

N°d'ordre :

Université de Saida– Dr. Moulay Tahar

Faculté des sciences

Thèse

Présentée pour obtenir le diplôme de

Doctorat en Sciences

Filière: Physique

Spécialité: Physique atomique

Par :

BELABBACI Mohammed

Thème :

Formalisme variationnel de Schwinger : Application à l'excitation et à l'ionisation des atomes et des molécules d'intérêt biologique par impact de particules chargées.



Thèse soutenue le 17/12/2024 devant le jury composé de :

N°	Nom et prénom	Grade	Etablissement	Qualité
01	EL KEURTI Mohammed	Pr.	Université de Saida – Dr. Moulay Tahar	Président
02	LASRI Boumediene	Pr.	Université de Saida – Dr. Moulay Tahar	Rapporteur
03	SAHLAOUI Mohammed	Pr.	Ecole supérieur en sciences appliquées ESSA Tlemcen	Co-Rapporteur
04	DOUMI Bendouma	Pr.	Université de Saida – Dr. Moulay Tahar	Examineur
05	MOKADDEM Allel	Pr.	Centre Universitaire Nour Bachir El Bayadh	Examineur
06	BENSAID Djilali	Pr.	Université DjillaliLiabes de Sidi Bel Abbes	Examineur

DEDICACE

Je dédie ce travail

À mes parents.

A mes sœurs et mes frères

A ceux qui me sont chers.

Remerciement

Avant de commencer cette thèse, je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers tous mes professeurs et enseignants. Leur soutien et leurs enseignements ont été indispensables à la réussite de mes études.

Je souhaite exprimer ma gratitude profonde au Professeur LASRI Boumediene, Directeur de cette thèse et Pr. Sahlaoui Mohammed, pour leurs écoutes attentives et sa disponibilités constantes tout au long de ce projet. Leurs aides précieuses et le temps qu'ils m'ont généreusement accordés, ce qui été essentiels à l'aboutissement de cette thèse.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Messieurs El-Keuri Mohammed, Professeur à l'Université de Saida, Pr. DOUMI Bendouma, professeur à l'Université de Saïda, et le Pr. MOKADEM Allel Professeur au Centre Universitaire d'El-BAYadh ainsi que le Pr. BENSAID Djilali, Professeur à l'Université de Sidi Belabess, pour l'attention qu'ils ont accordée à ce travail en acceptant de participer au jury.

Enfin, j'adresse mes remerciements les plus sincères à mes proches et amis, qui m'ont constamment soutenu et encouragé tout au long de la réalisation de cette thèse. Merci à vous tous.

Sommaire

Liste des tableaux	06
Liste des figures	07
Préface	08
Introduction Générale	11
	16
CHAPITRE I : Généralité sur les collisions atomiques	
I.1. Phénomènes d'ionisation, capture et excitation direct	16
I.1.1. L'ionisation	17
I.1.2. L'excitation	17
I.1.3. La capture	17
I.2. Domaines des vitesses d'impact :	17
I.2.1. Régime des basses vitesses d'impact ($K \gg 1$)	18
I.2.2. Régime de hautes vitesses d'impact pour ($K \ll 1$)	18
I.2.3. Régime des vitesses d'impact intermédiaires ($K \cong 1$)	18
I.3. Principales méthodes théoriques développées	19
I.3.1. Approximation de Born	20
I.3.2. Approximation de Vainshtein, Presnyakov et Sobelman (VPS)	23
I.3.3. Approximation des voies couplées (Close Coupling)	23
I.3.4. Approximation de Glauber	26
I.3.5. L'approche variationnelle	26
CHAPITRE II : Théorie des collisions et l'approche variationnelle de Schwinger	30
II-1. L'amplitude de transition et ses Formes stationnaires	31
II-1.1. Forme bilinéaire du principe Variationnel de Schwinger	33
II-1.2. Forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger	34
II-2. Amplitude variationnelle de transition approchée dans le formalisme de Schwinger	36

<u>CHAPITRE III</u> : Amplitude de transition Schwinger pour l'excitation	41
III-1. Introduction	41
III-2. Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact	41
III-3. Section efficace totale à excitation et amplitude de transition eikonale	48
III-3.1. Amplitude de transition eikonale	48
III-3.2. Sections efficaces eikonales	51
<u>CHAPITRE IV</u> : Amplitude de transition: Evaluation des éléments matriciels	54
IV-1. Éléments de matrice de Born-I	54
IV-2. Éléments de matrice de Born-II	57
IV-3. Influence des états du continuum et effet des lois d'échelle	62
IV-3.1. Introduction	62
IV-3.2. Contribution des états du continuum de la cible	62
IV-3.3. Méthode de Simpson et calcul des intégrales	68
IV-3.4. Lois d'échelle	69
IV-3.4.1. Lois d'échelle sur la charge ZP	70
IV-3.4.2. Lois d'échelle sur la charge ZT	72
<u>CHAPITRE V</u> : Résultats et discussions	76
V.1. Excitation du Be^{+3} par l'énergie d'impact des protons	78
V.2. Excitation du Li^{+2} par l'énergie d'impact des protons	84
Conclusion Générale	92
Bibliographie	94
APENDICES	98
Appendice-I : Forme iconale de l'opérateur de Green G_T^+	99
Appendice-II : calcul des éléments $w_{ij}(\vec{R})$	101
Appendice-III : Forme asymptotique des éléments $w_{ij}(\rho, z)$	107
Appendice-IV : Symétrie de la matrice D à inverser	112
Appendice-V : Calcul des intégrales $G_{ij}^{as}(\vec{z}_{ij})$ et $H_{ij}^{vas}(\vec{z}_{iv})$	122
Appendice-VI : La loi en ν^{-3} des éléments H_{ij}^v	128

Liste des tableaux

Tableau 01 : Section efficaces d'excitation à l'état 2s (en 10^{-19}) de l'ion Be^{3+} par impact

Tableau 02 : Section efficaces d'excitation à l'état 2p (en 10^{-19}) de l'ion Be^{3+} par impact de proton.

Tableau 03 : Section efficaces d'excitation à l'état $n=2$ (en 10^{-19}) de l'ion Be^{3+} par impact de proton.

Tableau 04 : Section efficaces d'excitation à l'état 2s (en 10^{-19}) de l'ion Li^{2+} par impact de proton.

Tableau 05 : Section efficaces d'excitation à l'état 2p (en 10^{-19}) de l'ion Li^{2+} par impact de proton.

Tableau06: Section efficaces d'excitation à l'état $n=2$ (en 10^{-19}) de l'ion Li^{2+} par impact de proton.

Liste des figures

Figure I.1 : Schéma de la collision

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

Fig. III-1. Schéma de la collision

Fig.1 : Section efficace d'excitation du niveau 2s pour Be^{3+} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Fig. 2 : Section efficace d'excitation du niveau 2p pour Be^{3+} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Fig. 3 : Section efficace d'excitation de l'état $n=2$ pour Be^{3+} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Fig. 4 : Section efficace d'excitation du niveau 2s pour Li^{+2} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Fig. 5 : Section efficace d'excitation du niveau 2p pour Li^{+2} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Fig. 6 : Section efficace d'excitation de l'état $n=2$ pour Li^{+2} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Préface

L'histoire des sciences est étroitement liée à la curiosité humaine. Un trait caractéristique de notre humanité est notre insatiable curiosité pour expliquer notre environnement.

La recherche du sens du "pourquoi ?" et du "comment ?" va de pair avec un autre instinct profondément humain : celui de modeler et de contrôler notre environnement vivant. L'histoire des sciences est étroitement liée à l'histoire de la curiosité humaine. Parmi les caractéristiques qui nous définissent, il y a ce besoin infatigable de comprendre le monde qui nous entoure.

Dans divers secteurs de la physique, l'étude des collisions entre un atome cible et un projectile fournit une source d'informations essentielle et unique sur la structure atomique et moléculaire. Cette approche présente un intérêt significatif à la fois théorique et appliqué, enrichissant la compréhension de nombreux phénomènes naturels, notamment dans les domaines de la physique des plasmas et de la fusion thermonucléaire.

En astrophysique, les mécanismes d'interaction fondamentaux comme la capture, l'ionisation et l'excitation jouent un rôle crucial dans la formation des objets cosmologiques, notamment les disques d'accrétion autour des trous noirs. La compréhension de ces processus permet d'analyser les phénomènes galactiques de manière approfondie. En fusion thermonucléaire, l'étude des phénomènes d'ionisation et d'excitation est cruciale pour avancer dans la physique des plasmas de fusion. Ces processus, induits par les collisions, génèrent des ions excités dont la désexcitation se traduit par l'émission de rayons X. Grâce à des techniques avancées de spectroscopie, il devient envisageable d'obtenir une évaluation précise de la densité et de la température dans les plasmas chauds. De plus, ces méthodes permettent de mettre en lumière les mécanismes de transfert d'énergie au sein de ces plasmas, conférant ainsi une importance fondamentale à la notion de section efficace totale. Par conséquent, la compréhension de la section efficace totale devient fondamentale. Les sections efficaces des collisions atomiques ont fait l'objet d'études approfondies en fonction des énergies d'impact. Récemment, de nouvelles orientations de recherche pour la physique des collisions atomiques ont émergé grâce aux expériences menées en physique nucléaire et biologique avec des ions fortement chargés dans des accélérateurs de particules. Observer uniquement un travail de recherche du point de vue intellectuel néglige l'importance de l'organisation nécessaire à

chaque moment sur divers autres fronts tels que le professionnel, le matériel, le personnel et la familial. Cela revient également à négliger les précieux alliés qui ont partagé ces "batailles" à nos côtés. Si la réalisation d'un travail de recherche se limitait à une entreprise solitaire, avec pour seuls outils un crayon, une feuille de papier et un microordinateur, alors un simple merci à Canson et à Bic suffirait. Cependant, ce n'est pas le cas. Des années de collaboration, de discussions stimulantes, de rencontres variées, en somme, des années de vie, exigent une multitude de remerciements à partager. Ce travail actuel découle de plusieurs années de recherche dans le domaine des collisions atomiques, où notre intérêt s'est porté sur une approche relativement nouvelle qui exclut un traitement perturbatif. Cette approche repose sur une théorie variationnelle connue sous le nom de Principe Variationnel de Schwinger.

L'utilisation de cette approche variationnelle se révèle être un instrument d'investigation extrêmement puissant, prenant la relève du traitement perturbatif dans l'analyse des processus d'excitation directe des atomes provoqués par l'impact d'ions à des énergies intermédiaires. En outre, cette méthode prévoit de manière réussie la saturation des sections efficaces totales à mesure que la charge du projectile augmente. Les différentes caractéristiques sont clairement démontrées par un excellent accord entre les résultats théoriques, lorsque la fonction d'onde est suffisamment bien représentée (avec 5, 10 et 14 états de base), et les résultats expérimentaux. Cela est observé dans des cas tels que l'excitation de l'atome d'hydrogène et des ions hydrogénoïdes Li^{2+} , Be^{3+} par impact de protons.

Les différentes recherches ont été menées au Laboratoire de Physique Théorique de l'Université Abou BekrBalkaid de Tlemcen (Algérie), à l'Université Ahmed Draiaa, Adrar et à l'université Tahar Mouly de Saida.

INTRODUCTION GENERALE

Introduction générale

La savoir répond à une nécessité croissante et incessante de l'humanité : celui de dénicher des réponses à ses interrogations et de saisir la nature des phénomènes qui l'entourent. Cette envie de saisir le "pourquoi ?" et le "comment ?" évolue en parallèle avec une différente aspiration profonde de l'être humain : celle de façonner et de maîtriser son milieu. Donc, l'homme, mécontent des simples hypothèses, a appris à expérimenter et à démontrer ce qu'il estime comme vrai a priori. C'est ainsi que la science a pris naissance.

Les collisions atomiques constituent des phénomènes fondamentaux dans divers secteurs de la physique quantique, et elles sont particulièrement cruciales en physique nucléaire et astrophysique. Le processus de ces collisions et leurs conséquences revêtent une importance capitale dans des domaines aussi divers que la physique de l'atmosphère, la physique des lasers et la chimie de la combustion.

Dans la fusion thermonucléaire, les plasmas, (des substances chaudes), émettent un rayonnement qui s'étend sur une vaste plage du spectre électromagnétique, variante selon le degré d'ionisation de la substance. Par ailleurs, l'analyse spectroscopique du rayonnement émanant de ces plasmas joue un rôle clé comme outil de diagnostic dès les premières étapes de la recherche, permettant d'évaluer la densité, la température et le niveau d'ionisation ...ect[1].

En raison de ses multiples applications, l'analyse des rayons X est cruciale, notamment en astrophysique : les étoiles, émettent et absorbent des radiations qui vont au-delà du spectre visible, du XUV aux rayons gamma. La capture, l'ionisation et l'excitation sont les trois mécanismes d'interaction principaux responsables de l'émission de ces radiations dans de tels environnements [1].

Ces processus sont actifs dans des environnements thermonucléaires tels que les plasmas stellaires, l'espace interstellaire et l'espace intergalactique. Ils jouent aussi un rôle crucial dans la formation d'objets cosmologiques comme les disques d'accrétion entourant les trous noirs, générant de ce fait une énergie considérable sous forme d'émissions de rayons X [2]. Dans ces plasmas, les collisions provoquent la production d'ions excités et leur relaxation se traduit par l'émission de rayons X [3][4].

L'examen des raies spectrales émises lors de collisions dans ces processus offre des renseignements précieux sur les phénomènes célestes existant dans l'univers.

Grâce à des techniques sophistiquées de spectroscopie, il est désormais possible d'obtenir des mesures précises de la densité et de la température, tout en révélant les processus de transfert d'énergie au sein de ces plasmas chauds [5]. De ce fait, comprendre le concept de section efficace totale s'avère essentiel.

Les études sur les sections efficaces des collisions atomiques se sont intensivement focalisées sur leur variation avec les énergies d'impact. De nouvelles avenues de recherche en physique nucléaire et biologique se sont ouvertes récemment grâce à l'utilisation d'ions fortement chargés dans les accélérateurs de particules, enrichissant le champ d'étude de la physique des collisions atomiques.

Des études récentes (Chetioui et al., 1994) sur les dommages biologiques ont montré une corrélation entre l'efficacité de la mort cellulaire et la formation d'un défaut dans la couche interne (par excitation ou ionisation) d'un atome de carbone de l'ADN. Il apparaît que l'efficacité maximale d'inactivation cellulaire est atteinte lorsque les vitesses du projectile et de l'électron dans la couche K de cet atome sont identiques, ce qui est semblable aux sections efficaces d'ionisation ou d'excitation de la couche K [2]. Absolument ! Comprendre les sections efficaces d'excitation et d'ionisation est crucial pour étudier divers phénomènes, y compris la saturation de l'effet biologique par des projectiles de grand numéro atomique. Les sections efficaces sont des mesures de la probabilité qu'une interaction particulière se produise lorsqu'une particule incidente interagit avec une cible. Dans le contexte des collisions asymétriques, où les projectiles sont de grande taille par rapport à la cible, ces sections efficaces deviennent encore plus pertinentes [2].

Les projectiles de grand numéro atomique, comme les ions lourds, sont souvent utilisés en physique des rayonnements et en radiothérapie, notamment pour le traitement du cancer. Lorsqu'ils interagissent avec des tissus biologiques, ces projectiles peuvent produire des effets d'excitation et d'ionisation importants. Comprendre les mécanismes sous-jacents à ces processus, y compris les sections efficaces associées, est essentiel pour prédire et contrôler les effets biologiques résultants [2].

La saturation de l'effet biologique fait référence au phénomène où l'efficacité d'un projectile donné pour induire des dommages biologiques atteint un plateau à des doses élevées. Cela peut être dû à des mécanismes de réparation cellulaire ou à des limitations physiques inhérentes aux interactions particule-cible [2].

En résumé, une compréhension précise des sections efficaces d'excitation et d'ionisation dans des collisions asymétriques avec des projectiles de grand numéro atomique

est cruciale pour expliquer des phénomènes tels que la saturation de l'effet biologique. Cela a des implications importantes dans des domaines tels que la recherche médicale et la physique des rayonnements [2].

Cette thèse se divise en cinq chapitres qui suivent une progression logique et méthodique dans l'étude des collisions atomiques et de l'excitation atomique induite par l'impact d'ions.

Dans le premier chapitre, nous plongeons dans l'aspect théorique des collisions atomiques. Nous commençons par une description générale de ce phénomène complexe, en mettant en lumière les forces fondamentales et les mécanismes sous-jacents. Nous examinons ensuite les principales méthodes utilisées pour aborder les défis posés par les collisions atomiques, établissant ainsi les fondements nécessaires à notre analyse approfondie.

Le deuxième chapitre est consacré à l'exposition de l'essentiel du principe variationnel de Schwinger, avec un accent particulier sur la détermination des expressions stationnaires. Ce principe constitue un cadre théorique robuste pour notre étude, permettant une approche précise et rigoureuse des processus d'excitation atomique.

Dans le troisième chapitre, nous adaptons le principe variationnel de Schwinger à l'excitation atomique. Cela nous permet de développer l'amplitude de transition variationnelle, conduisant ainsi à l'évaluation des sections efficaces totales d'excitation des systèmes hydrogénoïdes par impact d'ions. Nous considérons cette étude dans l'approximation du paramètre d'impact, où la trajectoire du projectile est supposée rectiligne par rapport à la cible.

Le quatrième chapitre se concentre sur l'évaluation de deux types d'éléments de matrice, le premier ordre de Born (Born-I) et le deuxième ordre de Born (Born-II) désignés respectivement par $(i | V | j)$ et $(i | VG_T^+ V | j)$. Nous développons le propagateur de Green en utilisant comme base l'ensemble du spectre discret ainsi que celui du continuum de la cible, ce qui nous permet une description précise de la fonction d'onde de diffusion.

Enfin, dans le cinquième chapitre, nous appliquons le formalisme variationnel de Schwinger pour étudier les processus d'excitation de l'ion Lithium (Li^{2+}) et du Béryllium (Be^{+3}) induits par l'impact de protons d'énergie variant 9 keV aux 3 MeV pour le Lithium et de 16 keV au 4 MeV pour le béryllium. Les résultats des calculs des sections efficaces totales d'excitation sont ensuite comparés à ceux obtenus par d'autres modèles théoriques, offrant ainsi une validation et une compréhension approfondie de nos résultats.

En conclusion, cette étude a contribué de manière significative à notre compréhension des collisions atomiques et de l'excitation atomique, tout en fournissant des résultats précis et validés pour les sections efficaces totales d'excitation. Pour de futures applications, nous suggérons notamment:

- L'exploration de configurations plus complexes et de systèmes multiélectroniques pour étendre notre compréhension des collisions atomiques.
- L'utilisation de techniques de calcul avancées pour affiner encore davantage nos résultats et étendre notre portée d'application à des énergies et des systèmes plus variés.
- L'exploration de nouvelles méthodes théoriques ou numériques pour aborder des questions spécifiques telles que les collisions asymétriques ou les effets de champ magnétique sur les processus d'excitation.

Ces suggestions ouvrent la voie à des recherches futures passionnantes et prometteuses pour développer et améliorer l'applications de ce travail.

CHAPITRE I

Chapitre I

Généralité sur les collisions atomiques

Durant les collisions entre un atome et un ion, une fraction de l'énergie cinétique est transférée aux deux cortèges électroniques, entraînant une restructuration des états électroniques. Ces modifications peuvent conduire à des phénomènes tels que l'excitation, l'ionisation ou la capture, comme représenté dans la Figure I-1 [6].

I. 1. Phénomènes d'ionisation, capture et excitation direct :

Dans l'analyse de la collision entre un ion projectile P et une cible atomique ou moléculaire C, les électrons considérés comme "actifs" de la cible sont ceux qui peuvent subir des transitions, passant d'une orbitale initiale à une autre orbitale de la cible (excitation), ou bien vers le continuum (ionisation), voire vers une orbitale de P (capture). En revanche, les électrons "passifs" sont ceux qui maintiennent leurs états quantiques tout au long de la collision.

Pour rendre plus accessible la compréhension de ces trois processus, nous adoptons un modèle à un seul électron. Dans ce cadre, le concept d'"électron actif" vise à définir les processus monos électroniques ainsi que les régimes de vitesses d'impact.

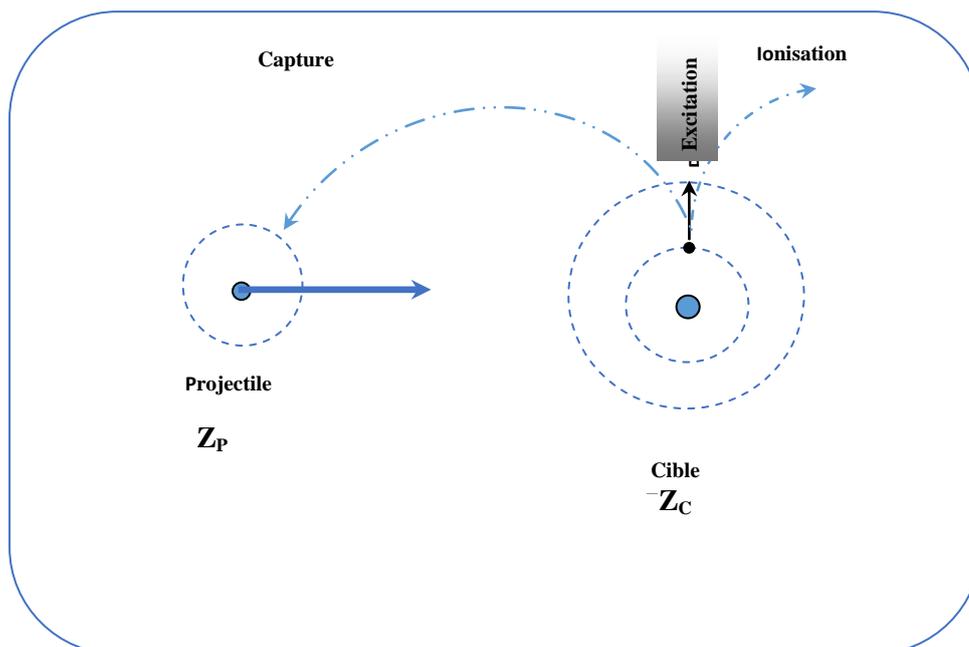


Figure 1-2 : Schéma de la collision

I. 1.1- L'ionisation :

Lors d'une interaction d'une intensité suffisante, le transfert d'énergie peut être assez important pour éjecter un électron de l'atome cible, entraînant ainsi le phénomène d'ionisation. Ce processus conduit à la formation d'une paire ion-électron, avec la présence simultanée d'un ion positif et d'un électron dans le milieu.

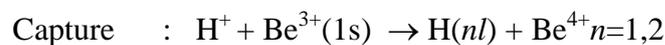
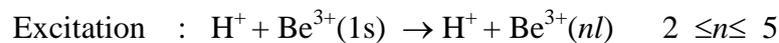
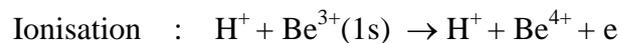
1.1.2- L'excitation :

En cas d'interaction insuffisante pour induire une ionisation, seule l'excitation se produit, entraînant un changement d'état quantique de l'électron. Ce passage se fait de l'état initial à un état final moins lié. Pour les cibles biologiques, ce processus est peu probable.

1.1.3- La capture :

La capture simple survient lorsque qu'un électron passe d'une orbitale de l'atome cible à une orbitale du projectile, sans qu'il y ait émission de lumière simultanée.

Ces divers processus peuvent être détaillés, prenons comme exemple une collision de type proton-Be³⁺ (H⁺ → Be³⁺) :



I.2. Domaines des vitesses d'impact :

Les divers procédés se démarquent par des sections efficaces qui, dans le cas d'un système proton-hydrogène donné, dépendent de l'énergie de la collision, comme présenté dans la figure I-2. En fonction de la vitesse (v_p) du projectile, les processus dynamiques varient en importance relative. On peut identifier trois principaux régimes de vitesses en se basant sur la valeur du paramètre K défini par Chetioui [2] et expliqué dans la relation I-1, notamment lorsqu'on examine les états électroniques du projectile :

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

v_e la vitesse initiale de l'électron actif engagé dans un processus atomique donné (c'est-à-dire les électrons subissant un changement d'état lors de la collision). Dans cette expression, v_p représente la vitesse du projectile, Z_p désigne la charge du projectile (le numéro atomique), et Z_C est la charge de la cible.

I.2.1 Régime des basses vitesses d'impact ($K \gg 1$)

Le régime appelé des basses vitesses, aussi désigné sous le nom de régime de forte interaction (lorsque $K \gg 1$), survient lorsque les vitesses de collision (V_p) sont considérablement plus faibles que celle de l'électron actif (V_e). Ceci se produit notamment lorsque les particules impliquées ont des numéros atomiques similaires, ou lorsqu'il y a une grande disparité de masse avec $Z_C \gg Z_p$.

En effet, durant la collision, l'électron se retrouve localisé simultanément autour des deux centres, conduisant ainsi le système à adopter une configuration moléculaire qui découle de l'interaction entre les deux partenaires. Cette phase est communément appelée le "domaine moléculaire". La théorie développée pour cette étape se fonde sur l'idée de la création d'une quasi-molécule transitoire au cours de la collision, reposant sur une représentation des états électroniques établie sur des bases moléculaires. La théorie des Ondes Déformées dans le Continuum (Continuum Distorted Wave - CDW) s'avère être particulièrement adaptée à ce type de collision.

I.2.2 Régime de hautes vitesses d'impact pour ($K \ll 1$)

Dans le régime des hautes vitesses, également désigné sous le nom de régime perturbatif (lorsque $K \ll 1$), les vitesses de collision sont considérablement supérieures à celle de l'électron actif de l'atome cible. Ce régime peut également être observé en présence de fortes asymétries de collision, comme $Z_p \gg Z_C$. À ces vitesses, il semble que les voies d'ionisation et d'excitation ne soient pas fortement interconnectées. Pour modéliser ce phénomène, une théorie de perturbation au premier ordre, telle que l'approximation PWBA (Plane-Wave Born Approximation), devient fiable, sous réserve que les fonctions d'onde décrivant la cible soient précises.

Cependant, la voie de capture semble être étroitement liée à la voie d'ionisation, alors que cette dernière est presque indépendante. Par conséquent, il en découle que le processus de capture doit être beaucoup moins significatif que celui de l'ionisation [2].

I.2.3 Régime des vitesses d'impact intermédiaires ($K \cong 1$)

Dans le domaine des vitesses intermédiaires, où la constante K est approximativement égale à 1, les sections efficaces des divers processus atomiques atteignent leur apogée et sont toutes de magnitude comparable. Lorsque plusieurs processus simples se déroulent simultanément, tels que la Capture-Ionisation, l'Excitation-Ionisation, la Double Excitation, etc., les probabilités liées à ces processus multiples deviennent significatives. Dans les systèmes quasi-symétriques, le domaine des vitesses intermédiaires se caractérise par une forte interaction entre les deux voies, la capture et l'excitation. À mesure que la vitesse d'impact augmente, la voie d'ionisation devient de plus en plus prédominante dans ce contexte. Une perspective intuitive suggère que l'ionisation est une continuation de l'excitation dans le continuum de la cible, tout comme elle peut être considérée comme une continuation de la capture dans le continuum du projectile. Lorsque la vitesse de collision est basse (comme dans le cas du Proton-Hydrogène -voir figure I 2-), la capture électronique est dominante [7].

En revanche, aux hautes vitesses de collision, l'ionisation et l'excitation prédominent [7].

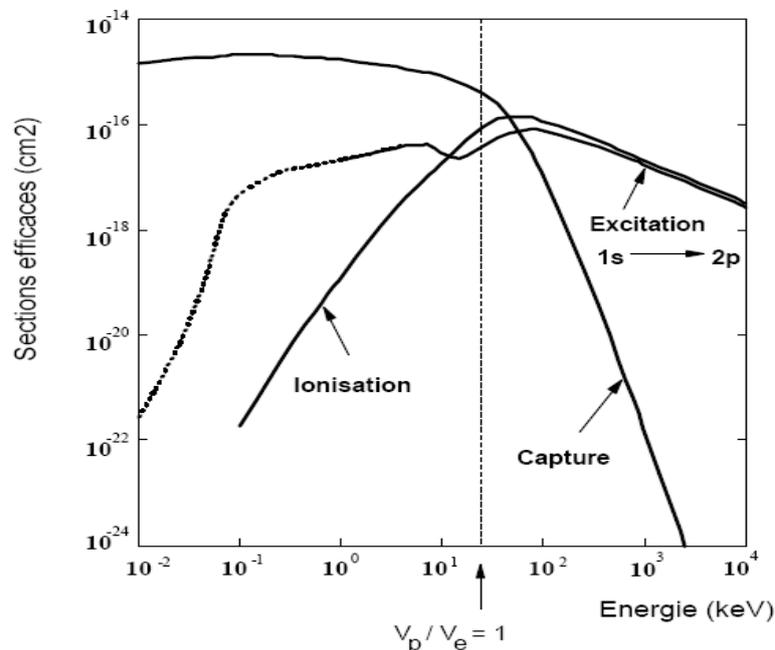


Figure I-2 : Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision P + H [6].

Cependant, la théorie quantique de l'hydrogène a une importance significative car elle a joué un rôle crucial dans le développement de la théorie des atomes à N électrons.

I.3. Les Principales méthodes théoriques développées :

L'étude théorique des structures atomiques, notamment celle de l'atome d'hydrogène et des systèmes ioniques à un électron, est d'un intérêt fondamental. Une théorie fiable doit pouvoir décrire avec précision l'interaction entre les noyaux et les électrons à travers la force coulombienne, en raison de son influence étendue. Cependant, même pour les collisions les plus simples, il est impossible de résoudre le problème collisionnel de manière exhaustive. C'est pourquoi la théorie des collisions atomiques induites par impact ionique se focalise sur l'élaboration de techniques, de méthodes et d'approximations visant à décrire de manière adéquate les divers processus de collisions.

Deux situations propices à l'utilisation d'approximations simplificatrices sont identifiables. La première survient lors de l'interaction de courte durée, où la théorie de perturbation trouve son application. La seconde se manifeste lors de collisions très lentes, où il y a la formation d'une quasi-molécule. Dans ce cas on considère que la perturbation est le mouvement lui-même.

La détermination de la fonction d'onde qui représente l'onde de diffusion revêt une importance cruciale dans un problème de collision. En effet, cette fonction rassemble la totalité des informations indispensables pour caractériser le système étudié. Pour résoudre ce défi, différentes techniques ont été développées afin d'obtenir une solution quasi-exacte. Dans ce chapitre, nous allons brièvement présenter les principales approches et approximations largement utilisées au cours des dernières décennies.

Ces approches ne se limitent pas uniquement à l'investigation du phénomène d'excitation, mais ont également été largement utilisées au cours des dernières décennies pour étudier les différents processus collisionnels tels que l'excitation, l'ionisation et la capture.

I.3.1 Approximation de Born :

L'approximation de Born se résume principalement à un développement de type perturbatif de la fonction d'onde ou de l'amplitude de diffusion en termes de puissances du potentiel d'interaction.

Dans cette approche, nous initions le processus en utilisant l'équation de Schrödinger indépendante du temps afin de dériver les équations intégrales de la fonction d'onde. Ensuite, nous devons prendre en compte les conditions aux limites appropriées, notamment celles liées aux grandes distances. Cela signifie qu'un choix spécifique pour la fonction de Green et pour la solution homogène de l'équation différentielle implique une détermination

des conditions aux limites. Il est également possible d'aboutir au même résultat en utilisant l'équation de Schrödinger et la fonction de Green dépendantes du temps [8].

Lorsqu'une cible atomique entre en collision avec un ion incident, on étudie le passage d'un électron de l'état initial de la voie d'entrée à l'état final de la voie de sortie, noté respectivement $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$.

Dans cette approche perturbative, l'élément matriciel de l'amplitude de transition peut être formulé de la manière suivante :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_\beta | \psi_\alpha^+ \rangle \quad \text{I-2}$$

Dans cette expression, $|\psi_\alpha^+\rangle$ désigne le vecteur propre de l'Hamiltonien total H dans la voie de sortie, qui satisfait l'équation de *ijin*-Schwinger :

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

où

$$G^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H + i\varepsilon)^{-1} \quad \text{I-4}$$

Il s'agit de l'opérateur de Green, où E représente l'énergie totale du système, et H est l'Hamiltonien total du système. L'Hamiltonien peut être exprimé de la manière suivante :

$$H = H_\alpha + V_\alpha = H_\beta + V_\beta \quad \text{I-5}$$

Dans la voie d'entrée, $|\alpha\rangle, H_\alpha$ et V_α représentent le vecteur propre, l'Hamiltonien des particules sans interaction et le potentiel d'interaction, tandis que $|\beta\rangle, H_\beta$ et V_β désignent respectivement le vecteur propre, l'Hamiltonien des particules sans interaction et le potentiel d'interaction dans la voie de sortie.

En se basant sur l'expression (I-5) et en appliquant une identité générale reliant les inverses de deux opérateurs, on peut exprimer G^+ sous la forme :

$$G^+ = G_\alpha^+ + G_\alpha^+ V_\alpha G^+ \quad \text{I-6}$$

avec

$$G_\alpha^+ = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} (E - H_\alpha + i\varepsilon)^{-1} \quad \text{I-7}$$

À partir de la relation (I-6), il est simple d'obtenir la série suivante :

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

Si on remplace l'expression de G^+ dans l'équation (I-3), nous obtenons :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_\beta \left[1 + G_\alpha^+ \sum_{i=0}^{+\infty} (V_\alpha G_\alpha^+)^i V_\alpha \right] | \alpha \rangle \quad \text{I-9}$$

En ne considérant que le premier terme de cette série, nous obtenons l'approximation de Born au premier ordre (Born-I) :

$$T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle \beta | V_\beta | \alpha \rangle \quad \text{I-10}$$

En raison de sa simplicité, on privilégie souvent l'approximation de Born du premier ordre. Celle-ci convient exclusivement aux collisions atomiques impliquant des ions à haute énergie. De manière analogue, l'approximation de Born au deuxième ordre implique de ne considérer que les deux premiers termes de la série (I-9) :

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

Dans les collisions inélastiques, l'approximation de Born du deuxième ordre est prépondérante dans la diffusion à haute énergie. Le deuxième terme, qui met en lumière un processus en deux étapes, est d'une importance primordiale dans le cadre de la capture à haute énergie.

De manière analogue, à chaque niveau supplémentaire N de l'approximation de Born, il est nécessaire de prendre en compte uniquement les N premiers termes de la série. Bien que l'ajout de termes supplémentaires dans le développement améliore la précision de la représentation de la fonction d'onde de diffusion, cela conduit rapidement à une augmentation de la complexité des calculs numériques sur machine.

Il est évident, d'après (I-9), que toutes les approximations au-delà de l'approximation de Born du premier ordre dépendent étroitement des développements appliqués à l'opérateur G^+

En effet, initialement, le système collisionnel est traité comme étant légèrement perturbé. Sa fonction d'onde est approximativement caractérisée par la forme asymptotique observée à grande distance, également connue sous le nom d'état libre. Cette forme d'onde correspond à l'ordre zéro de l'approximation et est ensuite remplacée par une fonction d'onde plus

complexe, qui représente véritablement le système en collision. Ainsi, l'approximation de Born est valide uniquement lorsque l'énergie cinétique de l'ion incident est nettement supérieure au potentiel d'interaction.

I.3.2. Approximation de Vainshtein, Presnyakov et Sobelman (VPS) :

Pour remédier à certaines limitations de l'approximation de Born, Vainshtein, Presnyakov et Sobelman ont développé une première approche appelée "approximation VPS". Cette méthode vise à traiter les distorsions de la fonction d'onde sortante qui décrivent le système collisionnel.

Cette approche vise à traiter de manière précise l'interaction entre le projectile et l'électron actif. Pour répondre aux exigences particulières du processus de collision, l'interaction entre le projectile et le noyau de la cible est approximativement évaluée. McCarroll et Crothers [9] ont présenté une variante légèrement modifiée de l'approche initiale utilisée par McCarroll et Salin [10] dans leur étude sur les collisions proton-hydrogène en 1966.

I.3.3. Approximation des voies couplées (Close Coupling) :

L'approche des voies couplées", représente une alternative robuste à l'approximation de Born. La fonction d'onde de diffusion est construite en utilisant des fonctions d'onde qui décrivent les différentes voies de réaction. Cela entraîne un système d'équations différentielles couplées impliquant les coefficients de développement [8].

Dans cette approche, nous utilisons le formalisme du paramètre d'impact pour aborder l'analyse des processus de collision, ce formalisme reste valide même à haute énergie et pour de petits angles de collision.

Ce formalisme repose sur l'hypothèse selon laquelle le projectile se déplace en ligne droite et que le transfert d'impulsion de la cible est perpendiculaire à sa trajectoire. Cette configuration est caractérisée par les équations suivantes:

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

Dans cette équation, R représente la distance entre le projectile et la cible, V est la vitesse incidente du projectile, ρ désigne le paramètre d'impact, et t est le temps choisi tel que $R=\rho$ à $t=0$. L'équation de Schrödinger peut alors être exprimée comme suit :

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

L'Hamiltonien électronique du système, en l'absence de potentiel d'interaction, est représenté par H. Il régit les transitions électroniques. La fonction d'onde peut être approximée en utilisant un développement sur une base tronquée d'états $\{ |\chi_j\rangle \}$ arbitraires, qui sont les vecteurs propres de H. Ainsi, nous introduisons :

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

pour chaque état propre $|\chi_k\rangle$ il est associée une énergie propre notée ε_k .

Nous introduisons l'expression (I-14) dans l'équation (I-13), nous obtenons un système d'équations différentielles couplées sur les fonctions $a_j(\vec{\rho}, \vec{z})$, après projection sur $\langle \chi_j |$:

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

Ici $V_{jk}(z)$ représente une matrice, ses éléments sont exprimés par :

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

On tenant compte les conditions asymptotiques:

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

i désigne l'état initial du système dans la voie d'entrée :

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

La probabilité de transition le long d'une voie de réaction spécifique f est établie par le coefficient de développement de la fonction d'onde le long de cette voie. Par conséquent, elle peut être formulée de la manière suivante :

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

Nous allons à présent brièvement exposer les diverses sélections de bases qui ont été faites, ces choix étant influencés tant par la vitesse que par l'asymétrie de la collision.

- Approche de l'expansion centrée sur un seul centre (SCE - Single Centered Expansion) : La fonction d'onde de diffusion est construite à partir d'une base d'états atomiques, qui représentent les vecteurs propres de l'Hamiltonien de la cible. Cette méthode, qualifiée "à un centre", concentre son attention sur la cible elle-même. Elle a été utilisée dans l'analyse du système collisionnel ($P + Li^{2+}$) dans cette thèse, sous l'appellation FHBS (Finit Hilbert base Set) [11].
- Dans le cadre de l'approche à deux centres (TCAO - TwoCentred Atomic Orbital), une diminution des vitesses entraîne une augmentation des sections efficaces de capture. En conséquence, les voies de capture, impliquant les états du projectile, s'ouvrent, ce qui rend impossible le développement complet de la fonction d'onde en se basant uniquement sur les états de la cible.
- Lorsque l'excitation se produit en traversant des états intermédiaires centrés sur le projectile impliquant ainsi une voie de capture, la méthode couramment utilisée implique à développer $|\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle$ sur une base connue sous le nom de "à deux centres" [6]. Cette approche est également valable dans le régime de vitesses intermédiaires. Dans cette configuration, le traitement du fort couplage entre l'excitation et la capture nécessite un développement sur une base à deux centres. Cela se traduit par :

$$|\psi^+(\vec{\rho}, \vec{z})\rangle = \sum_{k=1}^n a_k(\vec{\rho}, \vec{z}) |\chi_k^c\rangle \exp(-i\varepsilon_k z/v) + \sum_{l=1}^m b_l(\vec{\rho}, \vec{z}) |\chi_l^p\rangle \exp(-i\varepsilon_l z/v) \quad I-20$$

$|\chi_k^c\rangle$ et $|\chi_l^p\rangle$, désignent respectivement les états propres de la cible et du projectile.

La résolution de l'équation de Schrödinger (I-12) est souvent confrontée à des problèmes liés au coût en temps de calcul et au nombre d'états nécessaires pour atteindre la convergence. Cette approche a été utilisée pour calculer les sections efficaces d'excitation du système collisionnel $P + Li^{+2}$ (Ermolaev et al) [12], comme il est illustré dans cette thèse.

- La méthode de Base à un centre et demi (OHCE - One and Half Centered Expansion) : dans cette méthode on peut modéliser le phénomène d'ionisation de la cible résultante du phénomène de capture du projectile, pour ce faire il faut développer la fonction d'onde de diffusion au niveau des orbitales de la cible en intégrant des fonctions centrées sur le projectile.

à l'aide de ces fonctions, l'électron peut quitter la région de la cible vers un état lié de la projectile lorsque celui-ci et la cible s'éloignent l'un de l'autre. Prenant en compte ainsi les voies de capture alors disponibles [6].

Cette approche a été utilisée en 1981 par Reading et al sur le système $P+H^+$ [13], en utilisant uniquement la fonction $1s$ centrée sur le projectile. En 1982 Ford et al ont également l'employé pour étudier l'ionisation du système $P+Li^{2+}$ [14].

I.3.4. Approximation de Glauber :

A la fin des années 1950, Glauber a développé cette méthode qui représente l'une des formulations de l'approximation iconale et qui introduit l'impact du potentiel d'interaction à partir de la fonction d'onde décrivant l'état final du système.

L'approximation iconale est une méthode où l'on suppose que le projectile se déplace en ligne droite et que le transfert d'impulsion de la cible est perpendiculaire à la trajectoire du projectile.

Si la distance entre le projectile et la cible change, L'effet du potentiel d'interaction sur la fonction d'onde de diffusion se traduit par une modification de l'onde plane représentant le projectile. On suppose que cette approximation reste valide à des énergies d'impact inférieures à celles pour lesquelles l'approximation de Born au premier ordre est applicable. En effet, les fonctions d'onde incidente et de diffusion ne correspondent plus à des ondes planes [8].

I.3.5 L'approche variationnelle :

Diverses approches ont été élaborées pour fournir des modèles appropriés à l'étude du processus de collision. Parmi celles-ci, nous mentionnons : le modèle de Cheshire, établi en 1968 [15], dans lequel l'auteur a développé l'interaction et la fonction d'onde en utilisant des harmoniques sphériques ; le modèle du potentiel de second ordre, proposé par Bransden et Coleman en 1972 [16], basé sur la méthode des voies couplées. Enfin le modèle des pseudo-états, utilisé pour la première fois par Reading et al, en 1976 [17], puis repris par Fichard et al [18], ainsi que par Swaford et al, en 1977 [19].

La plupart des approches décrites jusqu'à présent, se concentrant principalement sur l'étude des collisions à haute énergie (à l'exception de la méthode des équations couplées, dont l'application peut être étendue au domaine des énergies moyennes), ont révélé leurs insuffisances dans la prise en compte des effets de couplage. Ces lacunes constatées peuvent être dues soit à la complexité accrue des calculs résultant de l'ajout d'états du continuum, soit à l'inexactitude inhérente des méthodes utilisées.

En 1950 Schwinger a introduit son principe variationnel qui présente une autre solution pour pallier ces limitations. Il s'avère être un outil puissant et efficace pour étudier la collision entre un proton et un atome d'hydrogène, ou de manière plus générale, la collision entre un ion multichargé et un atome à des vitesses intermédiaires.

En 1979, Lucchese et Mc Koy [20] ont été les premiers à appliquer le principe variationnel de Schwinger à l'étude de la diffusion électron-hélium (e-He). Ils cherchaient à prouver que ce principe permet de résoudre efficacement les problèmes de diffusion sans recourir à des développements sur des bases étendues. Plus tard, Lucchese, Watson et Mc Koy [21] ont étendu cette approche à l'étude de la diffusion élastique des électrons par des molécules. En réalité, leur objectif était de prouver que l'amplitude de diffusion, dérivée du principe variationnel de Schwinger, converge rapidement par rapport à la base utilisée pour développer la fonction d'onde de diffusion.

par la suite, cette approche a été employée par B. Brendlé [22-24] dans le domaine des énergies intermédiaires pour analyser l'excitation d'ions et d'atomes provoquée par l'impact de noyaux nus. Il a établi que la réduction de la base à deux vecteurs, décrivant uniquement les états initial et final de la transition en question, garantit une stabilité améliorée des résultats et une amplitude de transition stationnaire, bien que ce choix ne réponde pas parfaitement aux conditions asymptotiques. En même temps, M. Bouamoud a revu et perfectionné cette méthode sous la supervision du Professeur R. Gayet (l'Université de Bordeaux I, France). Il a mis au point une nouvelle approche fondée sur un nouveau code informatique développé en Fortran. Cette méthode cherche à calculer de manière rigoureuse les sections efficaces totales d'excitation de la cible représentée par une base composée de cinq états.

Durant ces dernières années, B. Lasri (Université de Tlemcen-Algérie) a développé ce formalisme en élargissant la base de 5 états à 10 puis à 14 états. Les résultats obtenus s'avèrent en très bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux disponibles. Ce modèle a été appliqué avec succès à l'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de protons et à l'étude du phénomène de saturation des sections efficaces totales d'excitation des ions héliumoides (Ar^{16+} , Ca^{18+} , Fe^{24+} , Kr^{34+} ,...) par des atomes neutres au énergie intermédiaires. [25-28].

Dans notre étude ici présente nous nous sommes pas limité à 5 états de base nous avons utilisé une base composée de 14 états. Le propagateur de Green a également été développé en utilisant une base composée à la fois de l'ensemble du spectre discret et de celui du continuum de la cible. En réalité, dans la plage d'énergie qui nous concerne, la contribution

des états du continuum est relativement faible, bien qu'elle ne puisse être totalement négligée [29][24].

Cette approche a conduit à des résultats très encourageants, représentant une nette amélioration par rapport aux travaux antérieurs.

Effectivement, cette reformulation innovante de l'approche variationnelle de Schwinger se positionne comme un instrument d'investigation extrêmement puissant pour étudier et examiner l'excitation électronique des atomes lors de l'interaction avec des ions. Cette méthode prévoit de manière concluante la saturation des sections efficaces totales d'excitation des ions résultant de l'impact de projectiles neutres à des vitesses intermédiaires. (B. Brendlé et al (1985) [22] [23], K. Wohrer et al (1986) [24], M. Bouamoud (1988) [25], R. Gayet et M. Bouamoud (1989) [26], B. Lasri (1998) [27], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2004) [28], B. Lasri, A Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet (2005) [30], B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet (2006) [31]).

CHAPITRE II

Chapitre II

Théorie des collisions et l'approche variationnelle de Schwinger :

Les principes variationnels, sont considérés indispensables en physique, pour améliorer la première estimation d'une grandeur physique en réduisant quadratiquement sa première variation. Cela mène à des améliorations analytiques ou numériques, incluant une méthode itérative qui converge vers la solution exacte.

D'un point de vue quantique, lors d'une collision, qu'elle soit directe, élastique ou inélastique, ces fondements variationnels sont fréquemment utilisés, tandis que les calculs variationnels associés aux processus d'impact sont ordinairement plus ardues. L'avantage de cette approche réside dans sa faculté à apporter un contentement acceptable avec une fonction d'onde d'essai, qui représente une approximation appropriée de la véritable fonction d'onde du problème considéré.

La technique Hulthén-Kohn, qui inclut des conditions aux limites complexes lors de sa création, est répertoriée dans la première classification [32-34]. Une extension moderne de cette méthode pour l'analyse des interactions électron-molécule a été exposée en 1995 par Rescigno et son équipe [35]. Par la suite cette technique a été significativement améliorée par une approche variationnelle appelée matrice-R (R-matrix) [36][37]. Ces progrès ont été récemment traités en profondeur par Schneider [38].

La technique variationnelle, établie par Schwinger lors de ses enseignements à l'Université de Harvard et publiée en 1947, est placée dans la seconde classification [39]."

Avec le temps, cette méthode, utilisée dans les collisions impliquant des électrons et des molécules, des ions et des atomes, ainsi que dans la photo ionisation moléculaire, a connu une évolution, un raffinement et une extension à d'autres champs d'application. Ces progrès sont attribués aux avancées en informatique et aux recherches menées par diverses équipes de recherche à l'échelle mondiale [40-43] [25-28].

Selon cette méthode, l'intégration automatique des conditions aux limites est assurée par la fonction de Green. Il est également faisable d'employer des fonctions de base dotées de conditions aux limites quelconques durant les calculs. Cette caractéristique permet l'emploi

d'une base L2 pour les calculs de collision et constitue une raison initiale convaincante pour l'adoption de cette technique en physique atomique et moléculaire [41][44].

Un tel accomplissement a d'abord conduit à l'élaboration de la méthode itérative de Schwinger, qui emploie des techniques d'expansion à centre unique (Single-Center Expansion), ainsi qu'une autre méthode itérative pour perfectionner la série de base initiale [45]. La méthode itérative de Schwinger a été largement appliquée pour examiner la photoionisation moléculaire [46] et pour les collisions électron-molécule, spécifiquement au niveau de l'échange statique pour les collisions élastiques. Elle est également associée à l'approximation des ondes déformées (DistortedWave Approximation) pour l'analyse de la diffusion électroniquement inélastique [47][48][49][50].

La quasi-totalité des travaux et études fondés sur le principe variationnel de Schwinger a démontré que ces approches variationnelles réussissent à résoudre de nombreux problèmes liés à l'énergie de liaison.

Tout d'abord, le principal avantage de ces approches réside dans leur capacité à fournir des résultats satisfaisants avec des fonctions d'onde d'essai qui constituent une approximation raisonnable de la fonction d'onde réelle du système.

Pour évaluer l'amplitude de diffusion, Schwinger a introduit l'une des formulations les plus fascinantes, connue sous le nom de "principe variationnel de Schwinger". Cette approche repose sur les équations intégrales de Lippmann-Schwinger.

Il est important de noter que ce principe implique la recherche d'une forme stationnaire de l'amplitude de transition en réponse à de petites variations des états de diffusion. Dans ce chapitre, nous allons établir les expressions stationnaires de l'amplitude de transition pour une collision sans réarrangement [25-28].

II-1. L'amplitude de transition et ses Formes stationnaires :

Lors d'une collision, on peut exprimer l'hamiltonien global du système de la manière suivante.:

$$H = H_C + V_C \tag{II-1}$$

ici H_C représente l'hamiltonien des particules sans interaction, doté d'un spectre de valeurs propres. Pour maintenir la généralité, définissons $|\varphi\rangle$ comme un état propre de H_C avec une énergie E et $|\psi\rangle$ comme l'état propre de H qui converge vers $|\varphi\rangle$ lorsque $V_C \rightarrow 0$:

$$H_C |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle \quad (E - H_C) |\psi\rangle = V_C |\psi\rangle \quad \text{II-2}$$

La solution formelle peut être écrite de la manière ci-dessous :

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + \frac{1}{E - H_C} V_C |\psi\rangle \quad \text{II-3}$$

Toutefois, l'opérateur $(E - H_C)^{-1}$ est mal défini : son effet sur les états propres de H_C avec énergie E est singulier. En règle générale, on introduit la résolvante :

$$G_C(z) = \frac{1}{z - H_C} \quad z \in \mathbb{C} \quad \text{II-4}$$

Et $G_C(z)$ présente une analyse complète, excepté aux points de l'axe réel qui correspondent aux valeurs propres de H_C . Afin de donner un sens à la relation (II-3), il est nécessaire de substituer E par un point proche de l'axe réel dans le plan complexe :

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + \frac{1}{E - H_C \pm i\varepsilon} V_C |\psi\rangle \quad (\varepsilon \rightarrow 0) \quad \text{II-5}$$

Cela représente l'équation de Lippmann-Schwinger. L'opérateur de Green est donné par

$$G_C^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (E - H_C \pm i\varepsilon)^{-1} \quad \text{II-6}$$

L'expression (II-5) est une équation implicite pour $|\psi\rangle$, mais elle peut être itérée de manière perturbative, comme suit :

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + G_C^\pm V_C |\varphi\rangle + G_C^\pm V_C G_C^\pm V_C |\varphi\rangle + \dots \quad \text{II-7}$$

La définition de l'opérateur de Green effectif est établie de la manière suivante :

$$G^\pm = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (E - H \pm i\varepsilon)^{-1} \quad \text{II-8}$$

On peut expliquer d'une manière simple que l'équation intégrale (II-2) admet la solution formelle suivante :

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + G^\pm V_C |\varphi\rangle \quad \text{II-9}$$

Les états propres de H_C sont représentés par les vecteurs dans la voie d'entrée et de sortie $|\alpha\rangle$ et $\langle\beta|$ respectivement.

Les vecteurs propres de l'Hamiltonien total H du système, correspondant aux états de diffusion notés $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$, qui satisfont respectivement aux conditions d'onde sortante et entrante, sont régis par les équations intégrales de Lippmann-Schwinger.

$$|\psi_\alpha^+\rangle = |\alpha\rangle + G_C^+ V_C |\psi_\alpha^+\rangle \quad \text{II-10a}$$

$$\langle\psi_\beta^-| = \langle\beta| + \langle\psi_\beta^-| G_C^- V_C \quad \text{II-10b}$$

L'opérateur de transition T est définie par :

$$T|\alpha\rangle = V_C |\psi_\alpha^+\rangle, \quad \langle\beta|T = \langle\psi_\beta^-| V_C \quad \text{II-11}$$

On définit l'amplitude de transition ($\alpha \rightarrow \beta$) par l'élément de matrice de transition présenté par la forme :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|T|\alpha\rangle \quad \text{II-12}$$

L'amplitude de transition est décrite par trois formes différentes, sont introduits à partir des expressions (II-9a. b) :

$$T_{\beta\alpha} = \langle\beta|V_C|\psi_\alpha^+\rangle \quad \text{II-13a}$$

$$= \langle\psi_\beta^-|V_C|\alpha\rangle \quad \text{II-13b}$$

$$= \langle\psi_\beta^-|V_C - V_C G_C^+ V_C|\psi_\alpha^+\rangle \quad \text{II-13c}$$

De la même manière qu'un principe variationnel, l'analyse du problème implique la recherche de trajectoires géodésiques dans un espace approprié, tel que l'espace d'Hilbert du système en collision. Ainsi, le problème peut être posé comme un problème de variations, supposant que la première variation de l'une des représentations intégrales de l'amplitude de transition est égale à zéro.

À partir des représentations (II-12a. b .c), l'amplitude de transition peut être écrite suivant le principe variationnel sous deux formes :

II-1.1 Forme bilinéaire du principe Variationnel de Schwinger :

La forme bilinéaire de l'amplitude de transition peut être déduite à partir des relations (II-12a, b, c) :

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V_C | \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle - \langle \psi_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad \text{II-14}$$

C'est une autre représentation de l'amplitude de transition [46-47]. Il s'agit d'une expression exacte de l'amplitude lorsque les vecteurs exacts $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ sont employés. Cette expression demeure stable face à de légères 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 dérivant l'expression (II-3), on obtient :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | -\langle \psi_\beta^- | + \langle \psi_\beta^- | V_C G_C^+ \right] V_C | \delta \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta \psi_\beta^- | V_C [| \alpha \rangle - | \psi_\alpha^+ \rangle + G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad \text{II-15}$$

Puisque les vecteurs $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ obéissent aux équations de Lippmann-Schwinger, la relation (II-14) en découle :

$$\delta T_{\beta\alpha} = 0 \quad \text{II-16}$$

On appelle forme bilinéaire du principe variationnel de Schwinger l'expression (II-13), qui est bilinéaire en $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ est bien stationnaire.

II-1.2 Forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger :

De la même manière, en partant des équations (II-12a-c), le principe variationnel de Schwinger adopte facilement sa forme fractionnaire :

$$T_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \langle \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle}{\langle \psi_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle} \quad \text{II-17}$$

L'avantage de l'amplitude de transition est qu'elle ne dépend pas de l'amplitude des fonctions test substituées aux solutions exactes $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$. Lorsque nous différencions l'expression précédente et en utilisant les représentations intégrales équivalentes (II-12a-c) de l'amplitude de transition, le résultat est :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | -\langle \psi_\beta^- | + \langle \psi_\beta^- | V_C G_C^+ \right] V_C | \delta \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta \psi_\beta^- | V_C [| \alpha \rangle - | \psi_\alpha^+ \rangle + G_C^+ V_C | \psi_\alpha^+ \rangle \quad \text{II-18}$$

Cela indique que l'expression résultant de la différenciation est identique à l'expression (II-14). Par conséquent, la forme fractionnaire (II-16) demeure invariable (stationnaire) lorsque

les états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ subissent de légères variations par rapport à leurs valeurs précises.

Les principes variationnels analysés jusqu'à présent sont considérés comme "exacts" parce qu'ils emploient les solutions $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ des équations de Lippmann-Schwinger.

En insérant dans les formules stationnaires de $T_{\beta\alpha}$ les fonctions d'essai connues en remplacement des fonctions d'onde inconnues $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$, nous obtenons effectivement des formules approximatives.

Dans la première formulation variationnelle, on substitue aux vecteurs inconnus exacts $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-|$ leurs équivalents d'essai dans la première approximation de Born, notés $|\alpha\rangle$ et $\langle\beta|$ dans l'expression (II-16), comme suit :

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

$$\langle\psi_\beta^-| = \langle\beta| \quad \text{II-19b}$$

Donc la forme stationnaire de l'amplitude de transition mentionnée dans l'expression (II-17) et notée $T_{\beta\alpha}^B$ accepte l'écriture suivante :

$$T_{\beta\alpha}^B = \frac{\langle\beta|V_C|\alpha\rangle \langle\beta|V_C|\alpha\rangle}{\langle\beta|V_C - V_C G_C^+ V_C|\alpha\rangle} \quad \text{II-20}$$

Ainsi elle peut accepter l'écriture sous la forme en dessous :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} \left[\frac{1}{1 - \frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}}} \right] \quad \text{II-21}$$

avec $T_{\beta\alpha}^{BI} = \langle\beta|V_C|\alpha\rangle \quad \text{II-22}$

Représente l'amplitude de transition à la première approximation de Born.

$$\begin{aligned} \overline{T}_{\beta\alpha}^{BII} &= \langle\beta|V_C G_C^+ V_C|\alpha\rangle \\ &= T_{\beta\alpha}^{BII} - T_{\beta\alpha}^{BI} \end{aligned} \quad \text{II-23}$$

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

A condition que :

$$\frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}} < 1 \quad \text{II-24}$$

On peut obtenir :

$$T_{\beta\alpha}^B = T_{\beta\alpha}^{BI} \left[1 + \frac{\overline{T}_{\beta\alpha}^{BII}}{T_{\beta\alpha}^{BI}} + \dots \right] = T_{\beta\alpha}^{BII} + \dots \quad \text{II-25}$$

Pour que la condition (II-22) soit satisfaite, la deuxième approximation de Born se manifeste comme le premier membre d'une série convergente menant vers l'expression stationnaire approximative.

On conclusion, pour des énergies suffisamment élevées où la série de Born converge, le principe variationnel de Schwinger pourrait offrir une meilleure approximation que celle de Born au deuxième ordre.

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

Identifier les deux formes stables de l'amplitude de transition face à de petites variations aléatoires des états de diffusion, c'est-à-dire la forme bilinéaire (II-13) et la forme fractionnaire (II-16), signifie que la variation initiale de l'amplitude de transition est de nature quadratique par rapport aux fluctuations des états de diffusion.

Pour effectuer nos différents calculs, nous considérons comme états d'essai les vecteurs approchés $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-|$ puisque Les états de diffusion ne sont pas connus exactement :

Avec

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \quad \text{II-26a}$$

et

$$\langle\tilde{\psi}_\beta^-| = \langle\psi_\beta^-| + \langle\delta\psi_\beta^-| \quad \text{II-26b}$$

Afin de faire nos calculs on utilisant le principe variationnel, il faut considérer les états d'essai commettants des vecteurs de base $\{| \nu \rangle\}$, dans un sous espace vectoriel de dimension N, donc on a :

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \quad \text{II-27a}$$

$$\langle \tilde{\psi}_\beta^- | = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j | \quad \text{II-27b}$$

Les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusion approximatifs sont obtenues en résolvant l'équation aux variations où l'expression stationnaire est nulle ($\delta T_{\beta\alpha} = 0$).

En remplaçant les états de diffusion par les états d'essai dans l'expression (II-16), on peut trouver la forme suivante pour l'amplitude de transition approximative :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\langle \beta | V_C | \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle \langle \tilde{\psi}_\beta^- | V_C | \alpha \rangle}{\langle \tilde{\psi}_\beta^- | V_C - V_C G_C^+ V_C | \tilde{\psi}_\alpha^+ \rangle} \quad \text{II-28}$$

D'après les expressions (II-17) et (II-24a,b), l'équation suivante peut être obtenue :

$$\delta T_{\beta\alpha} = \left[\langle \beta | - \langle \tilde{\psi}_\beta^- - \delta \psi_\beta^- | (1 - V_C G_C^+) | V_C | \delta \psi_\alpha^+ \rangle + \langle \delta \psi_\beta^- | V_C | \alpha \rangle - (1 - G_C^+ V_C) | \tilde{\psi}_\alpha^+ - \delta \psi_\alpha^+ \rangle \right] \quad \text{II-29}$$

On peut montrer facilement que $\delta T_{\beta\alpha} = 0$ pour toute variations en premier ordre en $|\delta \psi_\alpha^+\rangle$ et $\langle \delta \psi_\beta^- |$.

En utilisant les développements des vecteurs $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_\beta^- |$ (II-25a, b), nous arrivons aux deux systèmes d'équations couplées suivants pour les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* des états de diffusion approximatifs :

$$\begin{aligned} \langle j | V_C | \alpha \rangle - \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle &= 0 & j=1, \dots, N \\ \langle \beta | V_C | i \rangle - \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle &= 0 & i=1, \dots, N \end{aligned} \quad \text{II-30}$$

On définit la matrice carrée $N \times N$ noté D présentée par ses éléments suivants :

$$D_{ji} = \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle \quad \text{II-31}$$

On définit ainsi les vecteurs colonnes V_α et V_β présentés par leurs composantes respectivement :

$$(V_\alpha)_j = \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad \text{II-32a}$$

$$(V_\beta)_i = \langle i | V_C | \beta \rangle \quad \text{I-32b}$$

Si on remplace les vecteurs \tilde{a} et \tilde{b}^* par leurs composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* , l'expression (II-28) peut s'écrire sous la forme matricielle comme suit :

$$V_\alpha = D \cdot \tilde{a} \quad \text{II-33 a}$$

$$(V_\beta^*)^t = \tilde{b}^* \cdot D \quad \text{II-33b}$$

À l'aide des propriétés algébriques des matrices, on résout les deux systèmes d'équations couplées (II-28), on obtient :

$$\tilde{a} = D^{-1} V_\alpha \quad \text{II-34a}$$

$$\tilde{b}^* = (V_\beta^*)^t D^{-1} \quad \text{II-34b}$$

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

les équations II-32a et II-32b permettent de calculer les composantes \tilde{a}_i et \tilde{b}_j^* pour états d'essai $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_\beta^-|$. En insérant les deux états d'essai $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_\beta^-|$ dans l'expression (II-26) pour l'amplitude de transition approximative $\tilde{T}_{\beta\alpha}$, nous obtenons :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle \tilde{a}_i \tilde{b}_j^* \langle j | V_C | \alpha \rangle}{\sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^N \tilde{b}_j^* \langle j | V_C - V_C G_C^+ V_C | i \rangle \tilde{a}_i} \quad \text{II-35}$$

Alors on peut écrire sous forme matricielle, l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$:

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \frac{[(V_\beta^*)^t \cdot \tilde{a}] [\tilde{b}^* \cdot V_\alpha]}{\tilde{b}^* \cdot D \tilde{a}} \quad \text{II-36}$$

La représentation matricielle (II-31 a. b), nous permet d'écrire :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \left(V_{\beta}^* \right)^t \tilde{a} = \tilde{b}^* V_{\alpha} \quad \text{II-37}$$

Finalement, l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ sera déterminé par le remplacement des deux vecteurs \tilde{a} et \tilde{b}^* par leurs expressions (II-32a , b) dans l'équation (II-35) qui nous donne :

$$\tilde{T}_{\beta\alpha} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \langle \beta | V_C | i \rangle (D^{-1})_{ij} \langle j | V_C | \alpha \rangle \quad \text{II-38}$$

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

Enfin. Nous avons arrivé à la détermination de l'amplitude de transition approchée $\tilde{T}_{\beta\alpha}$ approchés développé dans un sous espace vectoriel de dimension N finie, en fonction des états de diffusion approchés.

Il est à noter que limiter l'équation (II-14) à un sous-espace très restreint de l'espace vectoriel des états de diffusion peut grandement faciliter sa résolution. Cependant, un choix inapproprié de ce sous-espace peut conduire à des états qui s'éloignent considérablement des véritables états de diffusion. Il est donc nécessaire de le choisir de manière à simplifier le problème tout en préservant au mieux les données physiques [25]."

CHAPITRE III

Chapitre III

Amplitude de transition Schwinger pour l'excitation

III-1.Introduction :

Les collisions atomiques à haute vitesse sont souvent expliquées en utilisant une approche perturbative pour décrire les processus élémentaires qui s'y déroulent. On a examiné en détail le mécanisme d'excitation lors des collisions ion-atome, en tenant compte principalement des situations où l'effet du partenaire exciteur est minime et où l'approximation de Born reste valable.

Un nouveau modèle a été élaboré pour analyser l'excitation dans les collisions à des vitesses intermédiaires, qui diffère des approches perturbatives traditionnelles. Ce modèle repose sur le principe variationnel de Schwinger plutôt que sur des calculs perturbatifs.

À ce niveau d'énergie, il est possible d'envisager que le projectile se déplace de manière rectiligne par rapport à la cible, ce qui permet d'aborder le problème en adoptant l'approximation eikonale.

III-2.Amplitude variationnelle dans le formalisme du paramètre d'impact:

Pour cette étude théorique, nous utiliserons le formalisme du paramètre d'impact, qui repose sur deux approximations fondamentales :

1- De manière traditionnelle, la trajectoire des noyaux peut être étudiée en fournissant à la fois la vitesse \vec{v} et le paramètre d'impact $\vec{\rho}$ de la collision.

Le déplacement des noyaux peut être illustré à l'aide d'une onde plane.

Ainsi, cette méthode, appelée aussi "méthode eikonale", est une approche semi-classique. Elle suppose que les noyaux suivent un mouvement classique tandis que le déplacement des électrons est traité de manière quantique.

Lors de l'étude de l'excitation d'un ion hydrogénoïde T, caractérisé par sa masse M_T et sa charge Z_T , suite à l'impact d'un projectile nu (noyau) P, possédant une masse M_P et une charge Z_P , nous pouvons analyser la situation en adoptant le référentiel du laboratoire. Dans ce contexte, l'origine est fixée sur la cible, où l'atome-cible demeure immobile tandis que le

projectile se déplace de façon constante le long d'une trajectoire rectiligne, déterminée par un paramètre d'impact spécifique $\vec{\rho}$.

Ainsi, en procédant ainsi, il devient possible de différencier le déplacement du projectile de celui de la cible, permettant ainsi de décrire le système à l'aide des coordonnées suivantes :

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

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

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

\vec{R} : vecteur distance projectile-noyau cible.

$\vec{\rho}$: paramètre d'impact (c'est un vecteur dans le plan qui inclue le noyau de la cible et est perpendiculaire à la trajectoire du projectile).

\vec{v} : vitesse d'impact.

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

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

Géométriquement, on représente le système collisionnel comme suit :

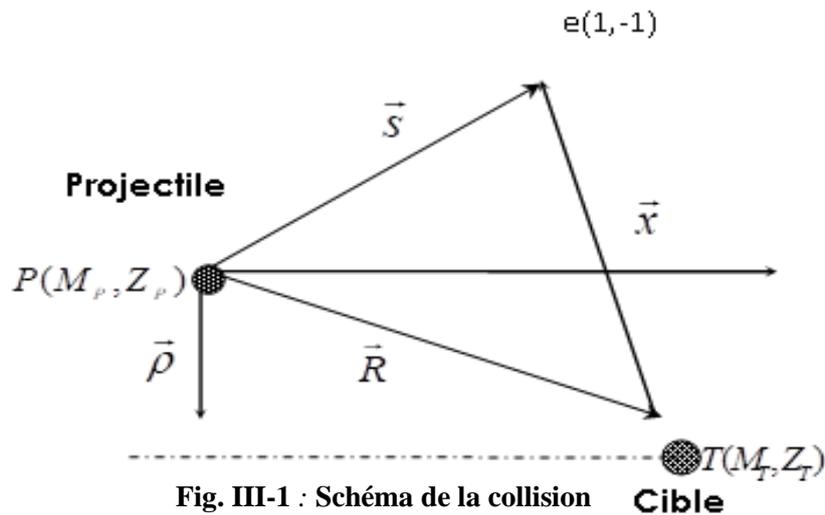


Fig. III-1 : Schéma de la collision

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

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

Dans le contexte d'une seule voie de réarrangement, l'hamiltonien total (H) qui représente le système collisionnel impliquant le projectile, la cible et l'électron est formulé comme suit :

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

Où H_C est la partie de l'Hamiltonien qui décrit l'état et les propriétés de la cible avant toute interaction, exprimé par $H_C = H_T + H_P$

Cette partie peut inclure des termes associés à l'énergie cinétique des particules de la cible, leur énergie potentielle due à des forces externes (comme un potentiel externe ou un champ magnétique), et toute autre énergie interne spécifique au système.

Sachant que :

L'Hamiltonien H_T capture le mouvement de la cible sans perturbation, exprimé en unités atomiques et donné par :

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

H_P représente l'Hamiltonien qui rend compte du mouvement relatif du projectile par rapport au noyau de la cible, tel qu'exprimé par :

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

Dans ce contexte la masse réduite du système notée μ est donnée par:

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

Et le potentiel noté V_C représente l'interaction entre les particules en collision exprimé par :

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

L'équation eikonale de Schrödinger est obtenue en substituant la dérivation par rapport à t par la dérivation par rapport à z dans l'équation de Schrödinger temporelle. Cela conduit à l'équation de diffusion eikonale de Schrödinger.

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

Pour résoudre l'équation (III-6), commençons par considérer l'équation eikonale de Schrödinger de la cible sans interaction.

$$\left(-i\nu \frac{\partial}{\partial z} + H_T\right) |\nu(z)\rangle = 0 \quad \text{III-7}$$

$|\nu(z)\rangle$ est un vecteur propre de l'Hamiltonien H_T , présenté dans la représentation des coordonnées électroniques de la cible $\{|\vec{x}, z\rangle\}$ de la manière suivante :

$$\langle \vec{x}, z | \nu(z) \rangle = e^{-i\frac{\mathcal{E}_\nu z}{\nu}} \varphi_\nu(\vec{x}) \quad \text{III-8}$$

En incorporant, Dans l'équation (III-7), le potentiel d'interaction coulombienne à longue portée entre le projectile et la cible (qui est le potentiel inter-agrégat) noté V_{int} et exprimé par :

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

on obtient :

$$\left(-i\nu \frac{\partial}{\partial z} + H_T + V_{\text{int}}\right) |\nu(z)\rangle = 0 \quad \text{III-10}$$

Pour obtenir les solutions de l'équation (III-10) définissant les états asymptotiques eikonales, on multiplie par un facteur de phase connu sous le nom de "facteur de coulomb", noté $i \frac{Z_P(Z_T - 1)}{\nu} \ln(\nu R - \nu z)$, les solutions de l'équation (III-7) notées $\{|\nu(z)\rangle\}$,

Cela veut dire que l'amplitude de transition est affectée par un facteur de phase lié au paramètre d'impact $\vec{\rho}$, symbolisé par $\rho = \frac{2iZ_P(Z_T - 1)}{\nu}$. Ce facteur peut être négligé lors du calcul de la section efficace totale, mais il est nécessaire de le réintroduire pour calculer la section efficace différentielle.

Ainsi, le potentiel qui induit l'excitation en prenant en compte les états asymptotiques eikonals est :

$$\begin{aligned}
 V &= V_C - V_{\text{int}} \\
 &= V_C - \frac{Z_P(Z_T - 1)}{R} \\
 &= Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right)
 \end{aligned}
 \tag{III-11}$$

Dans le formalisme du paramètre d'impact, l'équation de Schrödinger se réécrit comme suit :

$$\left\{ -iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \left| \psi_\alpha^+(z) \right\rangle = 0
 \tag{III-12a}$$

et

$$\left\{ iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} \left\langle \psi_\beta^-(z) \right| = 0
 \tag{III-12b}$$

Puisque les états $\left| \alpha(z) \right\rangle$ et $\left\langle \beta(z) \right|$ représentent les états initial (avant la collision) et final (après la collision) de la cible respectivement, et qu'ils sont des solutions de l'équation (III-7), nous sommes en mesure de résoudre les équations différentielles (III-12a, b) en utilisant leurs conditions initiales. Pour ce faire, nous utilisons les opérateurs de Green de la cible, qui sont définis comme les solutions des équations suivantes :

$$\left(\mp iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T \right) G_T^\pm(z - z') = -\delta(z - z')
 \tag{III-13}$$

en appliquant les conditions initiales ci-dessous :

$$G^+(z) = 0 \quad \text{si } z < 0
 \tag{III-14a}$$

$$G^-(z) = 0 \quad \text{si } z > 0
 \tag{III-14b}$$

En résolvant l'équation (III-13), nous obtenons :

$$\left\langle \nu(z') \right| G_T^+(z - z') = -\frac{i}{\nu} \left\langle \nu(z) \right| \theta(z - z')
 \tag{III-15a}$$

$$G_T^-(z-z')|v(z')\rangle = \frac{i}{v}\theta(z-z')|v(z)\rangle \quad \text{III-15b}$$

$\theta(z-z')$ désigne la fonction échelon unité, également connue sous le nom de fonction de Heaviside.

Les états de diffusion, solutions des équations (III-12a, b), notés $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $\langle\psi_\beta^-(z)|$, satisfont ainsi les équations appelées "les équations eikonales de Lippmann-Schwinger" suivantes :

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z') V(z') |\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad \text{III.16a}$$

$$\langle\psi_\beta^-(z)| = \langle\beta(z)| + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z') V(z') \langle\psi_\beta^-(z')| \quad \text{III.16b}$$

L'amplitude de transition eikonale peut être exprimée sous trois formes différentes en fonction de $\vec{\rho}$:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)\rangle \quad \text{III-17a}$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow -\infty} \langle\psi_\beta^-(z)|\alpha(z)\rangle \quad \text{III-17b}$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \lim_{z \rightarrow +\infty} \langle\psi_\beta^-(z)|V|\psi_\alpha^+(z)\rangle \quad \text{III-17c}$$

En utilisant la notation $\langle | \rangle$ pour représenter l'intégration sur les coordonnées électroniques, introduisons l'expression (III-16a) de $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ dans l'équation (III-13), puis utilisons (III-15a), ce qui nous donne :

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

Analogiquement on obtient :

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

et

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

En appliquant les relations (III-18a, b, c), nous dérivons la formule variationnelle eikonale de l'amplitude de transition en $\vec{\rho}$, similaire à l'expression quantique (II-16).

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \beta(z) | V | \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle \left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | V | \alpha(z) \rangle}{\left(-\frac{i}{v}\right) \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \psi_{\beta}^{-}(z) | V \left\{ | \psi_{\alpha}^{+}(z) \rangle - \int_{-\infty}^z dz' G_T^{+}(z-z') V | \psi_{\alpha}^{+}(z') \rangle \right\}}$$
 III-19

On peut écrire:

$$(\nu | \Omega | \nu') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle \nu(z) | \Omega | \nu'(z) \rangle$$
 III-20

Ω est un opérateur, et la notation $(| |)$ indique l'intégration sur les coordonnées électroniques et la coordonnée z . Symboliquement, une autre forme de l'amplitude de transition eikonale en $\vec{\rho}$ peut être écrite comme suit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{v} \frac{(\beta | V | \psi_{\alpha}^{+})(\psi_{\beta}^{-} | V | \alpha)}{(\psi_{\beta}^{-} | V - V G_T^{+} V | \psi_{\alpha}^{+})}$$
 III-21

De manière analogue à l'analyse quantique du chapitre II, il est possible de constater que l'expression (III-21) de l'amplitude de transition pour un paramètre d'impact donné $\vec{\rho}$ est stationnaire vis-à-vis des petites variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes, et que sa forme approximative peut être écrite comme suit :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta | V | i) (D^{-1})_{ij} (j | V | \alpha)$$
 III-22

Ici $(D^{-1})_{ij}$ désigne l'élément (i, j) de la matrice inverse de la matrice D , exprimée par

$$D_{ji} = (j | V - V G_T^{+} V | i)$$
 III-23

III-3. Section efficace totale d'excitation et amplitude de transition eikonale:

Après avoir déterminé l'amplitude de transition dans le formalisme du paramètre d'impact (III-20), nous aborderons désormais l'expression de l'amplitude de transition eikonale et de la section efficace totale pour l'excitation d'une cible atomique par impact de proton. Pour ce faire, nous utiliserons les approximations des états de diffusion $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ et $\langle\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ sur une base constituée uniquement des états liés de la cible, en excluant les états de capture sur le projectile parmi les états intermédiaires de transition.

III-3.1. Amplitude de transition eikonale :

Considérons les états électroniques initiaux $|\alpha\rangle$ et finaux $|\beta\rangle$, qui sont des états propres de l'Hamiltonien H_T . De plus, prenons les états propres initiaux $|\vec{k}_\alpha\rangle$ et finaux $|\vec{k}_\beta\rangle$, qui décrivent l'onde plane associée au projectile (avec \vec{k}_α et \vec{k}_β représentant respectivement les vecteurs quantité de mouvement initial et final du projectile).

L'amplitude de transition quantique entre l'état initial (avant la collision) et l'état final (après la collision) est formulée comme suit :

$$\begin{aligned}
 T_{\beta\alpha} &= \langle\vec{k}_\beta|\otimes\langle\beta|V|\psi_\alpha^+\rangle & (a) \\
 &= \left[\langle\vec{k}_\beta|\otimes\langle\beta|\right]V\left[|\psi_\alpha^{+E}\rangle\otimes|\vec{k}_\alpha\rangle\right] & (b) \\
 &= \langle\vec{k}_\beta,\beta|V|\vec{k}_\alpha,\psi_\alpha^{+E}\rangle & (c)
 \end{aligned}
 \tag{III-24}$$

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

Pour obtenir les équations (III-24b, c) nous développons l'approximation de paramètre d'impact en puissance de $1/\mu$ et en prenant l'onde de diffusion au premier ordre.

L'amplitude de transition quantique est exprimée sous sa forme eikonale selon la représentation des coordonnées $\{|\vec{R},\vec{x}\rangle\}$ de la manière suivante :

$$T_{\beta\alpha} = \int d^3\vec{R} d^3\vec{x} e^{i\vec{q}\cdot\vec{R}} \phi_\beta^*(\vec{x}) V(\vec{R},\vec{x}) \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho},\vec{z},\vec{x})
 \tag{III-25}$$

La quantité de mouvement transférée à la cible est exprimée par le vecteur \vec{q} et sa conservation implique que :

$$\vec{q} = \vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta \quad \text{III-26}$$

Ce vecteur peut s'écrire on se basant sur ses composantes longitudinales et transversales par rapport à la vitesse relative tel que : $\vec{\eta} \cdot \vec{v} = 0$

$$\vec{q} = q_v \vec{v} + \vec{\eta} \quad \text{III-27}$$

On considère le repère d'origine centre de masse, et on exprime la conservation de l'énergie de la manière suivante :

$$\frac{k_\alpha^2}{2\mu} + \varepsilon_\alpha = \frac{k_\beta^2}{2\mu} + \varepsilon_\beta \quad \text{III.28}$$

ε_α et ε_β et représentent respectivement les énergies des états liés initial et final de la cible. Il est important de noter que l'approximation eikonale est valable aux hautes énergies et aux petits angles de collision.

Lorsque l'angle θ entre les vecteurs \vec{k}_α et \vec{k}_β est faible et que l'énergie transférée est bien inférieure à l'énergie du projectile, la composante longitudinale du moment transféré peut être exprimée de la manière suivante :

$$q_v \approx \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{v} \quad \text{III.29}$$

On se basant sur la relation $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$, on peut obtenir :

$$\vec{q} \cdot \vec{R} = \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha}{v} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad \text{III.30}$$

sachant que $d^3 \vec{R} = d^2 \vec{\rho} dz$. Lorsque nous utilisons l'expression approximative de $\vec{q} \cdot \vec{R}$ (III-27) dans la formule de l'amplitude de transition donnée par la relation (III.25), nous parvenons à obtenir la forme suivante :

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

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} (\beta|V|\psi_\alpha^+) \quad \text{III.31}$$

En conclusion, lorsque $\alpha \neq \beta$, nous pouvons exprimer l'amplitude de transition quantique (III.31) sous une forme approximative en fonction de l'amplitude de transition variationnelle, exprimée dans le formalisme du paramètre d'impact, de la manière suivante :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = i\nu \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\cdot\vec{\rho}} \rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{\nu}} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad \text{III.32}$$

Dans cette formulation finale, il est remarquable que la contribution du potentiel inter-agrégat (III.9), exprimée par un facteur de phase $\rho^{2i\frac{Z_P(Z_T-1)}{\nu}}$ lié au paramètre d'impact, a été réintégrée [42].

III-3.2. Sections efficaces eikoniales :

La section efficace différentielle de diffusion $d\sigma/d\Omega$ représente le nombre de particules diffusées dans un élément d'angle solide $d\Omega$ pendant une unité de temps et par unité de courant de probabilité (le "flux" de particules incidentes) [43]. Elle se définit par la relation :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_\alpha}{k_\beta} \left| T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) \right|^2 \quad \text{III.33}$$

Où $d\Omega = \sin(\theta) d\theta d\varphi$

En cas où le transfert d'impulsion longitudinal ($\frac{k_\alpha}{k_\beta} \approx 1$) est faible, la formule (III.33) se transforme en:

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad \text{III.34}$$

Pour obtenir la section efficace totale, il est nécessaire de calculer la section efficace différentielle en fonction de η qui représente la composante transversale de la quantité de

mouvement transférée. Ainsi, la section efficace différentielle peut être exprimée comme suit :

$$d\sigma_{\beta\alpha} = d\varphi_{\beta} \sin(\theta_{\beta}) d\theta_{\beta} \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad \text{III.35}$$

En prenant la dérivée de \bar{q}^2 obtenue à partir des expressions (III-26, 27), et en supposant un faible transfert d'impulsion $\frac{k_{\alpha}}{k_{\beta}} \approx 1$, nous pouvons écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_{\beta}) d\theta_{\beta} \quad \text{III-36}$$

Lorsque $\varphi_{\beta} \equiv \varphi_{\eta}$, la section efficace totale s'écrit :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_{\eta} \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi v} \right|^2 \quad \text{III.37}$$

En substituant maintenant $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ par son expression (III.29) et en utilisant la transformée de Fourier bidimensionnelle, on obtiendra :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad \text{III.38}$$

Sachant que l'intégration sur l'angle azimutal φ_{ρ} est égale à 2π puisque $|a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2$ dépend que de module du $\vec{\rho}$. La section efficace totale s'écrit donc:

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad \text{III.39}$$

La section efficace totale d'excitation de l'état initial $|\alpha\rangle$ vers l'état final $|\beta\rangle$ est fonction de l'amplitude de transition variationnelle $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$. Comme mentionné précédemment, une forme approximative, notée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, est entièrement définie par l'expression (III.22) lorsqu'on développe les états de diffusion approximatifs dans un sous-espace vectoriel de dimension N.

CHAPITRE IV

Chapitre IV

Amplitude de transition: Evaluation des éléments matriciels

Il est crucial d'évaluer deux types d'éléments de matrice afin de déterminer l'amplitude de transition variationnelle noté $\tilde{\alpha}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$:

- ✓ 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 solutions de l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien H_T de la cible sont représentées par les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

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

IV-1. Éléments de matrice de Born-I:

Initialement, il est important de noter que, dans le modèle présenté précédemment dans le chapitre III, les composants matriciels de type $(i|V|j)$, également appelés Born-I, sont formulés de la manière suivante :

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

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

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

Cela nous autorise à formuler 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 composants de type Born-I seront formulés par :

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

Là où ε_i et ε_j représentent respectivement les énergies associées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$. Par ailleurs, dans l'appendice II, il est démontré que $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ peut être exprimé de la manière suivante :

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

m_i et m_j correspondent aux nombres quantiques magnétiques des états $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$, tandis que φ_R représente l'angle azimutal relatif au paramètre d'impact $\vec{\rho}$.

Dans la suite, afin de rendre l'écriture plus concise, les dépendances en $\vec{\rho}$ (en module et en angle) seront sous-entendues.

Initialement, rappelons les diverses propriétés de symétrie des éléments W_{ij} détaillées en appendice IV. Ces propriétés joueront un rôle crucial dans la simplification des formes des éléments de matrice traités numériquement. Elles contribueront à réduire le temps de calcul ainsi que l'espace mémoire nécessaire au stockage des 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 expression finale, les indices (-i) et (-j) indiquent respectivement le changement simultané de m_i en $-m_i$ et de m_j en $-m_j$.

Il est également essentiel de souligner que l'exploitation de ces propriétés de symétrie permet de diminuer le nombre d'éléments de matrice d'une manière numérique. Cela restreint également l'intervalle d'intégration sur z de $]-\infty, +\infty[$ à des valeurs $z > 0$ uniquement.

Si on écrit :

$$d_{ij} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{v} \quad (\text{IV.8})$$

Cela entraîne :

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

Considérons la définition de 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 basant sur les propriétés de symétrie des éléments $W_{ij}(z)$ (IV.7a-d), on peut déduire les caractéristiques suivantes pour la fonction G_{ij} :

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

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

ici G_{ij}^* représente la fonction conjuguée de G_{ij} .

En conséquence, l'expression (IV.9) se modifie comme suit :

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

Dans ce contexte, l'intervalle d'intégration $]-\infty, +\infty[$ est restreint à une intégration dans l'intervalle $[0, +\infty[$.

Compte tenu de la possibilité de définir une forme asymptotique plus simple de $W_{ij}(\rho, z)$, notée $W_{ij}^{as}(\rho, z)$ (voir appendice III), pour un paramètre d'impact ρ donné et des valeurs de z suffisamment grandes (avec z étant positif), le calcul de $G_{ij}(0, +\infty)$ devient simplifié. Nous avons subdivisé l'intervalle d'intégration sur z en deux parties : une partie

$[0, \tilde{z}_{ij}]$ aussi petite que possible, où l'intégration sur z est réalisée numériquement, et une autre partie $[\tilde{z}_{ij}, +\infty[$, où l'intégration est effectuée de manière analytique.

Dans le cas d'une transition considérée $j \rightarrow i$, il est possible de caractériser une région asymptotique en se basant sur 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 :

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

où

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

et

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

Nous rappelons que la fonction $G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij})$ est calculée d'une manière numérique, par contre la fonction $G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij})$ est calculée analytiquement (appendice V).

IV-2. Éléments de matrice de Born-II:

L'aspect le plus complexe du principe variationnel de Schwinger réside dans le calcul des éléments de matrice de second ordre, désignés par $(i|V G_T^+ V|j)$, et appelés éléments de type Born-II.

Pour décrire de manière appropriée les processus physiques, nous avons focalisé nos efforts sur une représentation appropriée de G_T^+ , une condition indispensable pour une évaluation précise des $(i|V G_T^+ V|j)$.

Le sous-espace des états générés par les bases $|i\rangle$ et $|j\rangle$ doit être soigneusement sélectionné pour une description adéquate des états de diffusion. Cependant, une représentation

inappropriée de l'opérateur G_T^+ entraîne des erreurs dans le calcul de ces éléments, provoquant une modification significative de l'amplitude de transition et, par conséquent, des altérations dans les prédictions physiques.

Conscients de ce défi, nous nous sommes attelés à développer une approche capable de décrire de manière appropriée les divers phénomènes physiques. Nous avons toutefois consacré tous nos efforts, aussi bien sur le plan analytique que numérique, pour parvenir à une représentation adéquate de G_T^+ et, par conséquent, améliorer l'évaluation des éléments matriciels de type Born-II.

Les calculs des éléments de matrice de Born-II impliquent le développement du propagateur de Green G_T^+ sur une série exhaustive de la cible $|v\rangle$, qui est constituée des états propres de l'opérateur hamiltonien H_T .

Il est possible de démontrer que l'opérateur iconal G_T^+ peut être exprimé selon la forme suivante (voir Appendice I) :

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

ici $\theta(z - z')$ représente la fonction d'Heaviside.

À présent, en incluant la forme (IV.18) de l'opérateur G_T^+ dans l'élément de matrice $(i|V G_T^+ V|j)$ et en incorporant les relations de fermeture, notamment pour les spectres discrets et du continuum :

$$\sum_v |v\rangle \langle v| = 1 \quad \text{et} \quad \int dv |v\rangle \langle v| = 1 \quad (\text{IV.19})$$

nous pouvons alors écrire:

$$(i|V G_T^+ V|j) = \int_v (i|V|v) \left(-\frac{i}{v} \right) \theta(z - z') (v|V|j) \quad (\text{IV.20})$$

Où \int_v explique la sommation sur tous les états discrets ainsi que ceux du continuum de la cible [1-5].

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

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

Le développement de l'expression (III.20), et la tenue en compte la propriété de la fonction θ telle que :

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

le terme $(i | V G_T^+ V | j)$ peut être s'exprimé avec les deux formes équivalentes suivantes :

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

ou

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

Sachant que les régions asymptotiques sont définis à l'aide des valeurs \tilde{z}_{iv} et \tilde{z}_{vj} et on tient en compte l'expression (IV.14), deux cas peuvent être considérés :

- $\tilde{z}_{iv} > \tilde{z}_{vj}$: Il est plus aisé d'appliquer la relation (III.23) lors du calcul des éléments de la matrice $(i | V G_T^+ V | j)$. En effet, l'intégration par rapport à z est analytique au-delà de \tilde{z}_{vj} , ce qui signifie que dès que $z > \tilde{z}_{vj}$ est atteint, l'intégration double se simplifie en une intégrale simple.

- $\tilde{z}_{iv} < \tilde{z}_{vj}$: Dans cette situation, il est bénéfique d'opter pour la forme (IV.24). Il

est important de noter que l'exploitation des relations de symétrie de W_{ij} (IV.7a-d) ainsi que des éléments $(i | V G_T^+ V | j)$ déterminés dans l'appendice IV nous autorise à revenir à la forme (IV.23). Par conséquent, nous pouvons élaborer un programme de traitement numérique unique dans le but de calculer les éléments de la matrice.

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

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

avec:

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

ou sous une autre écriture:

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

À présent, en exploitant les propriétés de symétrie de W_{ij} et également celles de la fonction G_{ij} définie par l'expression (IV.10), nous sommes en mesure d'écrire (voir appendice IV) :

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

où

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

Avec H_{ij}^v exprimée par :

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

Ainsi, les intégrales de l'expression (IV.27) présenteront les trois caractéristiques suivantes :

- ✓ $H_{ij}^v(0, \tilde{z}_{vj})$ résulte d'une double intégration numérique.
- ✓ $H_{ij}^v(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv})$ résulte d'une simple intégration numérique.
- ✓ $H_{ij}^v(\tilde{z}_{iv}, +\infty)$ se simplifie en une expression analytique appelée $H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv})$, définie de la manière suivante :

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

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

Cette forme $H_{ij}^{v^{as}}(\bar{z}_{iv})$ est détaillée dans l'appendice V.

Il est crucial de souligner que pour des valeurs élevées de ν , le nombre quantique principal des états $| \nu \rangle$, les erreurs d'arrondi peuvent entraîner une instabilité de calcul. Afin de prendre en compte l'ensemble des états du spectre discret, nous avons exploré une méthode de développement en $\frac{1}{\nu^3}$, similaire à celle introduite par Bethe et Salpeter [6]. Cette approche nous permet de restreindre les calculs numériques à des états de Z relativement modestes, assurant ainsi la stabilité des résultats pour chaque paire d'états $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

Notre travail ne se limite pas aux états discrets, car nous avons étendu notre analyse à ceux du continuum. Par conséquent, il était nécessaire de déterminer précisément la région du continuum située au-dessus du seuil d'ionisation, contribuant effectivement. Cela implique la détermination de l'énergie, appelée énergie de coupure, au-delà de laquelle la contribution des états du continuum devient entièrement négligeable (voir chapitre V).

Selon R. Schakeshaft [7], B. Lasri en 1998 [3], et B. Lasri, M. Bouamoud, et R. Gayet [4], cette contribution du continuum est modeste, bien qu'elle ne puisse être totalement négligée.

Dans l'appendice VI, en se fondant sur le comportement de la fonction radiale $R_{\nu l}$ pour des valeurs élevées de ν avec l fixe et $\nu \gg 1$, il est démontré que peut être approximé par l'expression suivante :

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

ici A et B présentent des constantes liées aux $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

Pour des valeurs suffisamment grandes de ν , le terme exponentiel devient égal à 1 dans l'expression (IV-31), et par conséquent, la somme sur ν se simplifie comme suit :

$$\sum_{\nu=\nu_0}^{+\infty} H_{ij}^{\nu} = H_{ij}^{\nu_0} + A \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{I}{(\nu_0 + k)^3} + B \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{I}{(\nu_0 + k)^5} \quad (\text{IV.32})$$

où A et B sont constantes expliquées en détail dans l'appendice VI.

ν_0 : explique la valeur de ν à partir de laquelle les éléments H_{ij}^{ν} suivent la loi en ν^{-3} de l'expression (IV.30).

En se basant sur les fonctions zêta de Reimann $\zeta(3)$ et $\zeta(5)$, les sommations précédentes sur k peuvent être reformulées comme suit :

$$\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{(v_0 + k)^3} = \zeta(3) - \sum_{k=1}^{v_0} \frac{1}{k^3} \quad (\text{IV.33a})$$

$$\sum_{k=1}^{+\infty} \frac{1}{(v_0 + k)^5} = \zeta(5) - \sum_{k=1}^{v_0} \frac{1}{k^5} \quad (\text{IV.33b})$$

IV-3. Influence des états du continuum et effet des lois d'échelle :

IV-3.1. Introduction :

L'un de nos objectifs fondamentaux dans cette thèse est de discuter du rôle des états du continuum dans le mécanisme d'excitation et de mettre en évidence leur contribution aux sections efficaces totales d'excitation. Nous explorons également l'influence des lois d'échelle, qui permettent de simplifier l'étude des processus de collisions de type ion-atome en une collision bien plus simple de type proton-atome d'hydrogène, avec un paramètre d'impact réduit et une vitesse réduite. Cette approche nous a permis de simplifier considérablement l'ensemble des calculs, comme il est détaillé dans la partie V-4. Il est important de souligner également que les propriétés de symétrie des éléments de matrice $(i|V|j)$ et $(i|V G_T^+ V|j)$, conjuguées avec leur réaction envers les charges respectives Z_p et Z_T du projectile et de la cible, ont significativement réduit le temps de calcul ainsi que l'utilisation de la mémoire.

IV-3.2. Contribution des états du continuum de la cible :

Dans le processus d'évaluation de $(i|V G_T^+ V|j)$, les termes de Born-II, définis par l'équation (IV.25), nécessitent impérativement une sommation sur une série infinie des états intermédiaires $|v\rangle$. En vue d'atteindre une évaluation exhaustive et précise de ces éléments matriciels, nous avons délibérément élargi notre approche au-delà des états discrets introduits précédemment par M. Bouamoud et R. Gayet en 1988 et 1989 [1][2], qui utilisaient cinq états de base. Nous avons entrepris une nouvelle extension en tenant compte de la contribution de l'ensemble du spectre discret de la série $\{|v\rangle\}$, ainsi que celui du continuum, qui avait été négligé dans la quasi-totalité des études antérieures. Toutefois, afin d'obtenir une représentation plus précise du propagateur (opérateur de Green G^+), nous avons élargi la base

sur laquelle ce dernier est développé, passant de 5 états à 10, puis à 14 états (1s, 2s, 2p₀, 2p₁, 2p₋₁, 3s, 3p₀, 3p₁, 3p₋₁, 3d₀, 3d₁, 3d₋₁, 3d₂, 3d₋₂). Cette expansion significative a abouti à une nette amélioration des résultats obtenus, comme en témoignent les travaux de B. Lasri en 1998 [3] et ceux de B. Lasri et al. en 2004 et 2006 [4][5].

Dans la plage d'énergie qui suscite notre intérêt, il devient nécessaire de déterminer précisément la région du continuum située au-dessus du seuil d'ionisation qui contribue de manière significative. Il est envisageable d'effectuer une extension et un prolongement analytique dans le continuum. Par conséquent, notre travail devrait principalement consister à déterminer l'énergie ε_ν , appelée énergie de coupure, c'est-à-dire celle après laquelle les contributions deviennent entièrement négligeables. Cependant, on anticipe que la contribution des états du continuum de la cible dans les sections efficaces totales d'excitation, bien que non négligeable, ne sera pas déterminante [3-5][6].

Afin de déterminer cette contribution, une forme approximative de la fonction d'onde radiale $R_{\nu l}(x)$ de $\varphi_\nu(\vec{x})$ a été utilisée, particulièrement pour de faibles valeurs de x , conformément à la proposition de Bethe et Salpeter en 1957 [7].

$$R_{\nu l}(x) \approx \nu^{-\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{2}{x}} J_{2l+1}(\sqrt{8x}) \quad (\text{IV.34})$$

Dans cette expression, ν , l et J_{2l+1} représentent respectivement le nombre quantique principal, le nombre quantique azimutal, et la fonction de Bessel régulière d'ordre $2l+1$.

En partant de l'équation (IV.4), il devient évident que pour des valeurs élevées de ν , la contribution principale à $W_{i\nu}(\vec{\rho}, z)$ et $W_{j\nu}(\vec{\rho}, z)$ provient des petites valeurs de x , car $\varphi_i(\vec{x})$ et $\varphi_j(\vec{x})$ représentent les états liés les plus bas. Par conséquent, pour des valeurs de ν suffisamment élevées, il est plus judicieux d'utiliser l'expression (V.1) pour calculer H_{ij}^ν .

D'autre part, cette même expression montre que $R_{\nu l}(x)$ dépend de ν seulement par un facteur de normalisation. Donc, pour une valeur donnée de l , il doit y avoir une valeur ν_0 tel que l'on peut écrire pour $\nu \geq \nu_0$: Par ailleurs, la même expression révèle que $R_{\nu l}(x)$ dépend de ν uniquement par un facteur de normalisation. Ainsi, pour une valeur donnée de l , il doit exister une valeur ν_0 telle que l'on puisse écrire pour $\nu \geq \nu_0$:

$$H_{ij}^{(v,l)} \approx \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 H_{ij}^{(v_0,l)} \quad (\text{IV.35})$$

il convient de rappeler que les éléments de second ordre peuvent être écrits formellement de la manière suivante :

$$\left(i | V G_T^+ V | j \right) = \left(-\frac{i}{v} \right) \left[\sum \right]_{\nu} H_{ij}^{\nu} \quad (\text{IV.36})$$

Sachant que les états intermédiaires hydrogénéoides $|v\rangle$ sont expliqués à l'aide de leurs nombres quantiques habituels (v, l, m) et (k, l, m) respectivement, pour les états discrets et les états du continuum.

$$H_{ij}^{\nu} = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i \frac{\epsilon_i - \epsilon_v}{v} z} W_{i\nu}(\rho, z) \int_{-\infty}^z dz' e^{i \frac{\epsilon_v - \epsilon_j}{v} z'} W_{\nu j}(\rho, z') \quad (\text{IV.37})$$

Effectivement, la contribution du continuum peut être évaluée grâce à une continuation analytique.

Pour passer de la fonction d'onde radiale $R_{\nu l}$ à la fonction d'onde du continuum R_{kl} , il sera simplement nécessaire d'utiliser le passage suivant [7][8]:

$$v = \frac{Z}{ik} \quad (\text{IV.38})$$

Avec k représente l'impulsion de l'électron dans le continuum de la cible.

En effectuant cette substitution de variable, il est possible de démontrer que la relation entre la fonction d'onde radiale discrète $R_{\nu l}$ et la fonction d'onde radiale continue R_{kl} s'exprime comme suit :

$$R_{\nu l} = \frac{-k}{\sqrt{i}} \sqrt{\left(1 - e^{-\frac{2\pi}{k}} \right)} R_{kl} \quad (\text{IV.39})$$

ici $R_{\nu l}, R_{kl}$ sont présentées respectivement par :

$$\begin{cases} R_{vl} = \frac{2}{n^{l+2}(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} (2r)^l e^{-\frac{r}{n}} F\left(-n+l+1; 2l+2; \frac{2r}{n}\right) \\ R_{kl} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \frac{e^{\frac{z}{2k}}}{(2l+1)!} \left| \Gamma\left(l+1 - \frac{i}{k}\right) \right| (2kr)^l F\left(\frac{i}{k}+l+1; 2l+2; 2ikr\right) \end{cases} \quad (\text{IV.40})$$

Ainsi, la détermination de W_{ij} dans le contexte continu peut être formulée de la manière suivante :

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_c(\vec{x}) \quad (\text{IV.41})$$

$\varphi_i(\vec{x})$: états liés hydrogéoïdes.

$\varphi_c(\vec{x})$: états du continuum hydrogéoïdes.

Il n'est pas nécessaire d'ajouter davantage de détails ici. Cependant, écrivons l'équation (V.3) de manière plus précise et explicite :

$$\left(i \left| V G_T^+ V \right| j \right) = \left(-\frac{i}{v} \right) \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \left[\sum_{\nu=l+1}^{+\infty} H_{ij}^{(\nu, l, m)} + \int_0^{+\infty} d\gamma H_{ij}^{(\gamma, l, m)} \right] \quad (\text{IV.42})$$

Dans cette expression, m représente le nombre magnétique conventionnel, et γ est une variable continue directement liée à l'énergie de l'électron de la cible dans le continuum.

Il reste à définir la variable γ dans le contexte d'une extension analytique qui associe, au nombre quantique principal ν , l'impulsion k .

D'après Landau et Lifshitz [8], les éléments $H_{ij}^{(\gamma, l, m)}$ du continuum peuvent être obtenus à partir des éléments $H_{ij}^{(\nu, l, m)}$ du spectre discret en remplaçant ν par $\gamma = \frac{Z_T}{ik}$ dans les éléments $H_{ij}^{(\nu, l, m)}$ obtenus pour ν grand. Ici, $\gamma = 0$ représente le seuil d'ionisation. Cherchons alors comment faire le prolongement analytique de la somme sur le spectre discret vers celle sur le spectre continu.

En utilisant l'équation (IV.35), on peut simplifier la sommation sur ν dans l'équation (IV.42):

$$: \sum_{\nu=l+1}^{+\infty} H_{ij}^{(\nu,l,m)} \approx \sum_{\nu=l+1}^{\nu_0} H_{ij}^{(\nu,l,m)} + \nu_0^3 H_{ij}^{(\nu_0,l,m)} \sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} \frac{1}{\nu^3} \quad (\text{IV.43})$$

Dans les applications antérieures de la méthode variationnelle, l'évaluation des éléments matriciels $(i|VG_T^+V|j)$ était restreinte à l'ensemble du spectre discret en se fondant sur la relation (V.10), en prenant ν_0 suffisamment élevée pour garantir d'excellents résultats.

Même si l'on anticipe des contributions minimales du spectre de continuum, aucune indication claire n'est fournie à ce sujet. Pour mieux comprendre la nature de ces contributions potentielles, on examinera d'abord un intervalle du continuum autour du seuil d'ionisation. Le comportement de $H_{ij}^{(k,l)}$ légèrement au-dessus de ce seuil peut effectivement être évalué en utilisant une extension analytique du comportement de $H_{ij}^{(\nu,l)}$ pour des états de Rydberg. Dans ce cas particulier (Landau et Lifshitz, 1967) [8], cette extension analytique implique de remplacer ν par $\frac{Z_T}{ik}$ dans l'expression (IV.35), avec $Z_T = 1$.

À présent, examinons la contribution des états du continuum aux éléments de Born-II $(i|VG_T^+V|j)$ dans un intervalle $[0, k_0]$ au-delà du seuil d'ionisation, où le prolongement analytique prend une importance accrue. La valeur de k_0 est directement liée à ν_0 selon la relation (IV.35).

La valeur de ν_0 est automatiquement déterminée par le code informatique, qui s'assure que la loi en ν^{-3} (équation IV.35) est valide pour $\nu \geq \nu_0$ avec une précision donnée.

La valeur de k_0 est déterminée de manière similaire. En réalité, au-delà de $k_0 = \frac{2}{i\nu_0}$, la contribution du continuum identifiée est moins notable que celle observée dans l'intervalle $[0, k_0]$.

Par la suite, la sommation sur le continuum à proximité du seuil d'ionisation peut être dérivée à partir de la somme englobant les états de Rydberg les plus élevés. Cette dernière peut être exprimée de la manière suivante :

$$\sum_{v=v_0}^{+\infty} H_{ij}^{(v,l,m)} \approx \sum_{v=v_0}^{+\infty} H_{ij}^{(v_0,l,m)} \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 \times \Delta v \approx H_{ij}^{(v_0,l,m)} \int_{v_0}^{+\infty} \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 dv \quad (\text{IV.44})$$

Le prolongement analytique nécessite le remplacement de v par $\frac{Z_T}{ik}$. Par conséquent, dv doit

être remplacé par $d\left(\frac{Z_T}{ik}\right) = -\frac{Z_T}{i} \frac{dk}{k^2}$. Le troisième terme de l'expression (IV.44), prolongé

vers le continuum, peut être exprimé comme suit :

$$H_{ij}^{(v_0,l,m)} \int_{v_0}^{+\infty} \left(\frac{v_0}{v} \right)^3 dv \rightarrow H_{ij}^{\left(\frac{Z_T,l,m}{ik_0}\right)} \int_{k_0}^0 \left(\frac{k}{k_0} \right)^3 \left(-\frac{Z_T}{i} \frac{dk}{k^2} \right) \quad (\text{IV.45})$$

Dans l'équation (IV.42), la sommation sur le continuum débute à partir de 0, représentant ainsi la limite lorsque $V \rightarrow +\infty$.

De ce fait, la somme sur l'étendue du continuum, où le prolongement analytique reste toujours valide, peut être simplifiée :

$$\int_0^{\gamma_0} d\gamma H_{ij}^{(\gamma,l,m)} \approx H_{ij}^{(v'_0,l,m)} \int_{+\infty}^{v'_0} \left(\frac{v'_0}{v} \right)^3 dv \approx -\frac{Z_T}{i} \frac{H_{ij}^{\left(\frac{Z_T,l,m}{ik_0}\right)}}{k_0^3} \int_0^{k_0} k dk = iZ_T \frac{H_{ij}^{\left(\frac{Z_T,l,m}{ik_0}\right)}}{2k_0} \quad (\text{IV.46})$$

Avec $(v'_0 = \frac{Z_T}{ik_0})$ correspond à γ_0

Étant donné qu'on anticipe une contribution du continuum dans la gamme $[0, k_0]$, il est plus pertinent d'explorer préalablement la contribution de ce dernier sur l'ensemble du spectre, où $v'_0 = \frac{Z_T}{ik_0}$.

Il est crucial de souligner que le coefficient du second membre de l'équation (IV.46) correspond au coefficient $-\frac{A}{Z_T^2}$. En d'autres termes, en partant de la formule (A.VI.13) de

l'appendice VI de la thèse, on peut parvenir à :

$$H_{ij}^v = \frac{1}{v^3} \text{Exp} \left\{ -\frac{l(l+1)(2l+1)}{6v^2} \right\} \left[A + \frac{B}{v^2} + \frac{C}{v^4} + \dots \right] \quad (\text{IV.47})$$

Pour les valeurs de $\nu \gg 1$, nous ne considérons ici que le premier terme, et l'exponentielle est ≈ 1 , à savoir :

$$H_{ij}^{(\nu,l,m)} \approx \frac{A}{\nu^3} \quad (\text{IV.48})$$

Le prolongement analytique donne alors :

$$H_{ij}^{\left(\frac{Z_T}{ik}, l, m\right)} \approx A \frac{(ik)^3}{Z_T^3} \quad (\text{IV.49})$$

En introduisant ce résultat dans le 3^{ème} membre de (IV.46), il vient donc :

$$\int_0^{\gamma_0} d\gamma H_{ji}^{(\gamma,l,m)} \approx iZ_T \frac{H_{ji}^{\left(\frac{Z_T}{ik_0}, l, m\right)}}{2k_0} = iZ_T \frac{A \left(\frac{ik_0}{Z_T}\right)^3}{2k_0} = \frac{A}{Z_T^2} \frac{k_0^2}{2} \quad (\text{IV.50})$$

L'importance de ce résultat réside dans le fait que la constante A peut être déterminée en suivant la procédure simple décrite dans l'équation (A.VI.15a). En négligeant le terme en $\frac{B}{\nu^5}$, on peut adopter une procédure encore plus simple. En se basant sur l'équation (8), on obtient alors pour $\nu > \nu_0$:

$$A \approx \frac{1}{\nu^3} H_{ij}^{(\nu,l,m)} \exp\left[\frac{l(l+1)(2l+1)}{6\nu^2}\right] \quad (\text{IV.51})$$

L'intégration sur l'ensemble du spectre continu, sans se restreindre au continuum proche du seuil d'ionisation, nécessitera l'utilisation d'une formule plus complexe. Cela est dû au fait que le prolongement analytique fonctionne uniquement lorsque k est suffisamment petit pour que A demeure une quasi-constante dans l'équation (IV.48).

IV-3.3. Méthode de Simpson et calcul des intégrales :

Dans notre analyse des sections efficaces totales de diffusion, nous avons opté pour la méthode d'intégration de Simpson lors du calcul des intégrales numériques. Cette approche implique une estimation de la fonction dans de petits intervalles en utilisant l'arc d'une parabole qui traverse les extrémités et le milieu de chaque intervalle. Cela implique de diviser l'intervalle d'intégration en sous-intervalles égaux de manière à ce que leur nombre soit pair.

Le recours à cette méthode est motivé par le fait que, en cas d'insuffisance de précision nécessitant l'augmentation du nombre d'intervalles, elle présente l'avantage de doubler le nombre d'intervalles, permettant ainsi la réutilisation des points déjà calculés.

Au cours de l'évaluation de la probabilité $P(\rho)$ représentée par $P(\rho) = |\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2$ pour différentes valeurs du paramètre d'impact ρ , nous avons constaté que sa contribution dans les sections efficaces totales, déterminées par l'expression (III.47), se limite à un intervalle de petits paramètres d'impact. Cela nous a conduit à restreindre à la détermination des intégrales sur ρ de $[0, +\infty[$ à un ρ_{\max} au-delà duquel la contribution devient négligeable. Cela nous conduit à formuler :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\rho)|^2 \quad (\text{IV.52})$$

se simplifie à :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{\rho_{\max}} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\rho)|^2 \quad (\text{IV.53})$$

Concernant l'excitation de l'atome d'hydrogène, la valeur estimée de ρ_{\max} est de 11.2 a.u.

Il convient de souligner que le temps de calcul ainsi que l'utilisation de la mémoire ont été réduits grâce aux propriétés de symétrie des éléments de matrice $(i|V|j)$ et $(i|V G_T^+ V|j)$, en plus de leur comportement vis-à-vis des charges respectives Z_P et Z_T du projectile et de la cible.

Dans la suite de notre démarche, conformément à notre modèle, nous démontrons que l'analyse d'un processus de collisions de type ion-atome (ion Projectile de charge Z_P) et (Cible Hydrogénoïde de charge Z_T) peut toujours être ramenée à la collision d'un proton avec un atome d'hydrogène, caractérisé par un paramètre d'impact réduit et une vitesse réduite. Cette simplification a considérablement allégé l'ensemble des calculs.

IV-3.4. Lois d'échelle :

IV-3.4.1. Lois d'échelle sur la charge ZP :

En substituant les états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $|\psi_\beta^-\rangle$ par les états initial et final $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ et dans une démarche de simplification, nous considérerons l'amplitude de transition de Schwinger-Born $a_{\beta\alpha}^{SB}(\vec{\rho})$, telle que définie par la relation (III.25), qui s'exprime comme suit :

$$a_{\beta\alpha}^{SB}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{v}\right)(\beta|V|\alpha)\left(-\frac{i}{v}\right)(\beta|V|\alpha)}{\left(-\frac{i}{v}\right)(\beta|V-VG_T^+V|\alpha)} \quad (\text{IV.54})$$

Ici, V représente le seul potentiel responsable de la transition, défini par :

$$V = Z_p \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \right) \quad (\text{IV.55})$$

Dans cette configuration, il est notable que seul le potentiel V dépend de la charge Z_p du projectile. Par conséquent, nous pouvons dériver, à partir de la relation (IV.55), les relations de proportionnalité suivantes :

$$(\beta|V|\alpha) \propto Z_p \quad (\text{IV.56a})$$

$$(\beta|VG_T^+V|\alpha) \propto Z_p^2 \quad (\text{IV.56b})$$

Ces relations nous offrent le comportement asymptotique suivant :

$$\left(\beta|V-VG_T^+V|\alpha\right)_{Z_p \rightarrow +\infty} \propto Z_p^2 \quad (\text{IV.56c})$$

soit pour l'amplitude $a_{\beta\alpha}^{SB}(\vec{\rho})$ (III.49) :

$$a_{\beta\alpha}^{SB}(\vec{\rho})_{Z_p \rightarrow +\infty} \propto C^{ste} \quad (\text{IV.57})$$

et par conséquent, il en résulte pour l'amplitude de Schwinger $T_{\beta\alpha}$:

$$T_{\beta\alpha}_{Z_p \rightarrow +\infty} \propto C^{ste} \quad (\text{IV.58})$$

En résumé, les lois d'échelle énoncées précédemment par les expressions (IV.56a,b) concernant Z_p représentent un avantage majeur du principe variationnel de Schwinger. Elles offrent la possibilité, lors de l'investigation de l'excitation d'une cible chargée par des projectiles de charge variée, de dériver tous les résultats à partir du calcul des éléments de matrice pour une charge spécifique Z_p .

De plus, en se basant sur la relation (IV.53), on observe que $\tilde{\alpha}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ converge vers une valeur finie indépendante de Z_p lorsque $Z_p \rightarrow +\infty$. Ce phénomène est connu sous le nom de saturation de la section efficace totale d'excitation, et il n'a pas été prédit par d'autres modèles jusqu'à présents [1-5].

IV-3.4.2. Lois d'échelle sur la charge ZT :

Au début il faut noter que l'élément de matrice de Born-I ($i|V|j$) et Born-II ($i|V G_T^+ V|j$) donnés respectivement par les expressions (IV.5) et (IV.23), (IV.24) dépendent des éléments W_{ij} donnés par la relation (IV.5). Il est important de souligner initialement que les éléments de matrice de Born-I ($i|V|j$) et Born-II ($i|V G_T^+ V|j$), déterminés respectivement par les expressions (IV.5) et (IV.23), (IV.24), dépendent des éléments W_{ij} définis par la relation (IV.5).

Dans le cas d'une collision entre un projectile de charge $Z_p=1$ avec une cible de charge Z_T les éléments W_{ij} se mettent comme suit : Pour une collision entre un projectile de charge $Z_p=1$ et une cible de charge Z_T , les éléments W_{ij} s'expriment de la manière suivante :

$$W_{ij}(Z_T, \vec{R}) = \int d\vec{x} \phi_i^{Z_T}(\vec{x}) \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \right) \phi_j^{Z_T}(\vec{x}) \quad (\text{IV.59})$$

Avec $\phi_j^{Z_T}(\vec{x})$ représente les fonctions hydrogénoïdes (AIV.3a).

En effectuant le changement de variable suivant:

$$\vec{y} = Z_T \vec{x} \quad (\text{IV.60})$$

Les éléments $W_{ij}(Z, \vec{R})$ peuvent être exprimés de la manière suivante :

$$W_{ij}(Z, \vec{R}) = Z_T W_{ij}(1, Z_T \vec{R}) \quad (\text{IV.61})$$

Avec

$$W_{ij}(1, Z_T \vec{R}) = \int d\vec{y} \varphi_i^{H^*}(\vec{y}) \left[\frac{1}{Z_T R} - \frac{1}{Z_T \vec{R} - \vec{y}} \right] \varphi_j^H(\vec{y}) \quad (\text{IV.62})$$

Et

$$\varphi_k^H(\vec{y}) = \varphi_k^1(\vec{y}) (k=i, j) \quad (\text{IV.63})$$

représentant l'atome d'hydrogène.

Dans la suite, par souci de commodité, nous nous sommes directement penchés sur l'amplitude de transition approximée $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, définie par l'équation (III.39).

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

$$B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, Z_T; v; \vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v} \right) Z_T \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i \frac{Z_T}{v} (\varepsilon_\beta^H - \varepsilon_\alpha^H) Z_T z} W_{\beta\alpha}(1, Z_T \vec{R}) \quad (\text{IV.64})$$

ici ε_β^H et ε_α^H représentent les énergies propres de l'atome d'hydrogène.

En introduisant les coordonnées réduites suivantes :

$$u = \frac{v}{Z_T} \quad (\text{IV.65a})$$

$$\vec{\xi} = Z_T \vec{z} \quad (\text{IV.65b})$$

$$\vec{\gamma} = Z_T \vec{\rho} \quad (\text{IV.65c})$$

$$\vec{\mathfrak{R}} = Z_T \vec{R} = \vec{\gamma} + \vec{\xi} \quad (\text{IV.65d})$$

on aura:

$$B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, Z_T; v; \vec{\rho}) = \frac{1}{Z_T} B_{\beta\alpha}^{[1]}(1, 1; u; \vec{\gamma}) \quad (\text{IV.66})$$

où

$$B_{\beta\alpha}^{[[1]]}(1,1;u;\vec{\gamma}) = -\frac{i}{u} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{i\frac{e_\beta^H - e_\alpha^H}{u}\xi} W_{\beta\alpha}(1, \vec{R}) \quad (\text{IV.67})$$

À présent, en utilisant les expressions (IV.23), (IV.24) et (IV.66), nous pouvons déduire que le terme de Born-II, noté $-\frac{i}{v}(\beta|V G_T^+ V|\alpha)$, prendra la forme :

$$B_{\beta\alpha}^{[[2]]}(1, Z_T, v, \vec{\rho}) = \frac{1}{Z_T^2} B_{\beta\alpha}^{[[2]]}(1,1,u,\vec{\gamma}) \quad (\text{IV.68})$$

En conclusion, en appliquant les lois d'échelle concernant Z_P (IV.56a-b) et Z_T (IV.66) aux termes du développement de Born, nous pouvons énoncer la règle générale suivante :

$$B_{\beta\alpha}^{[[k]]}(Z_P, Z_T, v, \vec{\rho}) = Z_P^k B_{\beta\alpha}^{[[2]]}(1, Z_T, v, \vec{\gamma}) \quad (\text{IV.69a})$$

$$B_{\beta\alpha}^{[[k]]}(Z_P, Z_T, v, \vec{\rho}) = \left(\frac{Z_P}{Z_T}\right)^k B_{\beta\alpha}^{[[2]]}\left(1, 1, \frac{v}{Z_T}, \vec{\gamma}\right) \quad (\text{IV.69b})$$

Dans cette expression, k correspond à l'ordre $k^{\text{ème}}$ du développement de la série de Born pour l'amplitude de transition.

En conséquence, l'élément de matrice D_{ij} s'exprime comme suit :

$$D_{ij}(\vec{\rho}) = Z_P B_{ij}^{[[1]]}(1, Z_T, v, \rho) - Z_P^2 B_{ij}^{[[2]]}(1, Z_T, v, \rho) \quad (\text{IV.70})$$

Par conséquent, pour examiner l'excitation d'une cible hydrogénoïde de charge nucléaire Z_T par un projectile de charge Z_P , il est simplement nécessaire de réaliser les calculs de l'amplitude de transition $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ pour une collision entre un proton et un atome d'hydrogène,

en utilisant la vitesse réduite $u = \frac{v}{Z_T}$ et le paramètre d'impact réduit $\gamma = Z_T \rho$.

Remarque

En se basant sur les deux relations mentionnées précédemment, formulées dans les expressions (IV.10) et (IV.13), l'amplitude de Schwinger-Born, représentée par l'expression (IV.54), se présente de la manière suivante :

$$a_{\beta\alpha}^{SB}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \frac{[G_{\beta\alpha}(-\infty, +\infty)]^2}{G_{\beta\alpha}(-\infty, +\infty) + \left(\frac{i}{v}\right) \left[\sum_{\nu} \left| H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) \right| \right]} \quad (\text{IV.71})$$

De manière similaire, en appliquant les lois d'échelle sur Z_P et Z_T évoquées précédemment par les expressions (IV.68, 69a,b), nous obtenons :

$$a_{\beta\alpha}^{SB}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right) \frac{\left[\mathbf{B}_{\beta\alpha}^{[[1]]} \left(1, 1, \frac{v}{Z_T}; Z_T \vec{\rho} \right) \right]^2}{\frac{Z_T}{Z_P} \mathbf{B}_{\beta\alpha}^{[[1]]} \left(1, 1, \frac{v}{Z_T}; Z_T \vec{\rho} \right) - \mathbf{B}_{\beta\alpha}^{[[2]]} \left(1, 1, \frac{v}{Z_T}; Z_T \vec{\rho} \right)} \quad (\text{IV.72})$$

G_{ij} est issu d'une intégration sur z dans un intervalle infini, rendue possible par la division de cet intervalle en deux. L'un de ces intervalles est choisi aussi petit que possible, facilitant ainsi l'évaluation numérique de l'intégrale. De manière similaire, les intégrations sur z et z' conduisant à H_{ij}^v ont été effectuées en divisant l'intervalle $[0, +\infty[$ en trois parties. Seuls les premiers intervalles nécessitent une intégration double numérique.

CHAPITRE V

Chapitre V

Résultats et discussions :

Les méthodes variationnelles qui reposent sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger apparaissent comme un outil extrêmement efficace pour simplifier l'analyse perturbative dans l'étude des processus d'excitation directe des atomes par collision avec des ions à des énergies intermédiaires. En outre, cette méthode s'est avérée hautement efficace pour prédire les sections efficaces d'excitation directe des ions lithium (Li^{2+}) et béryllium (Be^{3+}) de type hydrogène (H^+) suite à l'impact de protons dans la gamme d'énergie comprise entre 16 et 4000 keV/u. Ces caractéristiques sont démontrés par une bonne concordance entre nos résultats théoriques, lorsque la fonction d'onde est représentée de manière adéquate (utilisant 5, 10 et 14 états), et les calculs théoriques disponibles obtenus via la méthode du couplage étroit. Cela inclut des approches telles que l'expansion orbitale atomique à deux centres (TCAO) d'Ermolaev et al., l'expansion à centre unique (SCE) de Hall et al., ainsi que les sections efficaces couplées de Sturmian de Winter et al.

Au fil des dernières décennies, il y a eu une exploration approfondie des sections efficaces de collision atomique à différentes énergies d'impact. Récemment, l'émergence d'expériences en physique nucléaire et biologique utilisant des faisceaux d'ions hautement chargés produits par des accélérateurs a marqué une nouvelle orientation dans le domaine de la physique des collisions atomiques.

L'intérêt des chercheurs dans le domaine de la fusion thermonucléaire impliquant la collision entre un proton et les ions lithium Li^{2+} et béryllium Be^{3+} a connu une augmentation significative. D'un côté, l'ion lithium pourrait jouer un rôle crucial en tant que source de refroidissement dans les dispositifs de fusion à confinement magnétique qui intègrent une couche externe de lithium, ainsi que dans les dispositifs à arc de lithium. De plus, les plaquettes de lithium sont utilisées à des fins de diagnostic, notamment pour mesurer les températures des ions hydrogène au sein du plasma central après l'injection de rayonnement neutre [51,52,53]. Par ailleurs, l'ion béryllium Be^{3+} , présent parmi les impuretés dans les plasmas de tokamak, est reconnu pour sa capacité à neutraliser les protons énergétiques ($Z_p=1$) lorsqu'ils interagissent entre eux, générant ainsi un flux significatif d'hydrogène neutre au cœur du plasma [54,55,56].

Dans de multiples domaines de la physique, l'exploration des interactions lorsqu'une cible atomique et un projectile se rencontrent représente une méthode cruciale et distinctive pour approfondir notre compréhension de la structure des atomes et des molécules. Cette approche revêt une importance considérable à la fois sur le plan théorique et pratique, permettant la compréhension de nombreux phénomènes naturels, notamment dans les domaines de la physique des plasmas et de la fusion thermonucléaire. En astrophysique, des processus d'interaction simples tels que la capture, l'ionisation et l'excitation jouent un rôle crucial lors de la formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs [57,58].

Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, l'étude de l'ionisation et de l'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 entraîne l'émission de rayons X [59,60,61,62]. Le problème classique de la diffusion des protons à partir de l'état fondamental de l'hydrogène a souvent été utilisé comme système de référence pour les modèles théoriques.

Nous exposons dans cette étude les sections efficaces d'excitation directe de $\text{Be}^{3+}(1s)$ et $\text{Li}^{2+}(1s)$ vers les états $2s$, $2p$ et $n=2$ en utilisant deux approches d'expansion différentes. Pour l'excitation vers un état nl , notre première approche (pour Be^{3+}) est calculée en utilisant une base de deux états $\{1s, nl\}$ (nommée Schwinger-Born [8], abrégée Schw-B). La seconde approche (pour Li^{2+}) est calculée avec une base de 14 états (notée Schw1414) et une base de 05 états (notée Schw55) $\{1s, 2lm\}$ pour l'excitation $2l$, où $0 \leq l \leq n-1$ et $-l \leq m \leq l$.

Nous avons comparé nos résultats avec d'autres études. Pour Be^{3+} , nous avons confronté nos calculs théoriques avec ceux obtenus par la méthode TCAO de Ermolaev [63-64], utilisant une expansion à deux centres AO de 55 (notée TCAO-55), ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Winter (Coupled-Sturmian) [65]. Pour Li^{2+} , nous avons comparé nos calculs théoriques avec ceux obtenus par la méthode TCAO de Ermolaev [63-64] utilisant une expansion à deux centres AO de 32 et 59 (notées TCAO-32, TCAO-59), avec ceux de Hall et al. (SCE) (Single Centre Expansion) [66], ainsi qu'avec les résultats expérimentaux de Winter (Coupled-Sturmian) [65].

V.1- Excitation du Be^{+3} par l'énergie d'impact des protons:

Dans les figures (1, 2 et 3), nous exposons respectivement les sections efficaces d'excitation vers les états $2s$, $2p$ et $n=2$ pour Be^{3+} , sur une gamme d'énergies allant de 16 keV à 4 MeV.

Tableau 01 : Section efficaces d'excitation à l'état 2s (en 10^{-19} cm²) de l'ion Be³⁺ par impact de proton.

E(KeV)	Ermolaeva et al (TCAO-55) [14]	Born I	Born II	Schw-B	Schw1414	Coupled Sturmiian
16		0,346028	2,74827	0,132817	0,0791105	
30	0,364					
32		1,06491	4,50391	1,2833	0,581424	
40	0,962					
50	1,53					2,15
64		1,83446	5,28477	4,26526	1,65825	
75	2,76					
96		1,99832	4,8486	4,73572	2,15881	
100	3,34					4,12
150	3,18					3,81
160		1,84569	3,70852	3,73906	2,14294	
200	2,7					3,19
240		1,54894	2,7059	2,59549	1,82167	
300	2					
320		1,30877	2,08328	1,94007	1,53069	
400						1,76
480		0,985821	1,40504	1,29647	1,13222	
640		0,786795	1,04897	0,970315	0,887181	
800		0,653603	0,833001	0,774397	0,726043	
960		0,558611	0,6891	0,643981	0,613214	
1000						0,62
1280		0,432482	0,510448	0,481449	0,466692	
1600		0,352678	0,4045	0,384308	0,37613	
2240		0,257512	0,28519	0,27378	0,270625	
2560		0,226881	0,248272	0,239144	0,237157	
3200		0,183266	0,197318	0,191226	0,190246	
4000		0,147753	0,156901	0,152833	0,152399	

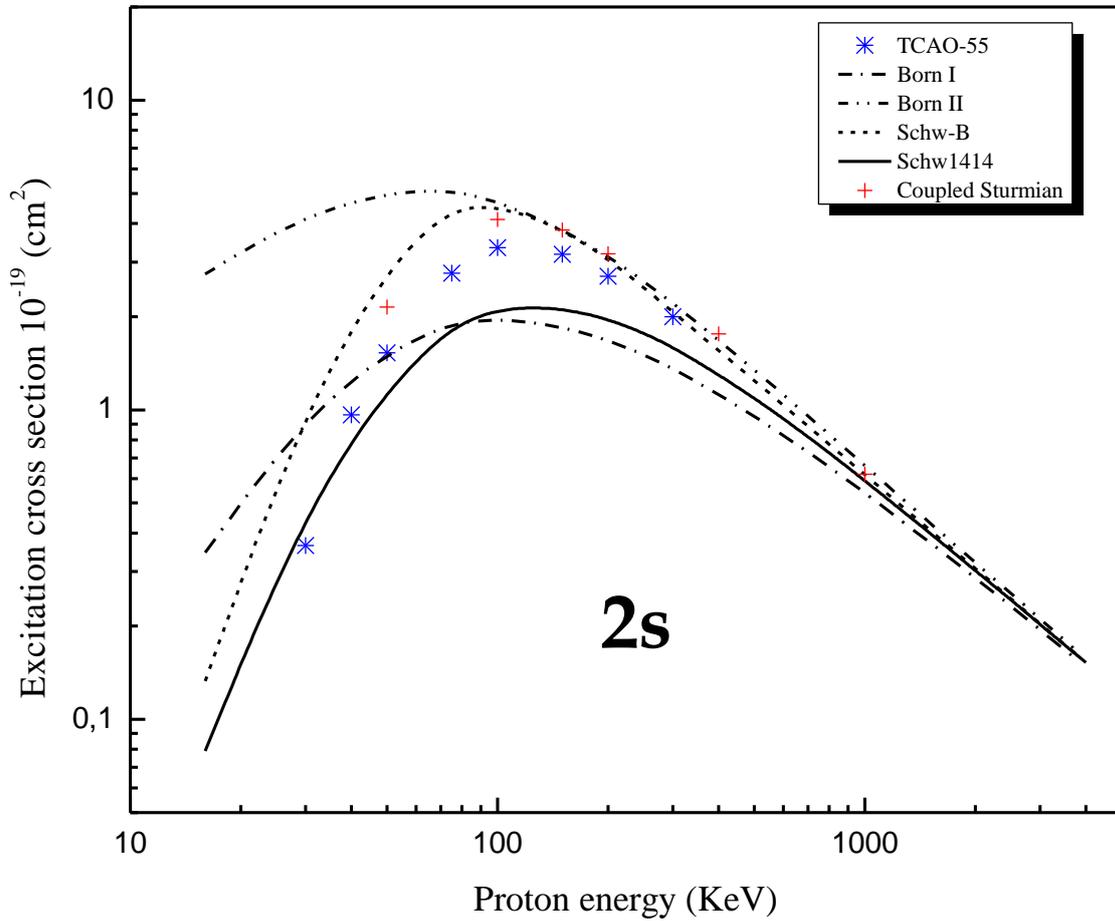


Fig.1 : Section efficace d'excitation du niveau 2s pour Be^{3+} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

La figure 1 montre que la section efficace de (TCAO-55, BornI, Schw1414) converge de 30.11 keV à 64 keV. À partir de 100 keV, et plus précisément à 99.6 keV (TCAO-55, Born II, Schw B, CoupledSturmian), les courbes convergent. Les six courbes sont proches les unes des autres à 303.25 keV. Dans la plage de valeurs inférieures à 30 keV, on observe une déviation notable de toutes les différentes courbes des sections efficaces (BornI, BornII, Schw-B, Schw1414, TCAO-55 et CoupledSturmian).

Tableau 02 : Section efficaces d'excitation à l'état 2p (en 10^{-19} cm²) de l'ion Be³⁺ par impact de proton.

E(KeV)	Ermolaeva et al (TCAO-55) [14]	Born I	Born II	Schw-B	Schw1414	Coupled Sturmian
16		0,1701164	1,343725	0,01215309	0,07778362	
30	0,094					
32		0,976607	1,815326	0,1948188	0,1562234	
40	0,267					
50	0,603					0,69
64		3,000138	2,514048	1,312647	0,890496	
75	1,85					
96		4,463908	3,61034	2,644192	1,983638	
100	3,06					3,32
150	4,66					4,98
160		5,91737	5,227314	4,539502	4,035838	
200	5,47					5,73
240		6,4486	6,03906	5,55139	5,22187	
300	5,96					
320		6,46663	6,20598	5,84062	5,61729	
400						5,98
480		6,08047	5,99615	5,77923	5,62474	
640		5,60216	5,58664	5,44502	5,32989	
800		5,16113	5,17486	5,07595	4,98708	
960		4,77542	4,802	4,72944	4,65824	
1000						4,64
1280		4,15047	4,18418	4,14084	4,09235	
1600		3,672	3,70478	3,67628	3,64117	
2240		2,990406	3,017098	3,002338	2,98178	
2560		2,738774	2,764951	2,753659	2,736514	
3200		2,346735	2,365712	2,358561	2,347341	
4000		1,99289	2,007588	2,00309	1,99543	

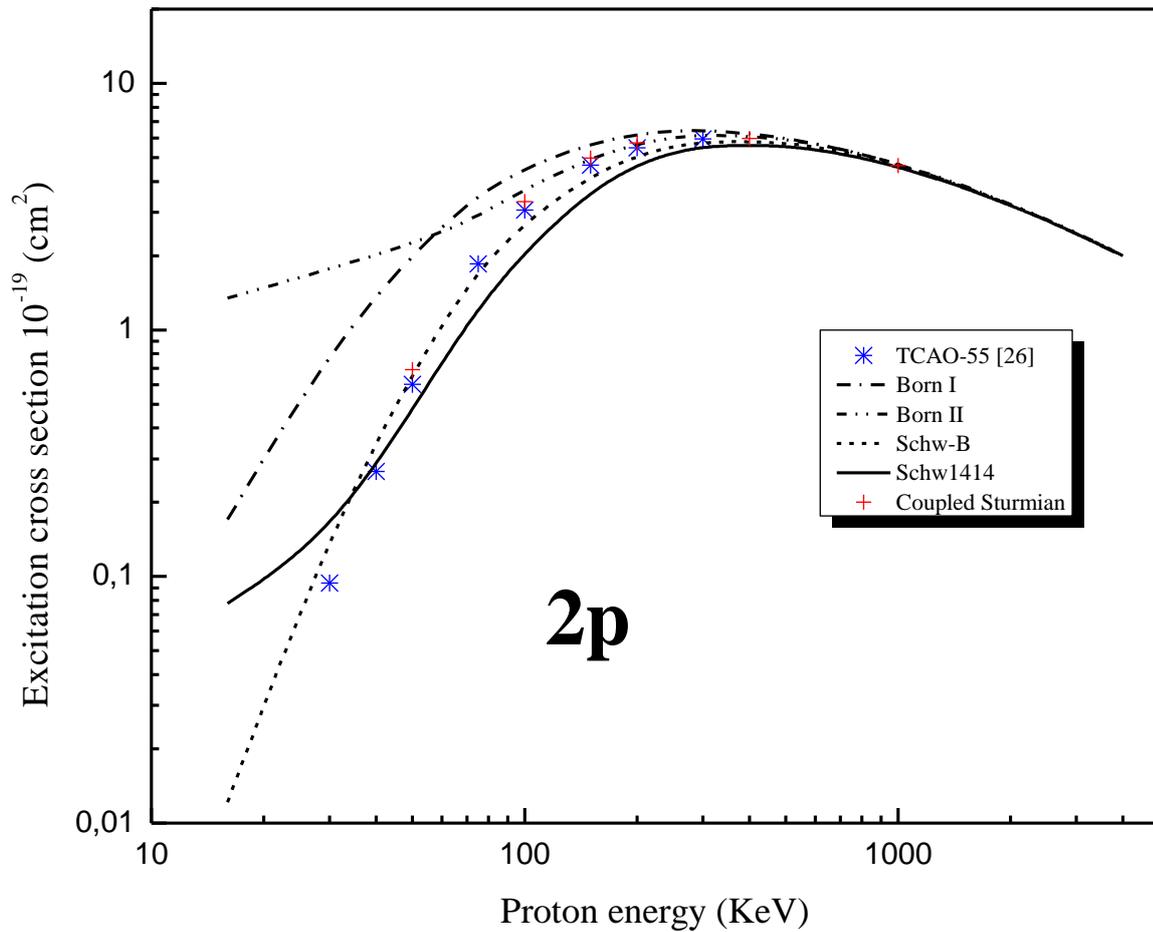


Fig. 2 : Section efficace d'excitation du niveau 2p pour Be^{3+} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

La figure 2 illustre que, à partir de 30 keV, les résultats de (TCAO-55 et Coupled Sturmian) concordent avec ceux de (Schw1414 et Schw-B), tandis que les résultats de BornI et BornII divergent de ceux de TCAO-55, Schw1414, Schw-B et CoupledSturmian entre 16 et 150 keV. Cependant, les six courbes convergeront et se rapprocheront les unes des autres sur l'ensemble de l'intervalle d'énergie intermédiaire restant.

Tableau03 : Section efficaces d'excitation à l'état n=2 (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Be^{3+} par impact de proton.

E(KeV)	Ermolaeva et al (TCAO-55) [14]	Born I	Born II	Schw-B	Schw1414	Coupled Sturmian
16		0,516144	4,091995	0,14497	0,156894	
30	0,458					
32		2,041517	6,319236	1,478119	0,737647	
40	1,229					
50	2,133					2,84
64		4,834598	7,798818	5,577907	2,548746	
75	4,61					
96		6,462228	8,45894	7,379912	4,142448	
100	6,4					7,44
150	7,84					8,79
160		7,76306	8,935834	8,278562	6,178778	
200	8,17					8,92
240		7,99754	8,74496	8,14688	7,04354	
300	7,96					
320		7,7754	8,28926	7,78069	7,14798	
400						7,74
480		7,066291	7,40119	7,0757	6,75696	
640		6,388955	6,63561	6,415335	6,217071	
800		5,814733	6,007861	5,850347	5,713123	
960		5,334031	5,4911	5,373421	5,271454	
1000						5,26
1280		4,582952	4,694628	4,622289	4,559042	
1600		4,024678	4,10928	4,060588	4,0173	
2240		3,247918	3,302288	3,276118	3,252405	
2560		2,965655	3,013223	2,992803	2,973671	
3200		2,530001	2,56303	2,549787	2,537587	
4000		2,140643	2,164489	2,155923	2,147829	

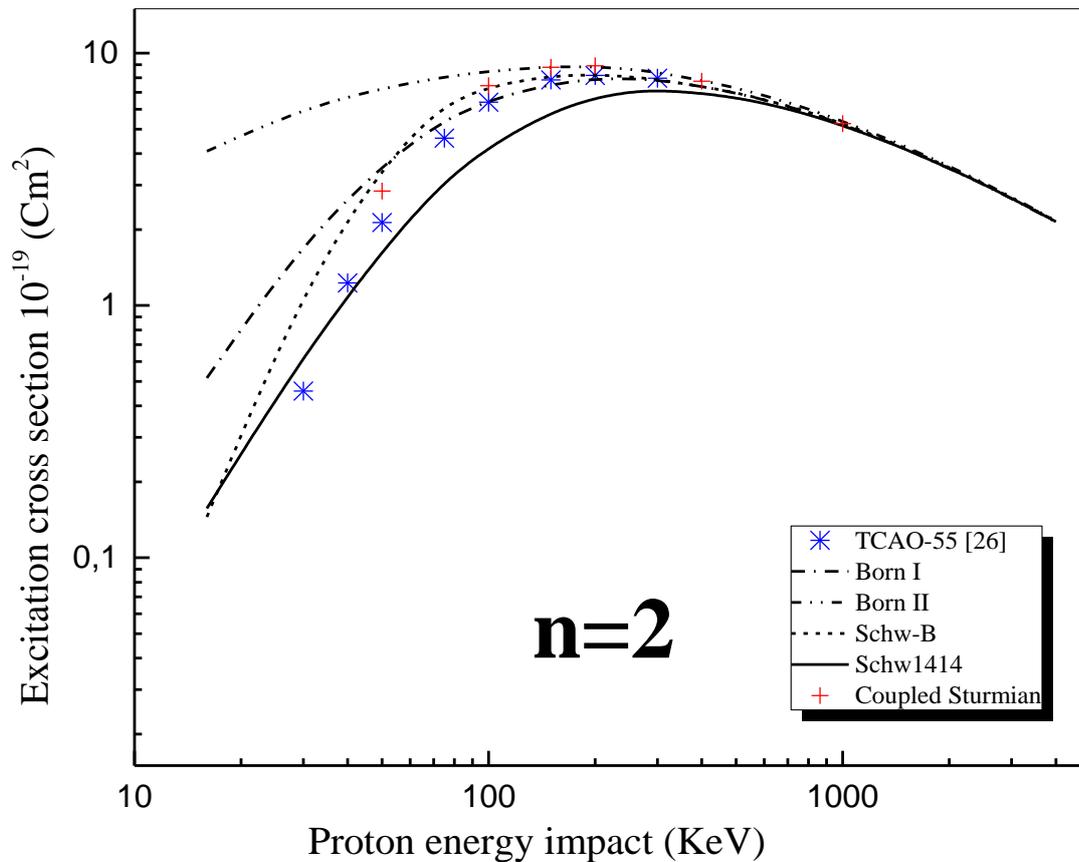


Fig. 3 : Section efficace d'excitation de l'état $n=2$ pour Be^{3+} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Dans la Figure 3, les résultats de notre modèle, ainsi que ceux de BornI, SchwB et Schw1414, montrent une proximité avec les prédictions théoriques d'Ermolaev et les données expérimentales de Winter à partir de l'énergie de 74,17 keV. À partir de 100 keV, les quatre courbes se superposent sur l'ensemble de la plage d'énergies restante, soulignant une concordance. Toutefois, nous avons observé une divergence des résultats du modèle BornII sur toute la plage d'énergies.

V.2- Excitation du Li^{+2} par l'énergie d'impact des protons :

Tableau 04 : Section efficaces d'excitation à l'état 2s (en 10^{-19} cm^2) de l'ion Li^{2+} par impact de proton.

E(KeV)	Ermolaev et al (TCAO-32) [14]	Ermolaev et al (TCAO-59) [14]	Hall et al (SCE) (FHBS) [15]	Born I	Born II	Schw-B	Schwi 55	Schw14 14	Coupl e d Sturmi an
9				1,09362	13,4928	0,291888		0,17865	
17.5	0,56								0,6
18				3,36566	20,4983	3,19917		1,42311	
30	5,9	4,95	5,83						6,2
36				5,79781	23,0001	16,0712		4,36	
40			10,4						
50	11,25	9,82							13,3
54				6,31567	20,3658	22,6539	6,0512	5,99	
60			13,9						
80			13,5						
87,5	12,7	10,7							
90				5,83329	14,771	16,8128	6,11	6,40400	
100	12	10,1	12,1						12,2
108							5,6229		
125			10,2						10,2
135				4,89543	10,3618	10,9344	4,8475	5,58548	
150	8,42	7,93	8,65						
180				4,13636	7,7654	7,38169		4,76321	
200	5,95	5,89	6,48						6,6
225							3,6517		
250			5,11						
270				3,11568	5,06131	4,55586	3,2555	3,58181	
300			4,21						
360				2,48666	3,69728	3,29589	2,64	2,82313	

400	2,85	3	3,08						3,2
450				2,06571	2,89154	2,5822	2,2269	2,31376	
500			2,42						
540				1,76549	2,36496	2,1228	1,8758	1,95412	
600	1,91	1,98	1,98						2
720				1,36686	1,72419	1,56617		1,48571	
800		1,42							
900				1,11464	1,35186	1,24107	1,12	1,19651	
1000	1,11	1,12							1.1
1260				0,81386	0,94041	0,877413		0,86005	
1440				0,71705	0,81493	0,764482		0,75363	
1800				0,57921	0,64344	0,609681	0,6005	0,60397	
2000	0,54	0,56							
2250				0,46697	0,50879	0,486211		0,48351	
3000		0,37							

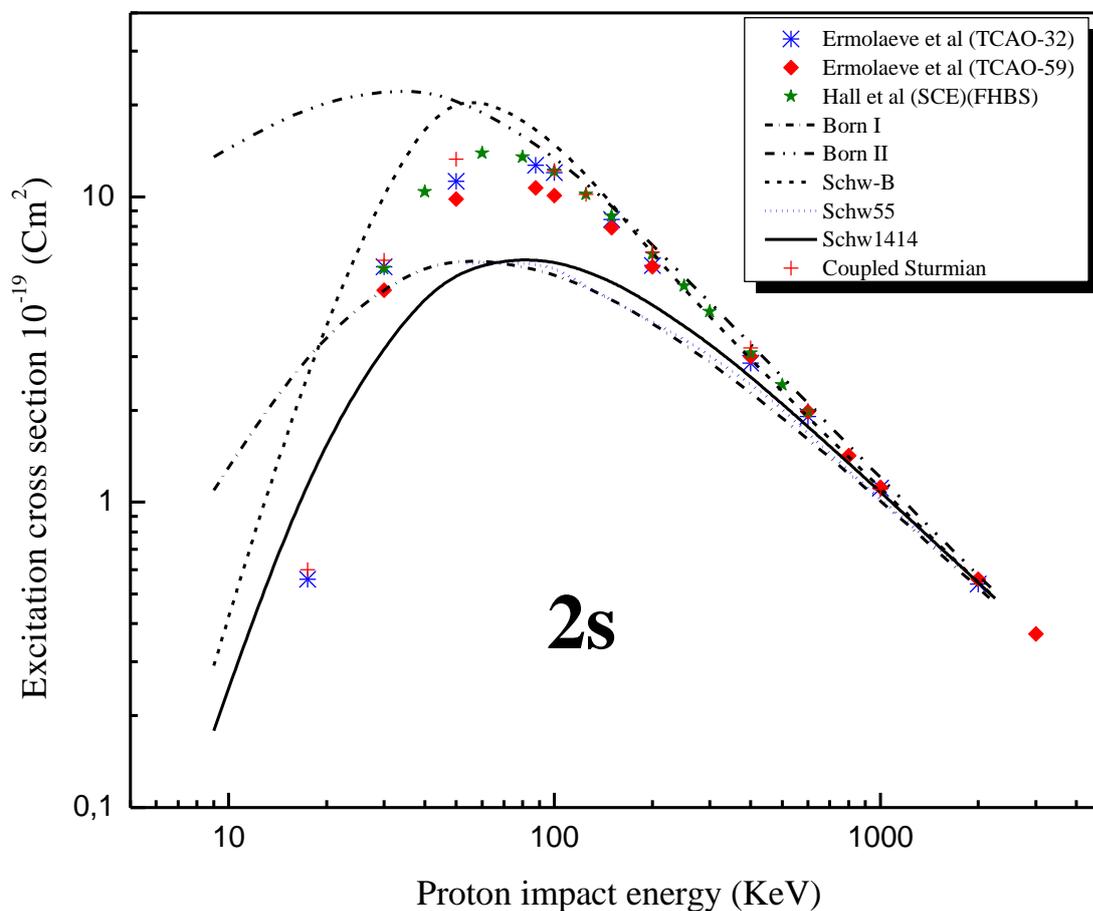


Fig. 4 : Section efficace d'excitation du niveau 2s pour Li^{+2} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Dans la Figure 4, la section efficace d'excitation de Li^{+2} est représentée en fonction de l'énergie d'impact des protons. Entre 0 et 30 keV, les neuf courbes présentent des divergences significatives. Cependant, à partir de 88,74 keV, les résultats de nos modèles pour SchwB et BornII convergent vers les résultats théoriques et expérimentaux antérieurs. De plus, à partir de 362,97 keV ($2,79 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$), les résultats de notre modèle pour BornI Schw1414 suivent le même schéma que ceux de SchwB et BornII, se rapprochant des résultats théoriques et expérimentaux précédents.

Tableau 05 : Section efficaces d'excitation à l'état 2p (en 10^{-19} cm²) de l'ion Li²⁺ par impact de proton.

E (KeV)	Ermolaev et al (TCAO-32) [14]	Ermolaev et al (TCAO-59) [14]	Hall et al (SCE) (FHBS) [15]	Born I	Born II	Schw-B	Schw55	Schw1414	Coupled Sturmiann
9				0,537651	8,34012			0,3053526	
17,5	0,46								0,54
18				3,08655		0,44783		0,5180892	
30	2,01	2,18	1,67						2,3
36				9,4819	11,1427	3,45272		2,036044	
40			3,85						
50	6,61	6,35							7,3
54				14,1082	13,1328	7,38935	3,81	4,412446	
60			8,79						
80			12,4						
87,5	14,3	13,6							
90				18,7	17,1924	13,435	6,996	9,89129	
100	15,4	15	14,7						15,3
108							9,33721		
125			16,6						16,9
135				20,3807	19,4278	16,8529	12,9722	14,2539	
150	16,5	17,9	17,5						
180				20,4378	19,8313	17,9184		16,1097	
200	17	18,3	18						18,1
225							16,822		
250			17,8						
270				19,2173	19,1053	17,9674	16,86	16,8587	
300			17,4						
360				17,7056	17,7838	17,0358	16,21	16,28903	
400	16,8	16,5	16,2						15,9
450				16,3117	16,4637	15,9379	15,36	15,399	
500			15						
540				15,0927	15,2709	14,8829	14,42	14,46935	
600	14,7	14,2	14						13,5
720				13,1176	13,2972	13,0632		12,79353	
800		12,4							
900				11,6054	11,7675	11,6126	11,1	11,42088	
1000	11,4	11							11
1260				9,45118	9,5758	9,49483		9,38291	
1440				8,65587	8,77545	8,71326		8,61645	
1800				7,41684	7,50266	7,46312	7,37019	7,40186	

2000	7,47	7,32						
2250				6,29852	6,36414	6,33918		6,29732
3000		5,66						

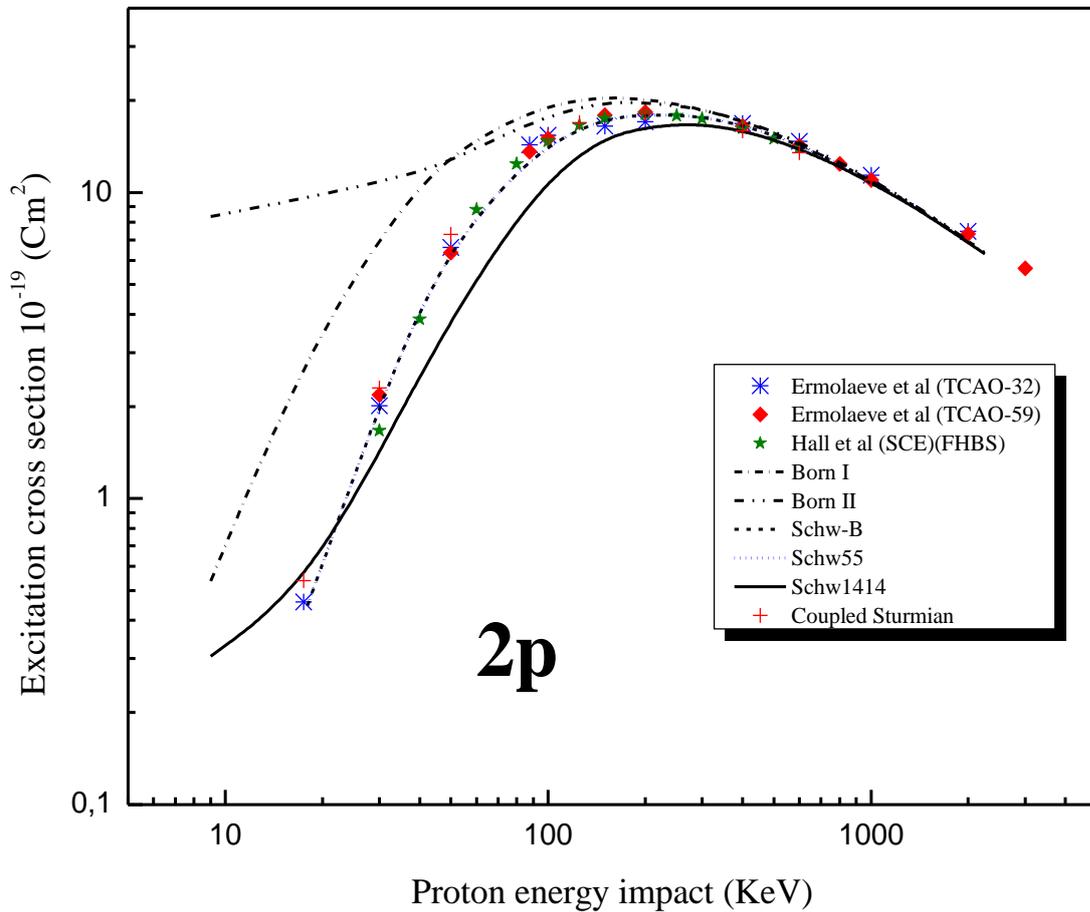


Fig. 5 : Section efficace d'excitation du niveau 2p pour Li^{+2} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Dans la Figure 5, la section efficace d'excitation est présentée en fonction de l'énergie d'impact des protons du niveau 1s au niveau 2s. Entre 0 et 135 keV, nous observons une divergence entre les résultats théoriques de notre modèle, BornI et BornII. Au-delà de cette valeur, ces deux résultats convergent avec tous les autres, à savoir ceux d'Ermolaev (TCAO-32 et TCAO-59), Hall, SchwB, Schw1414, Schw55 et CoupledSturmian de Winter. De plus, nos résultats théoriques concernant Schw1414, Schw55 et Schw Born sont presque identiques

à ceux d'Ermolaev (TCAO-32, TCAO-59), Hall, sur la majeure partie de la plage d'énergie entre 17 et 3000 keV, avec des valeurs d'environ $5,64 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$ et $0,54 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$.

Dans la figure 6, qui illustre la section efficace d'excitation en fonction de l'énergie d'impact des protons du niveau 1s au niveau 2p, nous notons que les résultats théoriques (TCAO-32, TCAO-59) de Hall et les autres correspondent bien aux résultats expérimentaux de Winter sur l'ensemble des intervalles d'énergies d'impact des protons. Nos modèles, notamment SchwB, BornI et BornII, commencent à converger vers les résultats théoriques antérieurs à partir de 90,37 keV ($30,49 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$), tandis que Schw55 et Schw1414 convergent à partir de 180,71 keV ($21,06 \times 10^{-19} \text{ cm}^2$). À partir de ces points, les neuf courbes suivent un même schéma jusqu'à la fin de l'intervalle d'énergie.

Tableau 06: Section efficaces d'excitation à l'état n=2 (en 10^{-19} cm²) de l'ion Li²⁺ par impact de proton

E (KeV)	Ermolaev et al (TCAO-32) [14]	Ermolaev et al (TCAO-59) [14]	Hall et al (SCE) (FHBS) [15]	Born I	Born II	Schw-B	Schw55	Schw1414	Couple d Sturmi an
9				1,63127	21,8329	0,31675		0,484004	
17.5	1,02								1,14
18				6,45221	31,6204	3,647		1,941199	
30	7,91	7,13	7,5						8,5
36				15,2797	34,1428	19,5239		6,396044	
40			14,25						
50	17,86	16,17							20,6
54				20,4239	33,4986	30,0432	9,86123	10,40245	
60			22,69						
80			25,9						
87,5	27	24,3							
90				24,53329	31,9634	30,2478	13,106	16,29529	
100	27,4	25,1	26,8						27,5
108							14,9601		
125			26,8						27,1
135				25,2761	29,7896	27,7873	17,8197	19,83938	
150	24,92	25,83	26,15						
180				24,5742	27,5967	25,3001		20,87291	
200	22,95	24,19	24,48						24,7
225							20,4737		
250			22,91						
270				22,3329	24,1666	22,5233	20,1156	20,44051	
300			21,61						
360				20,1922	21,4810	20,3316	18,85	19,11216	
400	19,65	19,5	19,28						19,1
450				18,3774	19,3552	18,5201	17,5869	17,71276	
500			17,42						
540				16,8581	17,6358	17,0057	16,2958	16,42347	
600	16,61	16,18	15,98						15,5
720				14,4844	15,0213	14,6293		14,27924	
800		13,82							
900				12,7200	13,1193	12,8536		12,61739	
1000	12,51	12,12							12,1
1260				10,2650	10,5162	10,3722		10,24297	
1440				9,37292	9,59038	9,47774		9,370087	
1800				7,99605	8,14610	8,07280		8,005831	
2000	8,01	7,88							
2250				6,76549	6,87293	6,82539		6,78083	
3000		6,03							

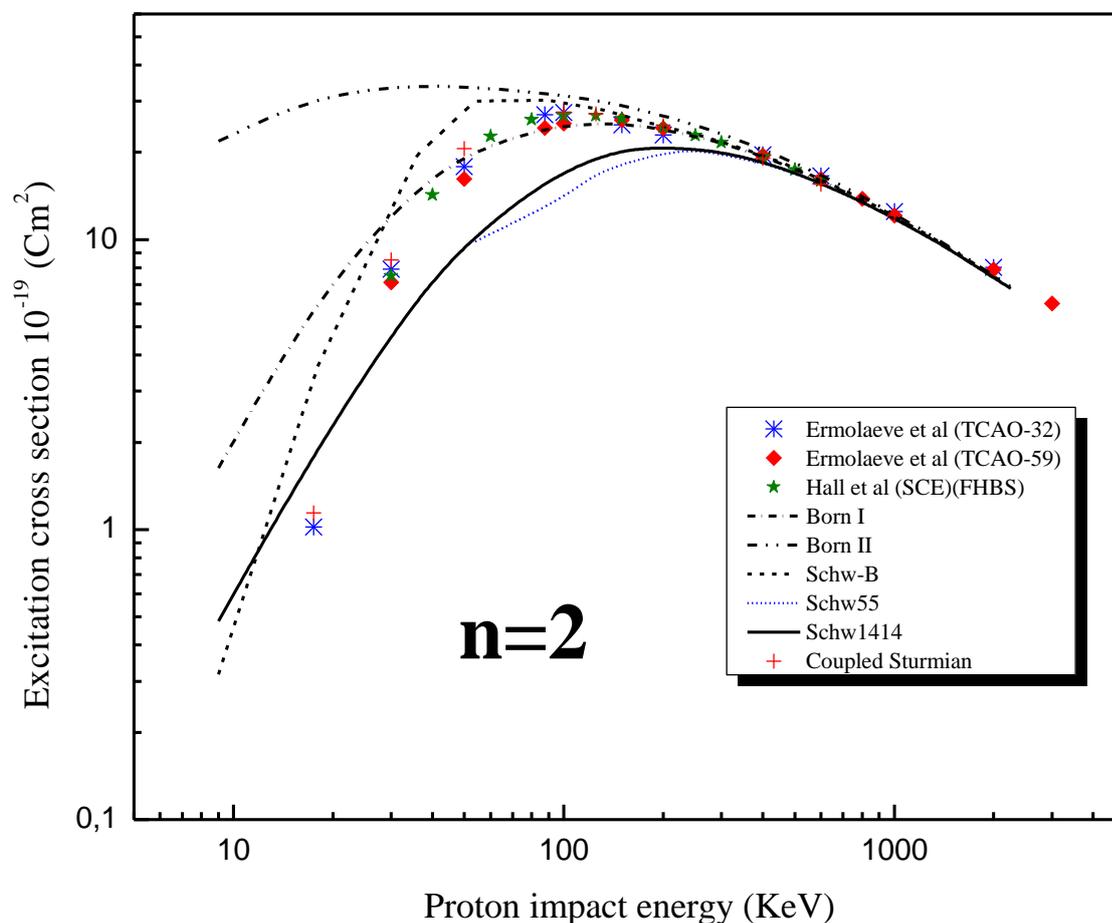


Fig. 6 : Section efficace d'excitation de l'état $n=2$ pour Li^{+2} en fonction de l'énergie d'impact des protons.

Globalement on peut dire que sur les différentes figures les différents calculs théoriques des sections efficaces d'excitation des états nl , s'avèrent en accord avec les résultats de la méthode Close-coupling d'Ermolaev TCAO32 et TCAO-59 (1987) et la méthode SCE de Hall et al (1996)] à part d'une légère différence due au choix des bases sur lesquelles le développement est effectué ainsi que l'influence des états de capture surtout à basse énergie. L'absence de résultats expérimentaux ne permet pas de trancher sur la validité de chaque calcul théorique présenté ici.

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale :

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode variationnelle de Schwinger pour étudier comment l'énergie d'impact des protons excite les ions lithium (Li^{2+}) et béryllium (Be^{3+}) sur une large gamme d'énergies, de 16 keV à 4 MeV. Les calculs révèlent que la construction des fonctions d'onde $\Psi^+(z)$ et $\Psi^-(z)$ à partir de 5 et 14 états, respectivement, conduit à des résultats satisfaisants. Il est observé que la prise en compte de l'influence des états du continuum près du seuil d'ionisation, comme cela est fait dans Born-I et Born-II, a peu voire aucun effet significatif sur les sections efficaces totales, en particulier dans la plage d'énergie intermédiaire.

Nous avons réexaminé et amélioré l'approche variationnelle de Schwinger appliquée à l'excitation atomique par impact protonique à des vitesses intermédiaires. L'objectif de cette étude était de présenter une méthode robuste pour calculer les sections efficaces totales d'excitation de protons interagissant avec des atomes à des vitesses intermédiaires. Nous avons également exploré l'impact du spectre discret et continu sur ces calculs de sections efficaces. Ce calcul met en évidence l'efficacité de la méthode de Schwinger, en particulier dans une plage d'énergie de collision intermédiaire, pour décrire les processus d'excitation. En conclusion, les méthodes variationnelles fondées sur le principe variationnel de Schwinger se révèlent être un outil puissant pour l'étude des collisions atomiques à des vitesses intermédiaires. Elles offrent une alternative efficace aux approches perturbatives traditionnellement utilisées.

BIBLIOGRAPHIE

Bibliographies

- [1] - J.Rangama" Ionisation et excitation de l'atome de lithium par impact de particules chargées rapides", Thèse de Doctorat Es Sciences, CAEN/BASSE-NORMANDIE (1995).
- [2] - A.Chetioui , I.Despiney , L.Adoui , L.Sabatier , B.Dutrillaux , Int.J of Radiat. Biol. 65 (1994) 511-512.
- [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] - L. Adoui, "Mécanismes d'excitation d'ions Ar^{+16} en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire", Thèse de Doctorat Es Sciences, Université Bordeaux I (1995).
- [7] - 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.
- [8] - B.Lasri , Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences, Université Abou bakrBelkaïd de Tlemcen (2007).
- [9] - B. Mc Carroll et D. Crothers, Proc. Phys. Soc. 86 (1965) 753.
- [10] - R. McCarroll et A. Salin, Ann. Phys. (Paris) 1 (1966) 283.
- [11] - K. A. Hall, J. F. Reading et A. L. Ford, Phys. B At Mol. Opt Phys. 29 pp1979-1994(1996).
- [12] - A. M. Ermolaev et M. R. C. McDowell , J. Phys. B: At. Mol. Phys. 20 L379-L383 (1987).
- [13] - J. F. Reading, A. L. Ford et R. L. Becker, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 14 pp1995-2012 (1981).
- [14] - A L Ford, J F Reading and R L Beckerf ,J. Phys. B: At. Mol. Phys. **15** (1982) 3257-3273.
- [15] - I. M. Cheshire ,J.Phys. SER. 2, VOL. 1 (1968).
- [16] - B. H. Bransden et J.P. Coleman, J. Phys. B 5 (1972) 537.

- [17] - J. F. Reading, A. L. Ford and E. G. Fitchard, Phys. Rev. Lett. 36 5B (1976).
- [18] - E. G. Fitchard, A.L. Ford et J.F. Reading, Phys. Rev. A 16 (1977) 1325.
- [19] - G. L. Swaford, J. F. Reading, A. L. Ford and E. Fitchard, Phys. Rev. A 16(1977) 1329.
- [20] - R. R. Lucchese et V. McKoy, J. Phys. B 12 (1979) L421.
- [21] - R. R. Lucchese, D.R. Watson et V. McKoy, Phys. Rev. A 22 .421 (1980).
- [22] - B. Brendlé, Thèse de troisième cycle, Université de bordeaux-I, 1984.
- [23] - B. Brendlé, R. Gayet et K. Woher, Phys. Rev. Lett. 54 (1985) 2007.
- [24] - K. Wohrer, A. Chetoui, J.P. Rozet, A. Jolly. F. Fernandez, C. Stephan. B. Brendlé et R. Gayet, J. Phys. B 19 (1986) 1997.
- [25] - 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.
- [26] - R. Gayet and M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 42 (1989) 515-522.
- [27] - 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 bakrBelkaïd de Tlemcen 28 Juin (1998).
- [28] - 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.
- [29] - B. H. Bransden, D. P. Dewangan et C.J. Noble, J. Phys. B 12 (1979) 3563.
- [30] - 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.
- [31] - 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.
- [32] - L. Hulthén, K. Fysiogr. Sällsk. Lund. Förh. 14, 257 (1944).

- [33] - W. Kohn, *Phys. Rev.* 74, 1763 (1948).
- [34] - S.I. Rubinow, *Phys. Rev.* 96, 218 (1954).
- [35] - 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
- [36] - J.L. Jackson, *Phys. Rev.* 83, 301 (1951).
- [37] - R.K. Nesbet, *Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory*, Plenum Press, New York (1980).
- [38] - 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
- [39] - J. Schwinger, *Phys. Rev.* 56,750 (1947).
- [40] - R.R. Lucchese, K. Takatsuka, and V. McKoy, *Phys. Rep.* 131, 147 (1986).
- [41] - D.K. Watson, *Adv. At. Mol. Phys.* 25, 221 (1988).
- [42] - M.A.P. Lima, T.L. Gibson, L.M. Brescansin, V. McKoy, and W.M. Huo, "Studies of Elastic and Electronically Inelastic Electron-Molecule Collisions," in *Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule Collisions*, ed. L.C. Pitchford, B.V. McKoy, A. Chutjian, and S. Trajmar, Springer-Verlag, New York (1987), pp 239-264.
- [43] - 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).
- [44] - D.K. Watson and V. McKoy, *Phys. Rev. A* 20, 1474 (1979).
- [45] - R.R. Lucchese, G. Raseev, and V. McKoy, *Phys. Rev. A* 25, 2572 (1982).
- [46] - See, for example, 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).
- [47] - M.-T. Lee, M.M. Fujimoto, S.E. Michelin, L.E. Machado, and L.M. Brescansin, *J. Phys. B.* 25, L505 (1992).
- [48] - M.-T. Lee, S.E. Michelin, L.M. Brescansin, G.D. Meneses, and L.E. Machado, *J. Phys. B.* 28, L477 (1993).
- [49] - C. J. Joachain "Quantum Collision Theory" (New York: North-Holland) pp 225-42 (1979).

- [50] - E. Guerjuoy, David S. Saxon, *Phy. Rev.* 94, 2 (1954).
- [51] - Phaneuf R A and Janev R K. (1993). *Atomic and Plasma-Material Interaction Processes in Controlled Thermonuclear Fusion* ed R K Janev and H W Drawin (Amsterdam: Elsevier) pp371–80.
- [52] - Anderson, H., et al. (2000). "Neutral beam stopping and emission in fusion plasmas I: deuterium beams." *Plasma physics and controlled fusion* 42(7): 781.
- [53] - Isler, R. *Plasma physics and controlled fusion* 36(2): 171(1994).
- [54] - Korotkov, A. and A. Gondhalekar. (1994). *Controlled fusion and plasma physics. Proc. 21st Eur. Conf. Montpellier.*
- [55] - Petrov, M. et al. (1992). *Europhysics Conference Abstracts.*
- [56] - Suarez, J., et al. (2013). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 46(9): 095701.
- [57] - Ballance, C., et al. (2001). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34(16):3287.
- [58] - Whiteford, A., et al. (2002). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 35(17): 3729;
- [59] - Anthony C. K. Leung and Tom Kirchner. (2019). *Eur.Phys.J.D73* :246.
- [60] - Avazbaev, S., et al. (2016). *Physical Review A* 93(2): 022710.
- [61] - Schroeder, W. A., et al. (2001). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34(3): 297.
- [62] - Zeng, J., et al. (2001). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 34(14): 2823.
- [63] - Ermolaev, A. and M. McDowell. (1987). *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 20(12).L379.
- [64] - Ermolaev, A. and A. Korotkov. (1996). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*.9(13):2797.
- [65] - Winter, T. G. (2013). *Physical Review A* 87(3):032704.
- [66] - Hall, K., et al. (1996). *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 29(10).

APENDICES

Appendice-I

Forme iconale de l'opérateur de Green G_T^+

D'une façon analogue au traitement de l'équation de Schrödinger pour la théorie des collisions dépendante du temps [20][36], on peut déduire l'équation suivante dans l'approximation iconale, pour l'opérateur de Green G_C^+ associé à l'hamiltonien H_C donné par l'expression (II.1a). L'opérateur iconale vérifie l'équation :

$$\left[-iv \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right] G_T^+(z, z') = -\delta(z - z') \quad (\text{AI.1})$$

où v désigne la vitesse d'impact et $H_T(z)$ est l'hamiltonien de la cible avec la condition initiale:

$$G_T^+(z, z') = 0 \text{ pour } z < z' \quad (\text{AI.2})$$

La résolution de l'équation (AI.1) sans second membre donne:

$$G_T^+(z, z') = \exp\left\{ -\frac{i}{v} \int_{z_0}^z H_T(u) du \right\} G_T^+(z_0, z') \quad (\text{AI.3})$$

où z_0 est arbitraire de telle sorte que $z_0 > z'$.

Maintenant, pour résoudre l'équation avec second membre on prend:

$$G_T^+(z, z') = \exp\left\{ -\frac{i}{v} \int_{z_0}^z H_T(u) du \right\} k(z_0, z') \quad (\text{AI.4})$$

et on fait varier la constante.

En remplaçant $G_T^+(z, z')$ par son expression (AI.4), dans l'équation (AI.1), nous obtenons:

$$-iv \exp\left\{ -\frac{i}{v} \int_{z_0}^z H_T(u) du \right\} \frac{\partial}{\partial z} k(z_0, z') = -\delta(z - z') \quad (\text{AI.5})$$

Ce qui donne :

$$k(z - z') = -\frac{i}{v} \exp\left\{ \frac{i}{v} \int_{z_0}^{z'} H_T(u) du \right\} \theta(z - z') \quad (\text{AI.6})$$

L'approximation iconale de l'opérateur G_T^+ est alors :

$$G_T^+(z, z') = -\frac{i}{v} \exp\left\{ -\frac{i}{v} \int_{z'}^z H_T(u) du \right\} \theta(z - z') \quad (\text{AI.7})$$

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

Appendice-II

Calcul des éléments $W_{ij}(\vec{R})$

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

$$W_{ij}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{AII.1})$$

où

$$V(\vec{R}, \vec{x}) = Z_p \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{x}|} \right] \quad (\text{AII.2})$$

et $\varphi_i(\vec{x})$ et $\varphi_j(\vec{x})$ désignent les fonctions hydrogènoïdes, données, d'une façon générale par:

$$\varphi_k(\vec{x}) \equiv \varphi_{n_k l_k m_k}(\vec{x}) = R_{n_k l_k}(x) Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) \quad (\text{AII.3a})$$

telle que:

$$R_{n_k l_k}(x) = e^{-\frac{Z_T x}{n_k}} \sum_{\mu=0}^{n_k - l_k - 1} B_{k\mu} x^{l_k + \mu} \quad (\text{AII.3b})$$

Où:

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

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

$$Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) = \left[\frac{2l_k + 1}{4\pi} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l_k - m_k)!}{(l_k + m_k)!} \right]^{\frac{1}{2}} (-1)^{m_k} P_{l_k}^{m_k}(\cos \theta_x) e^{im_k \varphi_x} \quad (\text{AII.3d})$$

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

$P_{l_k}^{m_k}$ désigne la fonction de Legendre définie par :

$$P_{l_k}^{m_k}(x) = (1-x^2)^{\frac{m_k}{2}} \frac{d^{m_k}}{dx^{m_k}} P_{l_k}(x) \quad \text{pour } m_k \geq 0 \quad (\text{AII.3e})$$

$$P_{l_k}^{-m_k}(x) = (-1)^{m_k} \frac{(l_k - m_k)!}{(l_k + m_k)!} P_{l_k}^{m_k}(x) \quad \text{pour } -m_k < 0 \quad (\text{AII.3f})$$

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

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

$$W_{ij} = Z_p \left[\frac{\delta_{ij}}{R} - I(\bar{R}) \right] \quad (\text{AII.4a})$$

$$\text{où } I(\bar{R}) = \int d\bar{x} \varphi_i^*(\bar{x}) \frac{1}{|\bar{R} - \bar{x}|} \varphi_j(\bar{x}) \quad (\text{AII.4b})$$

Si on fait un développement multipolaire de $\frac{1}{|\bar{R} - \bar{x}|}$:

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

où $r_<$ et $r_>$ désignent respectivement le plus petit et le plus grand des modules R et x , l'intégrale (AII.4b) devient :

$$I(\bar{R}) = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} L_l(R) Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{R}) J \quad (\text{AII.5a})$$

avec

$$L_l(R) = \int_0^{+\infty} dx x^2 R_i(x) R_j(x) \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} \quad (\text{AII.5b})$$

où J est une intégrale bien connue :

$$J = (-1)^{m_i} \int d\hat{x} Y_l^{m_i}(\hat{x}) Y_{l_i}^{-m_i}(\hat{x}) Y_{l_j}^{-m_j}(\hat{x}) \quad (\text{AII.5c})$$

qui est égale à :

$$J = (-1)^{m_i} \left[\frac{(2l+1)(2l_i+1)(2l_j+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \quad (\text{AII.5d})$$

En utilisant les propriétés des coefficients 3J de Wigner nous obtenons les règles de sélection suivantes pour que J soit différent de 0 :

$$l + l_i + l_j = 2p \quad p \in N \quad (\text{AII.6a})$$

$$|l_i - l_j| \leq l \leq l_i + l_j \quad (\text{AII.6b})$$

$$m = m_i - m_j \quad (\text{AII.6c})$$

Dans le cas où $l=0$ l'intégrale radiale est donnée par :

$$L_0(R) = \frac{1}{R} \int_0^R dx x^2 R_i(x) R_j(x) + \int_R^{+\infty} dx x R_i(x) R_j(x) \quad (\text{AII.7a})$$

$$= \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{1}{R} \int_R^{+\infty} dx x^2 R_i(x) R_j(x) + \int_R^{+\infty} dx x R_i(x) R_j(x) \quad (\text{AII.7b})$$

En explicitant les fonctions radiales $R_i(x)$ et $R_j(x)$ suivant l'expression (AII.3b), nous aurons :

$$L_0(r) = \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{e^{-\alpha_{ij}R}}{R} \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N_0-1)!}{(\alpha_{ij})^{N_0}} \sum_{p=0}^{N_0-1} C_{N_0}(p) (\alpha_{ij}R)^p \quad (\text{AII.7c})$$

$$\text{Avec} \quad \alpha_{ij} = Z_T \left(\frac{1}{n_i} - \frac{1}{n_j} \right) \quad (\text{AII.7d})$$

$$N_0 = l_i + l_j + \mu + \nu + 3 \quad (\text{AII.7e})$$

$$C_{N_0}(p) = \begin{cases} 1 & \text{pour } p = 0 \\ \frac{1}{p!} - \frac{1}{N_0-1} \frac{1}{(p-1)!} & \text{pour } 1 \leq p \leq N_0 - 1 \end{cases} \quad (\text{AII.7f})$$

pour $l \neq 0$, nous obtenons :

$$L_{l \neq 0}(r) = \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \int_0^{+\infty} dx \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij}x} \quad (\text{AII.8})$$

L'intégrale sur x conduit aux intégrales suivantes :

$$\int_0^{+\infty} dx \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij}x} = \frac{1}{R^{l+1}} \int_0^R dx x^{N-1} e^{-\alpha_{ij}x} + R^l \int_R^{+\infty} dx x^{N-2(l+1)} e^{-\alpha_{ij}x} \quad (\text{AII.9a})$$

$$= \frac{1}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} \frac{(\alpha_{ij}R)^p}{p!} \right\} + R^l \frac{[N-2(l+1)]!}{\alpha_{ij}^{N-2(l+1)}} e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{q=0}^{N-2(l+1)} \frac{(\alpha_{ij}R)^q}{q!} \quad (\text{AII.9b})$$

Où N est défini comme :

$$N = N_0 + l \quad (\text{AII.9c})$$

L'équation (AII.8) devient alors :

$$L_{l \neq 0}(R) = \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij}R)^p \right\} \quad (\text{AII.10a})$$

$$C_{N,l}(p) = \begin{cases} \frac{1}{p!} & \text{pour } 0 \leq p \leq 2l \\ \frac{1}{p!} - \frac{1}{(N-1)!} \frac{[N-2(l+1)]!}{[p-2(l+1)]!} & \text{pour } 2l+1 \leq p \leq N-1 \end{cases} \quad (\text{AII.10b})$$

A partir des expressions (AII.7b) et (AII.10a), l'intégrale $I(\vec{R})$ définie par l'expression (AII.5a) devient :

$$I(\vec{R}) = \frac{\delta_{ij}}{R} + \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^{m*}(\hat{R}) J \quad (\text{AII.11a})$$

$$J = \sum_{\mu, \nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \left\{ (1 - \delta_{l,0}) - e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij}R)^p \right\} \quad (\text{AII.11b})$$

En explicitant $Y_l^m(\hat{R})$ et l'intégrale J , et en utilisant les règles paires de sélections (AII.6a-c), la somme sur l peut être limitée à des valeurs paires ou impaires et la somme sur m à un seul terme ($m = m_i - m_j$).

On aura alors, à partir de (AII.4a) :

$$W_{ij}(\vec{R}) = W_{ij}(\vec{R}_0) e^{-im\varphi_R} \quad (\text{AII.12a})$$

\vec{R}_0 représente le vecteur \vec{R} avec un angle φ_{R_0} où :

$$W_{ij}(\vec{R}_0) = Z_p \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} A_{ll,l_j}^{mm,m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_j-l_i-l_j-1} \sum_{\nu=0}^{n_i-l_j-l_i-l_j-1} B_{n_i,l,\mu} B_{n_j,l,\nu} \frac{P_l^m(\cos(\theta_R))}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \left\{ e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij}R)^p - (1 - \delta_{l,0}) \right\} \quad (\text{AII.12b})$$

avec :

$$A_{ll,l_j}^{mm,m_j} = (-1)^{m_j} \left[(2l_i + 1)(2l_j + 1) \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \quad (\text{AII.12c})$$

$$l_{\min} = \sup \left[|l_i - l_j|, |m_i - m_j| \right] \quad (\text{AII.12d})$$

$$l_{\max} = l_i - l_j \quad (\text{AII.12e})$$

L'expression (AII.1) peut être sous la forme :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \langle j_i | V(\vec{R}, \vec{x}) | j_j \rangle \quad (\text{AII.13a})$$

Du fait que \vec{R} est donné par une relation de \vec{R}_0 d'un angle φ_R autour de l'axe z on peut alors écrire :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \langle \varphi_i | \Re V(\vec{R}_0, \vec{x}) \Re^{-1} | \varphi_j \rangle \quad (\text{AII.13b})$$

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

Il vient alors :

$$W_{ij}(\vec{R}) = e^{i(m_j - m_i)\varphi_R} \langle \varphi_i | V(\vec{R}_0, \vec{x}) | \varphi_j \rangle \quad (\text{AII.13c})$$

soit :

$$W_{ij}(\vec{R}) = e^{-im\varphi_R} W_{ij}(\vec{R}_0) \quad (\text{AII.13d})$$

$$\text{où :} \quad m = m_i - m_j \quad (\text{AII.13e})$$

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

Par analogie avec l'expression (II.26) de l'opérateur de transition T , on peut écrire, à partir des deux relations : $(k|\Theta|k') = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle k|\Theta|k' \rangle$ ainsi que la relation (III.37) :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = (\beta | a(\vec{\rho}) | \alpha) \quad (\text{AII.14a})$$

ou encore :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = (\beta | \mathfrak{R} a(\vec{\rho}_0) \mathfrak{R}^{-1} | \alpha) \quad (\text{AII.14b})$$

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

On aura donc

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = e^{i(m_\alpha - m_\beta)\varphi_R} \langle \beta | a(\vec{\rho}_0) | \alpha \rangle \quad (\text{AII.14b})$$

qui s'écrit encore :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = e^{i(m_\alpha - m_\beta)\varphi_R} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}_0) \quad (\text{AII.14d})$$

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

Appendice-III

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

AIII.1 Développement des fonctions de Legendre:

Les fonctions de Legendre sont définies de la façon suivante:

D'après la relation (III.1a), $\bar{R} = \bar{\rho} + \bar{z}$, et la figure (III.1), nous pouvons poser :

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

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

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x) \quad (\text{AIII.3})$$

Les polynômes de Legendre sont donnés par :

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

où la notation $E[\frac{l}{2}]$ signifie la partie entière de $\frac{l}{2}$.

Pour des valeurs de $m \geq 0$ et en développant la dérivée dans la relation (AIII.2) nous obtenons:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \sum_{k=0}^{E[\frac{l}{2}]} (-1)^k \frac{(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k-m)!} x^{l-2k-m} \quad (\text{AIII.5})$$

Des relations (AIII.1) et (III.1a), nous déduisons pour $z > 0$:

$$x = \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{AIII.6})$$

$$1 - x^2 = \frac{\rho^2}{z^2} \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-1} \quad (\text{AIII.7})$$

En rapportant ces expressions dans (AIII.5), on peut écrire:

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

Dans l'hypothèse où le rapport $\frac{\rho^2}{z^2} < 1$, l'expression (AIII.8) peut être transformée en utilisant le développement général suivant :

$$(1-\gamma)^{-\beta} = \sum_{n=0}^{+\infty} (-1)^n \frac{(\beta)_n}{n!} \gamma^n \quad (\text{AIII.9})$$

$$\text{où } \gamma < 1 \quad (\text{AIII.9a})$$

$$(\beta)_n = \beta(\beta+1)\dots(\beta+n-1) = (\beta)_{n-1}(\beta+n-1) \quad (\text{AIII.9b})$$

$$(\beta)_0 = 1 \quad (\text{AIII.9c})$$

On en déduit alors :

$$\frac{P_l^m(\rho, z)}{R^{l+1}} = \frac{\rho^m}{z^{l+m+1}} \left(1 + \frac{\rho^2}{z^2}\right)^{-\frac{l+m+1}{2}} \sum_{k=0}^{E[\frac{l-m}{2}]} (-1)^{k+n} \frac{(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k-m)!} \left(\frac{\rho^2}{z^2}\right)^n \quad (m \geq 0) \quad (\text{AIII.10})$$

avec

$$\beta = 1 - k + \frac{1}{2} > 0 \quad (\text{AIII.10b})$$

III.2 – Forme asymptotique $W_{ij}^{as}(\rho, z)$:

Rappelons l'expression (AII.27) des éléments W_{ij} :

$$W_{ij}(R, \theta) = Z_p \sum_{l=\min}^{l\max} A_{ll_j}^{m_i, m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_i-1} \sum_{\nu=0}^{n_j-l_j-1} B_{n_i, l, \mu} B_{n_j, l, \nu} \left\{ \frac{P_l^m(\cos(\theta_R)) (N-1)!}{R^{l+1} \alpha_{ij} N} e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N, l}(p) (\alpha_{ij} R)^p - (1 - \delta_{l0}) \right\} \quad (\text{AIII.11})$$

Pour une valeur donnée du paramètre d'impact ρ , la région asymptotique peut être définie à la fois comme celle où les termes exponentiellement décroissants dans (AII.27) sont négligeables devant 1, et où le rapport $\frac{\rho}{z}$ est suffisamment petit devant 1, pour que le développement (AIII.9) avec $\gamma = \frac{\rho^2}{z^2}$ et $\beta = l - k + \frac{1}{2}$ converge rapidement pour une valeur n_{\max} de n pas trop élevée.

Ceci se traduit par les conditions suivantes :

$$\text{a) } e^{-\alpha_{ij} R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N, l}(p) (\alpha_{ij} R)^p < \varepsilon \quad (\text{AIII.12a})$$

$$\text{b) } \frac{\rho^2}{z^2} < 1 \quad (\text{AIII.12b})$$

$$\text{c) } \frac{(\beta)_{n_{\max}}}{n_{\max}!} \gamma^{n_{\max}} (1 + \gamma)^\beta < \varepsilon' \quad (\text{AIII.12c})$$

ε et ε' dépendant ici de la précision souhaitée.

Dans le cas où la condition a) est remplie, on peut alors négliger le terme dépendant de $e^{-\alpha_{ij} R}$ dans (AII.27). Quand la condition b) est aussi réalisée, on peut alors exprimer les fonctions $P_l^m(\cos(\theta_R))$ et les puissances de R , dans (AII.27), sous la forme d'un développement en puissance de $\frac{\rho^2}{z^2}$ tel qu'il est donné par l'expression (AIII.10).

En reportant alors ce développement dans (AII.27), on obtient la forme asymptotique W_{ij}^{as} de W_{ij} pour $m \geq 0$. Soit de façon générale :

$$W_{ij}^{as}(\rho, z) = -Z_p S(m) \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} (1 - \delta_{l0}) A_{ll_j}^{|m| m_i m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i - l_i - m_i - l_i - 1} \sum_{\nu=0}^{n_j - l_j - m_j - l_j - 1} B_{n_i l_i \mu} B_{n_j l_j \nu} \frac{(n-1)!}{(\alpha_{ij})^n} \frac{\rho^{|m|}}{z^{1+|m|+1}} \sum_{n=0}^{+\infty} C_{l,|m|}(n) \left(\frac{\rho^2}{z^2} \right)^n \quad (\text{AIII.13})$$

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

$$C_{l,|m|}(n) = \sum_{k=0}^{E\left[\frac{(l-|m|)z}{2}\right]} (-1)^{k+n} \frac{(2l-2k)!}{2^l k!(l-k)!(l-2k-|m|)!} \frac{(\beta)_n}{n!} \quad (\text{AIII.14a})$$

Compte tenu de la relation (AII.28a) qui définit $A_{ll_j}^{mm_i m_j}$ et de la relation (AIII.3) entre les fonctions de Legendre de m opposés, il est aisé de vérifier que $S(m)$ a la valeur suivante :

$$S(m) = \begin{cases} 1 & \text{si } m \geq 0 \\ (-1)^m & \text{si } m < 0 \end{cases} \quad (\text{AIII-15})$$

Remarque:

L'élément W_{ij}^{as} est nul pour $\rho = 0$.

Rappelons que pour une valeur donnée du paramètre d'impact ρ la région asymptotique est définie pour une valeur $\bar{z}_{ij} \geq 0$ compatible avec les deux conditions a) et b).

Nous remarquons également que dans le cas où ρ est assez grand, la condition a) peut être satisfaite même pour z nulle ($z=0$). Par contre il est nécessaire que le rapport $\frac{\rho}{z}$ soit suffisamment petit devant 1 pour que la condition c) soit satisfaite pour une valeur pas trop grande de n_{\max} .

Il est donc très utile, pour les calculs de définir une région asymptotique de telle sorte que l'intervalle d'intégration numérique sur z soit le plus petit possible, avec cependant une valeur de \bar{z}_{ij} qui reste suffisamment grande devant celle de ρ . Et par conséquent la condition $\bar{z}_{ij} \geq \frac{3}{2}\rho$ s'est avérée satisfaisante.

Appendice-IV

Symétrie de la matrice D à inverser

Dans cette partie, on va essayer d'établir certaines propriétés de symétrie des éléments W_{ij} qui vont nous permettre de restreindre l'intervalle d'intégration sur z à des valeurs de z positives seulement et par conséquent réduire considérablement le nombre d'éléments de matrice à calculer.

AIV-1. Symétrie des éléments W_{ij} :

D'après l'expression (AII.27) des éléments $W_{ij}(\rho, z)$, nous constatons tout d'abord que ces éléments sont réels. On peut donc écrire :

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

D'autre part, on remarque que les seuls termes dépendant des indices i, j et du signe de z sont $A_{mm_i m_j}^{l_i l_j}$ et les fonctions de Legendre $P_l^m\left(\frac{z}{R}\right)$.

Ce qui nous mène à considérer la proportionnalité des éléments W_{ij} par rapport à ces termes.

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

Nous avons :

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

avec : $m = m_i - m_j$ (AIV.2b)

En intervertissant les indices i et j nous obtenons :

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

En utilisant, les propriétés des coefficients 3J de Wigner [37], nous aurons:

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

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

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

du fait que $l+l_i+l_j$ doit être pair, nous aurons :

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

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

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

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

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

En utilisant la relation $m = m_i - m_j$ et en comparant l'expression (AIV.7) à (AIV.2) nous obtenons :

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

AIV-1.2. Symétrie par rapport au changement de signe de m_i et m_j :

En changeant les signes de m_i et m_j l'expression obtenue à partir de W_{ij} et notée $W_{-i,-j}$

. Nous avons alors :

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

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

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

Compte tenu de la relation (IV.6), nous obtenons :

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

D'où l'on conclut :

$$W_{-i,-j}(\rho, z) = (-1)^m W_{i,j}(\rho, z) \quad (\text{AIV.12})$$

AIV-1.3. Symétrie par rapport au changement de signe de z :

En effectuant le changement $z \rightarrow z'$ dans l'expression (AIV.2A), nous aurons :

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

En utilisant les propriétés des fonctions de Legendre :

$$P_l^m \left(-\frac{z}{R} \right) = (-1)^{l+m} P_l^m \left(\frac{z}{R} \right) \quad (\text{AIV.14})$$

et les propriétés des coefficients de Wigner (AIV.6) :

$$(-1)^l = (-1)^{l+l_j} \quad (\text{AIV.15})$$

nous déduisons alors :

$$W_{i,j}(\rho, -z) = (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} W_{i,j}(\rho, z) \quad (\text{AIV.16})$$

AIV-2. Symétrie des éléments $(i|V|j)$:

AIV-2.1. Symétrie par rapport au changement des indices i et j :

Nous avons la relation bien connue :

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

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

A partir de la relation (III.6) des éléments $(i|V|j)$ nous remarquons que le seul terme qui dépend des signes de m_i et m_j est W_{ij} .

D'après (AIV.12), on déduit :

$$(-i|V|-j) = (-1)^m (i|V|j) \quad (\text{AIV.18})$$

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

AIV-2.3. Symétrie par rapport au changement de signe de z :

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

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

En faisant le changement de variable suivant:

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

Nous obtenons :

$$G_{ij}(-x, -y) = \int_x^y -dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(-z) \quad (\text{AIV.119c})$$

En utilisant la relation (AIV.16) de $W_{ij}(-z)$, on peut déduire:

$$G_{ij}(-x, -y) = (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(y, x) \quad (\text{AIV.19d})$$

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

AIV-3. Symétrie des éléments $(j|VG_T^+V|i)$:

Nous avons établi au chapitre III, l'expression (III.25) qui s'écrit :

$$(j|VG_T^+V|i) = -\frac{i}{v} \left\{ \sum + \int \right\}_v H_{ij}^v(-\infty, +\infty) \quad (\text{AIV.20a})$$

Où H_{ij}^v est donné par l'expression (IV.26):

$$H_{ij}^v(-\infty, +\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}(z') \quad (\text{AIV.20b})$$

En premier lieu on va établir les différentes symétries des éléments H_{ij}^v .

AIV-3.1. Symétrie par rapport à l'échange des indices i et j :

A partir (AIV.20a), il vient :

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

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

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

$$z' \rightarrow -z' \quad (\text{AIV.21b})$$

Nous obtenons :

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

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

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{l_j+l_i+m_j-m_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{jv}z} W_{vj}(-z) \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \theta(z' - z) e^{id_{iv}z'} W_{iv}(-z') \quad (\text{AIV.22b})$$

ou encore en intervertissant l'ordre d'intégration :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{l_j+l_i+m_j-m_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}(z') \quad (\text{AIV.22c})$$

Soit, compte tenu de l'expression (AIV.20a) :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{l_j+l_i+m_j-m_i} H_{ij}^v(-\infty, +\infty) \quad (\text{AIV.23})$$

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

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{l_j+l_i+m_j-m_i} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{ij}z} W_{vj}(z) \int_z^{+\infty} dz' e^{id_{iv}z'} W_{iv}(z') \quad (\text{AIV.24})$$

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

On peut donc écrire, en vertu des relations (III.24) et (III.25) du chapitre III et de l'expression (AIV.24) :

$$H_{ji}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{l_j+l_i+m_j-m_i} H_{ji}^v(-\infty, +\infty) \quad (\text{AIV.25})$$

la formule (AIV.25) est utilisée pour $\bar{z}_{iv} < \bar{z}_{ij}$.

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

Nous remarquons que la seule dépendance des signes de m_i et m_j dans l'expression (AIV.20b) de $H_{ij}^v(-\infty, +\infty)$ vient des éléments W_{iv} et W_{vj} . Nous déduisons alors:

$$H_{-i,-j}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{m_i-m_v} H_{ij}^v(-\infty, +\infty) \quad (\text{AIV.26a})$$

soit :

$$H_{-i,-j}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{m_i-m_j} H_{ij}^v(-\infty, +\infty) \quad (\text{AIV.26b})$$

AIV-3.3 - Développement des éléments $H_{ij}^v(-\infty, +\infty)$:

Nous avons :

$$H_{ij}^v(-\infty, +\infty) = \left\{ \int_{-\infty}^0 dz + \int_0^{+\infty} dz \right\} e^{id_{iv}z} W_{iv} G_{vj}(-\infty, z) \quad (\text{AIV.27})$$

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

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

ou encore :

$$G_{vj}(-\infty, z) = (-1)^{l_v+l_j+m_v-m_j} G_{vj}^*(0, +\infty) + G_{vj}^*(0, z) \quad (\text{AIV.28b})$$

En remplaçant $G_{vj}^*(0, z)$ par son expression (AIV.28b), l'expression (AIV.27) devient alors:

$$H_{ij}^v(-\infty, +\infty) = (-1)^{l_v+l_j+m_v-m_j} G_{vj}^*(0, +\infty) \left\{ G_{iv}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_v+m_i-m_v} G_{ij}^*(0, +\infty) \right\} \\ + \left\{ \int_{-\infty}^0 dz + \int_0^{+\infty} dz \right\} e^{id_{iv}z} W_{iv} G_{vj}(0, z) \quad (\text{AIV.29})$$

Considérons maintenant l'intégrale $\int_0^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z)$ en faisant le changement $z \rightarrow -z$ et en utilisant la propriété (III.11) de G_{vj} nous obtenons :

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

avec :

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

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

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

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

L'intervalle $[0, +\infty[$ va être divisé en deux intervalles: un où l'intégration est numérique et l'autre où elle est analytique et ceci suivant la valeur de \tilde{z}_{iv} et \tilde{z}_{vj} déterminant les zones asymptotiques.

nous traitons le cas où $\tilde{z}_{iv} > \tilde{z}_{vj}$

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

$$H_{ij}^v(0, +\infty) = \left\{ \int_0^{\tilde{z}_{vj}} dz + \int_{\tilde{z}_{vj}}^{\tilde{z}_{iv}} dz + \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz \right\} e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}(0, z) \quad (\text{AIV.33})$$

qui se décompose comme suit :

$$H_{ij}^v(0, +\infty) = H_{ij}^v(0, \tilde{z}_{vj}) + H_{ij}^v(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv}) + H_{ij}^v(\tilde{z}_{iv}, +\infty) \quad (\text{AIV.34})$$

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

$$H_{ij}^v(0, \tilde{z}_{vj}) = \int_0^{\tilde{z}_{vj}} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) \int_0^z dz' e^{id_{iv}z'} W_{vj}(z') \quad (\text{AIV.35})$$

Tandis que $H_{ij}^v(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv})$ ne nécessite que des intégrations numériques simples. En effet, nous avons :

$$H_{ij}^v(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv}) = G_{iv}(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{iv}) G_{vj}(0, +\infty) - \int_{\tilde{z}_{vj}}^{\tilde{z}_{iv}} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}(z) G_{vj}^{as}(z) \quad (\text{AIV.36})$$

Les intégrales numériques simples étant faites dans (AIV.37), le dernier terme de (AIV.34) ne nécessite plus qu'une intégration analytique :

$$H_{ij}^v(\tilde{z}_{iv}, +\infty) = G_{iv}^{as}(\tilde{z}_{iv}) G_{vj}(0, +\infty) - H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv}) \quad (\text{AIV.37})$$

Dans les expressions (AIV.36) et (AIV.37), les intégrales suivantes sont déterminées analytiquement et feront l'objet de l'appendice V suivant :

$$H_{ij}^v(\tilde{z}_{iv}) = \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} W_{iv}^{as}(z) G_{vj}^{as}(z) \quad (\text{AIV.38})$$

$$G_{vj}^{as}(z) = \int_z^{+\infty} dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}^{as}(z') \quad (\text{AIV.39})$$

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

Les éléments de la matrice D sont donnés par l'expression :

$$D_{ij} = (i|V - V G_T^+ V|j) \quad (\text{AIV.40})$$

où les éléments dits de Born-I et Born-II qui composent les éléments D_{ij} , respectivement $(i|V|j)$ et $(i|V G_T^+ V|j)$ sont donnés par les relations (III.1) et (III.25).

En plus des propriétés de symétrie qui nous ont permis d'effectuer les intégrations de ces éléments dans des intervalles de valeurs positives de z et z' , nous venons de déterminer dans les paragraphes précédents différentes règles de symétries pour ces éléments.

Ces propriétés de symétries vont nous permettre, pour chaque couple (i,j) , de réduire considérablement le nombre d'éléments calculés dans D_{ij} . Les autres éléments se déduisent par la suite, par une simple application de ces propriétés, ce qui limite le temps de calcul informatique mis en jeu.

Le tableau suivant montre, dans le cas où les états (i,j) sont formés par la base $\{1s, 2l, 3l'\}$, que sur 196 éléments d'une matrice carrée de dimension 14, 65 éléments seulement sont à calculer.

Voici les éléments de matrice D à inverser pour une base $\{1s, 2l, 3l'\}$

X : sont les éléments à calculer.

ξ : sont les éléments déduits directement à partir des relations de symétries.

Les éléments qui se situent au dessous de la diagonale sont tous déduits des éléments supérieurs se situant au dessus de la diagonale.

	1s	2s	2p ₀	2p ₊₁	2p ₋₁	3s	3p ₀	3p ₊₁	3p ₋₁	3d ₀	3d ₁	3d ₋₁	3d ₂	3d ₋₂
1s	X	X	X	X	ξ	X	X	X	ξ	X	X	ξ	X	ξ
2s		X	X	X	ξ	X	X	X	ξ	X	X	ξ	X	ξ
2p ₀			X	X	ξ	X	X	X	ξ	X	X	ξ	X	ξ
2p ₊₁				X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
2p ₋₁					X	ξ	ξ	ξ	ξ	ξ	ξ	ξ	ξ	ξ
3s						X	X	X	ξ	X	X	ξ	X	ξ
3p ₀							X	X	ξ	X	X	ξ	X	ξ
3p ₊₁								X	X	X	X	X	X	X
3p ₋₁									X	ξ	ξ	ξ	ξ	ξ
3d ₀										X	X	ξ	X	ξ
3d ₊₁											X	X	X	X
3d ₋₁												X	ξ	ξ
3d ₂													X	X
3d ₋₂														ξ

Appendice-V

Calcul des intégrales $G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij})$ et $H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv})$

Dans le troisième chapitre on a déterminé les expressions de G_{ij}^{as} et H_{ij}^{vas} données respectivement par les relations (III.17) et (III.30) :

$$G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}) = \int_{\tilde{z}_{ij}}^{+\infty} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}^{as}(z) \quad (\text{AV.1})$$

$$H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv}) = \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz e^{id_{iv}z} G_{ij}^{as}(z) \quad (\text{AV.2})$$

où les valeurs \tilde{z}_{ij} et \tilde{z}_{iv} de z sont positives.

A partir de ces deux expressions, on peut remarquer que ces intégrales dépendent des formes asymptotiques W_{ij}^{as} , W_{iv}^{as} et W_{vj}^{as} .

Après avoir examiné dans l'expression (AIII.13) les éléments $W_{ij}^{as}(W_{iv}^{as}, W_{vj}^{as})$, nous remarquons qu'on peut les mettre sous la forme de fonction d'une suite infinie de puissance de z . Pour cela définissons la suite $\{\mathcal{A}(z)\}$ de fonction de $g_n(z)$:

$$\{\mathcal{A}(z)\} = \{g_n(z)\} \quad (\text{AV.3})$$

et l'application FW_{ij} sur la suite $\{\mathcal{A}(z)\}$

$$FW_{ij}[\{\mathcal{A}(z)\}] = FW_{ij}[\{g_n(z)\}] \quad (\text{AV.4})$$

FW_{ij} est choisie de telle sorte qu'en l'appliquant à une suite de puissances croissantes de z , elle puisse reproduire $W_{ij}^{as}(\rho, z)$.

L'expression (AIII.13) impose alors de définir FW_{ij} de la façon suivante :

$$FW_{ij}[\varphi(z)] = -Z_p S(m) \rho^{|m|} \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} (1 - \delta_{l_0}) A_{l,l_j}^{m m_i m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i - l_i - 1} \sum_{\nu=0}^{n_j - l_j - 1} B_{n_i, l_i, \mu} B_{n_j, l_j, \nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \sum_{n=0}^{+\infty} C_{l, |m|}(n) \rho^{2n} g_n(z) \quad (\text{AV.5})$$

En supposant que les propriétés de la suite $\{g_n(z)\}$ sont définies telles que l'expression (AV.5) est celle d'une série convergente.

On a alors :

$$W_{ij}^{as}(\rho, z) = FW_{ij}[\{z^{-k}\}] \quad (\text{AV.6a})$$

avec

$$k = l + |m| + 2n + 1 \text{ et } n = 1, \dots, \infty \quad (\text{AV.6b})$$

En reportant ensuite la forme (AV.6a) de W_{ij}^{as} dans l'intégrale (III.17), nous obtenons:

$$G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}) = FW_{ij}[\{X_b^k(\tilde{z}_{ij})\}] \quad (\text{AV.7})$$

où les fonctions $X_b^k(z)$ sont définies comme suit :

$$X_b^k(z) = \int_z^{+\infty} dz' \frac{e^{ibz'}}{z'^k} \quad (\text{AV.8})$$

où, pour simplifier l'écriture, nous avons remplacé d_{ij} par b .

$$b = d_{ij} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_j}{\nu} \quad (\text{AV.9})$$

Où ε_i et ε_j sont respectivement les énergies associées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$.

En ce qui concerne l'intégrale (III.17), nous remarquons que $H_{ij}^{\nu as}$ comporte deux formes asymptotiques $W_{i\nu}^{as}$ et $W_{\nu j}^{as}$. Compte tenu de l'expression (AV.6a) des formes asymptotiques, l'intégrale $H_{ij}^{\nu as}$ va se trouver simplifiée par l'introduction du produit de deux applications FW .

Si on définit les applications $FW_{i\nu}$ et $FW_{\nu j}$ et une suite à deux indices $\{g_{n',n}(z)\}$, l'application $FW_{\nu j}$ à cette suite nous donne une suite mono indicée $\{d_n(z)\}$ en effectuant une sommation sur l'indice de gauche n' .

A la nouvelle suite $\{d_n(z)\}$, la deuxième application $FW_{i\nu}$ va faire correspondre une fonction de z qui est l'image de $\{g_{n',n}(z)\}$ dans l'application produit. Soit, de façon explicite:

$$FW_{vj}[\{g_{n',n}(z)\}] = \{d_n(z)\} \quad (\text{AV.10})$$

$$FW_{vj}[\{g_{n',n}(z)\}] = \{d_n(z)\} FW_{iv} \times FW_{vj}[\{g_{n',n}(z)\}] = FW_{iv}[\{d_n(z)\}] \quad (\text{AV.11})$$

Nous allons plutôt nous intéresser à la fonction conjuguée de H_{ij}^{vas} , ceci pour la commodité des calculs, soit :

$$\left[H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv}) \right]^* = \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz e^{-id_{iv}z} W_{iv}^{as}(z) \int_z^{+\infty} dz' e^{-id_{vj}z'} W_{vj}^{as}(z') \quad (\text{AV.12})$$

(W_{iv}^{as} et W_{vj}^{as} étant des réels, expression (AIV.1)).

Compte tenu des relations (AV.7a,b) nous obtenons alors :

$$\left[H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv}) \right]^* = FW_{iv} \times FW_{ij}[\{U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}_{iv})\}] \quad (\text{AV.13})$$

$$\text{avec } k = l + |m| + 2n + 1 \text{ et } s = l' + |m'| + 2n' + 1 \quad (\text{AV.14})$$

où

$$U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}_{iv}) = \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz \frac{e^{-iaz}}{z^s} \int_z^{+\infty} dz' \frac{e^{ibz'}}{z'^k} \quad (\text{AV.15})$$

où l'on a posé :

$$a = d_{iv} = \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_v}{v} \quad (\text{AV.16a})$$

$$b = d_{jv} = -d_{vj} = \frac{\varepsilon_j - \varepsilon_v}{v} \quad (\text{AV.16b})$$

A l'aide de (AV.8), il vient :

$$U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}_{iv}) = \int_{\tilde{z}_{iv}}^{+\infty} dz \frac{e^{-iaz}}{z^s} X_b^k(z) \quad (\text{AV.17})$$

L'intégrale H_{ij}^{vas} s'écrit alors :

$$H_{ij}^{vas}(\tilde{z}_{iv}) = FW_{iv} \times FW_{vj} \left[\left\{ U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}_{iv}) \right\}^* \right] \quad (\text{AV.18})$$

Nous venons d'exprimer respectivement les intégrales G_{ij}^{as} et H_{ij}^{vas} en fonction des intégrales X_b^k et $U_{b,a}^{k,s}$ qui peuvent être déterminées analytiquement.

AV-1. Calcul des intégrales $X_b^k(z)$:

Rappelons la forme (AV.8) de $X_b^k(z)$:

$$X_b^k(z) = \int_z^{+\infty} dz' \frac{e^{ibz'}}{z'^k} \quad (\text{AV.19})$$

Notons d'abord que, d'après son expression (AV. 9) ou (AV.16b), b est un réel de signe quelconque. Pour $z > 0$, l'intégrale $X_b^k(z)$ converge toujours absolument si $k > 1$. Au vu de l'expression (AIII.13), c'est précisément le cas $l \geq 1$ dans la somme sur l . L'expression (AV.6b) de k montre alors que $k \geq 2$.

Par ailleurs, nous avons la propriété suivante pour $X_b^k(z)$:

$$X_{-b}^k(z) = [X_b^k(z)]^* \quad (\text{AV.20})$$

Plusieurs cas peuvent se présenter, cas où $b=0$ et $b \neq 0$.

Dans le cas où $b \neq 0$, $X_b^k(z)$ est donné par la relation de récurrence suivante :

$$X_b^k(z) = \frac{1}{k-1} \left[\frac{e^{ibz}}{z^{k-1}} + ib X_b^{k-1}(z) \right] \quad (\text{AV.21})$$

avec $k \geq 2$.

Maintenant il suffit de trouver une forme analytique pour l'intégrale $X_b^1(z)$.

$X_b^1(z)$ peut être identifiée avec une exponentielle intégrale [17][38] :

$$X_b^1(z) = -Ei(ibz) \quad (\text{AV.22})$$

qui peut être représentée par une série, de la forme [39][40] :

$$Ei(-x) = \gamma + Ln(x) + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-x)^n}{n \cdot n!} \quad (x > 0) \quad (\text{AV.23})$$

où γ est la constante d'Euler.

Ce qui nous mène à la forme asymptotique de $X_b^1(\tilde{z})$ [17]:

$$X_b^1(z) = -e^{ibz} \left[\sum_{k=1}^n \frac{(k-1)!}{(ibz)^k} + R_n \right] \quad (\text{AV.24})$$

En pratique, n devra être choisi de telle façon que le reste R_n du développement soit minimum.

Cette condition conduit à la valeur de n suivante

$$n = \text{Ent}[|b|z] \quad (\text{AV.25})$$

AV-2. Calcul des intégrales $U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}_{iv})$:

Rappelons l'expression (AV.17) de $U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}_{iv})$. Pour simplifier l'écriture nous remplacerons \tilde{z}_{iv} par \tilde{z} dans tout ce qui suit.

Nous avons :

$$U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}) = \int_{\tilde{z}}^{+\infty} dz \frac{e^{-iaz}}{z^s} X_b^k(z) \quad (\text{AV.26})$$

Les valeurs de b et de a (relation AV.16a,b) pouvant être nulles, positives ou négatives.

Dans le cas où $b \neq 0$, $a \neq 0$ et $b \neq a$ la relation de récurrence sur k est donnée par [17]:

$$U_{b,a}^{k,s} = \frac{1}{k-1} \left[X_{b-a}^{s+k-1}(\tilde{z}) + ib U_{b,a}^{k-1,s}(\tilde{z}) \right] \quad (\text{AV.27})$$

avec $k \geq 2$

et la relation de récurrence sur s est exprimée par [17]:

$$U_{b,a}^{k,s}(\tilde{z}) = \frac{1}{s-1} \left[\frac{e^{-ia\tilde{z}}}{\tilde{z}^{s-1}} X_b^k(\tilde{z}) - X_{b-a}^{s+k-1}(\tilde{z}) - ia U_{b,a}^{k,s-1}(\tilde{z}) \right] \quad (\text{AV.28})$$

avec $s \geq 2$

Ces deux relations de récurrence sur k et s nécessitent l'évaluation de la forme analytique $U_{b,a}^{1,1}(\tilde{z})$ donnée par:

$$\begin{aligned} U_{b,a}^{1,1}(\tilde{z}) &\approx -X_{-a}^1(\tilde{z}) \left[\gamma - i \frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(b) + \operatorname{Ln}(|b|\tilde{z}) \right] \\ &- \left[\gamma - i \frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(a) + \operatorname{Ln}(|a|\tilde{z}) \right] \operatorname{Ln}(|a|\tilde{z}) - \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{(ia\tilde{z})^n}{n^2 \cdot n!} \\ &- e^{-ia\tilde{z}} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(b/a)^n}{n^2} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{(ia\tilde{z})^m}{m!} + S_a \end{aligned} \quad (\text{AV.29})$$

avec

$$\begin{aligned} S_a &= \left[\gamma + i \frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(a) + \frac{1}{2} \operatorname{Ln}(|a|\tilde{z}_1) \right] \operatorname{Ln}(|a|\tilde{z}_1) + \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n \frac{(ia\tilde{z}_1)^n}{n^2 \cdot n!} \\ &+ \sum_{k=1}^n (-1)^k \frac{(k-1)!}{(ia)^k} X_{-a}^{k+1}(\tilde{z}_1) \end{aligned} \quad (\text{AV.30})$$

Il faut noter que S_a dépend a priori de \tilde{z}_1 qu'on a choisi arbitrairement comme borne d'intégration ($\tilde{z}_1 > \tilde{z}$). Il est clair que $U_{b,a}^{1,1}(\tilde{z})$ ne doit pas dépendre de \tilde{z}_1 . Par ailleurs, seul S_a

peut dépendre de \tilde{z}_1 . Comme $U_{b,a}^{1,1}$ n'en dépend pas, il est clair que S_a doit être une constante. Ceci a été vérifié numériquement pour les valeurs de \tilde{z}_1 satisfaisant les conditions fixées pour cette borne.

Dans le cas où $b=a$

$$U_{a,a}^{1,1}(\tilde{z}) = - \sum_{k=1}^n \frac{(k-1)!}{k} \frac{1}{(ia\tilde{z})^k} - R_n(\tilde{z}) \quad (\text{AV.31})$$

avec

$$n = \text{Ent}[|a|\tilde{z}] \quad (\text{AV.32})$$

où n doit être choisi de telle façon que le reste R_n soit négligeable

$$|R_n(\tilde{z})| < \frac{n!\sqrt{2}}{|x|^{n+1}} \quad \text{où } |x| = |bz| \quad (\text{AV.33})$$

Pour \mathcal{X} suffisamment grand, $|R_n|$ commence à décroître quand n croît, passe par un minimum, puis croît. Il s'agit donc de déterminer la valeur de n correspondant au minimum de $|R_n|$.

Du fait que n est entier, on aura:

$$n = \text{Ent}[|x|] \quad (\text{AV.34})$$

Appendice-VI

La loi en ν^{-3} des éléments H_{ij}^ν

Dans cette partie on va essayer de donner la loi en ν^{-3} des éléments H_{ij}^ν et ceci en partant de la fonction d'onde radiale normalisée.

Nous avons :

$$R_{\nu l}(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(\nu+l)!}{(\nu-l-1)! 2\nu}} \left(\frac{2Z}{\nu}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{\nu}} \left(\frac{2Zr}{\nu}\right)^l F\left[-(\nu-l-1), 2l+2, \frac{2Zr}{\nu}\right] \quad (\text{AVI.1})$$

où F est la fonction Hypergéométrique confluyente.

En utilisant la formule de Stirling , on détermine le comportement de $R_{\nu l}$ pour ν grand (l fixé, $\nu \gg l$).

Nous avons alors:

$$(\nu+l)! = \sqrt{2\pi} (\nu+l)^{\nu+l+\frac{1}{2}} \exp\left[-(\nu+l) + \frac{\theta_1}{12(\nu+l)}\right] \quad (\text{AVI.2a})$$

et

$$(\nu-l-1)! = \sqrt{2\pi} (\nu-l-1)^{\nu-l-\frac{1}{2}} \exp\left[-(\nu-l-1) + \frac{\theta_2}{12(\nu-l-1)}\right] \quad (\text{AVI.2b})$$

On suppose que $\theta_1 \approx \theta_2$ et on pose alors:

$$\theta = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \quad (\text{AVI.3})$$

ce qui donne :

$$\frac{(\nu+l)!}{(\nu-l-1)!} = \exp\left\{\left(\nu+l+\frac{1}{2}\right)\text{Ln}(\nu+l) - \left(\nu-l-\frac{1}{2}\right)\text{Ln}(\nu-l-1) - (2l+1) + \frac{\theta}{12}\left[\frac{1}{\nu+l} - \frac{1}{\nu-l-1}\right]\right\} \quad (\text{AVI.4})$$

En écrivant:

$$\text{Ln}(\nu+l) = \text{Ln}(\nu) + \text{Ln}\left(1+\frac{l}{\nu}\right) \quad (\text{AVI.5a})$$

$$\text{Ln}(\nu-l-1) = \text{Ln}(\nu) + \text{Ln}\left(1-\frac{l+1}{\nu}\right) \quad (\text{AVI.5b})$$

En faisant un développement limité des logarithmes, nous obtenons:

$$\frac{(\nu+l)}{(\nu-l-1)!} = \nu^{2l+1} \exp\left\{-\frac{2l+1}{6\nu^2}\left[l(l+1) - \frac{1}{2} + \frac{\theta}{2\left(1+\frac{l}{\nu}\right)\left(1-\frac{l+1}{\nu}\right)}\right]\right\} \quad (\text{AVI.6a})$$

Si on retient que le terme $l(l+1)$ dans le crochet, le résultat est exact pour $l=0$.

Bien que θ dépend de l et ν , une bonne approximation est $\theta \approx l$. On peut donc écrire:

$$\frac{(\nu+l)}{(\nu-l-1)!} \approx \nu^{2l+1} \exp\left\{-\frac{l(l+1)(2l+1)}{6\nu^2}\right\} \quad (\text{AVI.6b})$$

De l'expression (AVI.1), on déduit alors pour la fonction :

$$R_{\nu}(r) \approx 2\left(\frac{Z}{\nu}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{(2Zr)^l}{(2l+1)!} \exp\left\{-\frac{l(l+1)(2l+1)}{12\nu^2}\right\} e^{-\frac{Zr}{\nu}} F\left[-(\nu-l-1), 2l+2, \frac{2Zr}{\nu}\right] \quad (\text{AVI.7})$$

La fonction radiale $R_{\nu}(r)$ est solution de l'équation :

$$\frac{d^2 R_{\nu}}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_{\nu}}{dr} + \left(2E + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) R_{\nu} = 0 \quad (\text{AVI.8})$$

Pour ν très grand et si $r \ll \frac{\nu^2}{Z}$, l'énergie $E = -\frac{Z^2}{2\nu^2}$ peut être négligée devant le terme en $\frac{1}{r}$ et $\frac{1}{r^2}$. et en développant R_ν sous la forme :

$$R_\nu = R_\nu^0 + \left(\frac{Z^2}{\nu^2}\right)R_\nu^1 + \frac{Z^4}{\nu^4}R_\nu^2 + \dots \quad (\text{AVI.9})$$

nous pouvons alors écrire, au premier ordre :

$$\frac{d^2 R_\nu^0}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_\nu^0}{dr} + \left(\frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)R_\nu^0 = 0 \quad (\text{AVI.10a})$$

La solution de cette équation différentielle est indépendante de ν . La forme normalisée de la solution s'écrit [45]:

$$R_\nu^0 = \frac{Z}{\nu^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2}{r}} J_{2l+1}(\sqrt{8Zr}) \quad (\text{AVI.11a})$$

où J_{2l+1} est la fonction de Bessel d'ordre $2l+1$.

Au deuxième ordre, nous obtenons:

$$\frac{Z^2}{\nu^2} \left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left(\frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) \right] R_\nu^1 = \frac{Z^2}{\nu^2} R_\nu^0 \quad (\text{AVI.11b})$$

Aux petits r , le membre de droite de (AVI.11b) est proportionnel à r^l , donc négligeable devant le terme en $\frac{1}{r}$ et $\frac{1}{r^2}$ du membre de gauche. Dans cette région, la solution pour R_ν^1 et par conséquent celle de l'équation (AVI.10a) on aura au premier ordre $R_\nu^1 \propto R_\nu^0$ soit:

$$\frac{Z^2}{\nu^2} R_\nu^1 \propto \frac{1}{\nu^2} R_\nu^0 \quad (\text{AVI.11c})$$

Au troisième ordre l'équation radiale nous donnerait encore :

$$R_\nu^2 \propto R_\nu^1 \propto R_\nu^0 \quad (\text{AVI.11d})$$

Nous obtenons finalement le comportement suivant de R_ν pour ν grand :

$$R_\nu(r) = \frac{Z}{\nu^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{2}{r}} J_{2l+1}(\sqrt{8Zr}) \left[1 + \frac{a}{\nu^2} + \frac{b}{\nu^2} + \dots \right] \quad (\text{AVI.12a})$$

Où a et b sont des constantes.

Ou encore en combinant ce résultat avec le développement pour $r \ll \frac{v^2}{Z}$ de l'expression (AVI.7) donnée dans [46], il vient :

$$R_{\nu}(r) = \frac{Z}{v^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{l(l+1)(2l+1)}{12v^2}\right\} \left[a' + \frac{b'}{v^2} + \frac{c'}{v^4} + \dots \right] \quad (\text{AVI.12b})$$

où a', b', c' dépendent ici de r mais pas de v .

A partir des expressions (III.20) et (III.25) des éléments $(i|VG_T^+V|j)$ et du comportement radial R_{ν} (AVI.12b) à des valeurs de v grandes, nous déduisons le comportement suivant pour les éléments H_{ij}^{ν} :

$$H_{ij}^{\nu} = \frac{1}{v^3} \exp\left\{-\frac{l(l+1)(2l+1)}{6v^2}\right\} \left[A + \frac{B}{v^2} + \frac{C}{v^4} + \dots \right] \quad (\text{AVI.13})$$

où A, B, C sont des constantes. Dans nos calculs nous nous sommes restreints au deuxième terme du développement, soit :

$$H_{ij}^{\nu} = \frac{1}{v^3} \exp\left\{-\frac{l(l+1)(2l+1)}{6v^2}\right\} \left[A + \frac{B}{v^2} \right] \quad (\text{AVI.14})$$

Pour déterminer A et B , nous avons utilisé la relation (AVI.13) avec le troisième terme du développement et nous avons résolu les équations en prenant les valeurs de $H_{ij}^{\nu} = \frac{1}{v^3} \exp\left\{-\frac{l(l+1)(2l+1)}{6v^2}\right\}$, H_1, H_2 et H_3 , pour trois valeurs consécutives de v , respectivement ν_1, ν_2, ν_3 . Nous avons obtenu alors :

$$A = \frac{1}{\nu_1^2 - \nu_3^2} \left[\frac{H_1 \nu_1^7 - H_2 \nu_2^7}{\nu_1^2 - \nu_2^2} - \frac{H_2 \nu_2^7 - H_3 \nu_3^7}{\nu_2^2 - \nu_3^2} \right] \quad (\text{AVI.15a})$$

$$B = \frac{H_2 \nu_2^7 - H_3 \nu_3^7}{\nu_2^2 - \nu_3^2} - A(\nu_2^2 - \nu_3^2) \quad (\text{AVI.15b})$$

La somme sur v des éléments H_{ij}^{ν} pour des v grands à partir d'une certaine valeur ν_0 (en prenant le terme exponentiel de (AVI.14) égal à 1) est donnée par :

$$\sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} H_{ij}^{\nu} = A \sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} \frac{1}{\nu^3} + B \sum_{\nu=\nu_0+1}^{+\infty} \frac{1}{\nu^5} \quad (\text{AVI.1})$$

Rappelons que la valeur maximale ν_0 est déterminée automatiquement par le programme de calcul qui teste, pour chaque valeur de v , la loi en v^{-3} des éléments H_{ij}^{ν} . Il faut noter également qu'un résultat similaire est obtenu pour le spectre du continuum de la cible en faisant la correspondance suivante $\nu = \frac{Z}{ik}$ pour passer de la fonction radiale R_{ν} à la fonction du continu R_{kl} .

الملخص:

إن الطرق النظرية المعتمد عليها في الدراسات الخاصة بالتصادمات الذرية و المرتكزة أساساً علي المبدأ التغري لشوينغر تعتبر ركيزة من الركائز الحديثة المعول عليها في حساب المقاطع الفعالة للإثارة المباشرة للذرات عن طريق الأيونات في المجال الطاقوي المتوسط و التي بإمكانها إعطاء نتائج جد مشجعة خاصة فيما يتعلق بالايون الشبه هيدروجيني Be^{3+} و كذا Li^{+2} في حالة تصادمه مع البروتون المرمرز إليه غالبا ب H^+ . نعرض في طيات هذا المقال طريقة جديدة (باستخدام 5 و 10 و 14 معادلة موجة) مرتكزة اساسا في شكلها العام على شكل كسري للمبدأ التغري لشوينغر. النتائج و النبوات النظرية في توافق جيد إن لم نقل تام مع المعطيات التجريبية الخاصة بإثارة المستويات الجزئية $(1s,2p)$, $(1s,2s)$ فتم الكلية $(n=2)$ الخاصة ب Be^{3+} (الذي يعتبر واحدة من الشوائب في البلازما Tokamak) في المجال الطاقوي المحدد من 40 keV إلى 4 MeV و من 9 keV إلى 4 MeV بالنسبة ل Li^{+2} الذي يشمل المجال الطاقوي المتوسط.

الكلمات المفتاحية :

المبدأ التغري لشوينغر، الاثارة الذرية، التصادمات الذرية، المقاطع الفعالة، معادلة الموجة.

Résumé :

Les méthodes variationnelles qui reposent sur la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger apparaissent comme un outil extrêmement efficace pour simplifier l'analyse perturbative dans l'étude des processus d'excitation directe des atomes par collision avec des ions à des énergies intermédiaires. En outre, cette méthode s'est avérée hautement efficace pour prédire les sections efficaces d'excitation directe des ions lithium (Li^{2+}) et béryllium (Be^{3+}) de type hydrogénoïdes par impact de protons aux énergies allant de 9 keV aux 3 MeV pour le Lithium et de 16 keV au 4 MeV pour le béryllium. Ces caractéristiques sont démontrées par une bonne concordance entre nos résultats théoriques, lorsque la fonction d'onde est représentée de manière adéquate (utilisant 5, 10 et 14 états), et les calculs théoriques disponibles obtenus via la méthode dites « Close coupling ». Cela inclut des approches telles que l'expansion orbitale atomique à deux centres (TCAO) d'Ermolaev et al., l'expansion à centre unique (SCE) de Hall et al., ainsi que les sections efficaces dites « coupled Sturmian » de Winter et al.

Mots clés : principe variationnel de Schwinger, excitation atomique, collision atomique, sections efficaces d'excitation, fonction d'onde.

Abstract :

Variation methods based on the fractional form of Schwinger's variational principle emerge as an extremely effective tool for simplifying perturbative analysis in the study of direct excitation processes of atoms through collisions with ions at intermediate energies. Furthermore, this method has proven to be highly efficient in predicting the direct excitation cross sections of hydrogen-like lithium ions (Li^{2+}) and beryllium ions (Be^{3+}) following proton impact within the energy range of 9 keV to 3 MeV and 16 to 4 MeV respectively. These characteristics are demonstrated by a good agreement between our theoretical results, when the wave function is adequately represented (using 5, 10, and 14 states), and the available theoretical calculations obtained through the close-coupling method. This includes approaches such as Ermolaev et al. two-center atomic orbital expansion (TCAO), Hall et al. single-center expansion (SCE), as well as Winter et al. coupled Sturmian cross sections.

Key word: Schwinger variational principle, atomic collision, direct excitation processes of atoms, excitations cross sections, wave function..