

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Université Abou Bekr Belkaid
Tlemcen Algérie



جامعة أبي بكر بلقايد

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du titre de

MASTER

Domaine: Sciences de la Matière

Option: Physique des Gaz et des Plasmas

Par:

Mr. ABDELOUAHAD Mohamed

Sur le thème :

Application du principe variationnel de Schwinger aux calculs des sections efficaces de l'émission Balmer- α et de la fraction de polarisation dans une collision proton-atome d'hydrogène

Soutenu le **03 Juillet 2013** devant le jury composé de:

Président	M ^r INAL Mokhtar Kemal	Professeur
Encadreur	M ^r LASRI Boumediene	Maître de Conférences «A »
Examinatrice	M ^{me} BEDRANE Zeyneb Ep. TABET	Maître de Conférences «A »

Année Universitaire 2012 - 2013

Dédicaces

Je dédie ce travail:

◆ *A toute ma famille*

- *Mon frère*
- *Mes oncles*

◆ *A tous mes enseignants, du primaire à l'université*

◆ *A tous mes amis et mes collègues.*

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été réalisé au sein du département de Physique de la Faculté des Sciences de l'Université de Tlemcen

J'adresse naturellement des remerciements tout particuliers à M^r **LASRI Boumediene** qui a dirigé ce mémoire. Ses grandes qualités scientifiques et humaines ont permis que ce travail puisse avancer rigoureusement, dans un esprit toujours amical.

Qu'il veuille bien trouver ici l'expression de mon profond respect et de ma reconnaissance.

Je tiens à remercier profondément le Professeur **Mokhtar Kemal INAL** pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire.

J'exprime également ma profonde gratitude à M^{me} **Zeyneb BEDRANE Ep. TABET** d'avoir accepté de juger ce mémoire.

Un grand merci à tous mes collègues et à tous mes amis.

Enfin, je remercie du fond du cœur toute ma famille pour son appui durant toutes ces années. Particulièrement, à mes chers parents que j'adresse mon profond respect et reconnaissance.

Un grand merci à tous ceux qui me sont chers.

Table des matières

Introduction générale.....	1
Chapitre I	
Processus élémentaires, domaines de vitesses et divers travaux.....	4
I-1 Introduction.....	4
I-2 Processus élémentaires et régimes de vitesses.....	5
I-3 Diverses Approches théoriques	8
I-3.1 Les méthodes perturbatives.....	8
I-3.1.1 L'approximation de Born.....	9
I-3.1.2 L'approximation iconale.....	11
I-3.2 D'autres travaux actuels.....	11
I-4 Notre approche variationnelle	13
Chapitre II	
L'essentiel du principe variationnel de Schwinger pour la théorie des collisions atomiques.....	20
II-1. Introduction.....	20
II-2. L'approche variationnelle de Schwinger pour la théorie des collisions.....	22
II-2.a. Amplitude variationnelle approchée dans le formalisme de Schwinger	25
Chapitre III	
Traitement variationnel de Schwinger pour l'excitation atomique des ions.....	33
III-1 Introduction.....	33
III-2 Amplitude variationnelle de Schwinger pour l'excitation directe.....	34
III-3 De l'amplitude de transition iconale à la section efficace totale d'excitation.....	41
III-3.1 Amplitude de transition iconale.....	41
III-3.2 Sections efficaces iconales.....	43
Chapitre IV	
Evaluation des éléments matriciels de type Born pour l'amplitude de transition.....	47
IV-1. Calcul des éléments de matrice de Born-I.....	47
IV-2. Calcul des éléments de matrice de Born-II.....	50
Chapitre VII	
Sections efficaces de l'émission Balmer-α dans une collision Proton-atome d'hydrogène.....	55
Introduction	55
VII-2 Diverses Procédures théoriques.....	57
VII-2.1 Les Méthodes perturbatives.....	57
VII-2.2 Approches semi-classiques	58
VII-2.2.1 Les Méthodes Close-Coupling.....	58
VII-2.2.1.1 Approches à centre unique (SCE).....	58
VII-2.2.1.2 Approches à deux centres (TCAO).....	59
VII-2.2.1.3 Approches à trois centres (TCE).....	59
VII-2.3 Notre traitement variationnel.....	60
VII-3 Fraction de polarisation	63
VII-4 Résultats.....	65
VII-5 Discussions.....	69
Conclusion générale.....	76

Résumé

Les approches variationnelles basées sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger s'avèrent un outil d'investigation très puissant qui prend le relais du traitement perturbatif dans l'étude des processus d'excitation directe des atomes par impact d'ions aux énergies intermédiaires. De plus, ces procédures prédisent avec succès la saturation des sections efficaces totales lorsque la charge du projectile augmente. Ces diverses caractéristiques sont bien illustrées par un bon accord entre les résultats théoriques quand la fonction d'onde est assez bien représentée (5, 10 et 14 états de base) et les résultats expérimentaux comme ceux de l'excitation de l'atome d'hydrogène ainsi que pour les sections efficaces de l'émission de la raie Balmer- α et la fraction de polarisation linéaire.

Mots clés : collisions atomiques - Principe variationnel de Schwinger- excitation atomique- section efficace, émission Balmer- α , fraction de polarisation linéaire.

Introduction générale

 Dans plusieurs domaines de la physique, les collisions atomiques sont les processus les plus fondamentaux en physique quantique et présentent un intérêt essentiel en physique nucléaire et en astrophysique. La connaissance de la nature et de l'efficacité des processus collisionnels a une importance considérable.

L'un des domaines les plus importants dans la physique moderne est l'étude des processus d'ionisation de cibles atomiques ou moléculaires par impact de particules chargées. La théorie la plus concernée par l'explication de ces processus est la théorie des collisions atomiques. La compréhension des processus d'ionisation est très importante pour plusieurs domaines comme, par exemple, la physique des plasmas, l'astrophysique et la radiobiologie.

Pour profiter des prédictions de la théorie, il est souvent nécessaire de modéliser un formalisme mathématique selon la nature du processus à étudier. Cependant, suivre la rigueur d'un formalisme mathématique souvent mène à des complications au niveau des calculs numériques qui rendent parfois impossible l'extraction des résultats avec les moyens matériels qui sont à notre disposition. D'autres problèmes peuvent aussi apparaître au niveau des calculs numériques et qui peuvent nécessiter un savoir-faire qui n'est pas à notre possession. Le temps nécessaire pour obtenir un résultat est aussi un facteur très important. Donc nous sommes souvent obligés de faire des approximations pour simplifier le formalisme mathématique d'un côté pour rendre les calculs maniables et d'un autre côté pour pouvoir tirer des informations sur la nature du processus étudié. Cependant, les résultats donnés par la modélisation doivent être en accord avec ceux donnés par des modèles précédents de précision déjà confirmée, et le plus important c'est qu'ils doivent être en bon accord avec les données de l'expérience. Une approximation peut induire une formule élégante, mais malheureusement, elle peut se répercuter sur la précision des résultats. Donc le chercheur doit faire très attention au choix du formalisme et aux approximations nécessaires.

Pour comprendre ce qui se passe lors de la collision, il est donc nécessaire d'analyser l'un des produits de la collision (photons, électrons, fragments, ions de recul, projectile), ou plusieurs produits en même temps.

Citons quelques exemples d'applications :

Pour soigner des personnes atteintes de cancers, il faut détruire les cellules cancéreuses, en touchant le moins possible aux cellules saines. Il existe plusieurs méthodes, complémentaires, pour traiter les cancers :

- ✓ La chirurgie, consistant à enlever manuellement les zones touchées.
- ✓ La chimiothérapie.
- ✓ La radiothérapie, développée dès le début des années 19, dont le principe est d'envoyer sur les cellules cancéreuses des rayons γ .

Ces méthodes font leurs preuves chaque jour, avec des succès grandissant.

Une méthode nouvelle a vu le jour dans les années 1946, avec l'avènement des sources et des accélérateurs d'ions. L'hadron-thérapie est une méthode dans laquelle des ions de haute énergie (plusieurs MeV) sont envoyés sur la zone malade à traiter. Les ions présentent un grand avantage, comparés à d'autres particules. Lorsque des photons sont utilisés, l'énergie est déposée dans les 1ers mm, et continue à se déposer plus avant.

Autrement dit, nous voyons que les cellules cancéreuses ne seront pas les seules affectées. Le phénomène est similaire avec des électrons, quoique moins prononcé. Avec des ions, il en va tout autrement. L'énergie est peu déposée sur les premiers cm. A une certaine profondeur, qui dépend de l'énergie incidente de l'ion, les ions vont ralentir brusquement, et vont déposer la quasi-totalité de leur énergie à cet endroit. Cette énergie détruit les cellules cancéreuses.

Si le principe est simple, la mise en œuvre et la compréhension des processus qui interviennent sont complexes. En effet, les ions qui traversent le corps ionisent les molécules présentes, c'est-à-dire en majorité les molécules d'eau ainsi que, par exemple, les molécules plus complexes telles que l'ADN. L'eau ionisée se fragmente, par exemple en H^+ et OH^+ . A leur tour, les fragments vont se recombiner avec d'autres molécules, tandis que les électrons ionisés peuvent à leur tour ioniser d'autres molécules. L'analyse du passage d'un ion dans la matière requiert donc une connaissance qualitative (quelles sont les réactions primaires et secondaires ?) et quantitative (sections efficaces)

Interaction vent solaire – comètes :

En 1995, une comète fut découverte, et comme toutes les comètes, elle est constituée principalement d'eau, mais aussi de beaucoup d'autres molécules, telles que OH, H_2S , SO, et des molécules très exotiques telles que HNC, HNCO, ... De manière générale, nous distinguons le noyau, et une queue très longue, due à l'échauffement du noyau au voisinage

du Soleil. En fait, il existe deux sortes de queue, celle due aux poussières émises, visible grâce à la réflexion du Soleil, et une queue due à l'émission de molécules gazeuses.

Outre ces principales queues, un rayonnement X provenant de la comète a été observé grâce au satellite ROSAT. Ce rayonnement provient de la désexcitation d'ions lourds, tels que C^{5+} , N^{6+} , O^{7+} , Ne^{6+} . Plusieurs processus ont été évoqués pour expliquer la production de ces X : la diffusion d'électrons provenant du Soleil sur la comète, la diffusion d'X sur cette même comète.

Finalement, l'hypothèse retenue jusqu'à présent est la capture électronique. Des ions lourds très chargés provenant du vent solaire capture un électron de molécules de la comète, sur des états excités. La désexcitation est principalement radiative, de l'état $2p$ vers l'état $1s$. L'énergie émise est dans le domaine des X.

A cause des insuffisances des méthodes basées sur des théories perturbatives dues principalement aux calculs qui deviennent difficiles en incluant un nombre important d'états, dans notre étude nous nous sommes intéressés à une nouvelle procédure basée sur une théorie variationnelle nommée principe variationnel de Schwinger. Notre objectif principal dans ce mémoire est d'évaluer les sections efficaces de l'émission de la raie Balmer- α ainsi que la fraction de polarisation lors d'un processus d'excitation pour une collision de type proton-atome d'hydrogène. Nos résultats obtenus ont été comparés avec d'autres calculs théoriques ainsi qu'avec les résultats expérimentaux disponibles

Ce travail est organisé comme suit :

Chapitre 1: Un brève introduction sur les divers processus collisionnels.

Chapitre 2: Nous présentons dans ce chapitre, l'essentiel du principe variationnel de Schwinger pour la théorie des collisions atomiques.

Chapitre 3: Ce principe est adapté à l'excitation atomique où nous développons l'amplitude de transition variationnelle afin d'aboutir aux sections efficaces totales d'excitation des systèmes hydrogénoïdes, par impact d'ions aux vitesses intermédiaires.

Chapitre 4 : Evaluation des éléments notés $(i|V|j)$, dits de premier ordre de Born (Born-I), et ceux dits de deuxième ordre de Born (Born-II), notés $(i|V G_T^+ V|j)$.

Chapitre 5: Application du principe variationnel de Schwinger aux calculs des sections efficaces de l'émission de la raie Balmer- α ainsi que la fraction de polarisation de l'atome d'hydrogène.

Chapitre I

Processus élémentaires, domaines de vitesses et divers travaux

I-1 Introduction:

 Dans plusieurs domaines de la physique, l'étude de la collision entre un atome cible et un projectile constitue une source d'information très importante et originale de la structure atomique et moléculaire. Cela présente de plus un grand intérêt aussi bien fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes naturels notamment pour la physique des plasmas et la fusion thermonucléaire.

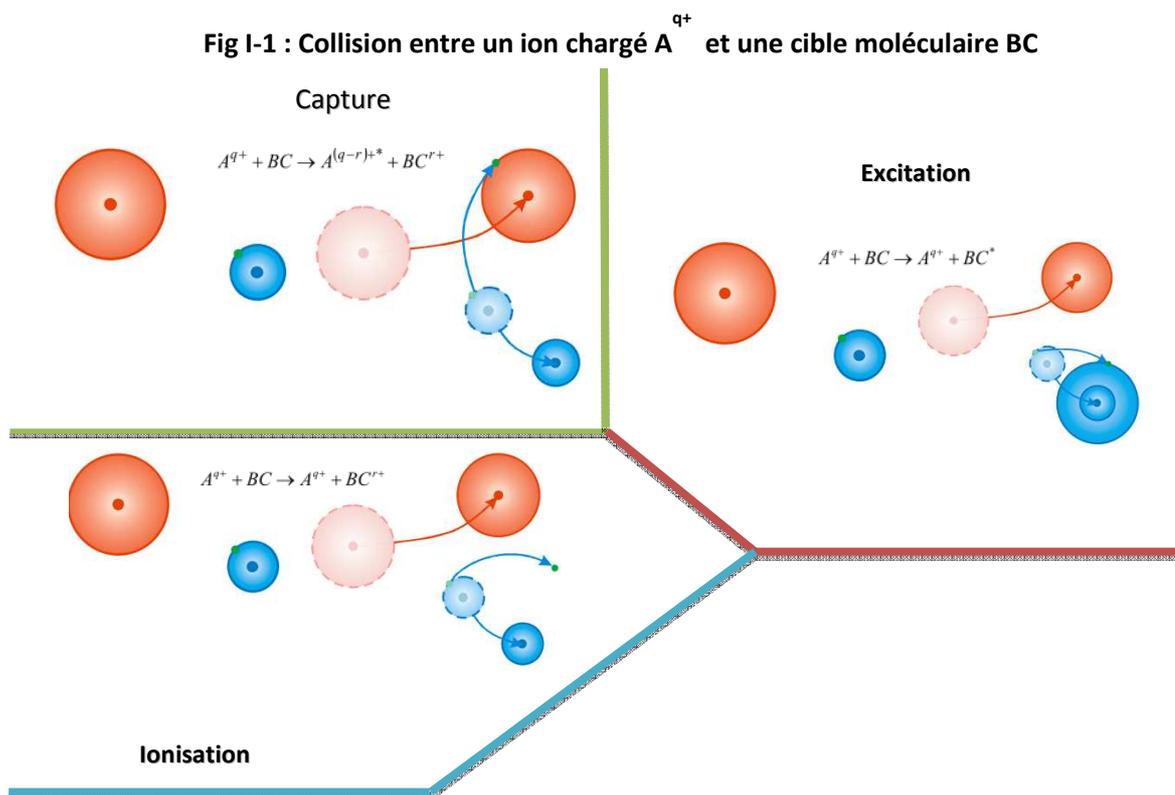
En astrophysique par exemple, les mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) interviennent lors de la formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs [1][2].

La connaissance de ces mécanismes permet ainsi d'analyser les phénomènes galactiques. Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, l'étude des phénomènes d'ionisation et d'excitation est fondamentale pour le développement de la physique des plasmas de fusion, dans lesquels les collisions conduisent à la production d'ions excités dont la désexcitation se traduit par l'émission de rayons X [3][4]. Grâce à des méthodes performantes de spectroscopie, il est possible d'obtenir une estimation précise de la densité, de la température ainsi que la mise en évidence des processus de transfert d'énergie au sein de ces plasmas chauds [5], et par conséquent la notion de section efficace totale est fondamentale.

Les sections efficaces de collisions atomiques ont été largement étudiées en fonction des énergies d'impact. Récemment, les expériences de physique nucléaire et biologiques avec des ions fortement chargés dans des accélérateurs de particules ont montré une nouvelle direction des études pour la physique des collisions atomiques.

I-2 Processus élémentaires et régimes de vitesses:

Lors d'une collision entre un ion projectile et une cible atomique ou moléculaire, les divers processus mono électroniques, tels que l'ionisation, l'excitation et la capture d'un électron susceptibles de se produire, sont décrits de manière adéquate par un grand nombre de théories (Fig I-1).

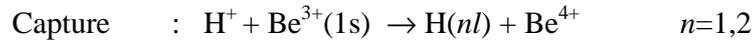
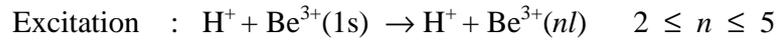
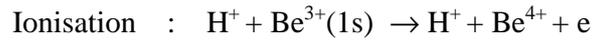


L'ionisation : si l'interaction est assez intense, le transfert d'énergie peut être suffisant pour arracher un électron de l'atome cible : c'est le phénomène d'ionisation. Il y a création d'une paire ion-électron (ion positif et électron) dans le milieu.

L'excitation : si l'interaction est insuffisante pour créer une ionisation, il y a seulement excitation : l'électron change d'état quantique. L'excitation le fait passer d'un état initial à un état final moins lié. Pour les cibles biologiques par exemple ce processus est peu probable.

La capture : 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 différents processus peuvent être traduits par une écriture plus explicite; citons par exemple le cas d'une collision de type Proton-Be³⁺ ($H^+ \rightarrow Be^{3+}$):



Ces divers processus sont caractérisés par des sections efficaces qui, pour un ion projectile et une cible donnés, dépendent de l'énergie de la collision comme le montre la figure I-2 pour le cas d'un système proton sur hydrogène. Selon la vitesse v_p du projectile, l'importance relative de ces processus dynamiques diffèrent. Trois principaux régimes de vitesses peuvent être distingués selon la valeur du paramètre K défini par la relation I-1 si on s'intéresse aux états électroniques du projectile :

$$K = \frac{Z_C v_e}{Z_P v_P} \quad (\text{I-1})$$

où v_e est la vitesse initiale de l'électron actif mis en jeu dans un processus atomique considéré (c'est-à-dire les électrons qui changent d'état au cours de la collision), v_P : la vitesse du projectile, Z_P désigne la charge du projectile (numéro atomique) et Z_C est la charge de la cible.

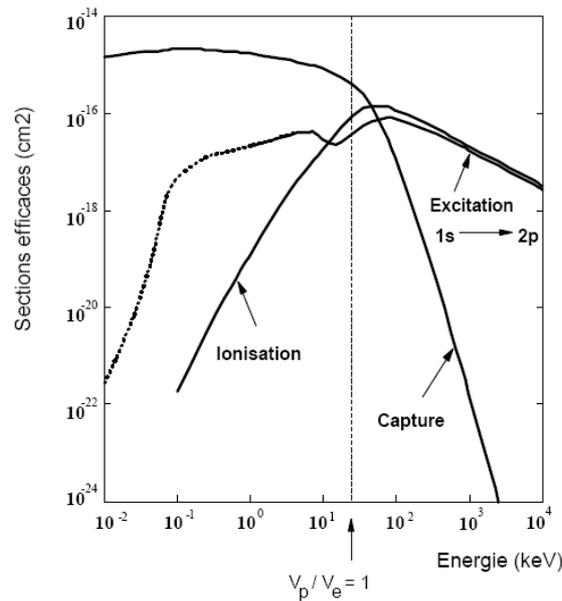


Figure I-2 : Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision P + H.

En fait, pour les systèmes plus complexes, le paramètre judicieux n'est pas la vitesse du projectile, mais le rapport la vitesse du projectile et la vitesse des électrons actifs, c'est-à-dire les électrons entrant en jeu dans la dynamique de la collision. Par analogie, les électrons qui ne participent pas activement à la collision sont dit passifs, ou spectateurs. Ces électrons font partie du noyau, et ont pour rôle de diminuer la charge du noyau.

1. **Le régime dit des basses vitesses** : ou régime de forte interaction ($K \gg 1$) est atteint pour des vitesses de collision (v_p) très inférieures à celle de l'électron actif (v_e) entre partenaires de numéros atomiques comparables ou pour une grande asymétrie de collision $Z_C \gg Z_P$. En effet, lors de la collision l'électron est localisé à la fois autour des deux centres et le système apparaît sous une configuration moléculaire formée par les deux partenaires, d'où l'appellation courante « domaine moléculaire ». La théorie, adaptée à ce régime, est basée sur l'hypothèse de la formation d'une quasi-molécule transitoire au cours de la collision et fondée sur une représentation des états électroniques sur des bases moléculaires. La théorie Continuum Distorted Wave (CDW) [6] est appropriée pour ce système de collision.
2. **Le régime dit des hautes vitesses** : ou régime perturbatif ($K \ll 1$) est atteint pour des grandes vitesses de collision comparées à celle de l'électron actif de l'atome cible, ou pour des grandes asymétries de collision du type $Z_P \gg Z_C$. Dans ce domaine, les voies d'ionisation et d'excitation ne semblent pas couplées entre elles. Une théorie de perturbation au premier ordre telle que l'approximation PWBA (Plane-Wave Born Approximation) [7-9] devient fiable, à condition que les fonctions d'ondes utilisées pour la cible soient correctes.
3. **Le régime dit des vitesses intermédiaires** : ($K \cong 1$) pour lequel les sections efficaces des différents processus atomiques sont proches de leurs valeurs maximales et sont toutes du même ordre de grandeur. Les processus multiples faisant intervenir plusieurs de ces processus simples simultanément (Capture-Ionisation, Excitation-Ionisation, Double Excitation,...) ont alors des probabilités non négligeables. Pour des systèmes quasi-symétriques, ce domaine des vitesses est caractérisé par un fort couplage entre les deux voies de capture et d'excitation. Et la voie d'ionisation apparaît d'autant plus importante que la vitesse d'impact est grande. 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 [10].

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

I-3. Diverses Approches théoriques :

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

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

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

I-3.1. Les méthodes perturbatives:

L'étude des systèmes de collisions atomiques a toujours été le sujet de nombreuses discussions et de divers travaux théoriques et expérimentaux.

Les méthodes de perturbation ont joué un rôle important en physique des collisions atomiques et moléculaires particulièrement dans le domaine des expériences critiques et des mesures dans l'étude des réacteurs, depuis les débuts des applications de l'énergie nucléaire. Déjà Wigner en 1945 [11] en proposait une formulation plus élémentaire, la CPT (Classical Perturbation Theory), issue directement des concepts classiques de la mécanique quantique, pour mesurer le poids en réactivité de petits échantillons de matériaux introduits dans une pile atomique.

Dans un problème de collisions à haute énergie, le potentiel de diffusion peut être considéré comme une petite perturbation devant l'énergie totale du système. C'est pourquoi dans ce domaine d'énergie, des approches perturbatives sont couramment utilisées pour décrire un tel processus : cette description est souvent faite par le biais d'un traitement de Born au premier ordre (Born-I) pour l'excitation et l'ionisation [12], ou la théorie des ondes distordues « Continuum-distorted-wave » (CDW) pour le transfert de charge [6][13][14].

I-3.1.1 L'approximation de Born:

Au début, il faut noter que l'approximation de Born est essentiellement un développement perturbatif de la fonction d'onde ou de l'amplitude de diffusion, en puissance du potentiel d'interaction.

Dans cette section, nous commençons par l'équation de Schrödinger indépendante du temps et ceci dans le but de déduire les équations intégrales pour la fonction d'onde. Nous devons alors prendre en considération les conditions aux limites en exigeant qu'elles aient la forme appropriée aux grandes distances, c'est-à-dire un choix donné pour la fonction de Green et pour la solution homogène de l'équation différentielle impliquant une définition des conditions aux limites. Il est aussi possible de déduire le même résultat si nous employons l'équation de Schrödinger et la fonction de Green dépendante du temps.

Pour cela, considérons la transition d'un électron de l'état initial $|\alpha\rangle$ de la voie d'entrée, à l'état final $|\beta\rangle$ de la voie de sortie, dans une collision d'une cible atomique avec un ion incident.

Dans ce traitement perturbatif, l'élément matriciel de l'amplitude de transition $T_{\beta\alpha}$ peut être écrit :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_\beta | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{I.1})$$

L'Hamiltonien total du système s'écrit :

$$H = H_0 + V = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \quad (\text{I.2})$$

$|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ désignent respectivement les valeurs propres de H_α et H_β , hamiltoniens des particules sans interaction dans la voie d'entrée et entre les agrégats de la voie de sortie.

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

$|\psi_\alpha^+\rangle$ représente le vecteur propre de l'hamiltonien total H dans la voie de sortie et vérifie les équations de Lippman-Schwinger :

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G^+ V_\alpha |\psi_\alpha^+\rangle \quad (\text{I.3})$$

où

$$G^+ = (E - H + i\varepsilon)^{-1} \quad (\text{I.4})$$

E est l'énergie totale du système.

En outre, il est facile de montrer que l'opérateur de Green prend la forme du développement suivant :

$$G^+ = G_\alpha^+ \sum_{i=0}^{+\infty} (V_\alpha G_\alpha^+)^i \quad (\text{I.5})$$

Maintenant, en substituant cette expression de G^+ dans l'équation (I.3), l'élément matriciel de l'amplitude de transition $T_{\beta\alpha}$ devient :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_\beta \left[1 + G_\alpha^+ \sum_{i=0}^{+\infty} (V_\alpha G_\alpha^+)^i V_\alpha \right] | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{I.6})$$

Alors, si on retient juste le premier terme de cette série, nous obtenons le premier terme de l'approximation de Born dit Born-I :

$$T_{\beta\alpha}^{B1} = \langle \beta | V_\beta | \alpha \rangle \quad (\text{I.7})$$

De même, l'approximation de Born dite Born-II revient à retenir seulement les deux termes du développement qui dominent la diffusion à haute énergie dans le cas de collisions inélastiques. Le second terme qui laisse apparaître un caractère de processus en deux étapes, est primordial dans le cas de la capture à haute énergie:

$$T_{\beta\alpha}^{B2} = \langle \beta | V_\beta + V_\beta G_\alpha^+ V_\alpha | \alpha \rangle \quad (\text{I.8})$$

Et ainsi de suite, le " $N^{\text{ème}}$ " ordre de l'approximation de Born, revient à retenir seulement les N premiers termes de la série.

En général, l'approximation de Born donne un bon résultat pour des hautes énergies d'incidence. et par conséquent l'approximation de Born est seulement valable quand l'énergie cinétique de l'ion incident est très grande par rapport au potentiel d'interaction.

I-3.1.2. L'approximation iconale:

L'approximation de Born et l'approximation iconale sont toutes les deux basées sur l'expression intégrale exacte de l'amplitude de collision de l'expression (I.1).

L'approximation de Born au premier ordre (Born-I) est basée sur le fait que la collision s'effectue à faible interaction, par conséquent la fonction d'onde de diffusion $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ diffère très peu de la fonction d'onde plane incidente. Si nous considérons une meilleure approximation de la fonction d'onde, celle-ci sera réalisée pour l'amplitude de transition. Une possible amélioration est alors l'approximation iconale, qui est valable aussi à haute énergie et aux petits angles de collision. Elle consiste à supposer que le projectile se déplace en ligne droite et que le transfert d'impulsion de la cible est perpendiculaire à la trajectoire du projectile. L'idée de base dans cette méthode consiste en ce que la fonction d'onde incidente subisse un changement de phase sous l'influence du potentiel sur une trajectoire en ligne droite.

Pour déduire l'approximation iconale, on peut modifier ψ comme suit :

$$\psi(\vec{r}) = e^{ik'\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}) \quad (\text{I.9})$$

Quand les critères de validité de l'approximation de Born ne sont pas vérifiés, la généralisation de l'approximation Born dite DWBA (Distorted Wave Born Approximation) peut être employée. Par exemple, l'excitation ou l'ionisation d'ions positifs où la contribution du potentiel à longue portée est dominante, nécessite que l'état initial soit le produit d'une fonction d'onde de la particule incidente choisie dans un modèle de potentiel et la fonction d'onde de la cible obtenue avec certaines approximations.

I-3.2. D'autres travaux actuels:

Dans l'ordre de surmonter certaines faiblesses de l'approximation de Born, une nouvelle méthode a été développée au début des années soixante, appelé VPS (Vainshtein, Presnyakov et Sobelman) [15]. Elle consiste en une correction partielle de la fonction d'onde par inclusion de la distorsion due à l'interaction entre la particule incidente et les électrons liés en essayant de traiter exactement cette interaction. Une version partiellement différente de

l'approche initiale a été proposée en 1965 par McCarroll et Crothers [16]. Elle fut appliquée ensuite, en 1966 par Mc Carroll et Salin [17] aux collisions de type Proton-atome d'hydrogène.

Développée par Glauber à la fin des années cinquante sous l'appellation de "Impact Parameter Method" [18][19], ensuite par Mc Carroll et Salin en 1966 pour des cas de collisions atomiques à plusieurs voies de réarrangement [17], l'approximation de Glauber est l'une des formulations de l'approximation iconale qui permet d'introduire les effets du potentiel d'interaction dans la fonction d'onde décrivant l'état final du système. Sachant que l'approximation iconale est une approximation où 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, cette nouvelle formulation iconale (approximation de Glauber) modifie ou déforme l'onde plane représentant le projectile. Ainsi elle prend en compte l'influence du potentiel d'interaction sur la fonction d'onde de diffusion quand le projectile s'approche ou s'éloigne de la cible. En effet les fonctions d'onde incidente et de diffusion ne sont plus des ondes planes.

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

Outre ces applications, le calcul des sections efficaces totales de diffusion constitue l'intérêt majeur des études faites sur ces processus de collisions. En effet, plusieurs chercheurs se sont penchés sur le problème de la diffusion multiple. Ce n'est qu'en 1975 que Park et ses collaborateurs ont publié les résultats expérimentaux [20], concernant des mesures de la section efficace totale de diffusion obtenues par la technique appelée "Crossed Beam".

Plusieurs approches ont été formulées afin de donner des modèles adéquats à l'étude du processus de collision. Nous citons le modèle de Cheshire et Sullivan établi en 1967 [25] dans lequel ces auteurs ont développé l'interaction et la fonction d'onde sur des harmoniques sphériques, le modèle du potentiel de second ordre proposé par Bransden et Coleman en 1972 [21] fondé sur la méthode des voies couplées et le modèle des pseudo-états utilisé pour la première fois par Reading et al en 1976 [22], puis repris par Fichard et al [23] ainsi que Swaford et al en 1977 [24].

Juste après, en 1979 Reading et al [26] ont utilisé la méthode appelée OHCE "One and Half Centred Expansion", afin de lever les difficultés rencontrées dans le calcul de la section efficace par la méthode SCE "Single Centred Expansion". Cependant, et dans la même année Bransden et al [27] ont utilisé le modèle appelé "Single-Centred Coupled Chanel" élaboré à partir du modèle des pseudo-états.

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

I-4. Notre approche variationnelle:

A cause de l'insuffisance des méthodes citées précédemment et des difficultés de mise en oeuvre des méthodes basées sur une théorie perturbative, nous avons donc essayer d'élaborer un outil performant et efficace à l'étude de la collision proton-atome d'hydrogène ou d'une façon plus générale à l'étude de la collision ion-atome multichargé aux vitesses intermédiaires.

Dans notre étude nous nous sommes intéressés à une approche relativement nouvelle excluant un traitement perturbatif, et fondée sur une théorie variationnelle, le Principe Variationnel de Schwinger.

Notre motivation dans l'étude des collisions atomiques par impact ionique est de donner et de fournir des résultats précis de sections efficaces totales qui seront nécessaires dans plusieurs applications pratiques. Ainsi nous avons testé au début l'approximation de Born qui rentre toujours dans le cadre des méthodes perturbatives et qui n'est pas applicable à une large gamme d'énergies du projectile mais seulement dans les hautes énergies d'impacts.

Pour la première fois, en 1979 une application du principe variationnel de Schwinger à la diffusion e -He a été présentée par Lucchese et Mc Koy [28] dont le but était de montrer que ce dernier fournit de bonnes solutions aux problèmes de diffusion sans nécessiter des développements sur des bases importantes. Par la suite, Lucchese, Watson et Mc Koy [29] ont développé cette approche dans le cas de la diffusion élastique d'électron par des molécules. En effet leur objectif était de montrer que l'amplitude de diffusion déduite du principe variationnel de Schwinger converge rapidement par rapport à la base sur laquelle la fonction d'onde de diffusion est développée.

En 1984, B. Brendlé [30-32] et sous la direction du Pr R. Gayet au Laboratoire des Collisions Atomiques de l'université de Bordeaux-I (France), a appliqué cette méthode à l'excitation d'ions et d'atomes par impact de noyaux nus aux vitesses intermédiaires. Il a montré que la restriction de la base à deux vecteurs représentant les seuls états initial et final de la transition considérée donne une meilleure stabilité des résultats et une amplitude de transition stationnaire, quoique le choix ne satisfasse pas exactement les conditions asymptotiques.

Parallèlement, M. Bouamoud [33][34], dans le même Laboratoire à l'université de Bordeaux I (France) et toujours sous la direction du Pr R. Gayet, a repris et développé cette méthode en mettant au point une nouvelle approche, basée sur un nouveau code informatique de calcul en Fortran, calculant systématiquement les sections efficaces totales d'excitation, en utilisant une base constituée de cinq états de la cible.

En 1998, dans un précédent travail qui représentait la thèse de Magistère à l'Université de Tlemcen, de M. LASRI sous la direction du Pr M. BOUAMOUD a réexaminé formalisme variationnel de nouveau et la base a été élargie de deux à cinq états.

Ce modèle théorique fut utilisé avec succès par le biais du formalisme du paramètre d'impact. Il est spécialement adapté à l'excitation de systèmes hydrogènoïdes 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 [33-36].

Récemment, dans le but de développer et d'affiner encore plus cette approche variationnelle dans la représentation de la fonction d'onde de diffusion, nous ne nous sommes pas restreints lors de notre développement à 5 états de base mais nous avons élargi cette base de 5 états à 10 puis à 14 états. Le propagateur de Green a été développé aussi sur une base constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que par celui du continuum de la cible. En fait, dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, la contribution des états du continuum est petite sans toutefois être complètement négligeable [27][32].

Cette approche a mené à des résultats très encourageants et a amélioré nettement les précédents.

En effet, cette nouvelle formulation de l'approche variationnelle de Schwinger, s'avère un outil d'investigation très puissant pour étudier l'excitation électronique d'atomes par impact d'ion. Cette procédure prédit avec succès la saturation des sections efficaces totales d'excitation d'ions par impact de projectiles neutres aux vitesses d'impact

intermédiaires (B. Brendlé et al (1985) [30][31], K. Wohrer et al (1986) [32], M. Bouamoud (1988) [33], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [34 (1998) [35], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [36], B. Lasri, A Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet (2005) [37], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2006) [38]).

Il faut ajouter que les différents résultats obtenus ainsi que les prédictions sont en très bon accord avec la totalité des résultats expérimentaux et parfois nettement meilleurs que ceux d'autres travaux théoriques fondés sur des techniques et des approximations récentes

Références

- [1]- C. P. Ballance, N. R. Badnell and K. A. Berrington, *J. Phys. B.* 34, 3287 (2001).
- [2]- A. D. Whiteford, N. R. Badnell, C. P. Ballance, S. D. Loch, M. G. O'Mullane and H. P. Summers, *J. Phys. B* 35, 3729 (2002).
- [3]- W. A. Schroeder, T. R. Nelson, A. B. Borisov, J. W. Longworth, K. Boyer and C. K. Rhodes, *J. Phys. B* 34, 297 (2001).
- [4]- J. Zeng, J. Yuan and Q. Lu, *J. Phys. B* 34, 2823 (2001).
- [5]- M. K. Inal and J. Dubau, *J. Phys. B.* 20, 4221 (1987).
- [6]- DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, *Phys. Report* 6 (1979) 279.
- [7]- E. Fermi, *Z. Physik* 29, 315 (1924).
- [8]- C. F. Weizsäcker, *Z. Physik* 88, 612 (1937).
- [9]- M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.* 43, 297 (1971).
- [10]- R. Schakeshaft, *Phys Rev A* 18 (1978) 1930
- [11]- E. P. Wigner - Effect of small perturbations on pile period. *Chicago Report CP6G-3048*, (1945).
- [12]- I. Lesteven-Vaïsse, D. Hennecart and R. Gayet, *J. Phys. (Paris)* 49 (1988) 1528.
- [13]- R. Gayet, *J. Phys. B* 5 (1972) 483.
- [14]- DZ. Belkic, R. Gayet and A. Salin, *Phys. Comput. Phys. Commun.* 32 (1962) 385.
- [15]- L. Vainshtein, L. Presnyakov et I. Sobelman, *Zh. Eksp. Teor. Fiz* 45 (1963) 2015 ; *Sov. Phys. JETP* 18 (1964) 1383.
- [16]- R. McCarroll et D. Crothers, *Proc. Phys. Soc.* 86 (1965) 753.
- [17]- R. McCarroll et A. Salin, *Ann. Phys. (Paris)* 1 (1966) 283.
- [18]- R. J. Glauber *Lecture in Theoretical Physics* 1 (1958) 315.
- [19]- V. Franco et B.K. Thomas, *Phys. Rev. A* 4 (1971) 945.
- [20]- J.T. Park, J.E. Aldag et J.M. George et J.L. Peacher, *Phys. Rev. A* 14 (1976) 608.
- [21]- B. H. Bransden et J.P. Coleman, *J. Phys. B* 5 (1972) 537.
- [22]- J. F. Reading, A. L. Ford and E. G. Fitchard, *Phys. Rev. Lett.* 36 5B (1976).
- [23]- E. Fitchard, A.L. Ford et J.F. Reading, *Phys. Rev. A* 16 (1977) 1325.

- [24]- G. L. Swaford, J. F. Reading, A. L. Ford and E. Fitchard, Phys. Rev. A 16 (1977) 1329.
- [25]- I. M. Cheshire et E.C. Sullivan, Phys. Rev. 4 (1967) 160.
- [26]- J. F. Reading and A. L. Ford, Phys. Rev. A 20 (1979) 130.
- [27]- B. H. Bransden, D. P. Dewangan et C.J. Noble, J. Phys. B 12 (1979) 3563.
- [28]- R. R. Lucchese et V. McKoy, J. Phys. B 12 (1979) L421.
- [29]- R. R. Lucchese, D.R. Watson et V. McKoy, Phys. Rev. A 22 (1980) 421.
- [30]- B. Brendlé, Thèse de troisième cycle, Université de bordeaux-I, 1984.
- [31]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 2007.
- [32]- K. Wohrer, A. Chetioui, J.P. Rozet, A. Jolly. F. Fernandez, C. Stephan. B. Brendlé et R. Gayet, J. Phys. B 19 (1986) 1997.
- [33]- M. Bouamoud, " Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif" Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I (1988), Texte en français.
- [34]- R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 (1989) 515-522.
- [35]- B. Lasri, "**Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation**" Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou Bakr Belkaïd de Tlemcen, le 28 Juin (1998).
- [36]- B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet "**Application du principe variationnel de Schwinger à l'excitation directe du $\text{Fe}^{24+}(1s^2)$ à 400 Mev par impact de différents atomes : contribution des états du continuum**", Physical and Chemical News Journal. Volume 20, November 2004, p. 12 -17.
- [37]- B. Lasri , A. Bouserhane, M. Bouamoud and R. Gayet, "**Nouvelle modélisation du phénomène de canalisation de l'ion $\text{Xe}^{52+}(1s^2)$ dans un monocristal de Silicium**", Physical and Chemical News Journal, Volume 28, Mars 2006, p. 97-102.
- [38]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, "**Variational approach to excitation of atomic hydrogen atoms by impacts of protons at intermediate velocities**", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Volume 251, issue 1, July 2006, p. 62-77.

Chapitre II

L'essentiel du principe variationnel de Schwinger pour la théorie des collisions atomiques.

II-1. Introduction:

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

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

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

Cette approche appliquée aux collisions de type e^- -molécule, ion-atome et à la photoionisation moléculaire n'a cessé de se développer, de se raffiner et de s'étendre à d'autres domaines le long de ces dernières années, grâce aux progrès informatiques et aux divers travaux accomplis par plusieurs équipes de recherche dans le monde [9-12][18-21].

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

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

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

Le présent chapitre discute de la mise en oeuvre du principe variationnel de Schwinger basé sur des équations intégrales de Lippman-Schwinger et fondé sur l'obtention d'une forme stationnaire de l'amplitude de transition en vue d'une application aux collisions de type ion-atome [18-21].

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

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

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

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

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

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

E est l'énergie totale du système.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Il est important de rappeler que ce principe variationnel, telle la forme bilinéaire donnée par l'équation (II.5), introduit automatiquement des conditions aux limites correctes (c'est à dire n'exige pas des fonctions d'onde d'essai qui satisfont les conditions aux limites comme dans le cas de méthode Hulhén-Kohn [1]) et utilise seulement des fonctions d'onde d'essai dans la région où l'interaction apparaît.

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

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

et

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

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

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

on sous une autre formulation:

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

tel que:

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

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

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

On peut souligner que dans le cas où le rapport $\left| \frac{\bar{T}^{BII}}{T^{BI}} \right|$ est petit devant 1, et en utilisant le

développement de l'expression (II.12) ($(1-\varepsilon)^{-1} \cong (1+\varepsilon)$ $\varepsilon < 1$), on aura :

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

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

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

Une évaluation de l'amplitude de transition sous sa forme fractionnaire donnée par l'équation (II.8) et l'utilisation de l'approximation (II.10a,b) avec des choix plus complexes a été effectuée pour 3S_1 dans une collision nucléon-nucléon décrite par un potentiel de Yukawa [23], ou par un potentiel de Gauss [22]. Le résultat variationnel s'avère en effet être plus précis que la seconde approximation de Born.

En fait, la première approximation de Born donne des sections efficaces moins précises que l'estimation variationnelle basée sur un choix simple (II.10a,b). Un tel exemple illustre les difficultés qui peuvent apparaître quand un mauvais choix des fonctions d'essai est employé dans le principe variationnel.

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

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

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

et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Maintenant au moyen de l'équation $\delta T_{\beta\alpha} = 0$ et en remplaçant les vecteurs $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_\beta^-|$ par les développements cités précédemment par les équations (II.16a,b), nous obtenons pour les coefficients \tilde{a}_i et \tilde{b}_j , composantes des états de diffusion approchés, les deux équations couplées suivantes :

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

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

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

et par V_α et V_β les vecteurs colonnes dont les éléments sont respectivement:

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

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

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

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

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

ou encore en utilisant les propriétés algébriques des matrices :

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

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

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

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

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

ou sous forme matricielle :
$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\left[\begin{pmatrix} V_\beta^* \end{pmatrix} \cdot \tilde{a} \right] \left[\tilde{b}^* \cdot V_\alpha \right]}{\tilde{b}^* \cdot D \cdot \tilde{a}} \quad (\text{II.25})$$

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

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

ou encore sous une forme plus explicite :

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

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

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

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

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

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

Références

- [1]- L. Hulthén, K. Fysiogr. Sällsk. Lund. Förh. 14, 257 (1944).
- [2]- W. Kohn, Phys. Rev. 74, 1763 (1948).
- [3]- S.I. Rubinow, Phys. Rev. 96, 218 (1954).
- [4]- T.N. Rescigno, C.W. McCurdy, A.E. Orel, and B.H. Lengsfeld III, "The Complex Kohn Variational Method," chapter 1 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco, Plenum Press, New York, 1995
- [5]- J.L. Jackson, Phys. Rev. 83, 301 (1951).
- [6]- R.K. Nesbet, Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory, Plenum Press, New York (1980).
- [7]- B.I. Schneider, "An R-Matrix Approach to Electron Molecule Collisions" chapter 8 in Computational Methods for Electron-Molecule Collisions Edited by W.M. Huo and F.A. Gianturco, Plenum Press, New York, 1995
- [8]- J. Schwinger, Phys. Rev. 56,750 (1947).
- [9]- R.R. Lucchese, K. Takatsuka, and V. McKoy, Phys. Rep. 131, 147 (1986).
- [10]- D.K. Watson, Adv. At. Mol. Phys. 25, 221 (1988).
- [11]- M.A.P. Lima, T.L. Gibson, L.M. Bescansin, V. McKoy, and W.M. Huo, "**Studies of Elastic and Electronically Inelastic Electron-Molecule Collisions**," in Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions, ed. L.C. Pitchford, B.V. McKoy, A. Chutjian, and S. Trajmar, Springer-Verlag, New York (1987), pp 239-264.
- [12]- C. Winstead and V. McKoy, "Studies of Electron-Molecule Collisions on Highly Parallel Computers," in Modern Electronic Structure Theory Vol. 2, ed. D. Yarkony, World Scientific, Singapore (1994).
- [13]- D.K. Watson and V. McKoy, Phys. Rev. A 20, 1474 (1979).
- [14]- R.R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, Phys. Rev. A 25, 2572 (1982).
- [15]- G. Bandarage and R.R. Lucchese, Phys. Rev. A 47, 1989 (1993); M.-T. Lee, K. Wang, and V. McKoy, J. Chem. Phys. 97, 3108 (1992).
- [16]- M.-T. Lee, M.M. Fujimoto, S.E. Michelin, L.E. Machado, and L.M. Bescansin, J.Phys. B. 25, L505 (1992).

- [17]- M.-T. Lee, S.E. Michelin, L.M. Brescansin, G.D. Meneses, and L.E. Machado, *J. Phys. B.* 28, L477 (1993).
- [18]- M. Bouamoud, « **Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif** » Thèse de doctorat d'état es-sciences, Université de Bordeaux-I (1988), Texte en français.
- [19]- R. Gayet and M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 42 515-522 (1989).
- [20]- B. Lasri, **²Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation²**, Thèse de Magistère, Institut de physique Université Abou bakr Belkaïd de Tlemcen 28 Juin (1998).
- [21]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*. Volume 20, November 2004, p. 12 -17.
- [22]- B. Lasri , M. Bouamoud and R. Gayet, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 251,pp66–72 (2006).
- [22]- C. J. Joachain “**Quantum Collision Theory**” (New York: North-Holland) pp 225-42 (1979).
- [23]- E. Guerjuoy, David S. Saxon, *Phy. Rev.* 94, 2 (1954)

Chapitre III

Traitement variationnel de Schwinger pour l'excitation atomique des ions.

III-1. Introduction:

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

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

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

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

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

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

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

La méthode iconale est une approche semi-classique qui consiste à supposer que les noyaux se déplacent d'une façon classique tandis que le mouvement des électrons est traité d'une manière quantique. Pour cela, considérons une collision entre un projectile de masse M_P et de charge Z_P et une cible de masse M_T et de charge Z_T .

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

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

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

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

où :

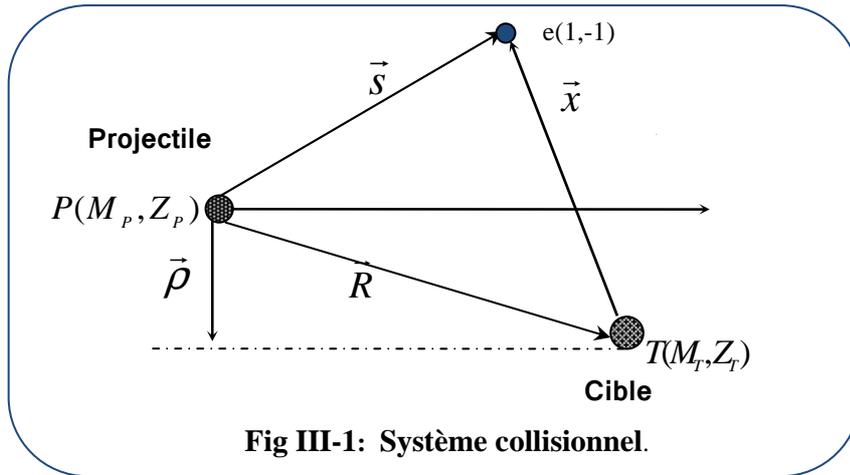
\vec{R} est la distance internucléaire.

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

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

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

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



Avec

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

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

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

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

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

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

et

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

où μ représente la masse réduite donnée par :

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

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

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

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

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

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

En 1972, R. K. Janev et A. Salin [8] puis en 1979, D. Z. Belkic, R. Gayet et A. Salin [9] ont montré que les sections efficaces totales sont indépendantes du potentiel inter-agrégat V_{int} donné par l'équation (III.6). Dans le calcul de l'amplitude de transition, l'influence de ce potentiel se réduit à un facteur de phase dépendant du paramètre d'impact $\bar{\rho}$ donné par $\frac{2iZ_P(Z_T-1)}{\rho v}$. Par contre sa contribution à la section efficace différentielle doit être réintroduite.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

où ε_α et ε_β désignent respectivement les énergies propres des états φ_α et φ_β . \vec{x} est la distance séparant le noyau et l'électron, c'est à dire l'ensemble des coordonnées électroniques.

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

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

avec les conditions initiales:

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

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

En résolvant l'équation (III.12), on peut montrer directement et d'une manière générale que l'on a :

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

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

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

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

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

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

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

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

Soit :

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

ou

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

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

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

et

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

finalemt, et si on adopte la notation $(|)$ qui indique que l'intégration est effectuée sur les coordonnées électroniques ainsi que la coordonnée Z de \vec{R} c.a.d $(k | \Theta | k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz [k | \Theta | k']$ où Θ dénote un opérateur, et pour des cas où $\alpha \neq \beta$, les expressions (III.20a,-c) et (III.22) peuvent être écrites sous une forme condensée :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Remarque :

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

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

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

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

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

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

III-3.1. Amplitude de transition iconale:

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

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

Au premier ordre en $\frac{1}{\mu}$ où μ représente la masse réduite du système en collision, la fonction d'onde de diffusion s'écrit [10][11] :

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

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

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

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

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

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

$$\vec{q} = q_v \cdot \vec{v} + \vec{\eta} \quad (\text{III.31b})$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Remarquons que dans cette dernière expression, la contribution du potentiel inter-agrégat (III.6) qui se traduit par un facteur de phase $\rho^{2i \frac{Z_P(Z_T-1)}{v}}$ dépendant du paramètre d'impact a été réintroduite.

III-3.2. Sections efficaces iconales :

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

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

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

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

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

et par conséquent, la section efficace totale sera :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

On avait souligné précédemment que l'amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est variationnelle, et qu'une forme approchée noté $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est complètement déterminée par l'expression (III.26) quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-espace vectoriel de dimension N.

Références

- [1]-R. Gayet et J. Hanssen J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 825-37 (1992).
- [2]- R. Gayet and J. Hanssen Nucl. Instrum, Metlt. Phys. Res. B 86 52-61 (1994).
- [3]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 2007.
- [4]- M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I, (1988),
Texte en francais.
- [5]- R. Gayet et M. Bouamoud Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42
(1989) 515-522.
- [6]- B. Lasri, Thèse de Magistère, Institut de Physique, Université de Tlemcen, Juin (1998),
Texte en francais.
- [7]- B. Lasri , M. Bouamoud et R. Gayet, Physical and Chemical News Journal. Volume 20,
Novembre 2004, p. 12 -17.
- [8]- R. k. Janev et A. Salin, Ann. Phys. N.Y 73 (1972) 136.
- [9]- DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, Phys. Report 56 (1979) 279.
- [10]- R. McCaroll et A. Salin, C.R. Acad. Sc. Paris 263 (1966) 329.
- [11]- R. McCaroll et A. Salin, J. Phys. B 1 (1968) 163

Chapitre IV

Evaluation des éléments matriciels de type Born pour l'amplitude de transition.

ans le but de déterminer l'amplitude de transition variationnelle $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ il est indispensable d'évaluer deux catégories d'éléments de matrice :

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

Les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont solutions de l'équation de Schrödinger avec l'hamiltonien H_T de la cible.

Il est utile de rappeler que la notation $(\ | \ |)$ indique que l'intégration est effectuée sur la composante z de \vec{R} ainsi que sur les coordonnées électroniques \vec{x} de la cible.

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

Au début, il faut noter que dans le modèle introduit précédemment dans le chapitre III, les éléments matriciels de type $(i|V|j)$ dits de Born-I sont exprimés par :

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

où les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont donnés par les équations (III.10a,b), ou sous une forme plus générale :

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

ce qui nous permet d'écrire que:

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

Si on écrit :

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

Les éléments de type Born-I seront donnés par:

$$(i|V|j) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i\frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v}z} W_{ij}(\vec{\rho}, z) \quad (\text{IV.5})$$

Où ε_i et ε_j désignent respectivement les énergies associées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$. D'autre part, et dans l'appendice II, on démontre que $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ peut s'écrire comme suit:

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

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

Dans ce qui suit, et dans le but de simplifier l'écriture, les dépendances en $\vec{\rho}$ (en module et en angle) seront implicites.

Rappelons au début les différentes propriétés de symétries des éléments W_{ij} établies en appendice IV qui nous seront très utiles dans l'élaboration des formes simplifiées des éléments de matrice à traiter numériquement, et qui vont réduire le temps de calcul ainsi que la place mémoire pour le stockage de résultats .

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

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

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

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

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

Il est important de noter également que l'utilisation de ces propriétés de symétrie permet de réduire le nombre d'éléments de matrice à calculer d'une façon numérique, et de restreindre l'intervalle d'intégration sur z de $]-\infty, +\infty[$ à des valeurs de $z > 0$ seulement.

Si on écrit :

$$d_{ij} = \frac{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_j}{v} \quad (\text{IV.8})$$

il en résulte :

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

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

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

En se référant aux propriétés de symétrie des éléments $W_{ij}(z)$ (IV.7a-d), on déduit les propriétés suivantes pour la fonction G_{ij} :

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

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

où G_{ij}^* est la fonction conjuguée de G_{ij} .

Par conséquent, l'expression (IV.9) devient:

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

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

Du fait qu'on peut définir une forme asymptotique plus simple de $W_{ij}(\rho, z)$ notée $W_{ij}^{as}(\rho, z)$ (appendice III) pour un paramètre d'impact ρ donné et pour des valeurs de z suffisamment grandes (z étant positif), le calcul de $G_{ij}(0, +\infty)$ se simplifie. Nous avons divisé l'intervalle d'intégration sur z en deux : un intervalle $[0, \tilde{z}_{ij}[$ aussi petit que possible où l'intégration sur z est effectuée d'une façon numérique et un autre $[\tilde{z}_{ij}, +\infty[$ dans lequel l'intégration est faite analytiquement.

Pour une transition donnée $j \rightarrow i$, on peut définir une région asymptotique par la valeur $\tilde{z}_{ij} \geq 0$ telle que:

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

et par la suite nous aurons :

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

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

et

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

La fonction $G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij})$ est calculée numériquement, par contre la fonction $G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij})$ est calculée d'une façon analytique (appendice V).

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

La difficulté majeure du principe variationnel de Schwinger réside dans l'évaluation des éléments de matrice de second ordre notés $(i|V G_T^+ V|j)$ et nommés éléments de type Born-II.

Afin de décrire convenablement les processus physiques nous avons accentué tous nos efforts dans une représentation adéquate de G_T^+ ; condition nécessaire pour une bonne évaluation des éléments $(i|V G_T^+ V|j)$.

Le sous-espace des états engendré par les bases $|i\rangle$ et $|j\rangle$ doit être minutieusement choisi pour décrire convenablement les états de diffusion, par contre une mauvaise représentation de l'opérateur G_T^+ entraîne une erreur dans le calcul de ces éléments qui modifie considérablement l'amplitude de transition et par conséquent les prédictions physiques.

Conscient de ce problème, nous nous sommes penchés sur l'élaboration d'une approche capable de décrire d'une manière convenable les différents phénomènes physiques. Cependant, nous avons investi tous nos efforts, tant analytiques que numériques afin d'aboutir à une description adéquate de G_T^+ et par la suite une meilleure évaluation des éléments matriciels de Born-II.

Les éléments de matrice de Born-II sont calculés grâce à un développement du propagateur de Green G_T^+ sur une série de base complète de la cible $|v\rangle$, états propres de H_T . On peut montrer que l'opérateur iconal G_T^+ peut s'écrire sous la forme:

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

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

Maintenant, en substituant la forme (IV.18) de l'opérateur G_T^+ dans l'élément de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$ et en introduisant les relations de fermeture respectivement pour les spectres discrets et du continuum:

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

nous pouvons alors écrire:

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left[\sum + \int \right]_{\nu} (i|V|\nu) \left(-\frac{i}{\nu} \right) \theta(z-z') (|\nu\rangle V|j) \quad (\text{IV.20})$$

Le symbole $\left[\sum + \int \right]$ signifie la sommation sur tous les états discrets ainsi que ceux du continuum de la cible [1-5].

Comme les vecteurs $|j\rangle$, les vecteurs $|\nu\rangle$ ont la forme :

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

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

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

on peut exprimer le terme $(i|V G_T^+ V|j)$ sous deux formes équivalentes:

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left(-\frac{i}{\nu} \right) \left[\sum + \int \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}(z') \quad (\text{IV.23})$$

ou

$$(i|V G_T^+ V|j) = \left(-\frac{i}{\nu} \right) \left[\sum + \int \right] \int_{-\infty}^{+\infty} dz' e^{id_{ij}z'} W_{vj}(z') \int_{z'}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \quad (\text{IV.24})$$

A partir de l'expression (IV.14), et en définissant les régions asymptotiques par les valeurs \tilde{z}_{iv} et \tilde{z}_{vj} , deux cas peuvent être considérés :

- $\tilde{z}_{iv} > \tilde{z}_{vj}$: il est plus facile d'utiliser la relation (III.23) dans le calcul des éléments de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$. En effet l'intégration sur z est analytique au delà de \tilde{z}_{vj} , donc dès que $z > \tilde{z}_{vj}$ l'intégration double se réduit à une intégrale simple.

- $\tilde{z}_{iv} < \tilde{z}_{vj}$: dans ce cas il est avantageux d'utiliser la forme (IV.24). Il faut noter que l'utilisation des relations de symétrie de W_{ij} (IV.7a-d) et celles des éléments $(i|V G_T^+ V|j)$ déterminés dans l'appendice IV, nous permet de revenir vers la forme (IV.23), et

par la suite de mettre un programme unique de traitement numérique dans le but de calculer les éléments de matrice.

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

$$(i|V G_T^+ V |j) = \left(-\frac{i}{\nu}\right) \left[\sum + \int\right]_{\nu} H_{ij}^{\nu} \quad (\text{IV.25})$$

avec:

$$H_{ij}^{\nu} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i\frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{\nu} z} W_{iv}(\rho, z) \int_{-\infty}^z dz' e^{i\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\nu} z'} W_{vj}(\rho, z') \quad (\text{IV.26a})$$

ou sous une autre écriture:

$$H_{ij}^{\nu} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' e^{i\frac{\epsilon_j - \epsilon_i}{\nu} z'} W_{vj}(\rho, z') \int_{z'}^{+\infty} dz e^{i\frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{\nu} z} W_{iv}(\rho, z) \quad (\text{IV.26b})$$

Maintenant, en utilisant les propriétés de symétrie de W_{ij} et ainsi que celle de la fonction G_{ij} définie par l'expression (IV.10) nous pouvons écrire (voir appendice IV) :

$$H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) = G_{vj}^*(0, +\infty) \left\{ (-1)^{l_v + l_j + m_v - m_j} G_{iv}(0, +\infty) + (-1)^{l_i + l_j + m_i - m_j} G_{iv}^*(0, +\infty) \right\} \\ + H_{ij}^{\nu}(0, +\infty) + (-1)^{l_i + l_j + m_i - m_j + l} H_{ij}^{\nu*}(0, +\infty) \quad (\text{IV.27})$$

où

$$H_{ij}^{\nu}(0, +\infty) = H_{ij}^{\nu}(0, \tilde{z}_{ij}) + H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv}) + H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{iv}, +\infty) \quad (\text{IV.28})$$

et la fonction H_{ij}^{ν} définie comme:

$$H_{ij}^{\nu}(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z) \quad (\text{IV.29})$$

Par conséquent les intégrales de l'expression (IV.27) auront les trois caractéristiques suivantes:

- ❶ $H_{ij}^{\nu}(0, \tilde{z}_{vj})$ est le résultat d'une intégration double numérique.
- ❷ $H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv})$ est le résultat d'une intégration simple numérique.
- ❸ $H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{iv}, +\infty)$ se réduit à une expression analytique dite $H_{ij}^{\nu as}(\tilde{z}_{iv})$ définie comme suit :

$$H_{ij}^{\nu as}(\tilde{z}_{iv}) = \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}^{as}(z) G_{vj}^{as}(z) \quad (\text{III.30})$$

où $G_{vj}^{as}(z)$ est donnée par l'expression (IV.17).

Il est important de noter que pour des valeurs de ν , nombre quantique principal des états $|\nu\rangle$, très grandes, les erreurs d'arrondis entraînent une instabilité de calcul. Ainsi pour

prendre en compte l'ensemble des états du spectre discret, nous avons cherché une méthode de développement en $\frac{1}{v^3}$ comme celle introduite par Bethe et Salpeter [6] qui nous permet de limiter les calculs numériques à des états de v pas trop élevés et qui garantit la stabilité des résultats pour chaque couple d'états $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

Notre travail n'est pas restreint aux états discrets, nous avons fait une extension à ceux du continuum. Il fallait donc déterminer avec précision la région du continuum située au dessus du seuil d'ionisation, qui contribue effectivement. Ceci consiste en la détermination de l'énergie ε_v , appelée énergie de coupure, l'énergie après laquelle la contribution des états du continuum devient totalement négligeable (voir chapitre V).

D'après R. Schakeshaft [7], B. Lasri 1998 [3], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet [4], cette contribution du continuum est faible sans être toutefois négligeable.

En se basant sur le comportement de la fonction radiale R_{vl} pour des valeurs de v grandes avec l fixe et $v \gg l$ on montre que H_{ij}^v peut être approché par l'expression suivante:

$$H_{ij}^v = \frac{I}{v^3} \text{Exp} \left\{ -\frac{l(l+1)(2l+1)}{6v^2} \right\} \left[A + \frac{B}{v^2} \right] \quad (\text{III.31})$$

où A et B désignent des constantes dépendant de $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

Pour des valeurs de v assez grandes, le terme exponentiel est égal à 1 dans l'expression (III.31), et par la suite la somme sur v devient:

$$\sum_{v=v_0}^{+\infty} H_{ij}^v = H_{ij}^{v_0} + A \sum_{k=l}^{+\infty} \frac{I}{(v_0+k)^3} + B \sum_{k=l}^{+\infty} \frac{I}{(v_0+k)^5} \quad (\text{III.32})$$

où les constante A et B sont déterminées en détail dans l'appendice VI.

v_0 : désigne la valeur de v à partir de laquelle les éléments H_{ij}^v suivent la loi en v^{-3} de l'expression (IV.30).

En se référant aux fonction dzéta de Reimann $\zeta(3)$ et $\zeta(5)$, les sommations sur k peuvent être écrites :

$$\sum_{k=l}^{+\infty} \frac{I}{(v_0+k)^3} = \zeta(3) - \sum_{k=l}^{v_0} \frac{I}{k^3} \quad (\text{III.33a})$$

$$\sum_{k=l}^{+\infty} \frac{I}{(v_0+k)^5} = \zeta(5) - \sum_{k=l}^{v_0} \frac{I}{k^5} \quad (\text{III.33b})$$

Références

- [1]- M. Bouamoud, "Etude variationnelle de l'excitation atomique par des ions à des vitesses d'impact excluant un traitement perturbatif" Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I (1988).
- [2]- R. Gayet and M. Bouamoud Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 (1989) 515-522.
- [3]- B. Lasri, "Excitation variationnelle des atomes aux énergies intermédiaires, contribution des états du continuum dans les sections efficaces totales d'excitation", Thèse de Magistère, Institut de Physique, Université de Tlemcen, Juin (1998).
- [4]- B. Lasri , M. Bouamoud et R. Gayet, Physical and Chemical News Journal. Volume 20, November 2004, p. 12 -17.
- [5]- B. Lasri , A. Bouserhane, M. Bouamoud and R. Gayet, " Nouvelle modélisation du phénomène de canalisation de l'ion $Xe^{52+}(1s^2)$ dans un monocristal de Silicium ", Physical and Chemical News Journal, Volume 28, Mars 2006, p. 97 -102.
- [6]- H. A. Bethe et E. E. Salpeter, " Quantum Mechanics of one and two-electron atoms " , Springer-Verlag, Berlin, 1957.
- [7]- R. Schakeshaft, Phys Rev A 18 (1978) 1930.

Chapitre V

Sections efficaces de l'émission Balmer- α dans une collision Proton-atome d'hydrogène.

V-1. Introduction :

L'étude de l'excitation de l'atome hydrogène par impact d'ions demeure toujours l'un des sujets les plus intéressants, car permettant de comprendre un large nombre de processus dans la physique atomique, l'astrophysique ainsi que la physique des plasmas notamment pour l'utilisation de rayons neutres pour chauffer les plasmas dans des réacteurs de fusion (Janev (1989) [1]. Du fait que les processus d'excitation et d'ionisation sont des mécanismes importants de perte d'énergie aux hautes et moyennes énergies, il est utile et nécessaire de déterminer les sections efficaces pour ces réactions.

A cause de la simplicité relative des processus d'excitation et de transfert de charge permettant la population des états excités de l'atome d'hydrogène entrant en collision avec des protons, le système P \rightarrow H était souvent utilisé pour tester les différents modèles et approximations dans la théorie des collisions atomiques.

Les émissions d'hydrogène (Hydrogen-line) jouent un rôle très important dans l'interprétation et les analyses astrophysiques, en particulier Balmer- α (H_α à 656 nm) et Balmer- β (H_β à 486 nm) servent comme des détecteurs de proton-auroral. L'émission Balmer- α d'une collision non-radiative autour des supernovas est importante à comprendre, puisqu' à ces vitesses d'impact et dans la majorité des approches théoriques l'excitation par impact de protons aux niveaux $n=2$ et $n=3$ domine l'excitation électronique (Laming (1990) [2], Kazantsev et al (1994) [3], Smith et al (1991) [4], Laming et al 1996 [5]).

Emission Balmer- α : $H^*(n=3) \rightarrow H^*(n=2) + h\nu$

Récemment, le processus de la collision entre l'atome d'hydrogène et des protons a été largement étudié expérimentalement pour une large gamme d'énergies de collision (Donnelly et al 1991 [6], Hughes et al (1992) [7], Detleffsen et al (1994) [8], Gilbody (1995) [9], Higin et al (1996) [10], Werner et Schatner (1996) [11]), depuis, de multiples travaux théoriques intensifs employant divers modèles (Slim (1993) [12], Ramillon et McCarroll (1993) [13], Ford et al 1993 [14], Slim et Ermolaev (1994)[15], McLauhlin et al (1995) [16], Kuang et Lin (1996) [17], Brendan McLauhlin et al (1997) [18], F. Martin (1999) [19]) ont été réalisés afin de mieux comprendre les processus de capture, d'excitation et d'ionisation.

En 1991 Donnelly et al [7] suivi de Detleffsen et al en (1994) [9] ont publié des mesures expérimentales de l'émission Balmer- α dans le cas d'une collision rapide de l'atome d'hydrogène avec des protons. Les calculs réalisés par Slim et Ermolaev (1994)[15] et Ford et al (1993) [16] basés sur la méthode Close Coupling semblent ne pas être capables de représenter les mesures expérimentales obtenues par le groupe de Belfast (Donnelly et al (1991) [7]). Par contre, les incertitudes expérimentales récentes, montrent que les valeurs moyennes des sections efficaces sont en parfaite harmonie avec les prédictions théoriques.

Plusieurs anomalies existent toujours avec les valeurs expérimentales disponibles. D'abord, les données expérimentales du groupe de Belfast (Donnelly et al 1991 [7]) sont soumises à des incertitudes en valeur absolue en raison de la procédure due à la normalisation qui s'élève à 21 %. Deuxièmement, on juge utile de souligner que les mesures expérimentales effectuées par le groupe de Giessen (Detleffsen et al [9]) sont effectuées seulement sur l'excitation de l'état 3p mais les sections efficaces d'émission ont été obtenues via la formule:

$$\sigma(H_\alpha) = \sigma(n=3) - 0.88 * \sigma(3p) \quad (\text{VII.1})$$

où $\sigma(n=3)$ est prise directement à partir des résultats expérimentaux de Park et al (1976) [21] pour l'atome d'hydrogène quoique les barres d'erreurs sont tout à fait larges et assez importantes dues à l'utilisation de la relation (VII.1) (deux incertitudes à inclure).

Il faut rappeler que les données expérimentales de Park et al (1976) [20] ont été normalisées aux résultats de l'approximation de Born à une énergie de proton de 200 keV pour une transition $1s \rightarrow 2p$. Ensuite, en 1993, ces mêmes données expérimentales ont été renormalisées en les multipliant par un facteur de 0.951 (Ford et al (1993)) [16].

Afin de procéder à une comparaison minutieuse et de tester l'efficacité de notre nouvelle approche nommée principe variationnel de Schwinger (plus de détail sur cette

approche voir le chapitre II-IV), notre objectif est d'évaluer les sections efficaces de l'émission de la raie Balmer- α lors d'un processus d'excitation pour une collision de type proton-atome d'hydrogène. Nos résultats obtenus ont été comparés avec d'autres calculs théoriques comme ceux de l'approximation VPS (Vainshtein-Presnyakov-Sobelman) (1964) [21], l'approximation (CDW-EIS) continuum-distorted-wave eikonal initial state présentée dans la littérature par Crothers et McCann (1983, 1984) [22][23], ceux accomplis récemment par Brendan Mc Laughlin et al (1997) [19] basés sur une approche Close Coupling à multi-états utilisant une série de base à trois centres (TCE : triple centre expansion), ceux d'Ermolaev à deux centres (TCAO : Two Centred Atomic Orbital expansion) [24] et de Ford et al (SCE : Single Centred Expansion) [15]. Ainsi qu'avec les données expérimentales disponibles de Donnelly et al (1991) [7] et de Detlefsen et al (1994) [9].

V-2. Diverses Procédures théoriques:

V-2.1. Les Méthodes perturbatives:

La théorie de perturbation est l'une des approches les plus employées pour décrire la dynamique d'un processus de collision de particules; elle est justifiée dans le cas où la vitesse des ions projectiles incidents est beaucoup plus grande que la vitesse orbitale des électrons de cible.

Pour l'excitation à haute vitesse d'impact, il est souhaitable d'utiliser le traitement perturbatif connu sous le nom d'approximation de Born au premier ordre (Born-I) (Bates et Griffing 1953 [25], Bates 1961 [26]), où on se réfère à des ondes planes pour décrire les états initial et final, et ainsi il n'y a aucune distorsion. De même que l'approximation de Born-I, les théories de premier ordre ne tiennent pas compte de la distorsion due au nuage électronique de la cible où le couplage via les états intermédiaires du continuum lors de la collision. Cependant, plusieurs méthodes de second ordre ont été mises au point afin de prendre en compte ces effets physiques.

L'approximation Vainshtein-Presnyakov-Sobelman (VPS) est l'une des premières tentatives utilisées pour traiter la distorsion de la fonction d'onde sortante afin d'aboutir à une description plus réaliste de la collision. Cette approximation a été développée à l'origine par Vainshtein et al (1964) [22], puis fut utilisée par Crothers et Mc Carroll en 1965 [27] pour une collision de type Proton-atome d'hydrogène.

L'échec de cette approximation pour prédire les efficacités différentielles, en particulier pour les collisions aux grands angles, est bien établi.

Le processus d'excitation aux énergies intermédiaires, où le maximum de section efficace est caractérisé par des effets collisionnels multiples peut être simulé d'une manière plus réaliste via un formalisme plus étendu d'onde distordue. Dans ce même contexte, les procédures telles que l'approximation iconal et l'approximation CDW (continuum-distorted wave) ont remarquablement reproduit les résultats expérimentaux. Dans le cadre de l'approximation continuum-distorted-wave eikonal initial states (CDW-EIS), un état initial à phase distordue (EIS) est utilisée, tandis que pour l'état final (capture, excitation ou ionisation) une fonction d'onde distordue du continuum (continuum-distorted-wave function) (CDW) est employée. (Crothers et Mccann (1983), (1984) [23][24], McCartney et Crothers (1992 a,b) [28][29])

V-2.2. Approches semi-classiques :

V-2.2.1. Les Méthodes Close-Coupling :

Les méthodes Close-Coupling ont été largement utilisées pour calculer les sections efficaces totales d'excitation, d'ionisation et de transfert de charge dans le cas des collisions de type ion-atome. C'est une alternative puissante aux traitements perturbatifs, où la fonction d'onde de diffusion est développée sur des bases de fonctions d'ondes représentant les différentes voies des réactions. Il en résulte un système d'équations différentielles couplées sur les coefficients de développement.

La méthode Close-Coupling commence à prendre effet dès qu'il s'agit de collisions lentes où un traitement perturbatif devient inadéquat, et la configuration initiale du système en collision est perdue au cours de la collision. C'est une approche semi-classique, dans laquelle le projectile est supposé suivre une trajectoire en ligne droite où le mouvement est traité d'une manière classique, par contre le mouvement électronique est traité de façon quantique.

V-2.2.1.1. Approches à centre unique (SCE):

Comme il a été signalé au chapitre précédent les approches close coupling à centre unique (Single Centre Expansion) seront référées par SCE. Cette méthode a été réintroduite par Reading et al en 1979 [30] pour calculer l'ionisation, comme celle du proton avec le cuivre, $Z_p \ll Z_T$. La fonction d'onde d'essai utilisée pour approximer la fonction d'onde d'un

électron est développée sur une série de pseudo-états centrés sur la cible, avec l'hamiltonien H_T de la cible.

Les calculs SCE pour le cas de P→H furent réalisés par Fitchard et al (1977) [31] et Bransden et al (1979) [32] en utilisant seulement les orbitales s, p et d. Récemment, en 1990 Reinhold et al [33] a utilisé une base constituée de 74 états incluant tous les états liés de l'atome d'hydrogène. Les résultats obtenus par Ford et al en 1993 par le biais de cette méthode avec une fonction centrée sur le projectile (1s) sont généralement satisfaisants.

V-2.2.1.2. Approches à deux centres (TCAO):

La méthode Close Coupling (voies couplées) à deux centres (TCAO, Two Centred Atomic Orbital expansion) est une extension de divers travaux effectués par Ermolaev en 1984 [34] et 1990 [35] où les deux particules A et B (P et H dans notre cas) sont supposées avoir une trajectoire rectiligne et la fonction d'onde électronique est développée en utilisant une base d'orbitales atomiques à deux centres (TCAO) $[u_j^A, u_{j'}^B]$, $j=1, \dots, N_A$; $j'=1, \dots, N_B$.

Suite à de multiples discussions, en 1991 Ermolaev [24] a utilisé une base systématique avec un état 1s sur le projectile A, ($N_A=1$), et une large série, ($N_B=50$) états avec $0 \leq l \leq 3$ centrées sur le projectile B. 10 états « s », 16 états « p », 18 états « d » et 10 états « f » sont inclus dans la série.

V-2.2.1.3. Approches à trois centres (TCE):

C'est une approche semi-quantique, où la notion du centre complémentaire est utilisée à un modèle d'atome unique et aux collisions introduisant des aspects moléculaires, incluant le couplage avec les effets du continuum.

La fonction d'onde $\psi(r, t)$, dépendante du temps, électronique est développée sur une base d'orbitales atomiques à trois centres (A, B, C) (Antal (1973) [37], Antal et al (1975) [38], Anderson et al (1974) (1981) [39][40], Winter et Lin (1984a,b) [41][42]. Basé sur le formalisme de la fonction d'onde atomique de Bates et al (1958) [25], l'origine des coordonnées est arbitraire entre A et B et est prise au point de selle C du potentiel nucléaire (Winter et al (1984) [42], pour une collision systématique comme le cas présent, c'est aussi le centre de charge nucléaire.

Dans un récent travail, en 1997, Brenden Mc Laughlin et al [18], des fonctions d'onde hydrogénoïdes ont été employées dans le développement de la fonction d'onde à trois centres

et la charge nucléaire effective du troisième centre est choisie pour être celle de l'atome uni; les calculs de sections efficaces ont été réalisés en utilisant une série de base à trois centres suivant :

$$\text{Centre A} \quad nl = 1s, 2s, 2p_{0,1}, 3s, 3p_{0,1}, 3d_{0,1,2}$$

$$\text{Centre B} \quad nl = 1s, 2s, 2p_{0,1}, 3s, 3p_{0,1}, 3d_{0,1,2}$$

$$\text{Centre C} \quad nl = 1s, 2s, 2p_{0,1}, 3s, 3p_{0,1}, 3d_{0,1,2}, 4s, 4p_{0,1}, 4d_{0,1,2}, 4f_{0,1,2,3}$$

Soit à noter qu'en raison de la symétrie des états p, d et f de l'atome d'hydrogène cela a donné un total de 40 états qui ont été inclus dans le développement de la fonction d'onde totale.

V-2.3. Notre traitement variationnel:

A cause des insuffisances des méthodes citées précédemment, soit parce qu'elles sont basées sur des théorie perturbatives, soit parce que les calculs deviennent difficiles en incluant un nombre important d'états, dans notre étude nous nous sommes intéressés à une nouvelle procédure basée sur une théorie variationnelle nommée principe variationnel de Schwinger que nous avons déjà présenté dans les précédents Chapitres (le Chapitre II-IV) où l'amplitude de transition variationnelle pour un processus d'excitation est exprimée grâce aux deux éléments matriciels dits de Born-I et de Born-II, qui suivent des lois d'échelle mettant en œuvre les charges des deux partenaires de collision. Dans le formalisme du paramètre d'impact, la contribution des états du continuum ignorée auparavant a été réintroduite grâce à un prolongement analytique près du seuil d'ionisation.

Dans ce traitement, l'expression de l'amplitude variationnelle de l'excitation de la cible d'un état $|\alpha\rangle$ vers un état $|\beta\rangle$ est donnée par :

$$\tilde{\alpha}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v} \right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha) \quad (\text{V.2})$$

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

$$D_{ji} = (j | V - V G_T^+ V | i) \quad (\text{V.4})$$

v désigne la vitesse du projectile, $|i\rangle$ et $|j\rangle$ appartiennent respectivement à une série de base β_1 et β_2 convenablement choisies.

V est l'interaction entre le projectile et la cible. G_T^+ désigne le propagateur de la cible.

Pour ce faire, nous avons concentré tous nos efforts tant du point de vue analytique que numérique sur une représentation correcte et plus judicieuse du propagateur (opérateur de Green G^+), en le développant sur une base complète constituée par l'ensemble du spectre discret ainsi que celui du continuum de la cible. Cependant, et dans le but de décrire convenablement et d'une manière assez complète la fonction d'onde de diffusion, nous avons élargi de nouveau la base de 5 états (Schwinger55 (Schw55)) à 10 états (Schwinger1010 (Schw1010)), ce qui a nettement amélioré nos résultats.

Dans le domaine d'énergie qui nous intéresse, on s'attend à ce que la contribution des états du continuum de la cible dans les sections efficaces totales, ignorées jusqu'à présent dans la quasi-totalité des études précédentes de cette approche, soit petite sans toutefois être complètement négligeable.

Et ainsi on peut écrire :

Pour Schwinger55 (Schw55) : $B_1=B_2=\{1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}\}$

Pour Schwinger1010 (Schw1010) : $B_1=B_2=\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$

Il faut dire que lors d'un calcul précédant (Lasri (1998)[43] , en utilisant une base à 5 états nous avons remarqué un léger décalage vers les basses énergies en suivant toujours la même allure que les résultats expérimentaux, ce comportement peut être expliqué par le fait que dans les calculs des sections efficaces totales d'excitation de l'état $3p$ les 5 états de base sont $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_{+1}, 3p_{-1}\}$ mais pour l'excitation de l'état $3d$ on a utilisé la principe variationnel de Schwinger à deux états, seulement l'état initial et final (Schwinger22) donc au lieu d'avoir une matrice d'ordre 5 à inverser nous avons une matrice d'ordre 2 ainsi pour l'excitation vers l'état $3d_0$ la base comprendra $\{1s, 3d_0\}$ et l'excitation vers les états $3d_1$ et $3d_{-1}$ et $3d_2$ et $3d_{-2}$ les états de base seront respectivement $\{1s, 3d_1\}$, $\{1s, 3d_{-1}\}$ $\{1s, 3d_2\}$ $\{1s, 3d_{-2}\}$.

On peut donc conclure que pour décrire convenablement l'excitation du niveau $n=3$, il faut inclure tous les états intermédiaires de la cible ce qui nous amène à élargir la base à 10 états pour que la fonction d'onde soit bien représentée, ainsi la base comprendra : $\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$.

V-3. Fraction de polarisation:

La fraction de polarisation linéaire d'une radiation induite constitue une source d'information très importante afin d'évaluer une description plus rigoureuse du processus de collision ainsi que les sections efficaces totales d'excitation puisque la connaissance de celles-ci pour des sous-niveaux magnétiques est importante.

Les données de fraction de polarisation sont nécessaires pour des mesures dans des spectres solaires (Hénoux et Chambe (1990) [44] aussi bien que pour les radiations de plasmas polarisées (Kazantsev (1987) [45]. Pour les spectres solaires, les données s'avèrent nécessaires pour déterminer le mécanisme de l'énergie de transport.

Dans cette partie, la fraction de polarisation de la raie balmer- α est déterminée par le biais d'une nouvelle procédure basée sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger ensuite comparée avec les résultats expérimentaux disponibles ainsi qu'avec plusieurs autres calculs théoriques.

Expérimentalement, beaucoup d'efforts ont été réalisés afin de déterminer tous les éléments de matrice de densité après l'excitation. Récemment, Werner et Schartner (1996) [46] ont mesuré la fraction de polarisation linéaire produite par l'émission de la raie Balmer- α à partir des états de $n = 3$ de l'atome d'hydrogène excité par impact de protons.

Dans la littérature scientifique beaucoup de calculs ont été faits sur les sections efficaces totales d'excitation, mais malheureusement la plupart des auteurs n'ont pas publié les sections efficaces des sous niveaux magnétiques. Dans le cas du proton, et en 1973 ces sections efficaces ont été calculées par Baye et Heenen [47] en utilisant la méthode de diagonalisation. Plus récemment, un nouveau calcul basé sur la méthode close coupling mono-centrique à 10 états (SCE) a été réalisé par Schöller et al (1986) [48]. Ils ont déterminé les sections efficaces des sous niveau 1, le paramètre d'alignement associé ainsi que les éléments diagonaux de la matrice de densité. Un autre calcul close coupling avec une base symétrique constituée de 70 états a été effectué par Shakeshaft en (1978) [49], ensuite avec 74 états fut effectué par Slim et Ermolaev (Slim (1993) [12], Slim et Ermolaev (1994) [15]). Rodriguez et Miraglia (1992) [50] ont aussi déterminé tous les éléments de la matrice densité mais en employant une approximation iconal.

Récemment, Martin (1999) [51] a de nouveau calculé les sections efficaces totales d'excitation en utilisant un développement close coupling à un centre de la fonction d'onde dépendante du temps qui inclut une représentation discrétisée du continuum.

La fraction de polarisation linéaire où le premier paramètre de stokes est défini par l'observation perpendiculaire de l'axe du faisceau :

$$\Pi(H_\alpha) = \frac{I_{//} - I_{\perp}}{I_{//} + I_{\perp}} \quad (\text{V.3})$$

où $I_{//}$, I_{\perp} dénotent respectivement, l'intensité lumineuse due au vecteur du champ électrique parallèle et perpendiculaire à l'axe du faisceau incident des protons.

La fraction de polarisation linéaire observée est liée à la section efficace totale des différents sous niveaux magnétiques selon la définition donnée par (Syms et al 1975 [52]) qui se traduit par la relation suivante :

$$\begin{aligned} \Pi(H_\alpha) = & \left[B_{31} \frac{\sigma_{3p_0} - \sigma_{3p_1}}{2} + 57 B_{32} \frac{\sigma_{3d_0} + \sigma_{3d_1} - 2\sigma_{3d_2}}{100} \right] \\ & \times \left[B_{30} \sigma_{3s_0} + B_{31} \frac{7\sigma_{3p_0} + 11\sigma_{3p_1}}{6} + B_{32} \frac{119\sigma_{3d_0} + 219\sigma_{3d_1} + 162\sigma_{3d_2}}{100} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (\text{V.4})$$

où σ_{3l_m} désigne les sections efficaces partielles d'excitation aux sous niveaux $3l_m$ et B_{3l} est un rapport de la probabilité de l'émission H_α à la probabilité de l'émission à partir des niveaux $3l$, impliquant les coefficients d'Einstein :

$$B_{31} = \frac{A(3p \rightarrow 2s)}{A(3p \rightarrow 2s) + A(3p \rightarrow 1s)} = 0.118 \quad (\text{V.5a})$$

$$B_{30} = B_{32} = 1 \quad (\text{V.5b})$$

V-4. Résultats:**Tableau 1.**

Sections efficaces d'excitation (Schw1010) des états 3s, 3p, 3d et du niveau n=3 de l'atome d'hydrogène par impact de proton (en 10^{-18} cm^2).

E (keV)	3s	3p ₀	3p ₁	3p	3d ₀	3d ₁	3d ₂	3d	n=3
10	6.23482	4.36845	0.877953	6.124356	0.575345	0.229295	0.007594	1.04912	14.04470
15	7.68589	4.66916	1.41245	7.49406	0.651978	0.388946	0.0184511	1.46677	16.64672
20	8.58127	4.62370	1.82711	8.27792	0.664979	0.512502	0.0301684	1.75031	18.55520
30	9.41462	4.30552	2.36605	9.03762	0.611162	0.647528	0.0497645	2.00575	20.45799
40	9.49972	3.98260	2.65366	9.28992	0.526359	0.679901	0.0609345	2.00800	20.79764
50	9.23285	3.74912	2.82559	9.4003	0.44759	0.657913	0.0703634	1.90414	20.53729
60	8.77039	3.57297	2.92613	9.42523	0.380493	0.614569	0.0774051	1.76441	19.96003
70	8.22374	3.43620E	2.97893	9.39406	0.324879	0.567946	0.0822241	1.62521	19.24301
80	7.65461	3.32567E	3.00222	9.33011	0.279095	0.519136	0.0858176	1.48900	18.47372
100	6.5678	3.14346	3.00014	9.14374	0.210867	0.431075	0.0906213	1.25425	16.96579
140	4.82878	2.84087	2.90170	8.64427	0.129793	0.300118	0.0956167	0.92126	14.39431
200	3.19038	2.42726	2.66674	7.76074	0.746544	0.189225	0.0944576	0.64201	11.59314
250	2.37021	2.10550	2.44380	6.9931	0.594027	0.139557	0.0884056	1.0499522	10.4132622
300	1.82434	1.89233	2.27676	6.44585	0.445800	0.102446	0.0844976	0.8196872	9.0898772
400	1.18887	1.50330	1.97239	5.44808	0.329554	0.637561	0.0746485	1.753973	8.390923
900	0.350043	0.652714	1.16362	2.979954	0.196132	0.147958	0.0438629	0.5797738	3.9097708

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

E (keV)	Res. Exp. Donnelly et al. [6]	Res. Exp. Donnelly et al. Corrigés (15%) [6]	Res. Exp. Detleffsen et al. [8]	Appr. VPS [21]	Crothers et al (CDW- EIS) [27]	Ermolaev et al (TCAO) [21]	Ford et al (SCE) [14]	Mc Laughlin et al. (TCE) [16]	Mc Laughlin et al. (TCE cascade) [16]	Born-I	Schwinger- Born	Schw1010
10								3.84	4.02	14.6821	2.389825	7.89
15	5.85	4.9725		1.2	1.07		3.77	5.31	5.54	14.1488	3.625916	10.036
20	9.25	7.8625	5.71	2.85	1.82			7.25	7.66	13.0274	4.572204	11.25407
25	13.91	11.8235	6.52	3.52	2.49			9.36	9.92			
30	17.34	14.739	7.91	4	3.03	7.93	8.14	11.13	11.78	10.9105	5.63111	12.4868
35	17.65	15.0025	9	4.28	3.41			1.93	12.58			
40	18.14	15.419	9.98	4.43	3.67	8.78		12.36	12.99	9.30283	5.96419	12.6041
45			10.51	4.5	3.84		8.67	12.21	12.81			
50	16.46	13.991	10.15	4.51	3.94	8.78		11.40	11.94	8.09824	5.897117	12.24622
55			9.9	4.48	3.99			10.02	10.51			
60	15.58	13.243	8.45	4.42	4.01	8.16	7.85	8.36	8.78	7.17723	5.653052	11.647
65			9	4.36	4			6.91	7.28			
70	13.57	11.5345	9.5	4.3	3.97			6.05	6.39	6.44071	5.346149	10.95744
75			7.02	4.22	3.93	7.05		5.74	6.07			
80	11.98	10.183	7.21	4.14	3.87		6.6	5.76	6.1	5.84845	5.027156	10.24456
85			8.99	4.05	3.82	6.37		5.95	6.31			
90	11.47	9.7495		3.96	3.76			6.49	6.9			
95			7	3.87	3.7			6.47	6.88			
100	10.38	8.823		3.79	3.63	5.6	5.62	6.69	7.11	4.94799	4.441299	8.90102
105			6.72									
125			6.2				4.69					
140										3.79842	3.547764	6.770066
145				3.14	3.08	4.1		6.91	7.35			
150			4.38				4.03					
160			5.15									
200			3.2	2.57	2.53	3.16	3.12	4.08	4.35	2.83125	2.707534	4.74816

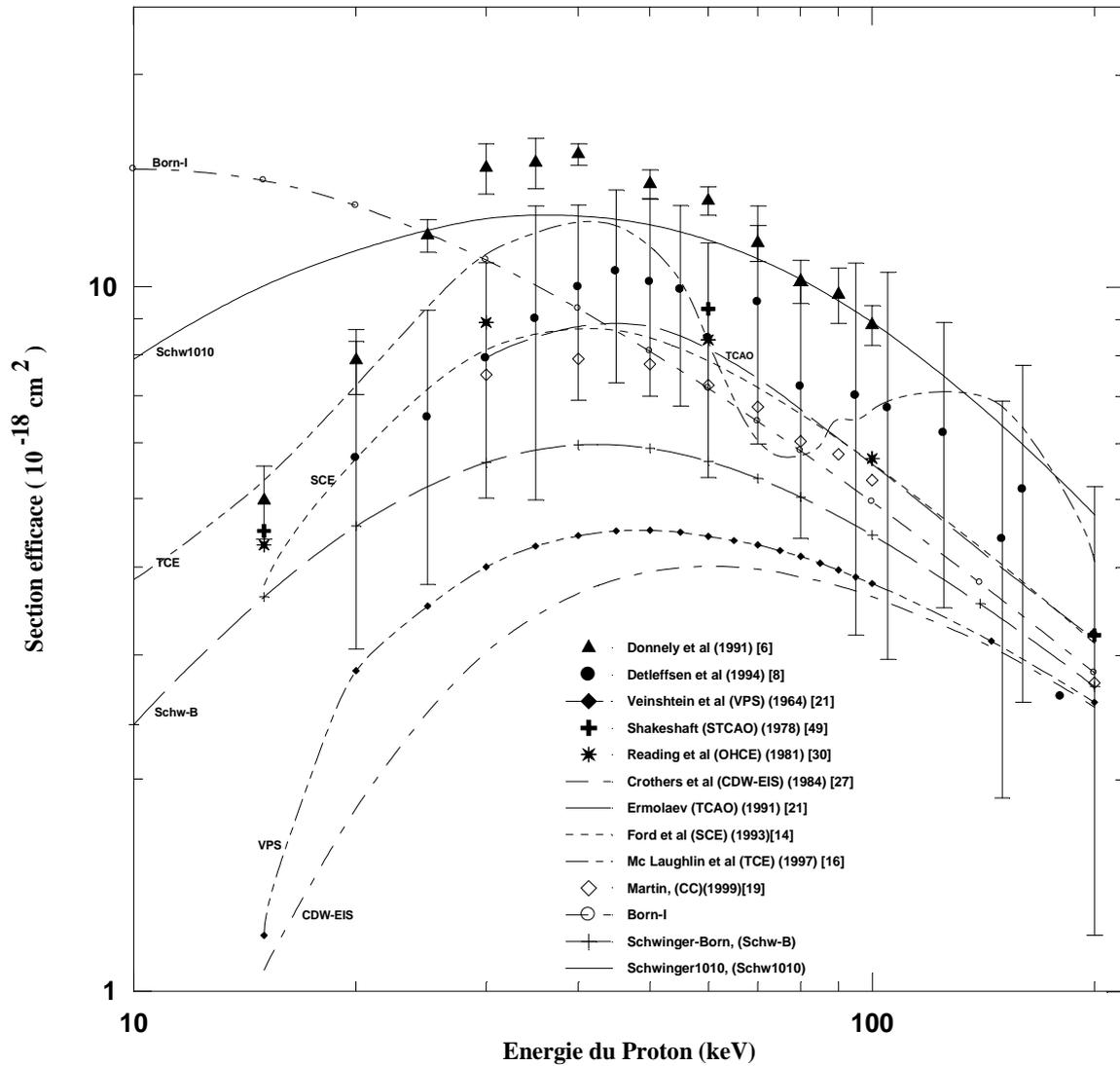


Figure 1: Sections efficaces totales d'émission Balmer- α (en 10^{-18} cm^2) pour une collision Proton-atome d'Hydrogène

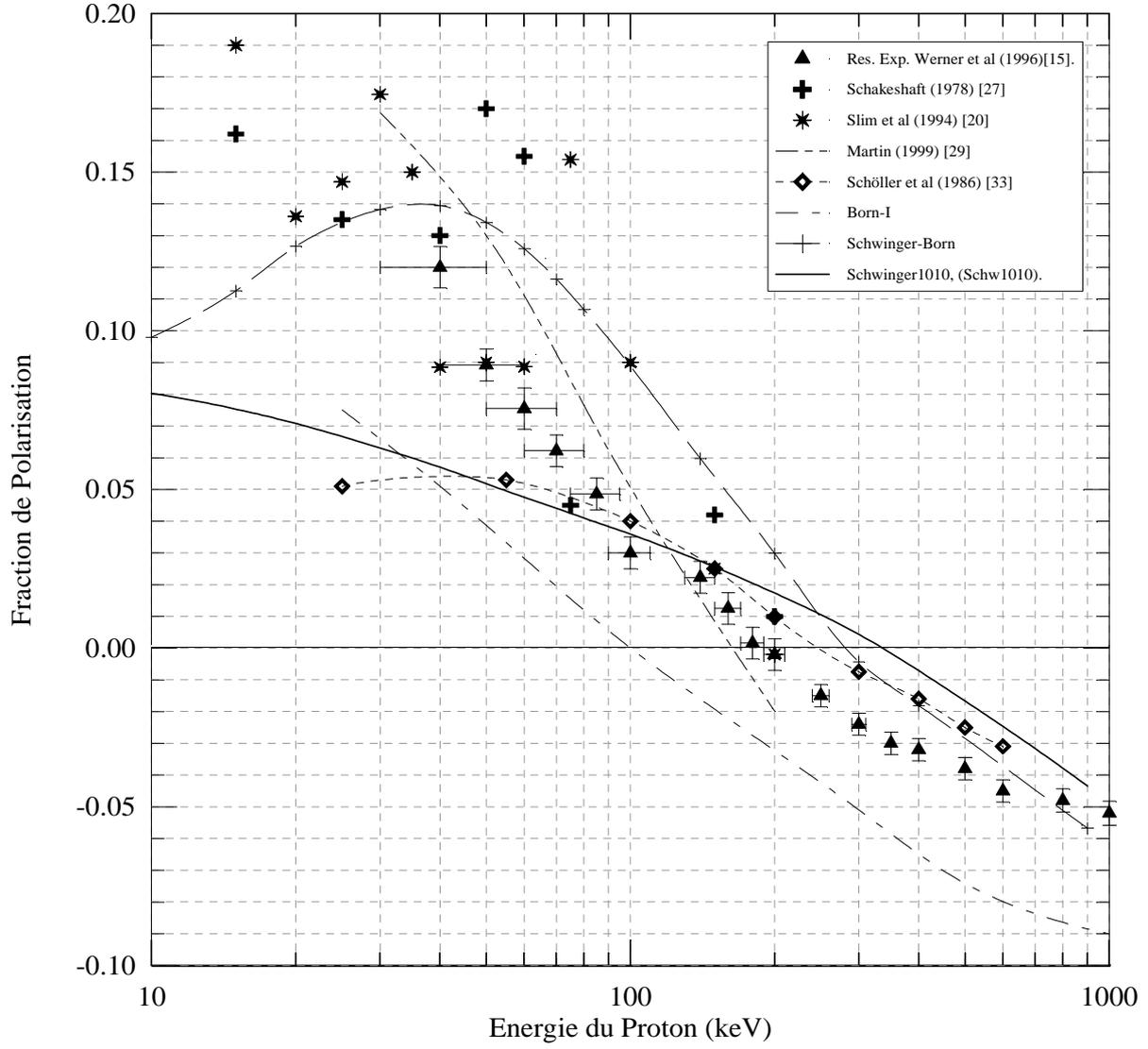


Figure V-2 : Fraction de polarisation par impact de protons.

V-5. Discussions:

Comme un premier pas vers une évaluation adéquate et quasi-complète des deux éléments matriciels de Born-I et Born-II, et afin d'aboutir à des sections efficaces totales de l'émission Balmer- α plus significatifs, dans notre développement ici présent nous ne sommes pas limités à 5 états de base mais nous avons élargi cette base à 10 états ($\{1s, 3s, 3p_0, 3p_1, 3p_{-1}, 3d_0, 3d_1, 3d_{-1}, 3d_2, 3d_{-2}\}$), mentionnée comme Schw1010, jugée indispensable pour une représentation plus correcte du propagateur (l'opérateur de Green G^+).

La contribution de tout le spectre discret ainsi que celui du continuum de la cible a été prise en compte. Cette nouvelle procédure a donné des résultats très encourageants et généralement nettement meilleurs que la majorité des calculs précédents.

Les sections efficaces totales de l'émission **Balmer- α** de l'atome d'hydrogène excité par un proton notées $\sigma(H_\alpha)$ sont données par la relation précédente (VII.3) qui montre que la plus grande partie de l'émission du niveau 3p (environ 88 %) est vers l'état initial (c'est la contribution de la cascade). Donc, la section efficace de l'émission Balmer- α $\sigma(H_\alpha)$ doit être corrigée sous l'influence des cascades à partir des niveaux plus hauts de l'atome d'hydrogène excités par impact de protons.

En 1982, il a été publié par Williams et al [53] que la correction pour l'émission Balmer- α due à la cascade était relativement petite. Cependant, le coefficient des diverses sections efficaces 3l sont une mesure de la cascade irradiante au niveau $n=2$. Pour le cas ici présent, le facteur 0.118 désigne la mesure de la cascade 3p, indiquant que la majorité de l'émission 3p est vers l'état fondamental 1s.

Les sections efficaces d'excitation aux états 3s, 3p, 3d et vers le niveau $n=3$ de l'atome d'hydrogène par impact de protons sont résumées dans le tableau VII-1 grâce auxquelles on a pu déterminer les sections efficaces totales de l'émission Balmer- α via la formule (VII.3).

La totalité de nos résultats qui incluent 10 états de la cible lors du développement désigné par l'état initial 1s plus tous les états excités du niveau $n=3$, ont été comparés aux divers résultats expérimentaux disponibles de Donnelly et al [6], Detleffsen et al [8] et avec d'autres calculs théoriques, principalement ceux basés sur la méthode Close Coupling: STCAO (Sturmian Two Centred Atomic Orbital expansion) de Shakeshaft (1978) [49],

TCAO (Two Centred Atomic Orbital expansion) d'Ermolaev (1991) [24], SCE (Single Centred Expansion) de Ford *et al* (1993)[14], TCE (Triple Centre Expansion) de McLaughlin *et al* (1997) [33], ainsi qu'avec quelques approches basées sur une théorie perturbative (Born-I [25], VPS [21], CDW-EIS [22][23]). La comparaison est faite généralement autour du maximum (pic) domaine des énergies intermédiaires où la voie d'excitation et de capture sont fortement couplées et avec une amplitude quasi-comparable (Gayet, (1983) [54]).

Dans la figure V-1 les données expérimentales de Donnelly *et al* (1991) [6] ont été réduites de 15% suite à une correction due à l'effet de cascade (voir McLaughlin *et al* (1997) [18]). On rappelle également que les données de Detleffsen *et al* [22] sont obtenues via la formule:

$$\sigma(H_{\alpha}) = \sigma(n=3) - 0.88 * \sigma(3p) \quad (\text{VI.6})$$

Où $\sigma(n=3)$ représente la section efficace totale vers le niveau $n=3$ prise directement des résultats de Park *et al* (1976)[20], par contre $\sigma(3p)$ est la section efficace totale d'excitation de l'état $1s$ vers l'état $3p$ mesurée par Detleffsen *et al* (1994)[8].

A partir des calculs Close-Coupling de McLaughlin *et al* (1997)[18] la contribution de l'effet de cascade aux sections efficaces de l'émission Balmer- α est estimée de la même manière que celles citées dans l'étude d'Ermolaev (1991)[24] où chaque cascade à partir des niveaux $n=4, 5$ et 6 est prise en considération en utilisant la notion de la probabilité de transition (Bethe et Salpeter (1957) [55]). Cependant, la contribution de la cascade du niveau $n=3$ est exprimée en termes de sections efficaces d'excitation par impact de protons. L'ensemble de ces divers calculs et résultats sont présentés dans le tableau 2.

Une minutieuse comparaison entre les résultats théoriques et les récentes sections efficaces de l'émission Balmer- α de Donnelly *et al* (1991) [6] et de Detleffsen *et al* (1994) [8] apparaît sur la figure VII-1. Sur la même figure ceux de Shakeshaft *et al* (STCAO) (1978) [49], Reading *et al* (1995) (OHCE) [56], Crothers *et al* (CDW-EIS) (1983) [22][23], Vainshtein *et al* (VPS) (1964) [21], Ermolaev (TCAO) (1991) [24], Ford *et al* (SCE) (1993) [14], McLaughlin *et al* (TCE) (1997) [18] sont aussi présentés afin d'illustrer un possible niveau d'accord entre la théorie et l'expérimental.

Dans le régime des hautes énergies d'impact considéré ($E=200$ keV), les sections efficaces découlant de l'approximation de Born pour l'émission Balmer- α sont légèrement différentes de celles prédites par notre nouveau modèle théorique basé sur le principe variationnel de Schwinger quoique la différence soit relativement petite. De plus la totalité

des modèles théoriques tend à converger vers les valeurs prédites par l'approximation de Born à partir de certaines énergies au delà du graphe.

A partir des calculs d'Ermolaev (1991) [24], et dans le régime des énergies intermédiaires localisées entre 20 et 200 keV, on peut dire qu'il y a une divergence considérable dans les valeurs numériques des sections efficaces. Le couplage entre les états de la cible qui s'avère important est pris en considération. Cependant, la figure 1 nous révèle que les résultats de cette approche dépendent essentiellement du choix du modèle général.

Un très bon accord est observé pour un processus de transfert de charge à basse énergie pour des calculs fondés sur un formalisme de paramètre d'impact réalisés par Shakeshaft en 1978 [49]. Cependant, la base utilisée dans cette étude ne prend pas en considération la voie d'ionisation. Cela, à son tour, a affecté dans une certaine mesure l'excitation directe de la voie d'émission à hautes énergies.

Récemment, on observe un accord satisfaisant entre les calculs effectués par McLaughlin *et al* (1997) [18] basés sur l'approche Close Coupling nommée TCE et les données expérimentales sur la gamme d'énergie considérée. Nous ne savons pas si la chute brusque dans les sections efficaces théoriques autour de 75 keV est réelle ou un artefact de la base finie employée. On voit que ces résultats sont positionnés entre les données expérimentales du groupe de Belfast (Donnelly *et al* (1991) [6]) et ceux de Giessen (Detleffsen *et al* (1994) [8]) et dans les limites d'erreur expérimentales.

On note également que les méthodes perturbatives (VPS et CDW-EIS) sous-estiment fortement ce processus et c'est une raison appropriée de l'utilisation des méthodes Close Coupling ou variationnelles.

Afin de bien exploiter les avantages des lois d'échelles, l'influence de la voie de capture a été ignorée dans notre application du principe variationnel (Brendlè *et al* (1985) [57], Lasri *et al* (2004) [58]).

Vu les présentes incertitudes expérimentales sur les mesure de Balmer- α on peut dire qu'il y a un bon accord entre nos résultats théoriques de la méthode variationnelle notée Schw1010 faisant référence à un développement sur une base de 10 états de la cible à partir d'une énergie de 30 keV, mais en dessous de cette énergie les sections efficaces calculées surestiment les données expérimentales. On peut expliquer cela par l'influence et la contribution de la voie de capture dans n'importe quel état du projectile qui est considérable aux énergies d'impact inférieures à 30 keV (Gayet (1983) [46]; Belkic *et al* (1979) [51]).

Les calculs Schwinger-Born déduits directement de notre nouveau modèle sous-estiment toutes les diverses données expérimentales disponibles malgré le fait qu'elles reproduisent l'allure de ces derniers.

Aux vitesses d'impact intermédiaires, la capture se produit principalement dans l'état s du projectile. De plus, ce processus prend place relativement aux petits paramètres d'impact. Par contre, aux hautes vitesses d'impact, l'excitation des états p est principalement due au terme dipolaire dont la contribution la plus importante apparaît aux grands paramètres d'impact. En conséquence, cette excitation, qui se produit principalement aux grands paramètres d'impact à haute vitesse d'impact, est moins affectée par le couplage avec la capture.

On peut expliquer la qualité des prédictions déduites à partir de Schw1010 à travers le fort couplage entre l'excitation et la capture dans la gamme d'énergie intermédiaire surtout en dessous de 30 keV. Comparé à l'excitation de la cible, la capture dans n'importe quel état du projectile est considérable dès que l'énergie d'impact sera plus petite que 30 keV (Gayet (1983) [54]; Belkic *et al* (1979) [59] Lasri *et al* (2004)[58]). Pour utiliser les lois d'échelles la voie de capture a été ignorée lors de nos calculs avec le principe variationnel. Donc, on ne peut pas s'attendre à ce que Schw1010 fournisse des prédictions assez fiables d'excitation pour des vitesses d'impact où la capture est fortement couplée à l'excitation.

Dans la figure 2 nous comparons nos résultats de la fraction de polarisation obtenus via la formule citée précédemment, avec les données expérimentales de Werner et Schartner [46]. Un accord raisonnable est décelé entre nos calculs Schw-B avec l'expérience et, de même pour Schw1010 mais aux hautes énergies avec une légère sous estimation à basse énergie. Nos calculs prévoient aussi un changement de signe autour de 300 keV et demeurent en bon accord avec ceux de Schöller *et al* (1986) [48] obtenus par une approche close coupling à un centre à 10 états, Rodriguez et Miraglia [50] et Balança *et al* [60], et en contradiction avec ceux de Shakeshaft (1978) [49] et Slim *et al* (1994) [15] qui oscillent, les récents résultats de Martin (1999) [51] demeurant nettement meilleurs et en parfait accord avec l'expérience.

Références

- [1] - R. K. Janev et L. P. Presnyakov, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 13 (1980).
- [2] - M. Laming, *Astrophys. J.* 362 219 (1990).
- [3] - S. A. Kazantsev, N. Feautrier, J. C. Hénoux, A. V. Liaptsev et V. V. Luchinkina, *Astron. Astrophys. Rev.* 6 1 (1994).
- [4] - R. C. Smith, R. P. Kirshner, W. P. Blair et P. F. Winkler, *Astrophys. J.* 375 652 (1991).
- [5] - M. Laming, J. C. Raymond, B. M. McLaughlin et W. P. Blair, *Astrophys. J.* 407 267 (1996).
- [6] - A. Donnelly, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 24 165 (1991).
- [7] - M. P. Hughes, J. Geddes, R. W. McCullough et H. B. Gilbody *Nucl. Instrum. Methods B* 79 50 (1992).
- [8] - D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, et K-H. Schartner *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 4195 (1994).
- [9] - H. B. Gilbody XIX ICPEAC Invited Papers (British Columbia, Canada) vol 360, ed L J Dubé, J B A Mitchell, J W McConkey et C E Brion (New York:AIP) p 19 (1995)
- [10] - D. P. Higgins, J. eddes et H. B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 1219 (1996).
- [11] - A. Werner et K-H. Schartner *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 127 (1996).
- [12] - H. A. Slim *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26 L743 (1993).
- [13] - M. Ramillon et R. McCarroll, *Phys. Scr.* 48 573 (1993).
- [14] - A. L. Ford, J. F. Reading et K. A. Hall, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26 4537 (1993).
- [15] - H. A. Slim et A. Ermolaev *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 L203 (1994).
- [16] - B. M. McLaughlin, T. G. Winter et McCann XIX ICPEAC Contributed Papers Whistler, British Columbia), ed J. B. A. Mitchell, J W McConkey et C E Brion (New York: AIP) p 129 (1995).
- [17] - Y. Kuang et C. D. Lin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 1207 (1996).
- [18] - Brendan M McLaughlin, Y. k. Thomas G Winterz et James F. McCann, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 30 1043—1059 (1997).
- [19] - F. Martin, A. Salin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 28 671 (1995).
- [20] - J. T. Park, J. E. Aldag, J. M. George et J. L. Preacher, *Phys. Rev. A* 14 608 (1976).
- [21] - L. Vainshtein, L. Presnyako et I. Sobelman, *Sov. Phys.—JETP* 18 1383 (1964).
- [22] - D. S. F. Crothers et J. F. McCann *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 16 3229 (1983).

- [23] - D. S. F. Crothers et J. F. McCann *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 17 L177 (1984).
- [24] - A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 24 L495 (1991).
- [25] - D. R. Bates et G. W. Griffing *Proc. Phys. Soc.* 66 961 (1953).
- [26] - D. R. Bates *Proc. R. Soc. A* 247 294 (1958).
- [27] - D. S. F. Crothers et R McCarroll *Proc. Phys. Soc.* 86 753 (1965).
- [28] - M. McCartney et D. S. F. Crothers, *Comput. Phys. Commun.* 72 288 (1992).
- [29] - M. McCartney et D. S. F. Crothers, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 25 L281 (1992).
- [30] - J. F. Reading et A. L. Ford *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, Vol. 12, No. 8, (1979).
- [31] - E. Fitchard, A. L. Ford et J. F. Reading, *Phys. Rev. A* 16 1325 (1977).
- [32] - B. H. Bransden, D. P. Dewangen et C. J. Noble *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 12 3563 (1979).
- [33] - C. O. Reinhold et J. E. Miraglia, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 20 1069 (1987).
- [34] - A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 17 1069 (1984).
- [35] - A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 23 L45 (1990).
- [36] - D. R. Bates *Quantum Theory: I. Elements* (New York: Academic) pp 251-97 (1961).
- [37] - M. Antal, PhD Thesis Harvard University (1973).
- [38] - M. J. Antal, D. G. Anderson et M. B. McElroy *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 8 1513(1975).
- [39] - D. G. Anderson, M. J. Antal et M. B. McElroy *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 7 L118 (1974).
- [40] - D. G. Anderson, M. J. Antal et M. B. McElroy *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 14 1707(1981).
- [41] - T. G. Winter et C. D. Lin *Phys. Rev. A* 29 567 (1984).
- [42] - T. G. Winter et C D Lin, *Phys. Rev. A* 29 3071 (1984).
- [43] - B. Lasri, Thèse de Magistère, Université de Tlemcen, (1998).
- [44] - J. C. Henoux et G. Chambe *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 44 193.(1990).
- [45] - S. A Kazantsev, N. Feautrier, J. C. Hénoux, A. V. Liaptsev et V. V.Luchinkina, *Astron. Astrophys. Rev.* 6 1 1994
- [46] - A. Werner et K-H Schartner *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 127 (1996).
- [47] - D. Baye et P-H. Heenen *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 6 105 (1973).
- [48] - O. Schöller, J. S. Briggs et R. M. Dreizler, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 19 2505 (1986).
- [49] - R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* 18 1930 (1978)
- [50] - V. D. Rodriguez et J. E. Miraglia *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 25 2037 (1992).
- [51] - F. Martin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* 32 (1999) 501
- [52] - Syms R F, McDowell M R C, Morgan L A et Myerscough V P 1975 *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.* 8 2817
- [53] - I. D. Williams, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys B: At. Mol. Phys.* 15 1377 (1982).
- [54] - R. Gayet. *Nuclear Science Applications* 1 555-67 (1983).

- [55] - H A Bethe et E. E. Salpeter Quantum mechanics of one et two electron atoms Springer-Verlag, Berlin p.18. (1957).
- [56] - J. F. Reading, A. L. Ford et R. L. Becker, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14 1995 (1981).
- [57] - B Brendlé, R Gayet, J P Rozet et K Woher, Phys. Rev. Lett. 54 2007 (1985).
- [58] - B Lasri, Physical et Chemical News Journal, 20, 12 -17 (2004).
- [59] - DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, Phys. Repport 56 (1979) 279
- [60] - C Balança, C D Lin et N Feautrier J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 31 2321 (1998).

Conclusion générale

 urant cette étude, notre objectif était de donner un outil de calcul performant pour déterminer les sections efficaces totales d'excitation soit dans l'interaction proton-atome d'hydrogène et ainsi déduire les sections efficaces de l'émission de la raie Balmer- α ainsi que la fraction de polarisation linéaire.

Le système étudié était un système proton-atome d'hydrogène aux énergies intermédiaires allant de 10 KeV à 200 KeV. Cette application présente un grand intérêt comme test du modèle théorique. De ce fait nous avons eu la possibilité d'examiner les différents résultats soit en introduisant l'approximation de Born au premier ordre dans le principe variationnel de Schwinger dite (Schwinger-Born) soit en représentant la fonction d'onde de diffusion par cinq états de base après avoir constaté que le choix de deux états de base s'avérait insuffisant pour rendre compte du processus d'excitation.

Un bon accord avec les différents résultats expérimentaux a été observé en examinant les sections efficaces les sections efficaces de l'émission de la raie Balmer- α ainsi que la fraction de polarisation linéaire. Ceci vient du fait que la fonction d'onde de diffusion est assez bien représentée (5 et 10 états de base).

Soulignons que pour décrire convenablement l'excitation du niveau $n=3$, 5 états de base ne suffissent pas, d'où la nécessité d'élargir la base à 10 états et inclure tout les états intermédiaires.

Dans notre développement nous avons pu inclure tout le spectre discret des états nl de la cible dans la représentation du propagateur de Green G_T^+ contenu dans les éléments de matrice de second ordre $\langle\langle i|VG_T^+V|j\rangle\rangle$.

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

On note également que La fraction de polarisation linéaire d'une radiation induite constitue une source d'information très importante afin d'évaluer une description plus rigoureuse du processus de collision ainsi que les sections efficaces totales d'excitation puisque la connaissance de celles-ci pour des sous-niveaux magnétiques est importante

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