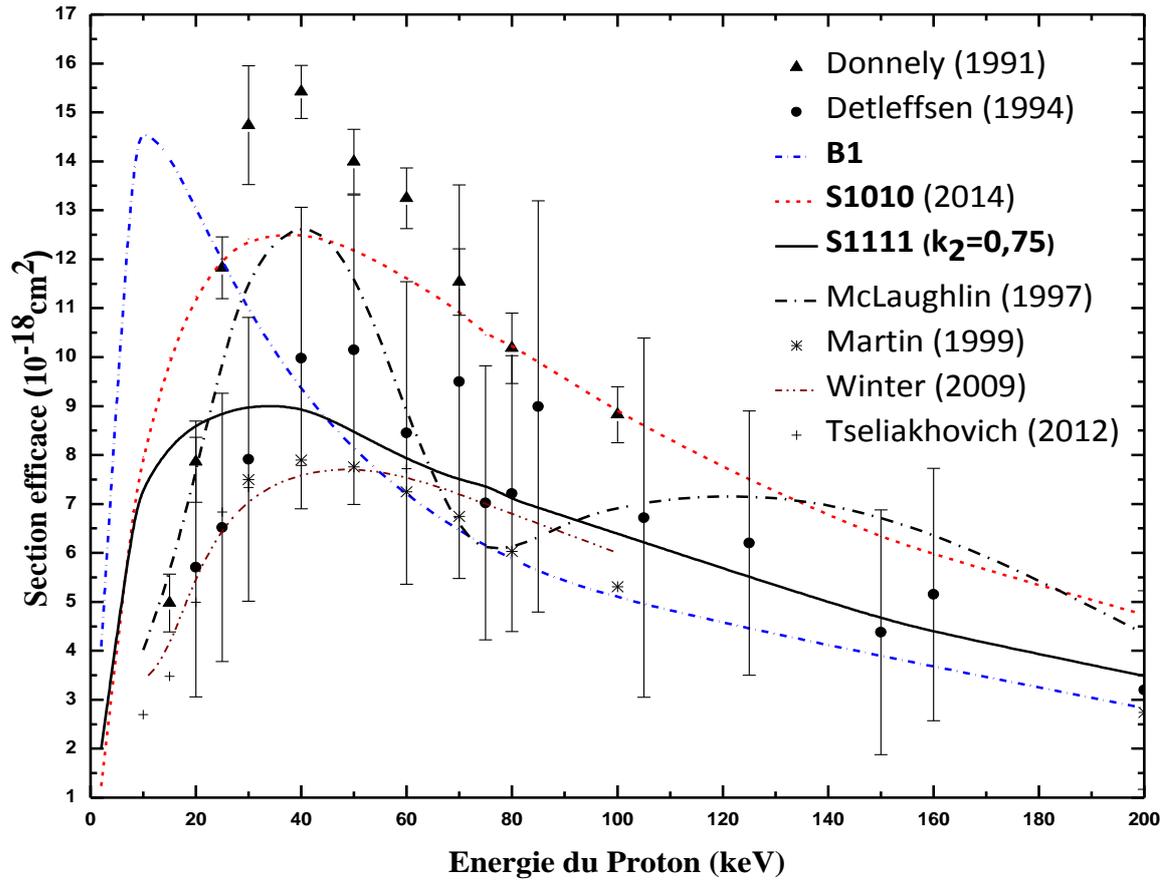


Fig. 4: Sections efficaces totales d'émission Balmer- α (en 10^{-18} cm^2) pour une collision proton-atome d'Hydrogène

Bibliographie :

- [1] T. J. Morgan. J. Geddes et H. B. Gilbody. *J. Phys. B: At. Mol. Phys*, 6 (1973) 2118.
- [2] J.T. Park. J.E. Aldag. J.M. George. and J.L. Peacher. *Phys. Rev. A*, 14 (1976) 608.
- [3] A. Donnelly. J. Geddes. and H.B. Gilbody. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 24 (1991) 165.
- [4] D. Detleffsen. M. Anton. A. Werner. and K.H. Schartner. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 27 (1994) 4195.
- [5] D P Higgins. J Geddes et H B Gilbody. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys*, 29 (1996) 1219.
- [6] 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).
- [7] R. Gayet et M. Bouamoud. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 42 (1989) 515.
- [8] A. Ford. J. Reading. and K. Hall. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 26 (1993) 4537.
- [9] H.A. Slim and A. Ermolaev. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 27 (1994) L203.
- [10] B. McLaughlin. T. Winter. and J. McCann. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 30 (1997) 1043.
- [11]-F. Martin. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 32 (1999) 501.
- [12] B.Lasri. ‘‘Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires. contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d’excitation’’. Thèse de Magistère. Université de Tlemcen (1998).
- [13] B. Brendlès. R. Gayet et K. Woher. *Phys. Rev. Lett*, 54 (1985) 2007.
- [14] B.Lasri. ‘‘Nouvelle approche du principe variationnel de Schwinger : application à l’excitation atomique aux énergies intermédiaires’’ Thèse de doctorat en sciences. Université de Tlemcen (2007).

- [15] M. Sahlaoui and M. Bouamoud. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 45 (2012) 085201.
- [16] C. Dal. Cappello. B. Hmouda. A. Naja. and G. Gasaneo. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys*, 46 (2013) 145203.
- [17] N.E.H. Benmansour. M. Sahlaoui. and M. Bouamoud. *J. Phys.: Conf. Ser*, 635 (2015) 052052.
- [18] M. Purkait. *Nucl. Inst. Meth. B: Beam Interact. Mater. Atoms*, 266 (2008) 1957.
- [19] T. Winter. *Phys. Rev. A*, 80 (2009) 032701.
- [20] R. Shakeshaft. *Phys. Rev. A*, 18 (1978) 1930.
- [21] B. Lasri. C. Champion. M. Sahlaoui. M. Bouamoud. and M. Dogan. *Chin. J. Phys*, 52 (2014) 1498.

CONCLUSION GENERALE

Nous avons essayé d'améliorer l'accord entre les résultats des sections efficaces totales d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact des protons obtenus à partir des diverses expériences disponibles ainsi que de différents modèles théoriques, et notre modèle en utilisant une approche variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact, dans la gamme d'énergie intermédiaire où le couplage entre les voies d'excitation et de capture est fort.

Pour décrire ce couplage, nous avons introduit les états du continuum exacts de la cible dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion au lieu de prendre en compte les états intermédiaires de capture. Cette procédure nous permet de conserver les lois d'échelle relatives à la charge nucléaire du projectile.

Nos nouveaux calculs montrent une convergence raisonnable de cette méthode variationnelle. Comme prévu, de bons résultats sont obtenus lorsque seulement deux états exacts du continuum de la cible sont inclus dans l'ensemble de la base. Une amélioration considérable des résultats des sections efficaces totales d'excitation du sous-niveau 2s de la cible a été montrée dans cette gamme d'énergie. De plus, les bonnes prédictions des sections efficaces d'excitation du niveau 2p nous amènent à conclure que la contribution d'un seul état exact du continuum de cible en tant qu'état intermédiaire est plus significative que celle de neuf états excités exacts supplémentaires de la cible dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion.

En outre, la comparaison entre les données expérimentales et d'autres calculs théoriques avec nos actuelles et précédentes sections efficaces d'émission Balmer α montre que l'introduction d'un seul état du continu de la cible dans le développement de la fonction d'onde de diffusion conduit à une convergence raisonnable vers des résultats stables.

Les résultats actuels pourraient lever le voile sur la grande divergence qui persistait entre de nombreux résultats théoriques et les données expérimentales de Donnelly et al dont les valeurs pourraient donc être corrigées après soustraction de la contribution du double processus.

L'inclusion d'états supplémentaires du continuum de la cible en tant qu'états intermédiaires dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion avec des moments électroniques k tels que $0,5 < k < 1$ améliorera les prédictions de notre approche variationnelle aux énergies intermédiaires basses. Le choix approprié de ces états pour chaque énergie dans ce domaine pourrait également améliorer ces résultats.

En conclusion, nous remarquons que les états exacts du continuum de la cible peuvent décrire convenablement les états de capture du projectile dans la gamme d'énergie où le couplage entre les voies d'excitation et de capture est fort.

Enfin, cette approche variationnelle sera en mesure de devenir un outil puissant pour étudier le processus d'excitation dans les collisions atomiques dans la gamme d'énergie allant des basses aux hautes énergies.

APPENDICES

Forme asymptotique des éléments $W_{ij}(\rho, z)$

Les éléments $W_{ij}(R, \theta_R)$ dependent des puissances de R et des fonctions de Legendre $P_l^m(\cos\theta_R)$, d'après la relation (III.42b). Les développements des puissance de R et des fonctions de Legendre vont nous permettre de déterminer une forme asymptotique des éléments W_{ij} . Rappelons que ces développements seront effectués pour des valeurs de z positives pour des raisons de symétrie que nous déterminerons ultérieurement.

AIII.1-Developpement des fonctions de Legendre:

D'après la relation (II.28) et la figure (II.1), nous pouvons poser:

$$x \equiv \cos\theta_R = \frac{z}{R} \quad (\text{AI.1})$$

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad (m \geq 0) \quad (\text{AI.2a})$$

et

$$P_l^{-m}(x) = (-)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \quad (\text{AI.2b})$$

Les polynômes de Legendre sont donnés par:

$$P_l(x) = \sum_{k=0}^{E[l/2]} (-)^k \frac{(2l-2k)!}{2^l k! (l-k)! (l-2k)!} x^{l-2k} \quad (\text{AI.3})$$

où la notation $E[l/2]$ signifie: "la partie entière de $l/2$ ". A partir de l'expression (AI.3) des polynômes de Legendre et en développant la dérivée dans la relation (AI.2a) nous obtenons pour $m \geq 0$:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \sum_{k=0}^{E[(l-m)/2]} (-)^k \frac{(2l-2k)!}{2^l k! (l-k)! (l-2k-m)!} x^{l-2k-m} \quad (\text{AI.4})$$

Des relation (AI.1) et (II.28), nous déduisons pour $z > 0$:

$$x = \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-1/2} \quad (\text{AI.5a})$$

et

$$1 - x^2 = \frac{\rho^2}{z^2} \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-1} \quad (\text{AI.5b})$$

En reportant ces expressions dans (AIII.4), on peut écrire:

$$\frac{P_l^m(\rho, z)}{R^{l+1}} = \frac{\rho^m}{z^{l+m+1}} \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-\frac{l+m+1}{2}} \sum_{k=0}^{E[(l-m)/2]} (-)^k \frac{(2l-2k)!}{2^l k! (l-k)! (l-2k-m)!} \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-\frac{l-m}{2}+k} \quad (m \geq 0) \quad (\text{AI.6})$$

Dans l'hypothèse où le rapport $\frac{\rho^2}{z^2} < 1$, l'expression (AIII.6) peut être transformée, en utilisant le développement général suivant :

$$(1 + \gamma)^{-\beta} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-)^n \frac{(\beta)_n}{n!} \gamma^n \quad (\text{AI.7a})$$

Où

$$\gamma < 1 \quad (\text{AI.7b})$$

$$(\beta)_n = \beta(\beta+1) \dots (\beta+n-1) = (\beta)_{n-1}(\beta+n-1) \quad (\text{AI.7c})$$

$$(\beta)_0 = 1 \quad (\text{AI.7d})$$

On en déduit alors:

$$\frac{P_l^m(\rho, z)}{R^{l+1}} = \frac{\rho^m}{z^{l+m+1}} \sum_{n=0}^{+\infty} \left[\sum_{k=0}^{E\left[\frac{l-m}{2}\right]} (-)^{k+n} \frac{(2l-2k)!}{2^l k! (l-k)! (l-2k-m)!} \frac{(\beta)_n}{n!} \right] \times \left(\frac{\rho^2}{z^2}\right)^n \quad (m \geq 0) \quad (\text{AI.8})$$

Avec

$$\beta = l - k + \frac{1}{2} > 0 \quad (\text{AI.9})$$

AIII.1-Forme asymptotique $W_{ij}^{as}(\rho, z)$:

Rappelons l'expression (III.42b) des éléments W_{ij} :

$$\begin{aligned} W_{ij}(R, \theta_R) = Z_p \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} A_{l \quad l_i \quad l_j}^{m \quad m_i \quad m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_i-1} \sum_{\nu=0}^{n_j-l_j-1} B_{n_i l_i \mu} B_{n_j l_j \nu} \frac{P_l^m(\cos(\theta_R))}{R^{l+1}} \\ \times \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \{ e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij} R)^p - (1 - \delta_{l,0}) \} \end{aligned}$$

Pour une valeur donnée du paramètre d'impact ρ , la région asymptotique peut être définie à la fois comme celle où les termes exponentiellement décroissants sont négligeables devant 1, et où le rapport $\frac{\rho}{z}$ est suffisamment petit devant 1, pour que le développement (AIII.7a) avec $\gamma = \rho^2/z^2$ et $\beta = l - k + \frac{1}{2}$ converge rapidement pour une valeur n_{\max} de n pas trop élevée. ceci se traduit par les conditions suivantes:

$$\text{a) } e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij} R)^p < \varepsilon \quad (\text{AI.10a})$$

$$\text{b) } \frac{\rho^2}{z^2} < 1 \quad (\text{AI.10b})$$

$$\text{c) } \frac{(\beta)_{n_{\max}}}{n_{\max}!} \gamma^{n_{\max}} (1 + \gamma)^\beta < \varepsilon' \quad (\text{AI.10c})$$

ε et ε' dépendant ici de la précision souhaitée.

Lorsque la condition a) est remplie, on peut alors négliger le terme dépendant de $e^{-\alpha_{ij} R}$ dans (III.42b). Quand la condition b) est aussi réalisée, on peut alors exprimer les fonctions

$P_l^m(\cos \theta_R)$ et les puissances de R , sous la forme d'un développement en puissance de ρ^2/z^2 tel que donné par l'expression (AI.8). En reportant alors ce développement dans (III.42b), on obtient la forme asymptotique W_{ij}^{as} de W_{ij} pour $m \geq 0$. Soit de façon générale:

$$W_{ij}^{\text{as}}(\rho, z) = -Z_p S(m) \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} (1 - \delta_{l,0}) A_{l \ l_i \ l_j}^{|m| \ m_i \ m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_i-1} \sum_{\nu=0}^{n_j-l_j-1} B_{n_i l_i \mu} B_{n_j l_j \nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{\rho^{|m|}}{z^{l+|m|+1}} \sum_{n=0}^{+\infty} C_{l,|m|}(n) \left(\frac{\rho^2}{z^2}\right)^n \quad (\text{AI.11})$$

où les coefficients $C_{l,|m|}(n)$ sont donnés par:

$$C_{l,|m|}(n) = \sum_{k=0}^{E\left[\frac{l-|m|}{2}\right]} (-)^{k+n} \frac{(2l-2k)!}{2^l k! (l-k)! (l-2k-|m|)!} \frac{(\beta)_n}{n!} \quad (\text{AI.12a})$$

Compte tenu de la relation (III.42c) qui définit $A_{l \ l_i \ l_j}^{|m| \ m_i \ m_j}$ et de la relation (AI.2b) entre les fonctions de Legendre de m opposés, il est aisé de vérifier que $S(m)$ a la valeur suivante:

$$S(m) = \begin{cases} 1 & \text{si } m \geq 0 \\ (-)^m & \text{si } m < 0 \end{cases} \quad (\text{AI.12b})$$

Remarque:

L'élément $W_{ij}^{\text{as}}(\rho, z)$ est nul pour $\rho = 0$

Rappelons que, pour une valeur donnée du paramètre d'impact ρ , la région asymptotique est définie pour une valeur $\tilde{z}_{ij} \geq 0$ compatible avec les deux conditions a) et b). Nous remarquons également que, dans le cas où ρ est assez grand, la condition a) peut être satisfaite même pour $z = 0$. Par contre il est nécessaire que le rapport ρ/z soit suffisamment petit devant 1, pour que la condition c) soit satisfaite pour une valeur pas trop grande de n_{\max} .

Il est donc très utile, pour les calculs, de définir une région asymptotique de telle sorte que l'intervalle d'intégration numérique sur z soit le plus petit possible, avec cependant une valeur de \tilde{z}_{ij} qui reste suffisamment grande devant celle de ρ .

Dans toutes nos applications, la condition $\tilde{z}_{ij} \geq 3/2 \rho$ s'est avérée satisfaisante.

Dans cet appendice, nous allons établir certaines propriétés de symétrie des éléments W_{ij} et donc par la même occasion des éléments $(i|V|j)$ et $(i|VG_T^\dagger V|j)$, qui vont nous permettre d'une part, de restreindre l'intervalle d'intégration sur z à des valeurs de z positives seulement, et d'autre part, de réduire considérablement le nombre d'éléments de matrice à calculer.

AII-1. Symétrie des éléments W_{ij} :

D'après l'expression (III.42b) des éléments $W_{ij}(\rho, z)$, nous constatons tout d'abord que ces éléments sont réels. On peut donc écrire :

$$W_{ij}(\rho, z) = W_{ij}^*(\rho, z) \quad (\text{AII.1})$$

D'autre part, il apparaît que les seuls termes dépendant des indices i et j et du signe de z sont $A_{l_i l_i l_j}^{m_i m_j m}$ et les fonctions de Legendre $P_l^m(z/R)$.

Aussi allons-nous considérer la proportionnalité des éléments par rapport à ces termes.

AII-1.1 Symétrie par rapport à l'échange des indices i et j :

Nous avons :

$$W_{ij}(\rho, z) \propto (-1)^{m_j} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} P_l^m \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.2a})$$

avec

$$m = m_j - m_i \quad (\text{AII.2b})$$

En intervertissant les indices, nous obtenons :

$$W_{ji}(\rho, z) \propto (-1)^{m_i} [(2l_j + 1)(2l_i + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ -m & -m_j & m_i \end{pmatrix} P_l^{-m} \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.3})$$

En utilisant d'une part, les propriétés des coefficients $3J$ de Wigner, nous pouvons écrire:

$$(-1)^{l+l_i+l_j} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{AII.4a})$$

$$(-1)^{l+l_i+l_j} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ m & m_j & -m_i \end{pmatrix} \quad (\text{AII.4b})$$

$$\begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ m & m_j & -m_i \end{pmatrix} = (-1)^{l+l_j+l_i} \begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ -m & -m_j & m_i \end{pmatrix} \quad (\text{AII.4c})$$

Comme $l + l_i + l_j$ doit être pair, nous obtenons :

$$\begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_j & l_i \\ -m & -m_j & m_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \quad (\text{AII.5})$$

D'autre part les fonctions de Legendre $P_l^{-m} \left(\frac{z}{R} \right)$ vérifient la relation suivante :

$$P_l^{-m} \left(\frac{z}{R} \right) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.6})$$

En utilisant la relation (AII.5) et en reportant l'expression (AII.6) dans l'expression (AII.3), nous obtenons :

$$W_{ji}(\rho, z) \propto (-1)^{m+m_i} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} P_l^m \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.7})$$

En utilisant la relation (AII.2b) et en comparant l'expression (AII.7) à (AII.2a), nous obtenons :

$$W_{ij}(\rho, z) = W_{ji}(\rho, z) \quad (\text{AII.8})$$

AII-1.2 Symétrie par rapport au changement simultané des signes de m_i et m_j :

L'expression obtenue à partir de W_{ij} en changeant les signes de m_i et m_j est notée $W_{-i,-j}$.

Nous avons alors :

$$W_{-i,-j}(\rho, z) \propto (-1)^{-m_j} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ -m & m_i & -m_j \end{pmatrix} P_l^{-m} \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.9})$$

A partir de (AII.4c) nous avons :

$$\begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ -m & m_i & -m_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \quad (\text{AII.10})$$

Et compte tenu de la relation (AII.6), nous obtenons :

$$W_{-i,-j}(\rho, z) \propto (-)^m (-1)^{-m_j} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} P_l^m \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.11})$$

D'où l'on conclut :

$$W_{-i,-j}(\rho, z) = (-)^m W_{ij}(\rho, z) \quad (\text{AII.12})$$

AIV-1.3 Symétrie par rapport au changement du signe z :

En effectuant le changement $z \rightarrow -z$ dans l'expression (AII.2a) nous obtenons :

$$W_{ij}(\rho, -z) \propto (-1)^{-m_j} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} P_l^m \left(-\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.13})$$

En utilisant la propriété suivante des fonctions de Legendre :

$$P_l^m \left(-\frac{z}{R} \right) = (-)^{l+m} P_l^m \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AII.14})$$

et la propriété des coefficients de Wigner (AII.4a) :

$$(-)^l = (-)^{l_i+l_j} \quad (\text{AII.15})$$

Nous déduisons alors :

$$W_{ij}(\rho, -z) = (-)^{l_i+l_j+m_i-m_j} W_{ij}(\rho, z) \quad (\text{AII.16})$$

AIV-2. Symétrie des éléments $(i|V|j)$:**AIV-2.1. Symétrie par rapport au changement des indices i et j :**

Nous avons la relation bien connue :

$$(i|V|j) = (i|V|j)^* \quad (\text{AII.17})$$

AII-2.2 Symétrie par rapport au changement simultané des signes de m_i et m_j :

Nous remarquons d'après la relation (III.9) des éléments $(i|V|j)$ que le seul terme qui dépende des signes de m_i et m_j est W_{ij} .

D'après (AIV.12), on déduit :

$$(-i|V|-j) = (-)^m (i|V|j) \quad (\text{AII.18})$$

La notation $(-i|V|-j)$ signifie le changement des signes des nombres quantiques m_i et m_j .

AII-2.2 Symétrie par rapport au changement simultané de signes z :

En reprenant la relation (III.10) de la fonction $G_{ij}(x, y)$, nous écrivons :

$$G_{ij}(-x, -y) = \int_{-x}^{-y} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(Z) \quad (\text{AII.19a})$$

En faisant le changement de variable suivant :

$$z \rightarrow -z \quad (\text{AII.19b})$$

Nous obtenons:

$$G_{ij}(-x, -y) = \int_x^y -dz e^{-id_{ij}z} W_{ij}(-Z) \quad (\text{AII.19c})$$

Et en utilisant la relation (AII.16) de $W_{ij}(-Z)$, nous déduisons :

$$G_{ij}(-x, -y) = (-)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(x, y) \quad (\text{AII.19d})$$

Cette relation transforme l'intervalle d'intégration sur des valeurs de z négatives en un intervalle de valeurs positive de z . Cette propriété de symétrie nous a donc permis d'effectuer tous nos calculs dans l'intervalle $[0, +\infty[$.

AII-3. Symétrie des éléments $(i|VG_T^+V|j)$:**AIV-3.1. Symétrie par rapport à l'échange des indices i et j :**

A partir de l'expression (III.26), nous écrivons :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{jv}z} W_{jv}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vi}z'} W_{vi}(z') \quad (\text{AII.20})$$

En utilisant la fonction θ de Heaviside et en faisant le changement de variables suivant :

$$z \rightarrow -z \quad (\text{AII.21})$$

$$z' \rightarrow -z'$$

Nous obtenons :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-id_{jv}z} W_{jv}(-z) \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \theta(z' - z) e^{-id_{vi}z'} W_{vi}(-z') \quad (\text{AII.22a})$$

Et en utilisant la propriété des éléments W_{ij} concernant le changement du signe z , nous obtenons:

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-)^{l_j+l_i+m_j-m_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{vj}z} W_{vj}(z) \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \theta(z' - z) e^{id_{iv}z'} W_{iv}(z') \quad (\text{AII.22b})$$

Ou encore, en intervertissant l'ordre d'intégration :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-)^{l_j+l_i+m_j-m_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}(z') \quad (\text{AII.22c})$$

Soit, compte tenu de l'expression (III.26) :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-)^{l_j+l_i+m_j-m_i} H_{ij}^v(-\infty, +\infty) \quad (\text{AII.23})$$

En reprenant maintenant l'expression (AII.22b) nous pouvons l'écrire sous la forme:

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-)^{l_j+l_i+m_j-m_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{vj}z} W_{vj}(z) \int_z^{+\infty} dz' e^{id_{iv}z'} W_{iv}(z') \quad (\text{AII.24})$$

Qui n'est autre que l'expression (III.24). C'est la deuxième forme des éléments $\langle i|VG_T^+V|j\rangle$ établie au chapitre III.

On peut donc écrire, en vertu des relations (III.23b) et (III.24) du chapitre III et de l'expression (AIV.24) :

$$H_{ji}^V(-\infty, +\infty) = (-)^{l_j+l_i+m_j-m_i} H_{ij}^V(-\infty, +\infty) \quad (\text{AII.25})$$

la formule (AII.25) est utilisée pour $\tilde{z}_{i\nu} < \tilde{z}_{vj}$.

AII-3.2 Symétrie par rapport au changement simultané des signes de m_i et m_j :

Suivant la même notation que celle introduite pour les éléments W_{ij} au paragraphe (AII.1.2), Nous remarquons que la seule dépendance des signes de m_i et m_j dans l'expression (AII.20b) de $H_{ij}^V(-\infty, +\infty)$ vient des éléments $W_{i\nu}$ et W_{vj} . Nous déduisons alors:

$$H_{-i,-j}^V(-\infty, +\infty) = (-)^{m_i-m_\nu} (-)^{m_\nu-m_j} H_{ij}^V(-\infty, +\infty) \quad (\text{AII.26a})$$

Soit :

$$H_{-i,-j}^V(-\infty, +\infty) = (-)^{m_i-m_j} H_{ij}^V(-\infty, +\infty) \quad (\text{AII.26b})$$

AII-3.3 - Développement des éléments $H_{ji}^V(-\infty, +\infty)$:

Nous avons :

$$H_{ji}^V(-\infty, +\infty) = \left\{ \int_{-\infty}^0 dz \int_0^{+\infty} dz \right\} e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu} G_{vj}(-\infty, z) \quad (\text{AII.27})$$

où $G_{vj}(-\infty, z)$ est définie par l'expression (III.10) qui se transforme en :

$$G_{vj}(-\infty, z) = G_{vj}(-\infty, 0) + G_{vj}(0, z) \quad (\text{AII.28a})$$

ou encore :

$$G_{vj}(-\infty, z) = (-)^{l_\nu+l_j+m_\nu-m_j} G_{vj}^*(0, +\infty) + G_{vj}(0, z) \quad (\text{AII.28b})$$

En remplaçant $G_{vj}(-\infty, z)$ par son expression (AII.28b), l'expression (AII.27) devient alors:

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-)^{l_v+l_j+m_v-m_j} G_{vj}^*(0, +\infty)\{G_{iv}(0, +\infty) + (-)^{l_i+l_v+m_i-m_v} G_{iv}^*(0, +\infty)\} \\ + \left\{ \int_{-\infty}^0 dz \int_0^{+\infty} dz \right\} e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z) \quad (\text{AII.29})$$

Considérons maintenant l'intégrale :

$$\int_{-\infty}^0 dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z)$$

en faisant le changement $z \rightarrow -z$ et en utilisant la propriété (III.11) de G_{vj} nous obtenons :

$$\int_{-\infty}^0 dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z) = (-)^{l_i+l_j+m_i-m_j+1} H_{ij}^{v*}(0, +\infty) \quad (\text{AII.30})$$

Avec :

$$H_{ij}^v(0, +\infty) = \int_0^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z) \quad (\text{AII.31})$$

$H_{ij}^v(-\infty, +\infty)$ peut être écrite alors sous la forme :

$$H_{ij}^v(-\infty, +\infty) = G_{vj}^*(0, +\infty)\{(-)^{l_v+l_j+m_v-m_j} G_{iv}(0, +\infty) + (-)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{iv}^*(0, +\infty)\} \\ + H_{ij}^v(0, +\infty) + (-)^{l_i+l_j+m_i-m_j+1} H_{ij}^{v*}(0, +\infty) \quad (\text{AII.32})$$

Développant la fonction $H_{ij}^v(0, +\infty)$.

Comme on l'a précisé au chapitre III, l'intervalle $[0, +\infty[$ va être divisé en deux intervalles: un intervalle où l'intégration est numérique et l'autre où elle est analytique et ceci suivant les valeurs de \tilde{z}_{iv} et \tilde{z}_{vj} déterminant les zones asymptotiques.

Nous traitons le cas où $\tilde{z}_{i\nu} > \tilde{z}_{\nu j}$

En utilisant les propriétés de symétrie des éléments H_{ij}^V . Nous avons alors:

$$H_{ij}^V(0, +\infty) = \left\{ \int_0^{\tilde{z}_{\nu j}} dz + \int_{\tilde{z}_{\nu j}}^{\tilde{z}_{i\nu}} dz + \int_{\tilde{z}_{i\nu}}^{+\infty} dz \right\} e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) G_{\nu j}(0, z) \quad (\text{AII.33})$$

qui se décompose comme suit :

$$H_{ij}^V(0, +\infty) = H_{ij}^V(0, \tilde{z}_{\nu j}) + H_{ij}^V(\tilde{z}_{\nu j}, \tilde{z}_{i\nu}) + H_{ij}^V(\tilde{z}_{i\nu}, +\infty) \quad (\text{AII.34})$$

où le premier terme est une intégration double numérique donnée par :

$$H_{ij}^V(0, \tilde{z}_{\nu j}) = \int_0^{\tilde{z}_{\nu j}} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \int_0^z dz' e^{id_{\nu j}z'} W_{\nu j}(z') \quad (\text{AII.35})$$

Tandis que $H_{ij}^V(\tilde{z}_{\nu j}, \tilde{z}_{i\nu})$ ne réclame que des intégrations numériques simples. En effet, nous avons :

$$H_{ij}^V(\tilde{z}_{\nu j}, \tilde{z}_{i\nu}) = G_{ij}^V(\tilde{z}_{\nu j}, \tilde{z}_{i\nu})G_{\nu j}(0, +\infty) - \int_{\tilde{z}_{\nu j}}^{\tilde{z}_{i\nu}} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z)G_{\nu j}^{as}(z) \quad (\text{AII.36})$$

Les intégrales numériques simples étant faites dans (AII.36), le dernier terme de (AII.34) ne nécessite plus qu'une intégration analytique :

$$H_{ij}^V(\tilde{z}_{i\nu}, +\infty) = G_{i\nu}^{as}(\tilde{z}_{i\nu})G_{\nu j}(0, +\infty) - H_{ij}^{Vas}(\tilde{z}_{i\nu}) \quad (\text{AII.37})$$

AIV-4. Détermination de la matrice D à inverser:

Les éléments de la matrice D_{ij} sont donnés par l'expression :

$$D_{ij} = (i|V - VG_T^+V|j)$$

où les éléments dits de Born-I et Born-II qui composent les éléments D_{ij} , respectivement $(i|V|j)$ et $(i|VG_T^+V|j)$ sont donnés par les relations (III.5) et (III.24).

En plus des propriétés de symétrie qui nous ont permis d'effectuer les intégrations de ces éléments dans des intervalles de valeurs positives de z et z' nous venons de déterminer dans les paragraphes précédents différentes règles de symétries pour ces éléments.

Ces propriétés de symétries vont nous permettre, pour chaque couple (i, j) , de réduire considérablement le nombre d'éléments calculés dans D_{ij} . Les autres éléments se déduisent par la suite, par une simple application de ces propriétés, ce qui limite le temps de calcul informatique mis en jeu.

A titre d'exemple, le tableau suivant montre, dans le cas où les états (i, j) sont formés par la base $\{1s, 2l, 3l', 3l''\}$ que sur 900 éléments d'une matrice carrée de dimension 30, 265 éléments seulement sont à calculer.

Voici les éléments de matrice D à inverser pour une base $\{1s, 2l, 3l', 3l''\}$

X : sont les éléments à calculer.

x : sont les éléments déduits directement à partir des relations de symétries.

Les éléments qui se situent au dessous de la diagonale sont tous déduit des éléments supérieurs se situant au dessus de la diagonale.

	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	4s	4p ₀	4p ₊₁	4p ₋₁	4d ₀	4d ₊₁	4d ₋₁	4d ₊₂	4d ₋₂	4f ₀	4f ₊₁	4f ₋₁	4f ₊₂	4f ₋₂	4f ₊₃	4f ₋₃	
1s	x	x	x	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
2s		x	x	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
2p ₀			x	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
2p ₊₁				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
2p ₋₁					0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
3s						x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
3p ₀							x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
3p ₊₁								x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
3p ₋₁									0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3d ₀										x	x	0	x	0	x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
3d ₊₁											x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
3d ₋₁												0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
3d ₊₂													x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
3d ₋₂														0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
4s															x	x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
4p ₀																x	x	0	x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
4p ₊₁																	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
4p ₋₁																		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
4d ₀																			x	x	0	x	0	x	x	0	x	0	x	0	
4d ₊₁																				x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
4d ₋₁																					0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
4d ₊₂																						x	x	x	x	x	x	x	x	x	
4d ₋₂																							0	0	0	0	0	0	0	0	
4f ₀																									x	x	0	x	0	x	0
4f ₊₁																										x	x	x	x	x	x
4f ₋₁																											0	0	0	0	0
4f ₊₂																												x	x	x	x
4f ₋₂																													0	0	0
4f ₊₃																														x	x
4f ₋₃																															0



PUBLICATIONS

Variational study of atomic hydrogen excitation by proton impact at intermediate velocities: target continuum states contribution

Nour El Houda Benmansour, Adnane Bouserhane, Mohammed Sahlaoui, Boumediene Lasri, and Mammam Bouamoud

Abstract: The Schwinger variational principle is used to evaluate the cross section for the excitation and Balmer- α emission of the hydrogen atom. The target is projected by proton impact at energies between 2 and 200 keV. To describe the strong coupling between the excitation and capture channels at intermediate impact energies, the Coulomb wave function, that is, exact continuum states of the hydrogen atom, have been added in the expansion of the scattering wave function. From comparison with the available experimental data and other theoretical findings we remark that taking into account the continuum states of the target is a good choice to describe the capture states at medium and low velocities, thus making the variational approach given in this work an easy way to successfully study the excitation of atoms by ion impacts at intermediate velocities.

Key words: cross section, excitation, capture channels, Schwinger variational principle, impact parameter approximation.

Résumé : Nous utilisons le principe variationnel de Schwinger pour évaluer la section efficace d'excitation de l'atome d'hydrogène et son émission Balmer α . La cible d'hydrogène est impactée par des protons d'énergie variant entre 2 et 200 keV. Afin de décrire le couplage fort entre les canaux d'excitation et de capture aux énergies d'impact intermédiaires, nous ajoutons la fonction d'onde de Coulomb dans l'expansion de la fonction d'onde de diffusion, elle qui décrit de façon exacte les états dans le continu de l'atome d'hydrogène. En comparant avec des données expérimentales et d'autres résultats théoriques, nous constatons, que tenir compte des états dans le continu de la cible, est une bonne approche pour décrire les états de capture aux énergies basses et intermédiaires. Tout ceci permet à l'approche variationnelle utilisée ici de décrire avec succès l'excitation des atomes par impact ionique aux vitesses intermédiaires. [Traduit par la Rédaction]

Mots-clés : section efficace, excitation, canaux de capture, principe variationnel de Schwinger, approximation du paramètre d'impact.

1. Introduction

Elementary processes, such as excitation, ionization, and electron transfer, arising in the atomic collisions have attracted great interest for a long time, both experimentally and theoretically (refs. 1, 2 and references therein). The interest in these fundamental atomic collision processes, which occur between protons and hydrogen atoms in astrophysical plasmas and fusion plasma research, was motivated by the need for data about these processes. At intermediate collision velocities, all three processes can be of comparable magnitude [3], and therefore compete. This problem has been addressed with the close-coupling approximation [4–11], but the obtained results are still not convincing. Indeed, the behavior of the electron wave function is more complicated than at low energies where electron transfer dominates, or at high energies where the excitation or ionization of the hydrogen atom are the dominant outcomes of the collisions. On the other hand, at intermediate energies the scattering wave function must describe all these processes.

An alternative attempt has been introduced by Purkait [12], who has calculated the electron excitation of atomic hydrogen by fully stripped projectile ions ($q = 1-8$) using the boundary-corrected continuum intermediate state approximation in the energy range of 20–1000 keV/amu. However, the results obtained cannot show the effectiveness of this method, because calculations were not carried out in an energy range lower than 20 keV where the coupling between excitation and capture is very strong. In fact, when the excitation is due to a genuine ion, the capture process cannot be neglected for impact velocities lower than the electron velocity on the initial orbital [3, 13]. Furthermore, and as shown by previous results, saturation effect of excitation cross sections predicted by our theoretical method [14, 15] are not verified at low impact energy of 40 keV and also for high projectile charge ($q > 4$), where the perturbation conditions are not fulfilled in this latter case. Hence, given the impact velocity, the larger the projectile charge, the more important the capture process.

Using coupled-Sturmian-pseudostate bases, Winter [9] determined cross sections for the Balmer- α direct excitation in collisions between protons and a hydrogen atom. We can also cite the

Received 17 October 2016. Accepted 13 February 2017.

N.E.H. Benmansour and M. Bouamoud. Theoretical Physics Laboratory, Faculty of Sciences, University Abou-Bekr-belkaïd, 22 Abi Aayed Abdelkrim Street, Pasteur P.B. 119, 13000, Tlemcen, Algeria.

A. Bouserhane. University of Bechar, P.O. Box 417, Route de Kenadsa, Bechar, Algeria.

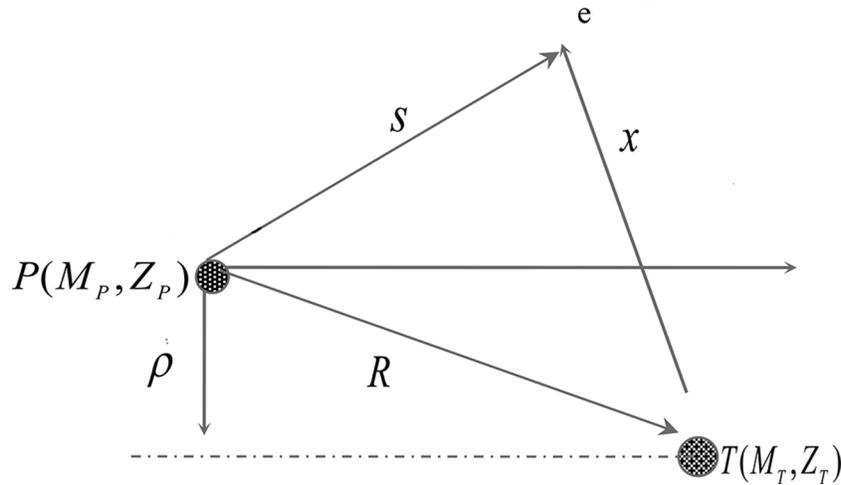
M. Sahlaoui. Graduate School of Applied Sciences, University of Tlemcen, 13000, Tlemcen, Algeria.

B. Lasri. Dr Tahar Moulay University, Saïda, Algeria.

Corresponding author: N.E.H. Benmansour (email: nour_mansour1@yahoo.fr).

Copyright remains with the author(s) or their institution(s). Permission for reuse (free in most cases) can be obtained from [RightsLink](https://rightslink.com).

Fig. 1. Coordinate in the impact parameter formalism. R is the internuclear distance between the projectile P of mass M_P and charge Z_P and the target T of mass M_T and charge Z_T . S is the position of the active electron e relative to the projectile and x the position relative to the target.



work of Tselikhovich et al. [16] where an improved algorithm for computing cross sections for high- nl proton–hydrogen collision, named BDSCx code, has been reported, including excitation and charge transfer to the $n \geq 2$ levels of the hydrogen atom. The present work aims to add some new physical insights of the variational impact parameter approach. Specifically, we are interested to show the ability of the continuum target states (introduced as intermediate states in the expansion of the scattering wave function) to successfully describe the projectile capture states in the proton–hydrogen atom collisions. This is because of the strong coupling occurring between excitation and capture in the intermediate energy range. Transitions to the continuum of the target states will be possible once a channel of electron capture is opened.

This variational method has been introduced [14, 15] to study the direct electronic excitation of hydrogen-like atoms by impact of ions at intermediate velocities. It was shown to be very successful in predicting the saturation of cross sections when the projectile charge is increased even in the case of the excitation of 400 MeV Fe^{24+} ($1s^2$) [15], 34 MeV/nucleon Kr^{34+} [17], and 13.6 MeV/u Ar^{16+} ($1s^2$) [18] helium-like ions impinging on various rare gases. However, these results have been obtained by neglecting the coupling between excitation and capture channels because they used neutral projectiles [15]. Indeed, the complete electronic structure of the atoms prevents them from picking up even one electron of the helium-like ion, thus making the capture process negligible. Further, neglecting this coupling presents a noticeable advantage: it leads to scaling laws related to projectile nuclear charge that are so useful to study the atomic excitation in ion–atom collisions. They enable us to make predictions for any projectile nuclear charge once calculations have been carried out for one projectile charge [14, 15]. The aim of our current approach is to preserve this advantage.

In the case of the excitation of a hydrogen atom by proton impacts at intermediate and low velocities, it should not be possible to ignore the coupling between excitation and capture channels, which becomes strong in this energy range. As an attempt to describe this strong coupling, we have tried to estimate the contribution of the exact continuum states of the target in the cross sections. So, instead of including the projectile capture states in the expansion of the scattering wave function, it is worthwhile to add only the continuum states of the target in this expansion. This procedure allows us to take advantage of the famous scaling laws of our variational model. The obtained results are encouraging

and satisfactory. Furthermore, significant improvements will be expounded.

The paper is organized as follows: in Sect. 2, the derivation of the form of the variational transition amplitude is briefly recalled with the contributions of intermediate continuum states of the target. In Sect. 3, our results are presented and compared to available experimental data and to previous theoretical predictions. Conclusions are drawn in Sect. 4. Atomic units are used throughout unless otherwise stated.

2. Theory

The derivation of the variational impact parameter transition amplitude for direct excitation has already been described by Gayet and Bouamoud [15]. More details may be found in the paper of Bouamoud and Gayet [14]. So, the following derivation is only a brief recall that allows us to point out possible improvements.

Within the impact parameter approximation framework the total cross section is defined as

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^\infty d\rho \rho |\mathbf{a}_{\beta\alpha}(\boldsymbol{\rho})|^2 \quad (1)$$

The internuclear separation is given by

$$\mathbf{R} = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{z} \quad (2)$$

with $\mathbf{z} = \mathbf{v}t$ and $\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{v} = 0$; $\boldsymbol{\rho}$ is the impact parameter; \mathbf{v} the impact velocity of the proton; and t is the time taken arbitrarily to be zero when $\mathbf{R} = \boldsymbol{\rho}$; while \mathbf{z} represents the coordinate along the almost straight trajectory of the projectile (see Fig. 1).

The transition amplitude $\mathbf{a}_{\beta\alpha}(\boldsymbol{\rho})$ is derived into the impact parameter approximation [19] with the help of standard eikonal scattering equations [1]. It follows that:

$$\mathbf{a}_{\beta\alpha}(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{i}{v}(\beta|\mathbf{V}|\psi_\alpha^+) = -\frac{i}{v}(\psi_\beta^-|\mathbf{V}|\alpha) \quad (3)$$

$$= -\frac{i}{v}(\psi_\beta^-|\mathbf{V} - \mathbf{V}G_T^+\mathbf{V}|\psi_\alpha^+) \quad (4)$$

Where the notation $||$ indicates integration over both the electronic coordinates and the coordinate z . The initial and final scattering wave functions $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ and $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ are defined, respectively, by the following Lippmann–Schwinger equations:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z' - z) \mathbf{V}(z') |\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (5)$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z' - z) \mathbf{V}(z') |\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (6)$$

where \mathbf{V} is the projectile–target interaction

$$\mathbf{V} = Z_p \left(\frac{1}{\mathbf{R}} - \frac{1}{\mathbf{S}} \right) \quad (7)$$

Z_p represent the projectile charge and $G_T^\pm(z' - z)$ are Green's operators of the target. $|\alpha(z)\rangle$ and $|\beta(z)\rangle$ refer to the initial and final states of the target, respectively.

Because $|\psi_\alpha^+\rangle$ and $|\psi_\beta^-\rangle$ cannot be obtained accurately we are obliged to use approximate wave functions $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$, such as

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \quad (8)$$

$$|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle = |\psi_\beta^-\rangle + |\delta\psi_\beta^-\rangle \quad (9)$$

however, thanks to the Schwinger variational principle [19] we can get the transition amplitude $\mathbf{a}_{\beta\alpha}(\rho)$ with a good accuracy. It follows that:

$$\tilde{\mathbf{a}}_{\beta\alpha}(\rho) = -\frac{i}{v} \frac{(\beta|\mathbf{V}|\tilde{\psi}_\alpha^+)(\tilde{\psi}_\beta^-|\mathbf{V}|\alpha)}{v(\tilde{\psi}_\beta^-|\mathbf{V} - \mathbf{V}G_T^+|\tilde{\psi}_\alpha^+)} \quad (10)$$

This fractional expression is stationary for small errors $|\delta\psi_\alpha^+\rangle$ and $|\delta\psi_\beta^-\rangle$ on the initial and final scattering wave functions. Indeed, it is easy to show that $\delta\mathbf{a}_{\beta\alpha}(\rho)$ is zero for the first order of $|\psi_\alpha^+\rangle$ and $|\psi_\beta^-\rangle$ [19].

By expanding $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ on truncated basis sets $\{|i\rangle\}$ and $\{|j\rangle\}$, respectively,

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = \sum_{i=1}^N a_i |i\rangle \quad |\tilde{\psi}_\beta^-\rangle = \sum_{j=1}^N b_j |j\rangle \quad (11)$$

Equation (10) take the following form:

$$\tilde{\mathbf{a}}_{\beta\alpha}(\rho) = \left(-\frac{i}{v} \right) \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|\mathbf{V}|i) a_i b_j^* (j|\mathbf{V}|\alpha)}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N b_j^* (j|\mathbf{V} - \mathbf{V}G_T^+|i) a_i} \quad (12)$$

The two basis sets are not necessarily identical but they must have the same finite dimension N . Equation (12) can be expressed in the following matrix form:

$$\tilde{\mathbf{a}}_{\beta\alpha}(\rho) = \left(-\frac{i}{v} \right) \frac{[(\mathbf{V}_\beta^*)^T \cdot \mathbf{a}] [\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{V}_\alpha]}{\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}} \quad (13)$$

where the elements of the column vectors \mathbf{V}_α , \mathbf{V}_β and the square matrix \mathbf{D} are defined by

$$(\mathbf{V}_\alpha)_j = (j|\mathbf{V}|\alpha) \quad (\mathbf{V}_\beta)_i = (i|\mathbf{V}|\beta) \quad (14)$$

$$D_{ji} = (j|\mathbf{V} - \mathbf{V}G_T^+|\mathbf{V}|i) \quad (15)$$

We note that the vectors \mathbf{V}_α and \mathbf{V}_β can be expressed as

$$\mathbf{V}_\alpha = \mathbf{D} \cdot \mathbf{a} \quad (\mathbf{V}_\beta^*)^T = \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{D} \quad (16)$$

These equations can be easily obtained using (5), (6), and (11). From these equations we deduce the elements of the vectors \mathbf{a} and \mathbf{b} , such as

$$\mathbf{a} = \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{V}_\alpha \quad \mathbf{b}^* = (\mathbf{V}_\beta^*)^T \cdot \mathbf{D}^{-1} \quad (17)$$

These two equations allow us to provide the solutions for the coefficients a_i and b_j . Consequently, we provide approximate solutions for the trial functions $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$.

It is easy to see that if we replace (17) in (13) we can get

$$\tilde{\mathbf{a}}_{\beta\alpha}(\rho) = \left(-\frac{i}{v} \right) \frac{[(\mathbf{V}_\beta^*)^T \cdot \mathbf{a}] [\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{V}_\alpha]}{(\mathbf{V}_\beta^*)^T \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}} \quad (18)$$

$$= \left(-\frac{i}{v} \right) \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{V}_\alpha = \left(-\frac{i}{v} \right) (\mathbf{V}_\beta^*)^T \cdot \mathbf{a} \quad (19)$$

$$= \left(-\frac{i}{v} \right) (\mathbf{V}_\beta^*)^T \cdot \mathbf{D}^{-1} \cdot \mathbf{V}_\alpha \quad (20)$$

Finally, we can deduce from this last result that replacing in (10) the trial scattering wave functions $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ by their approximate expressions given in (11) leads to the following form of the transition amplitude:

$$\tilde{\mathbf{a}}_{\beta\alpha}(\rho) = \left(-\frac{i}{v} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|\mathbf{V}|i) (\mathbf{D}^{-1})_{ij} (j|\mathbf{V}|\alpha) \quad (21)$$

where $(\mathbf{D}^{-1})_{ij}$ are the elements of the matrix \mathbf{D}^{-1} , the inverse of the matrix \mathbf{D} given in (15).

It should be noted, however, that in previous developments [13, 15] the two sets were restricted to a subset containing only the ground state and some excited states of the target. On the other hand, in the present work, the states of the basis $\{|i\rangle\}$ and $\{|j\rangle\}$ are selected such that they contain the bound and continuum eigenstates of the target, including the initial and the final states $|\alpha\rangle$ and $|\beta\rangle$. The exact continuum states of the target are introduced in the expansion of the scattering wave functions as an attempt to take into account the strong coupling occurring between excitation and capture in the intermediate energy range. Indeed, the scattering wave function must describe the capture process in this energy range. Thereby, the continuum states of the target are included in the expansion of the scattering wave function expansion as intermediate states instead of capture states of the projectile. This procedure is made easy by the fractional form of the variational transition amplitude given by (10), which is stationary for small errors in the scattering wave states $|\psi_\alpha^+\rangle$ and $|\psi_\beta^-\rangle$, and which has also the advantage of being independent of the normalization chosen for these states. This usage allows us to take advantage of the scaling laws related to projectile nuclear charge that

are so useful for studying the atomic excitation in ion–atom collisions [14, 15].

To calculate the variational amplitude $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\rho)$ we have to evaluate two kinds of matrix elements: the first Born-like elements ($i|V|j$) and the second Born-like elements ($i|VG_T^+V|j$). More explicitly,

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left(i\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v}z\right) W_{ij}(\rho, z) \quad (22)$$

where W_{ij} are given as follows: for a bound–bound transition,

$$W_{ij}(\rho, z) = \int d\mathbf{x} \varphi_i^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{R}, \mathbf{x}) \varphi_j(\mathbf{x}) \quad (23)$$

for a bound–continuum transition,

$$W_{ic}(\rho, z) = \int d\mathbf{x} \varphi_i^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{R}, \mathbf{x}) \varphi_c(\mathbf{x}) \quad (24)$$

and for a continuum–continuum transition

$$W_{cc}(\rho, z) = \int d\mathbf{x} \varphi_c^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{R}, \mathbf{x}) \varphi_c(\mathbf{x}) \quad (25)$$

The functions $\varphi_{i(j)}$ and $\varphi_{c(c)}$ are hydrogen-like orbitals representing the bound and continuum target states, respectively, given by

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = R_{n_l i}(\mathbf{x}) Y_{l_i}^{m_i}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (26)$$

$$\varphi_c(\mathbf{x}) = F_{l_\gamma}(kx) Y_{l_\gamma}^{m_\gamma}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (27)$$

where $Y_{l_i}^{m_i}(\hat{\mathbf{x}})$ are the spherical harmonics, and $R_{n_l i}(x)$ and $F_{l_\gamma}(kx)$ are the bound and continuum radial wave functions, respectively. This latter is defined as [1, 19]:

$$F_{l_\gamma}(kx) = \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{k}{z_T}} \exp\left(\frac{\pi z_T}{2k}\right) \left| \Gamma\left(l_\gamma + 1 - \frac{iz_T}{k}\right) \right| \frac{1}{(2l_\gamma + 1)!} (2kx)^{l_\gamma} e^{-ikx} {}_1F_1 \times \left(\frac{iz_T}{k} + l_\gamma + 1; 2l_\gamma + 2; 2ikx \right) \quad (28)$$

${}_1F_1$ is the confluent hypergeometric function where k is the momentum of a target electron in the continuum.

The second Born-like matrix elements are determined by inserting the closure relation on the complete set of target states $|\nu\rangle$ on the right-hand side of G_T^+ , namely,

$$(i|VG_T^+V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) \left[\sum + \int \right]_\nu H_{ij}^\nu \quad (29)$$

where

$$H_{ij}^\nu = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left(i\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_\nu}{v}z\right) W_{i\nu}(\rho, z) \int_{-\infty}^z dz' \exp\left(i\frac{\varepsilon_\nu - \varepsilon_j}{v}z'\right) W_{\nu j}(\rho, z') \quad (30)$$

As in the first Born-like elements, H_{ij}^ν takes three forms: H_{ij}^ν for bound–bound transition, H_{ic}^ν for bound–continuum transition, and H_{cc}^ν for continuum–continuum transition.

In (29), $[\sum + \int]_\nu$ means a sum over all discrete and continuous states $|\nu\rangle$.

Let us recall that the Green operator G_T^+ has been expanded over the complete spectrum of the bound states of the target, and those of the continuum close to the ionization threshold [13].

In our model the target can be any hydrogen-like atom. Then for each pair (i, j) , the following scaling laws:

$$B_{ji}^{[n]}(Z_p, Z_T, v, \rho) = Z_p^n B_{ji}^{[n]}(1, Z_T, v, \rho) \quad (31)$$

$$B_{ji}^{[n]}(Z_p, Z_T, v, \rho) = \left(\frac{Z_p}{Z_T}\right)^n B_{ji}^{[n]}(1, 1, u, \xi) \quad (32)$$

may be established for the reduced quantities $u = v/Z_T$ and $\xi = Z_T \rho$ [15]. Z_T is the charge of the target nucleus, and $B_{ji}^{[n]}$ represents the n th Born-like matrix element. For example: $B_{ji}^{[1]} = (i|V|j)$ and $B_{ji}^{[2]} = (i|VG_T^+V|j)$.

3. Results and discussion

3.1. Total excitation cross sections of 2s and 2p states

The total cross sections for the excitation of sublevels 2s and 2p of the hydrogen atom by proton impacts are given in Figs. 2–4, where they are compared to other theoretical approaches and to available experimental data. Initially the study of the excitation of the hydrogen atom was made with an approximation called S55 [14, 15], where five states were selected in the basis set $|i\rangle$ and $|j\rangle$, namely, $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}\}$ (S referring to Schwinger, 55 referring to five states in each bases set). Recently, to describe the strong coupling between excitation and capture, an attempt has been performed by adding the $n = 3$ states as intermediate states in the expansion of the scattering wave function, to estimate the contributions of the intermediate states of the target in the excitation cross sections of the sublevels 2s and 2p of the hydrogen atom [24]. This approximation made with a basis set composed from 14 states was called S1414 (S referring to Schwinger, 1414 referring to 14 states in the two bases).

In the new procedure given in this paper, exact states of the target have been introduced in the expansion of the scattering wave function to estimate their contribution in the calculation of the total excitation cross sections at energies lower than 40 keV where the excitation and capture channels become competitive. The calculations were carried out using the S66 k_1 and S66 k_2 approximations with basis set composed from six states, namely, $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}, k_1 p_0$ (or $k_2 p_0$) $\}$. The approximation S77 $k_1 k_2$ is also tested with a basis set composed from seven states, namely, $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}, k_1 p_0, k_2 p_0\}$, (S referring to Schwinger, 66 k_1 , 66 k_2 , and 77 $k_1 k_2$ referring, respectively, to six states with one continuum state of a momentum $k = k_1$ and seven states with two continuum states of momentum $k = k_1$ and $k = k_2$).

Figure 2 shows our theoretical results of the total excitation cross sections by proton impact of the 2s state of the hydrogen atom obtained from our different theoretical approaches S55, S1414, S66 k_1 , S66 k_2 , S77 $k_1 k_2$ and Born1 (first Born approximation) compared with the experimental results of Morgan et al. [20] and Higgins et al. [21].

As a first attempt and to see the behavior of the cross sections at low energies, we have introduced only one exact continuum state into the expansion of the total scattering wave function expansion with the values of the momentum $k = k_1 = 1$ a.u. and $k = k_2 = 0.75$ a.u. giving thus the approximations S66 k_1 and S66 k_2 , respectively. Afterwards the basis sets were extended to seven states with the inclusion of two continuum target states of momenta k_1

Fig. 2. Excitation cross sections (in units of 10^{-17} cm^2) of sublevel 2s of hydrogen atom by proton impact. Comparisons are made between our theoretical results and the experimental results of Morgan et al. [20] and Higgins et al. [21]. [Colour online.]

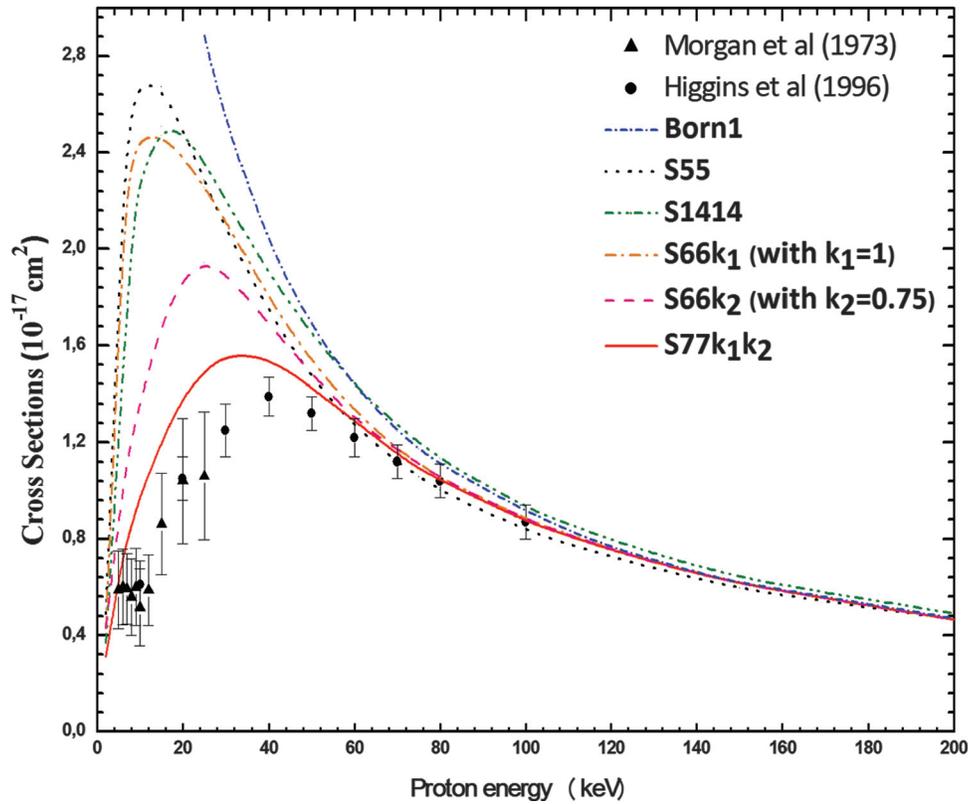


Fig. 3. Excitation cross sections (in units of 10^{-17} cm^2) of sublevel 2s of hydrogen atom by proton impact. Comparisons of our theoretical results with the theoretical results of Purkait [12], Winter [9], Ford et al. [5], Shakeshaft [22], and Slim and Ermolaev [23] and with the experimental results of Morgan et al. [20], Higgins et al. [21]. [Colour online.]

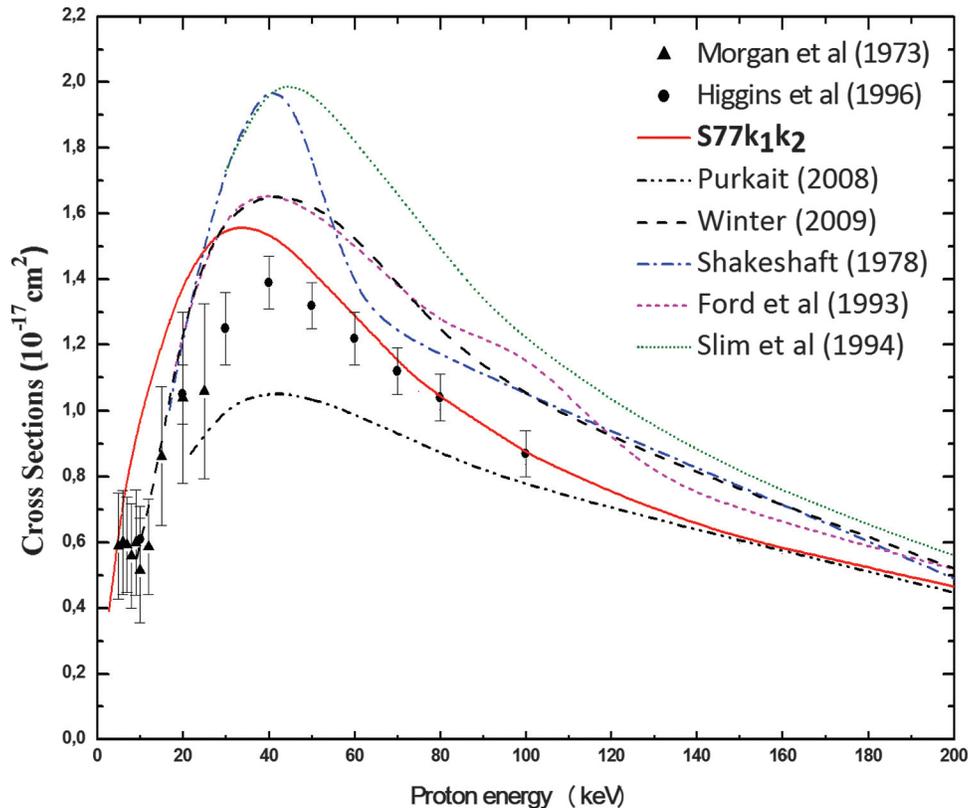
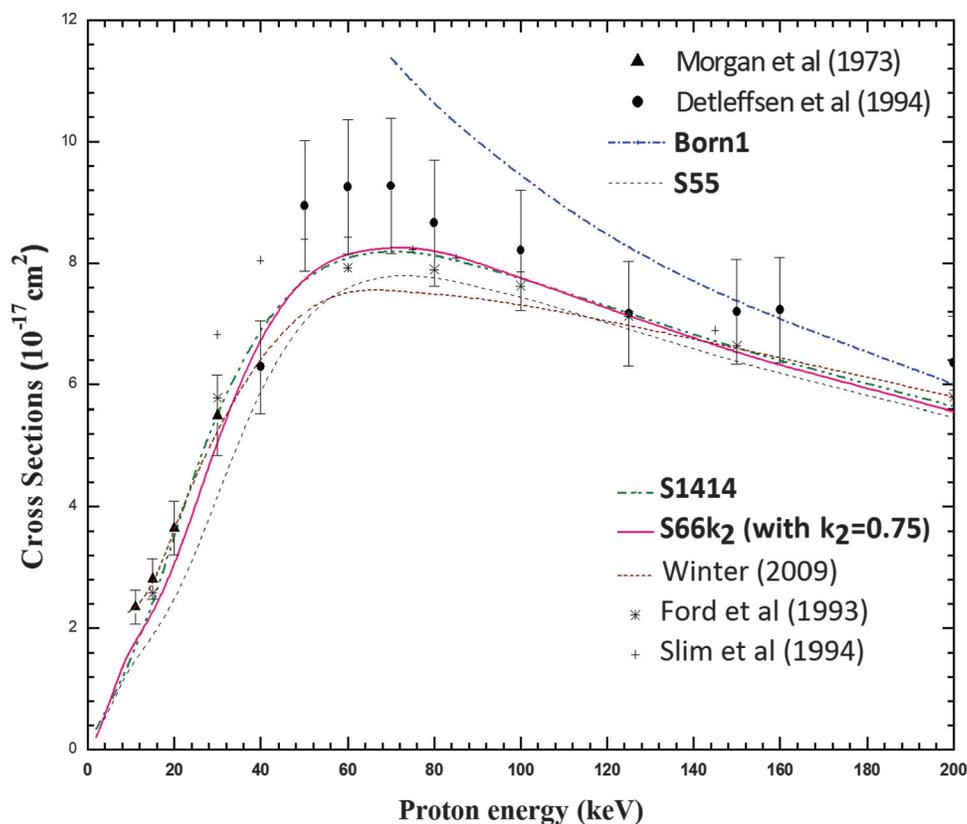


Fig. 4. Excitation cross sections (in units of 10^{-17} cm^2) of sublevel 2p of hydrogen atom by proton impact. [Colour online.]



and k_2 . This choice of the k value comes in fact from the works of Sahlaoui and Bouamoud [25], Dal Cappello et al. [26], and Benmansour et al. [27]. Indeed the evaluation of the second Born term in the closure approximation depends on the choice of a parameter called the average excitation energy parameter of the intermediate states. In refs. 25 and 26 values of 0.5 and 1 a.u. have been chosen. From this work it has been found that the better contribution of the k value was around 1 a.u. Thus in the present work two values are taken for k : $k = k_1 = 1$ a.u. and an averaged value $k = k_2 = 0.75$ a.u. As the most important contributions of intermediate states come from the angular momentum $l = 1$, the p states have been taken into account in the continuum target states.

It is important to note the convergence of the cross section computation in our new approaches $S66k_1$, $S66k_2$, $S77k_1k_2$. Indeed the maxima are shifted and decreased by a factor of 2 from the initial S55 results, drawing closer to experimental data, which are located at about 40 keV. Cross sections provided by $S77k_1k_2$ appear to be in reasonable agreement with experiments in the low energy range below the maximum where they overestimate somewhat the experimental values, while all the new approach calculations and S55 are in good agreement with experimental measurements and are close to each other beyond 60 keV. Above 80 keV S1414 and the first Born approximation agree with experimental data and lie close to the other approaches.

Now let us look at the results provided by S1414, $S66k_1$, and $S66k_2$ at energies lower than 40 keV. S1414 and $S66k_1$ have almost the same behavior while the predictions of $S66k_2$ are better than those of S1414. That leads us to conclude that the importance of the contribution of a single exact continuum target state as an intermediate state into the scattering wave function expansion is more significant than to increase the bound states basis-set number with nine additional exact excited target states.

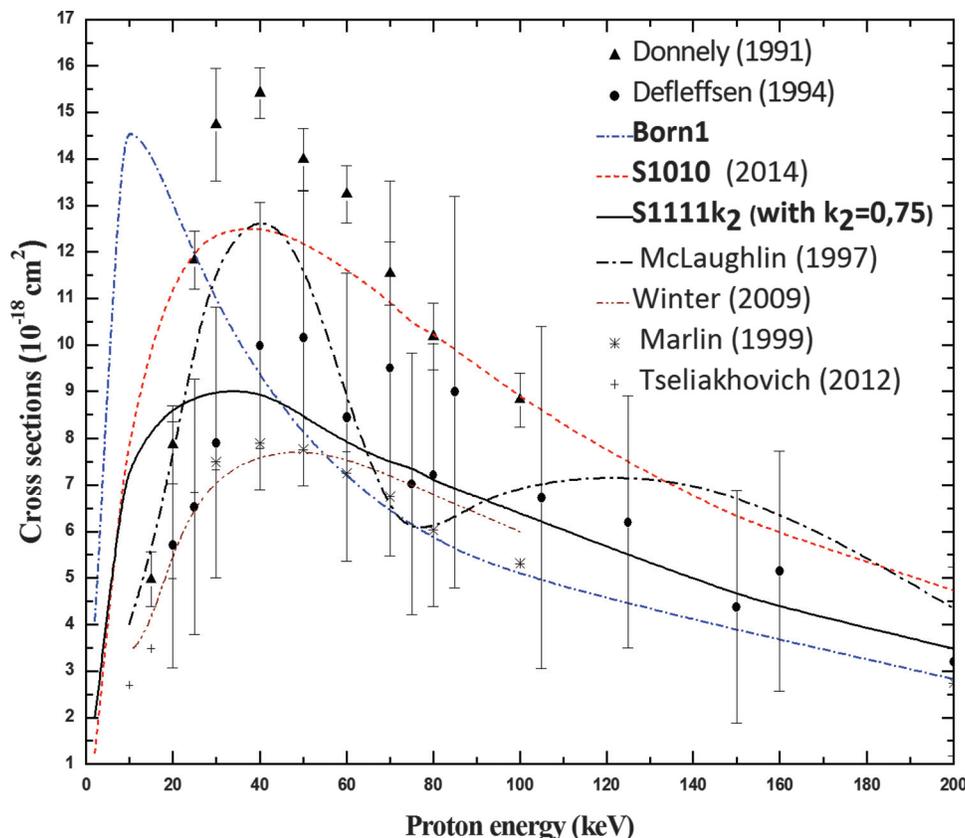
Figure 3 shows the excitation cross section results of the sublevel 2s given from the $S77k_1k_2$ approach, where they are compared to other theoretical approaches as well as to experimental measurements of Morgan et al. [20] and Higgins et al. [21]. Let us remember that in this case, the experimental data of Morgan et al. are restricted to a narrow energy region from 10 to 26 keV. The previous theoretical results are based on the calculations of the boundary-corrected continuum intermediate state approximation of Purkait et al. [12]; Sturmian calculations of Winter using the coupled-Sturmian-pseudostate bases up to 281-state asymmetric basis [9]; two-centre expansion of Shakeshaft [22] using 35 scaled hydrogen-like states with $l \leq 2$ on each center; single-center expansion (SCE) of Ford et al. [5], which includes states with angular momenta up to $l = 6$; and asymmetric two-centre expansion made from 50 states with $l \leq 3$ on the target and the dominant capture state $1s$ only on the projectile, referred to as TCE51 of Slim and Ermolaev [23].

The trend of the experimental data of Higgins et al. [21], including the peak around 40 keV, are well confirmed by a good agreement of our $S77k_1k_2$ calculations, although the predicted maximum is slightly to the left of the experimental one.

The Sturmian calculations of Winter [9] overestimate slightly the experimental results around the peak and lie close to the SCE results of Ford et al. [5] from 60 keV, while the boundary-corrected continuum intermediate state of Purkait et al. [12] are clearly lower than the experimental data around the peak, fall within the error bars below 25 keV and lie close to $S77k_1k_2$ and Born1 at high energy ($E > 140$ keV).

The two-centre expansion, SCE, and TCE51 calculations are too large around the peak. Although Shakeshaft [22] predictions and Slim and Ermolaev [23] results are higher than Ford et al. [5] cross sections for energies above 40 keV, the three theories make com-

Fig. 5. Balmer- α emission cross sections (in units of 10^{-18} cm 2) of hydrogen atom by protons impact. [Colour online.]



parable predictions between 15 and 40 keV with a good agreement with the available experimental data of Morgan et al. [20] and Higgins et al. [21] below 25 keV. Above 120 keV, all theoretical results are generally consistent.

Finally, we note that our variational calculations from the $S77k_1k_2$ approach, with seven basis states involving only two exact continuum states, are found generally to be in good agreement with experimental measurements and also with other theoretical approaches, and sometimes better than some of them like the two-centre expansion TCE51 method of Slim and Ermolaev [23] with 50 bound target states and the inclusion of the dominant 1s capture state on the projectile centre expansion.

From Fig. 4 where the excitation cross section results of the sublevel 2p are plotted, we observe a good agreement, except the Born1 approximation, shown by our new calculations $S66k_2 = 0.75$ and also S1414 with experimental measurements of the Giessen group [28] as well as Morgan et al. [20] on the entire range of impact energies. It is interesting to notice that both approaches are always close to each other and give a peak around 60 keV. As p-state excitation is mainly due to the dipolar term, at lower energies (below 40 keV) more multipolar terms contribute to the 2p-excitation. Thus, the contribution of nine additional states with angular momenta up to $l = 2$ in the S1414 approach improve clearly the predicted results of the S55 approximation in this energy range.

In this case the same remark can be drawn as in Fig. 2 for the 2s-excitation: the contribution of a single exact continuum target state as intermediate state is more significant than nine additional exact excited target states in the scattering wave function expansion.

Almost all results given by the different theories are included in the error bars of the available experimental data with sometimes

a good agreement, except a slight underestimation of SCE calculations around the peak and overestimation of TCE51 results between 30 and 50 keV, which are opposite to Winter Sturmian [9] calculations that underestimate experimental data between 40 and 100 keV. The present perturbative Born1 predictions agree with experimental data only above 150 keV. As in the case of the 2s sublevel excitation, above 100 keV, all theoretical results and experimental measurements meet generally.

So, we can conclude that the present variational calculations $S77k_1k_2$ for 2s-excitation, $S66k_2 = 0.75$ and S1414 for 2p-excitation are found generally to be in good agreement with experimental measurements and also with some of other theoretical approaches.

3.2. Balmer- α emission cross sections

The Balmer- α emission cross section can be expressed in terms of the excitation cross sections to the different l -states of the $n = 3$ level as [28]

$$\sigma(H_\alpha) = \sigma_{3s} + B_{3p}\sigma_{3p} + \sigma_{3d} = \sigma_{n=3} - 0.88\sigma_{3p} \quad (33)$$

where $B_{3p} = 0.118$ is the branching ratio for irradiative 3p decay.

Figure 5 presents the Balmer- α emission cross sections in proton-hydrogen atom collisions as a function of impact energy. The obtained cross sections are compared with experimental results as well as with other existing calculations.

The theoretical results of McLaughlin et al. [6] are based on the triple centre expansion within the close-coupling approach. The experimental data of Donnelly et al. [29] are reduced by 15% (estimation of cascade effects), whereas the experimental results of Detleffsen et al. [28] are obtained via the second equality of (16), in

which $\sigma_{n=3}$ is taken from the experimental work of Park et al. [30], where excitation cross sections were obtained from an analysis of the energy loss spectrum of the fast scattered projectiles. The two existing experimental works of Detleffsen et al. [28] and Donnelly et al. [29] differ in the magnitude of the cross sections.

Initially the calculation of excitation cross sections of the level $n = 3$ of the hydrogen atom was made with the S1010 approximation [31] with a 10 bound state basis set, namely, $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{-1}, 3d_{+2}, 3d_{-2}\}$. Presently the calculations were carried out with the S1111 k_2 approximation where an exact continuum target state with the momentum value $k = k_2 = 0.75$ have been added in the previous expansion of the scattering wave function, giving the 11 state basis set $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_{+1}, 3d_{-1}, 3d_{+2}, 3d_{-2}, k_2p_0\}$.

Globally, our previous S1010 calculations are within the error bars of the Donnelly et al. [29] experimental results for energies above 25 keV, while the new S1111 k_2 calculations stay in good agreement with those of Detleffsen et al. [28] except below 20 keV, where the results are overestimated. Both approximations become close to each other below 10 keV. As a result, apparently, the inclusion of a single additional continuum target state in the latter expansion is not yet sufficient to describe the strong coupling between excitation and capture arising in this range of energy.

Nevertheless it clearly appears from these comparisons that the introduction of one continuum target state as an intermediate state of the scattering wave function can enable to describe the double process, which can occur in the excitation of the level $n = 3$ of the hydrogen atom, at intermediate energy range between 10 and 100 keV. Therefore the experimental data of Donnelly et al. [29] may be corrected after subtraction of the double process contribution. That may explain a large discrepancy observed between these experiments and other large theoretical results, unless those of the triple centre expansion calculations provided by McLaughlin et al. [6], which agree below 25 keV but exhibit an oscillation that lies between both sets of experimental data above this energy.

The close-coupling approach of Martin et al. [7] based on a single-centre close-coupling approach using discretized continuum states, that of Winter [9] using coupled-Sturmian pseudostate bases, and the BDSCx code results of Tseliakhovich et al. [16] are in close agreement with the experimental data of Detleffsen et al. [28] at low intermediate energies, but underestimate somewhat these latter between 30 and 60 keV, although within the error bars' minima. Finally they lie close to S1111 k_2 from 60 keV, except for Martin et al. [7] cross sections, which exhibit the same behavior as the Born1 approximation beyond 50 keV. At high impact energies ($E > 100$ keV), a reasonable convergence is finally shown for all calculations.

4. Conclusion

We have tried to improve the agreement between the excitation cross section data of the hydrogen atom by proton impact and our model using the variational impact parameter approach, in the intermediate energy range where the coupling between the excitation and capture channels is strong. To describe this coupling, exact continuum target states have been introduced in the scattering wave function expansion instead of taking into account the capture intermediate states. This procedure allows us to preserve the scaling laws related to projectile nuclear charge, which present such a useful advantage that they enable us to make predictions for any projectile nuclear charge once calculations have been carried out for one projectile charge.

Our new calculations show a reasonable convergence of this variational procedure. As expected, good results are obtained when only two exact continuum target states are included in the basis set. A considerable improvement of excitation cross sections

results of sublevel 2s is shown in this energy range. Further, the good predictions of 2p-excitation cross sections lead us to conclude that the contribution of a single exact continuum target state as intermediate state is more significant than nine additional exact excited target states in the scattering wave function expansion.

Furthermore, the comparison between experimental data and other theoretical calculations with our present and previous Balmer- α emission cross sections shows that the introduction of one continuum target state in the scattering wave function expansion leads to a reasonable convergence to steady results. The present results may raise the veil from the large discrepancy that persisted between large theoretical results and experimental cross sections of Donnelly et al. [29], which may be therefore corrected after subtraction of the double process contribution.

The inclusion of additional continuum target states as intermediate states of scattering wave function with an electron momentum k , such as $0.5 < k < 1$ will improve the variational impact parameter approach predictions at low intermediate energies. The appropriate choice of this momentum for each energy in this energy range may likewise improve these results.

In conclusion we notice that the exact continuum target states can describe suitably the projectile capture states in the energy range where the coupling between the excitation and capture channels is strong.

Finally, this variational approach will be able to become a powerful tool to investigate the excitation process in atomic collisions in the energy range from low to high energies.

References

1. B.H. Bransden and M.R.C. McDowell. Charge exchange and the theory of ion-atom collisions. Clarendon Press, New York, 1992.
2. C.D. Lin. Review of fundamental processes and application of atoms and ions. World Scientific, Singapore, 1993.
3. R. Gayet. Nucl. Sci. Appl. **1**, 555 (1983).
4. W. Fritsch and C. Lin. Phys. Rep. **202**, 1 (1991). doi:10.1016/0370-1573(91)90008-A.
5. A. Ford, J. Reading, and K. Hall. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **26**, 4537 (1993). doi:10.1088/0953-4075/26/23/022.
6. B. McLaughlin, T. Winter, and J. McCann. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **30**, 1043 (1997). doi:10.1088/0953-4075/30/4/022.
7. F. Martin. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **32**, 501 (1999). doi:10.1088/0953-4075/32/2/028.
8. N. Toshima. Phys. Rev. A, **59**, 1981 (1999). doi:10.1103/PhysRevA.59.1981.
9. T. Winter. Phys. Rev. A, **80**, 032701 (2009). doi:10.1103/PhysRevA.80.032701.
10. S.K. Avazbaev, A.S. Kadyrov, I.B. Abdurakhmanov, D.V. Fursa, and I. Bray. Phys. Rev. A, **93**, 022710 (2016). doi:10.1103/PhysRevA.93.022710.
11. I.B. Abdurakhmanov, A.S. Kadyrov, S.K. Avazbaev, and I. Bray. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **49**, 115203 (2016). doi:10.1088/0953-4075/49/11/115203.
12. M. Purkait. Nucl. Inst. Meth. B: Beam Interact. Mater. Atoms, **266**, 1957 (2008). doi:10.1016/j.nimb.2008.03.048.
13. B. Lasri, M. Bouamoud, and R. Gayet. Nucl. Inst. Meth. B: Beam Interact. Mater. Atoms, **251**, 66 (2006). doi:10.1016/j.nimb.2006.03.199.
14. M. Bouamoud and R. Gayet. France: Doctorat d'Etat Thesis. Edited by Cnrs-Inist, Phys. At. Mol., N 88 BOR10576, Vandoeuvre-lé-Nancy, 1988.
15. R. Gayet and M. Bouamoud. Nucl. Instr. Meth. B: Beam Interact. Mater. Atoms, **42**, 515 (1989). doi:10.1016/0168-583X(89)90111-0.
16. D. Tseliakhovich, C.M. Hirata, and K. Heng. Mon. Not. R. Astron. Soc. **422**(3), 2357 (2012).
17. M. Chabot, P. Nicolai, K. Wohrer, A. Chetoui, J.P. Rozet, M.F. Politis, A. Touati, D. Vernhet, C. Stephan, and R. Gayet. Nucl. Inst. Meth. B, **56-57**, 1 (1991).
18. L. Adoui, M. Chabot, A. Chetoui, et al. Nucl. Inst. Meth. B: Beam Interact. Mater. Atoms, **87**, 45 (1994). doi:10.1016/0168-583X(94)95234-5.
19. C.J. Joachain. Quantum collision theory. North-Holland Publishing Company, 1975.
20. T.L. Morgan, J. Geddes, and H.B. Gilbody. J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **6**, 2118 (1973). doi:10.1088/0022-3700/6/10/024.
21. D.P. Higgins, J. Geddes, and H.B. Gilbody. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **29**, 1219 (1996). doi:10.1088/0953-4075/29/6/018.
22. R. Shakeshaft. Phys. Rev. A, **18**, 1930 (1978). doi:10.1103/PhysRevA.18.1930.
23. H.A. Slim and A. Ermolaev. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **27**, L203 (1994). doi:10.1088/0953-4075/27/9/004.
24. B. Lasri. Ph.D. thesis. University of Tlemcen, 2007.
25. M. Sahlaoui and M. Bouamoud. J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **45**, 085201 (2012). doi:10.1088/0953-4075/45/8/085201.

26. C. Dal, Cappello, B. Hmouda, A. Naja, and G. Gasaneo. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **46**, 145203 (2013). doi:[10.1088/0953-4075/46/14/145203](https://doi.org/10.1088/0953-4075/46/14/145203).
27. N.E.H. Benmansour, M. Sahlaoui, and M. Bouamoud. *J. Phys.: Conf. Ser.* **635**, 052052 (2015). doi:[10.1088/1742-6596/635/5/052052](https://doi.org/10.1088/1742-6596/635/5/052052).
28. D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, and K.H. Schartner. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **27**, 4195 (1994). doi:[10.1088/0953-4075/27/18/017](https://doi.org/10.1088/0953-4075/27/18/017).
29. A. Donnelly, J. Geddes, and H.B. Gilbody. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **24**, 165 (1991). doi:[10.1088/0953-4075/24/1/019](https://doi.org/10.1088/0953-4075/24/1/019).
30. J.T. Park, J.E. Aldag, J.M. George, and J.L. Peacher. *Phys. Rev. A*, **14**, 608 (1976). doi:[10.1103/PhysRevA.14.608](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.14.608).
31. B. Lasri, C. Champion, M. Sahlaoui, M. Bouamoud, and M. Dogan. *Chin. J. Phys.* **52**, 1498 (2014).

Theoretical Study of Atomic Excitation by Impact of Protons in the Variational Formalism

N. EL HOUDA BENMANSOUR^{a,*}, M. BOUAMOUD^b AND M. SAHLAOUÏ^c

^aAbou Bekr Belkaïd University, Tlemcen, Algeria

^bNaama University Centre, Naama, Algeria

^cPreparatory School in Science and Technology, Tlemcen, Algeria

Schwinger's variational principle is used to evaluate excitation cross-sections of hydrogen atom by proton impact in a range of energies excluding a perturbative treatment. To describe the strong coupling between the excitation and the capture channels that exists at low energies, the continuum states have been introduced in the total wave function. Our results show that these states can describe properly the projectile capture states.

DOI: [10.12693/APhysPolA.130.145](https://doi.org/10.12693/APhysPolA.130.145)

PACS/topics: 34.80.Dp, 34.50.Fa, 95.30.Dr

1. Introduction

The aim of our study is to appreciate the contribution of the continuum states of the target at intermediate energies in the calculation of total cross-sections of hydrogen atom excitation by proton impact. The continuum states are described by exact wave functions represented as confluent hypergeometric functions. Nevertheless, we should like to mention that to evaluate the variational transition amplitude, two matrix elements types must be calculated: Born I and Born II matrix elements.

In the present work, we are interested in the excitation of the hydrogen atom by proton impact with energies ranging from 2 keV to 200 keV. Our obtained results are compared to other theoretical and experimental results.

2. Theory

To evaluate the variational transition matrix, we use the eikonal method developed by Glauber [1]. In this semiclassical approach, the nuclei are assumed to be moving in a classical manner, while the movement of electrons is described by quantum equations. The initial and final scattering states $|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle$ and $|\psi_{\beta}^{-}(z)\rangle$, respectively, are solutions of the Schrödinger equation given in the eikonal approximation by

$$\left(-iv\frac{\partial}{\partial z} + H_T + V\right)|\psi_{\chi}^{\pm}(z)\rangle = 0, \quad (\chi = \alpha \text{ or } \beta), \quad (1)$$

where z is the coordinate along the almost straight trajectory of the projectile, V is the interaction energy and H_T is the Hamiltonian of the target. The solution of Eq. (1) can be determined by the following Lippmann-Schwinger equations [2]:

$$|\psi_{\chi}^{\pm}(z)\rangle = |\chi(z)\rangle$$

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^{\pm}(z - z') V(z') |\psi_{\chi}^{\pm}(z')\rangle, \quad (2)$$

where $|\chi\rangle$ is the solution of the homogeneous equation and G_T^{\pm} is the Green operator. The elements of the total cross-section for the excitation process are defined by the relation:

$$\sigma_{\alpha\beta} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\alpha\beta}(\rho)|^2, \quad (3)$$

where ρ is the impact parameter and $a_{\alpha\beta}(\rho)$ is the transition amplitude defined as follows:

$$a_{\beta\alpha}(\rho) = \left(-\frac{i}{v}\right) \left(\psi_{\beta}^{-} | V | \psi_{\alpha}^{+}\right). \quad (4)$$

To calculate $a_{\beta\alpha}(\rho)$, the states $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ are expanded over truncated basis sets $|i\rangle$ and $|j\rangle$, respectively. The two basis sets are not necessarily identical but they must have the same finite dimension N . Therefore, Eq. (4) takes the following form:

$$a_{\beta\alpha}(\rho) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (j | V | i), \quad (5)$$

The expansion of the initial and final states over a truncated basis sets provide an approximate solution for the transition amplitude. To improve the accuracy of this latter, we use the fractional form of the Schwinger variational principle given as follows [3]:

$$(j | V | i) = (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha), \quad (6)$$

where $(D^{-1})_{ij}$ is an element of the inverse of the matrix D defined as:

$$D_{ij} = (i | V - V G_T^{+} V | j). \quad (7)$$

To calculate the variational amplitude $a_{\beta\alpha}(\rho)$, we must evaluate two types of matrix elements: the elements $(i | V | j)$ and $(i | V G_T^{+} V | j)$, namely the first and second order Born approximation, respectively. The first order element is defined as:

*corresponding author; e-mail: nour_mansour1@yahoo.fr

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left(i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v} z\right) W_{ij}(\rho, z), \quad (8)$$

where ε_i is the energy of the electronic state $|\varphi\rangle$, and the elements W_{ij} are given as follows:

$$W_{ij}(\rho, z) = \int dr \varphi_i^*(r) V(R, r) \varphi_j(r) \quad (9)$$

bound-bound transition,

$$W_{ic}(\rho, z) = \int dr \varphi_i^*(r) V(R, r) \varphi_c(r) \quad (10)$$

bound-continuum transition,

$$W_{cc'}(\rho, z) = \int dr \varphi_c^*(r) V(R, r) \varphi_{c'}(r) \quad (11)$$

continuum-continuum transition.

The second order element $(i|VG_T^+V|j)$ is defined as:

$$(i|VG_T^+V|j) = \left[\sum + \int \right]_{\nu} H_{ij}^{\nu}, \quad (12)$$

where the term H_{ij}^{ν} is given by

$$H_{ij}^{\nu} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \exp\left(i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_{\nu}}{\nu} z\right) W_{i\nu}(\rho, z) \times \int_{-\infty}^z dz' \exp\left(i \frac{\varepsilon_{\nu} - \varepsilon_j}{\nu} z'\right) W_{\nu j}(\rho, z'). \quad (13)$$

3. Results and discussion

Our work is focused on the study of excitation of the hydrogen atom by proton impact for an energy range between 2 keV and 200 keV. Less than 40 keV the excitation and capture channels become competitive. This is why the initial and final states both are developed on a basis consisting of exact wave functions that describe the bound and continuum states. This will improve the accuracy of the cross-section, since the contribution of the continuum states of the target is taken into account.

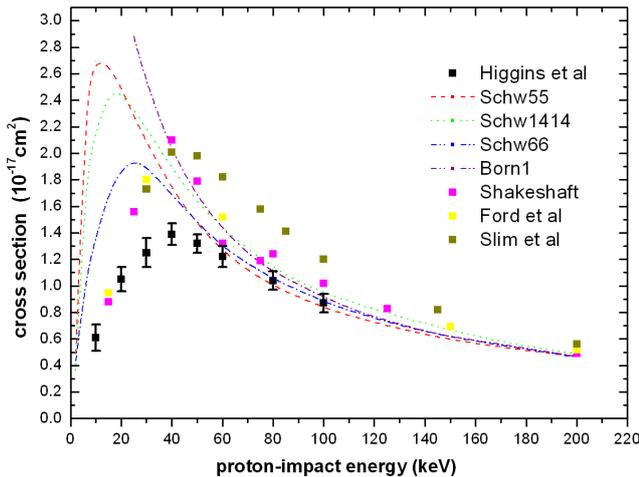


Fig. 1. Total cross-sections for the excitation of the 2s state of the hydrogen atom by proton impact.

Figure 1 represents our theoretical results (Schw66) of the total cross-section for the excitation of the 2s state of the hydrogen atom by proton impact, compared to experimental results (Higgins et al. [4]) and other theoretical results (Schw55, Schw1414, Born1, Shakeshaft [5], Ford et al. [6] and Slim [7]).

As a first attempt, we have introduced in the initial and final scattering wave functions, a single continuum state of the target with a momentum $k = 0.75$ a.u. The value of k has been obtained thanks to the work of Sahlaoui and Bouamoud [8], DalCappello et al. [9] and Benmansour et al. [10]. Our calculations have therefore been made on an expansion over the finite basis vectors $|i\rangle$ and $|j\rangle$ consisting of the six states $\{1s, 2s, 2p_0, 2p_{+1}, 2p_{-1}, kp_0\}$. The results of our variational method are called Schw66 (Schw as Schwinger and 66 refer to six states in both initial and final states).

From Fig. 1 we can see the good agreement between the present results and those obtained by Bouamoud [11]. We can notice also the significant improvement given by our result Schw66 for energies below 40 keV, compared to the previous results Schw55 and Schw1414 of Bouamoud [11]. For energies above 40 keV, the curves have the same profile.

4. Conclusion

In conclusion, we note that the continuum states of the target are able to properly describe the capture states of the projectile in an energy range where the coupling between capture and excitation channels is very strong.

References

- [1] R.J. Glauber, *Lect. Theor. Phys.* **1**, 315 (1958).
- [2] R.K. Janev, A. Salin, *Ann. Phys. (New York)* **73**, 136 (1972).
- [3] C.J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, North Holland, Amsterdam 1975.
- [4] D.P. Higgins, J. Geddes, H.B. Gilbody, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 1219 (1996).
- [5] R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **18**, 1930 (1978).
- [6] A.L. Ford, J.F. Reading, K.A. Hall, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 4537 (1993).
- [7] H.A. Slim, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **26**, L743 (1993).
- [8] M. Sahlaoui, M. Bouamoud, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **45**, 085201 (2012).
- [9] C. Dal Cappello, B. Hmouda, A. Naja, G. Gasaneo, *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **46**, 145 (2013).
- [10] N.E. Houda Benmansour, M. Sahlaoui, M. Bouamoud, *J. Phys. Conf. Series* **635**, 052052 (2015).
- [11] M. Bouamoud, Ph.D. Thesis, University of Bordeaux I, 1988.

Variational study of atomic hydrogen ionization by electrons impact

This content has been downloaded from IOPscience. Please scroll down to see the full text.

2015 J. Phys.: Conf. Ser. 635 052052

(<http://iopscience.iop.org/1742-6596/635/5/052052>)

View [the table of contents for this issue](#), or go to the [journal homepage](#) for more

Download details:

IP Address: 41.96.8.109

This content was downloaded on 20/09/2015 at 19:46

Please note that [terms and conditions apply](#).

Variational study of atomic hydrogen ionization by electrons impact

N.E.Houda Benmansour³, Mohammed Sahlaoui², and Mammam Bouamoud¹

¹ University Center of Naama, 45000 Naama, Algeria

² Ecole Préparatoire en Sciences et Techniques, 13000 Tlemcen, Algérie

³Theoretical Physics Laboratory, University Aboubekr Belkaid of Tlemcen, BP 119 Tlemcen 1300, Algeria

Triple differential cross section results of the electron impact ionization of hydrogen atom are performed in the so-called Schwinger-Born approximation of variational principle of Schwinger. In the theoretical calculations the first Born term was calculated analytically, and the second Born term was determined in the closure approximation using semi-analytical calculations. The theoretical results were corrected by the so-called Gamow factor in order to include post-collision effects, then compared with experiments performed with an incident electron energy of $E_i = 250$ eV and with those of other models. Better agreement was found between our results and experimental data even for high values of the ejected electrons energy (50 eV).

1. Introduction

We investigate in this work the ionization of hydrogen atom by electrons impact. The triple differential cross sections have been calculated in the framework of Schwinger-Born (SB) approximation of variational principle of Schwinger. The TDCS obtained in this work have been compared to the experimental results of Weigold *et al* [1] as well as to other theoretical ones [2],[3].

2. Theory

In the ionization of the atomic target by electron impact, the non-relativistic TDCS is given by

$$\frac{d^3\sigma}{dE_e d\Omega_e d\Omega_s} = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{k_e k_s}{k_i} |T_{\alpha\beta}|^2$$

is the matrix element describing the transition $\mathcal{M}_{\alpha\beta}$ the projectile-target system from the initial state $|\alpha\rangle$ to the final state $|\beta\rangle$, which is the variational amplitude defined as

$$T_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} \langle \beta | V | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V | \alpha \rangle$$

$$D_{ji} = \langle j | V - VG_T^+ V | i \rangle$$

V is the target - projectile interaction and G_T^+ the target propagator.

In this study calculations were performed in the Schwinger-Born approximation, that is $|i\rangle = |\alpha\rangle$ and $|j\rangle = |\beta\rangle$ where $|\alpha\rangle = \varphi_{k_i}(\mathbf{r}_0)\varphi_H(\mathbf{r}_1)$ and $|\beta\rangle = \varphi_{k_e}(\mathbf{r}_0)\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1)$. The incident and scattered particles are described by a plane wave. $\psi_{k_e}^{(-)}(\mathbf{r}_1)$ is the continuum state of the ejected electron described by the Coulomb wave function which satisfies the incoming boundary condition.

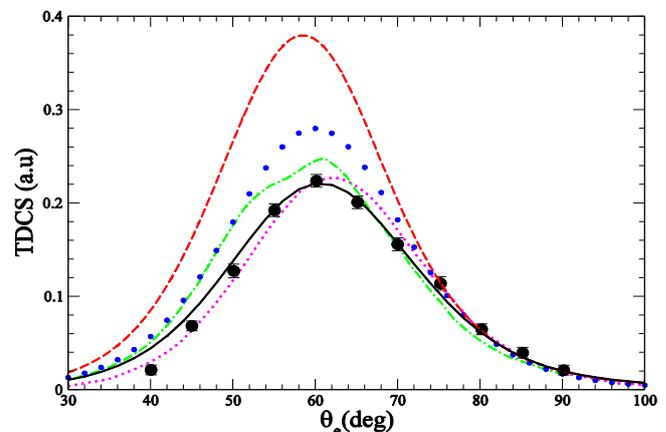
To include the post-collision interaction (PCI) between the outgoing scattered and ejected electrons

in the TDCS, the amplitude is multiplied by the Gamow factor [4].

$$T_{\alpha\beta}$$

3. Results and discussion

The figure shows the measurements of TDCS of Weigold *et al* [1] for electron-impact ionization of H for an incident energy $E_i = 250$ eV an ejected energy $E_e = 50$ eV and a scattered angle $\theta_s = 25^\circ$, our results of SB, first Born and second Born [5] approximations, and those of BBK model [2] and second Born approximation of Dal Cappello *et al* [3] including 294 intermediate states. SB results



First Born: *small circles*. Second Born: *dashed line*. Dal Cappello Second Born: *dashed-dot*. BBK: *dot line*. SB: *full line*. Experiments: *full circles with error bars*.

4. References

- [1] E. Weigold *et al* 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **12** 291
- [2] M. Brauner *et al* 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **22** 2265
- [3] C. Dal Cappello *et al* 2013 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46** 145203
- [4] A.S. Kheifets *et al* 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 145201
- [5] M. Sahlaoui and M. Bouamoud 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 085201



Abstract:

Nous avons utilisé le principe variationnel de Schwinger pour évaluer les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons dans un domaine d'énergie excluant un traitement de perturbation. Pour décrire le fort couplage entre les voies d'excitation et de capture qui existe à basse énergie, nous avons introduit les états du continuum exacts de la cible dans le développement de la fonction d'onde totale de diffusion. Les résultats obtenus montrent que ces états peuvent décrire convenablement les états de capture du projectile.

Mots clés: section efficace, excitation, principe variationnel de Schwinger, l'approximation des paramètres d'impact.

Abstract:

Schwinger's variational principle is used to evaluate excitation cross-sections of hydrogen atom by proton impact in a range of energies excluding a perturbative treatment. To describe the strong coupling between the excitation and the capture channels that exists at low energies, the continuum states have been introduced in the total wave function. Our results show that these states can describe properly the projectile capture states.

Key words: cross section, excitation, Schwinger variational principle, impact parameter approximation.

ملخص:

استخدمنا مبدأ شوينغر لتقييم المقاطع الإثارة الناتجة من تصادم ذرة الهيدروجين بواسطة البروتون في مجال الطاقة بدون إضطرابات. لوصف اقتران قوي بين مسارات الإثارة والتقاط الإلكترون التي توجد في مستوى الطاقة المنخفض، أدخلنا مستويات طاقة من المجال المستمر لذرة الهيدروجين في تطوير دالة موجة الإنتشار. النتائج التي تم الحصول عليها تبين أن هذه مستويات يمكن أن تصف على نحو كاف حالات التقاط الإلكترون على قذيفة.

الكلمات الرئيسية: المقطع العرضي، الإثارة، مبدأ شوينغر، تقريب معامل التأثير