

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ ABOU BEKR BELKAÏD DE TLEMCEM
FACULTÉ DES SCIENCES
DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



THÈSE

Pour obtenir le grade de
DOCTEUR EN PHYSIQUES
Spécialité : *physique théorique*

Par

BOUSERHANE Adnane

Sur le thème

**Contribution du continuum dans les sections efficaces
d'excitation aux énergies intermédiaires**

Soutenue publiquement le 16 Janvier 2014, devant le jury d'examen composé de :

Président	Pr. BENYOUCEF Boumediene	(Univ. Tlemcen)
Directeur de Thèse	Pr. BOUAMOUD Mammour	(Centre Univ. Naâma)
Examineurs :	Pr. INAL Mokhtar Kamal	(Univ. Tlemcen)
	Pr. LASRI Boumediène	(Univ. Saïda)
	M.C.A. BENTALHA Zine El Abidine	(Univ. Tlemcen)
	Pr. DOGAN Mevlut	(Univ. Afyon .Turquie)

-Année Universitaire 2013/2014-

DEDICACE

Dédicaces

Je dédie ce travail de thèse à :

- ✓ *Mes parents*
- ✓ *Ma femme et mes enfants*
- ✓ *Mes frères et sœurs*
- ✓ *Mes proches*
- ✓ *Mes amis*

REMERCIEMENT

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire de physique théorique de l'université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen sous la direction de monsieur le professeur M. Bouamoud. Monsieur le professeur M. Bouamoud a dirigé ce travail avec beaucoup de compétence et efficacité. Je tiens à lui exprimer toute ma reconnaissance et je le remercie pour sa patience et l'intérêt qu'il a su réserver à ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à Monsieur B. Benyoucef, professeur à l'université Abou Bakr Belkaid pour avoir accepté la présidence du jury de cette thèse. A monsieur le professeur B. Benyoucef, j'ai toujours réservé un respect particulier.

Je tiens aussi à remercier Monsieur M. Inal professeur à l'université Abou Bakr Belkaid pour avoir accepté d'examiner ce travail. Mes profonds respects s'adressent aussi à monsieur le professeur M. Inal.

Monsieur A. Bentalha, maître de conférences à l'université Abou Bakr Belkaid, a accepté d'examiner ce travail. Je tiens à lui exprimer mes reconnaissances profondes.

J'exprime toute ma reconnaissance à Monsieur B. Lasri, professeur à l'université Dr. Moulay Tahar de Saïda pour avoir accepté la tâche de rapporteur.

Monsieur M. Dogan, professeur à l'université de Kocatep, Afyon, Turquie, a accepté de participer au jury de cette thèse autant que rapporteur. Qu'il trouve ici l'expression de mes plus vifs remerciements.

Mon séjour, autrefois à Metz, m'a été rendu très agréable et bénéfique grâce au groupe LPMC de l'université Paul Verlaine de Metz. Je tiens à exprimer toute ma gratitude aux membres du groupe et en particulier monsieur le professeur J. Hanssen.

Je suis très redevable au groupe du laboratoire de physique théorique de l'université Abou Bakr Belkaid pour leurs soutiens et aide réservé à mon égard.

Je suis très redevable aussi au staff administratif du département des sciences et celui de la faculté des sciences et techniques ainsi que celui du vice rectorat à la recherche, pour leur traitement efficace et rapide de nos dossiers.

Ma femme a fait preuve d'une grande patience durant les années écoulées au cours de l'élaboration de ce travail. Je tiens à lui exprimer mes gratitude et mon profond respect.

Mes amis aussi m'ont toujours encouragé à finaliser ce travail de thèse et tout particulièrement B. Kadri à qui je dois adresser mes remerciements les plus sincères.

SOMMAIRE

SOMMAIRE

Introduction générale.....	1
CHAPITRE I : ELEMENTS DE THEORIE DES COLLISIONS	
I.1 INTRODUCTION.....	3
I.2 DESCRIPTION DES PROCESSUS DE COLLISION.....	3
I.2.1 PROCESSUS DE COLLISION ET REGIME DES VITESSES.....	4
I.2.2 PROCESSUS DE COLLISION ET SEUILS ENERGETIQUES.....	6
I.3 DESCRIPTIONS THEORIQUES DES PROCESSUS DE COLLISION.....	6
I.3.1 DESCRIPTION INDEPENDANTE DU TEMPS.....	10
I.3.2 DESCRIPTION EN TERME DE FONCTION D'ONDE.....	12
I.3.3 DESCRIPTION EN TERME DE MATRICE DE TRANSITION.....	18
I.4 CONCLUSION.....	20
Bibliographie.....	21
CHAPITRE II : COLLISIONS ET APPROXIMATIONS	
II.1 INTRODUCTION.....	22
II.2 COLLISIONS ET APPROXIMATION DE BORN.....	24
II.2.1 HAMILTONIEN DU SYSTEME.....	24
II.2.2 MATRICE DE TRANSITION ET FACTEUR DE FORMME.....	23
II.2.3 SECTION EFFICACE.....	23
II.3 EXCITATION ELECTRONIQUE DANS L'APPROXIMATION PWBA.....	25
II.3.1 HAMILTONIEN DU SYSTEME.....	25
II.3.2 FONCTION D'ONDE.....	26
II.3.3 MATRICE DE TRANSITION.....	26
II.3.4 CALCUL DES ELEMENTS DE MATRICE DE TRANSITION.....	29
II.3.5 AMPLITUDE DE DIFFUSION.....	29
II.4 CONCLUSION.....	31
Bibliographie.....	32
CHAPITRE III : PRINCIPE VARIATIONNEL DE SCHWINGER	
III.1 INTRODUCTION.....	33
III.2 PRINCIPES VARIATIONNELS ET EQUATIONS INTEGRALES DE FREDHOLM.....	34
III.3 PRINCIPE VARIATIONNEL DE SCHWINGER.....	37
III.3.1 AMPLITUDE DE TRANSITION DE SCHWINGER.....	37

SOMMAIRE

III.3.2 CHOIX DES FONCTIONS DE BASE.....	43
III.4 FORMULATION VARIATIONNELLE.....	45
III.5 CONCLUSION.....	47
Bibliographie.....	48
CHAPITRE IV : EXCITATION D'UN SYSTEME HYDROGENOÏDE	
IV.1 INTRODUCTION.....	50
IV.1 AMPLITUDE DE TRANSITION VARIATIONNELLE.....	50
IV.2 CALCUL DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION.....	56
IV.2.1 AMPLITUDE DE TRANSITION EIKONALE.....	56
IV.2.2 SECTION EFFICACE D'EXCITATION.....	57
IV.3 EVALUATION DE L'AMPLITUDE DE TRANSITION VARIATIONNELLE.....	59
IV.3.1 LES ELEMENTS DE MATRICE DE TRANSITION DE PREMIER ORDRE.....	59
IV.3.2 LES ELEMENTS DE MATRICE DE TRANSITION DE DEUXIEME ORDRE.....	61
IV.3.3 LES ELEMENTS $W_{ij}(\vec{R})$ DU SPECTRE DISCRET.....	64
IV.3.4 LES ELEMENTS $W_{ij}(\vec{R})$ DU PSEUDO SPECTRE.....	68
IV.4 CONCLUSION.....	70
Bibliographie.....	71
CHAPITRE V : DISCRETISATION DU CONTINU ATOMIQUE	
V.1 INTRODUCTION.....	73
V.2 METHODE L^2	73
V.3 METHODE PSEUDO-ETATS.....	74
V.4 DEVELOPPEMENT L^2 DES FONCTIONS D'ONDE DE COULOMB.....	77
V.4.1 INTRODUCTION.....	77
V.4.2 LES ETATS DU CONTINUUM.....	77
V.4.3 LES ETATS LIES.....	81
V.5 PSEUDO-ETATS.....	83
V.5.1 RELATION DU DEVELOPPEMENT L^2 AVEC LES PSEUDO-ETAT.....	83
V.6 Conclusion.....	85
Bibliographie.....	86
CHAPITRE VI : DISCRETISATION DU CONTINUUM	
VI.1 INTRODUCTION.....	88

SOMMAIRE

VI.2 DISCRETISATION DANS L^2 DU CONTINUUM D'ETAT.....	88
VI.2.1 UN PROBLEME DE COULOMB.....	89
VI.2.2 SPECTRE DISCRET DES ETATS LIES.....	91
VI.2.3 PSEUDO-SPECTRE DES ETATS DU CONTINUUM.....	92
VI.3 Conclusion.....	92
Bibliographie.....	94
CHAPITRE VII : PERFORMANCE DES CALCULS	
VII.1 INTRODUCTION.....	95
VII.2 PERFORMANCE DES CALCULS SUR L^2	95
VII.2.1 PERFORMANCE SUR UNE BASE DE FONCTIONS DE TYPE LAGUERRE.....	95
VII.2.2 PERFORMANCE SUR UNE BASE DE FONCTIONS DE TYPE SLATER.....	96
VII.3 RESULTATS ET DISCUSSION.....	98
VII.4 CONCLUSION.....	120
Bibliographie.....	122
Conclusion générale.....	124
ANNEXE A-I.....	127
ANNEXE A-II.....	132
ANNEXE A-III.....	133
ANNEXE A-IV.....	135
ANNEXE A-V.....	136
ANNEXE A-VI.....	137

INTRODUCTION GENERALE

Durant les dernières décennies une quantité considérable de travaux théoriques avait été consacrée à l'étude et la compréhension des processus de collisions. Ce domaine qui date de Rutherford s'est développé d'une manière très rapide et impressionnante dans un des secteurs les plus actifs de la recherche qui est la physique atomique, aussi bien du point de vue expérimental que théorique. A présent, beaucoup de nouveaux aspects des collisions atomiques attirent l'attention de plusieurs groupes de recherches expérimentaux et théoriques. Ces travaux théoriques sont motivés non seulement par leurs propres ampleurs scientifiques, mais aussi par de nombreuses applications tant dans les secteurs académiques que industriels. Seule une harmonie entre l'expérience et la théorie peut contribuer considérablement au progrès général des deux secteurs, notamment à une évaluation claire de la fiabilité des résultats expérimentaux et théoriques.

Sous l'égide du professeur M. Bouamoud, les travaux du groupe de physique des collisions atomiques ont débuté en 1992 avec E. H. Cherifi, A. Bouserhane et R. Bensaid. Ils ont affiné et adapté la méthode semi-classique connue sous l'appellation du modèle de Glauber, aux processus d'excitation atomique. En 1995, une nouvelle approche du principe variationnel de Schwinger, spécialement adapté à l'étude des processus collisionnels de type ion-atome, a été initiée avec la venue au sein du groupe de B. Lasri puis K. Safi et L. Bettaj deux ans plus tard.

Ces dernières années, l'activité de ce groupe s'est fait connaître dans le secteur de la théorie des collisions atomiques. Plus tard, les études faites sur l'excitation atomique ont été étendues à d'autres processus, incluant l'ionisation, la capture électronique et l'interaction entre les processus atomiques et nucléaires etc....Au cours de cette période, une série de codes informatiques de plus en plus complexes a été développée, modifiée et améliorée afin d'aboutir à une description plus précise et plus réaliste du phénomène de collisions atomiques. Les principaux axes de recherche du groupe des collisions atomiques de Tlemcen sont :

- Traitement variationnel des collisions atomiques.
- Collisions ions multichargé-atome.
- Excitation d'atomes par des ions.
- Ionisation des gaz rares et de la molécule d'eau (H_2O) par impact d'électrons et d'ions.
- Interaction rayonnement ionisant-matière biologique

Dans ce manuscrit, notre intérêt porte sur la contribution du continuum dans les sections efficaces d'excitation atomique par impact d'ions nus aux énergies intermédiaires. Nous utilisons l'approche variationnelle développée par le groupe de M. Bouamoud dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact. Nous suivons les mêmes procédures pour extraire les informations nécessaires sur le problème qui nous intéresse. Aucune modification ne sera

apportée au niveau de la procédure de calcul lorsqu'il s'agit des états liés de la cible. Le continuum sera introduit par la suite en utilisant une méthode L^2 supporté par certaines procédures de discrétisation sur un ensemble complet de fonctions de carrés sommables.

Le texte de ce manuscrit sera réparti sur sept chapitres. Dans le premier chapitre, nous faisons un rappel sur la théorie des collisions. Après un historique sur la théorie des collisions, nous définissons les grandeurs et les paramètres qui lui sont propre. Le deuxième chapitre sera consacré aux méthodes d'approximation couramment utilisées pour les calculs dans la théorie des collisions. Il s'agit de l'approximation de Born et de l'approximation de Born des ondes planes(PWBA). Ces deux approximations sont les plus souvent utilisées dans l'approche des systèmes perturbés. Le troisième chapitre est dédié au fameux principe variationnel de Schwinger et de ses prédécesseurs. Nous optons plus particulièrement pour le principe variationnel de Schwinger pour traiter le problème des états liés et de diffusion. Dans le quatrième chapitre, nous appliquons le principe variationnel de Schwinger pour le calcul des sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires. A la fin de ce chapitre, nous discuterons des grandeurs physiques directement liées aux transitions entre états liés et états du continuum proche du seuil d'ionisation. Les éléments de matrices de transition qui en découlent seront nécessaires pour l'extraction d'une information sur la contribution du continuum proche dans les sections efficace d'excitation aux énergies intermédiaires.

La représentation du continuum proche du seuil d'ionisation par une approche pseudo-états est possible via une discrétisation dans L^2 sur un ensemble complet de fonctions non orthogonales de type Laguerre. Le chapitre cinquième entame une discussion sur ce sujet dans le concept de la méthode de la matrice J de Yamani et Reinhardt. Les pseudo-états discrétisés sur l'ensemble complet de fonctions L^2 seront nécessaires pour l'évaluation des éléments de matrice de transition entre états liés et ceux du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible. Dans le sixième chapitre, nous traitons du problème des pseudo-états d'une cible hydrogène à un électron actif en suivant une stratégie élaborée dans le cadre de la méthode de la matrice J de Yamani et Reinhardt. Les pseudo-états issus de cette stratégie seront traités variationnellement dans le cadre du principe variationnel de Schwinger. Dans le chapitre septième, nous terminerons notre manuscrit par une discussion des résultats obtenus par les différentes procédures utilisées pour discrétiser le continuum proche du seuil d'ionisation de la cible. Les procédures de calcul discutées dans ce septième chapitre font référence à quelques pages jugées nécessaires ajoutées comme annexes à la fin de ce manuscrit.

CHAPITRE I
ELEMENTS DE
THEORIE DES
COLLISIONS

I.1 Introduction

Les processus de collision sont très communs dans certain domaine de science physique telle que la physique des particules, la physique atomique et moléculaire, la physique nucléaire et thermonucléaire ainsi que l'astrophysique et la physique des plasmas. L'analyse rigoureuse de ces processus, plus particulièrement en matière de sections efficaces, constitue une source d'information très importante sur la structure atomique et moléculaire et sur la structure des partenaires d'une collision en générale. Ces informations directement accessibles par l'expérience, présentent un intérêt aussi bien fondamental que pratique pour la compréhension de nombreux phénomènes naturels notamment pour la physique des plasmas et la physique thermonucléaire.

En astrophysique, les mécanismes élémentaires d'interaction (capture, ionisation, excitation) interviennent lors de formation d'objets cosmologiques tels que les disques d'accrétion autour des trous noirs [1, 2]. Dans le domaine de la fusion thermonucléaire, l'étude des phénomènes d'ionisation et d'excitation est fondamentale pour le développement de la physique des plasmas de fusion thermonucléaire, dans lesquels les collisions conduisent à la production d'ions excités dont la désexcitation se traduit par l'émission de rayons X [3, 4]. Grâce à des méthodes performantes de spectroscopie, il est possible d'obtenir une estimation précise de la densité et de la température ainsi que la mise en évidence des processus de transfert d'énergie au sein de ces plasmas chauds [5].

I.2 Description des processus de collision

Les processus de collision sont, habituellement, formulés en utilisant l'équation de Schrödinger de la mécanique quantique non relativiste pour un nombre fixe de composants. Les interactions fondamentales entre composants sont souvent représentées par des potentiels simples. Ces potentiels sont, dans certain cas, choisis comme modèle pouvant être manipulé facilement. Une fois, les potentiels définis, l'équation de Schrödinger est résolue de manière cohérente avec les conditions aux limites du problème en considération [6].

Dans un processus de collision, nous avons affaire à une interaction entre deux classes d'objets fréquemment appelés particules. Ces objets ne sont pas nécessairement démunis d'une structure de particules fondamentales comme le photon et l'électron, mais pouvant être des objets quantiques composites tels que nucléons, noyaux, atomes ou molécules. Généralement, dans une expérience de collision au laboratoire, une cible composée essentiellement d'objets sans interaction est bombardée par un faisceau de particules. En

physique des hautes énergies, il pourrait s'agir d'une expérience de collision entre deux faisceaux (collimatés et monoénergétiques) entrant en interaction dans une petite région de l'espace. L'expérience de collision entre faisceaux de particules a l'avantage de faire croître l'énergie du centre de masse sans augmenter l'énergie des particules dans chaque faisceau. Dans les deux cas, après interaction à partir d'un état initial, une collection d'objets dans un état final émerge du centre de diffusion et une partie de ces objets est détectée dans une région loin de la zone d'interaction.

Le plus grand soin doit être observé dans l'étude de la distribution angulaire ou bien du spectre de particules à l'état finale. Les résultats expérimentaux sont alors interprétés en utilisant un modèle de mécanique quantique non relativiste avec un potentiel d'interaction adéquat. Une analyse du processus de collision entre les deux types d'objets nous donne l'opportunité d'extraire une information sur le potentiel d'interaction même si celui-ci n'est pas connu avec précision. Si bien que nous sommes suffisamment renseignés sur l'interaction de coulomb entre particules chargées, le potentiel d'interaction entre deux atomes ou bien entre un électron et un atome n'est pas encore connu avec précision.

Une interaction entre objets ou partenaires dans l'état initial et final est localisée dans l'espace et le temps. Un processus de diffusion entraînera une redistribution ou bien un réarrangement des constituants des deux objets initiaux. En physique atomique, les constituants sont des noyaux et des électrons, en physique moléculaire se sont des atomes, et en physique nucléaire se sont des nucléons. Les composants librement mobiles dans la région asymptotique dans l'état finale pourraient être soit les constituants soit les composites formés à partir des constituants initiaux. Évidemment, un processus de diffusion raconte une histoire entière du processus, partant du passé infini vers un futur infini. Le processus physique est explicitement dépendant du temps et nécessite un traitement en termes de paquets d'ondes satisfaisant l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Cependant une description du problème basé sur l'équation de Schrödinger non relativiste et indépendant du temps avec des conditions aux limites asymptotiques appropriées est possible. Cette description est généralement employée dans l'analyse théorique des processus de diffusion [6].

I.2.1 Processus de collision et régime des vitesses

L'exemple le plus simple d'un processus de diffusion est celui d'une particule simple qui interagit avec un centre de force de portée finie. Dans de tel processus, la particule se déplace généralement avec une vitesse constante dans différentes directions. Ce centre de force est souvent appelé potentiel de diffusion et l'interaction peut être décrite par un potentiel à un

corps. Ce potentiel peut décrire, dans le cas le plus simple, une interaction entre deux objets dans un repère lié au centre de masse où aucun changement de structure des deux objets n'est observé comme résultat de la collision. Dans une situation pareille où les objets en interaction sont les mêmes dans le passé infini et dans le future infini, on parle de processus de diffusion élastique. Dans un tel processus, la configuration initiale et finale diffère au maximum en vitesse et en orientation de spin des particules [7].

Dans une situation un peu plus compliquée, les objets sans interaction avant et après collision ne sont pas nécessairement les mêmes : deux molécules, par exemple, peuvent diffuser dans une configuration finale représentée par des atomes dissociés ou bien des états excités. Elles peuvent même former deux nouvelles molécules. Dans ces processus, quand l'état des objets finaux représente l'état excité des objets initiaux, alors, on parle de processus d'excitation. Le processus est appelé réaction ou dissociation, si l'état final comporte plus de deux objets.

Si dans l'état final, les deux objets formés ont des structures internes distinctes des objets initiaux, le processus est dit réarrangement. Toutes les situations décrites auparavant, peuvent être illustré par un système de trois particules A, B et C en interaction. Pour ces trois particules, les différents processus de diffusions possible sont :



BC est l'état fondamental des particules BC alors que $(BC)^*$ est l'état excité.

En physique atomique et moléculaire et en chimie physique, un type spécial de dissociation où l'électron lié est éjecté d'un atome ou d'une molécule est appelé ionisation. De manière générale, lors des collisions atomiques, l'importance des mécanismes d'interaction (capture, ionisation, excitation) entre une particule chargée et un atome dépend essentiellement de la vitesse v_p du projectile par rapport à la vitesse v_i de l'électron actif de la cible. En particulier, à haute vitesse de collision ($v_p \gg v_i$), les processus d'ionisation et d'excitation de l'atome cible sont dominant.

Trois principaux régimes de vitesse sont par conséquent définis selon l'importance des processus dynamiques en comparant la vitesse v_p du projectile à la vitesse classique de l'électron actif de la cible.

1. le régime des basses vitesses où v_p est inférieur à v_i .
2. le régime des vitesses intermédiaires où v_p est comparable à la vitesse v_i .
3. le régime des hautes vitesses où v_p est supérieur à v_i .

En effet, à basse énergie le processus de transfert de charge sera prédominant tandis que les processus d'ionisation et d'excitation sont dominants aux régimes de hautes vitesses de collision.

I.2.2 Processus de collision et seuils énergétique

Une analyse en termes d'énergie de collision est toujours possible. En effet, un processus élastique intervient pour toute énergie positive du centre de masse. Tandis que les processus inélastiques et de dissociation sont permis si l'énergie incidente du centre de masse est plus grande par rapport à certaines valeurs positives d'énergie appelées respectivement seuil d'excitation ou de dissociation. Le seuil d'une diffusion élastique est en zéro pour le système du laboratoire et celui du centre de masse CM, tandis que le seuil des processus inélastiques et de dissociation peut prendre différentes valeurs positives de l'énergie. Le seuil dans le cas d'un réarrangement doit être en dessous ou bien en dessus du seuil élastique dépendant de la différence d'énergie de liaison entre clusters BC et CA qui doit être soit positif soit négatif.

I.3 Description théorique des processus de collision

Chacune des configurations des processus décrites auparavant correspond à ce que l'on appelle voie physique ou tout simplement voie. Une voie est associée à des partitions de particules dans un Cluster (agrégat). Il est possible d'avoir plus d'une voie dans une partition. Il est fréquemment convenable de travailler dans le système du centre de masse CM, et de dissocier le Hamiltonien H en différentes parties.

$$H = \sum H_i + \sum_{i>j} V_{ij} \quad (I.5)$$

où H_i est l'énergie cinétique de la particule et V_{ij} potentiel entre particules i et j correspondant à une partition où l'Hamiltonien peut convenablement être dissocié en une partie H_a interne et une partie V^a externe tel que :

$$H = H_a + V^a \quad (I.6)$$

La quantité H_a représente l'énergie cinétique et les potentiels d'interactions internes à la partition a et V^a le potentiel d'interaction entre clusters de la partition a .

L'équation de Schrödinger argumentée de certaines conditions aux limites correctes suffit pour implémenter une solution au problème physique. Pour un problème à deux corps, on

peut trouver une solution par intégration numérique directe de l'équation différentielle de Schrödinger indépendante du temps dans une configuration en espace avec les interactions exprimées en termes de potentiel locales. Cette approche élémentaire n'est pas très commode quand les potentiels sont plus compliqués ou bien lorsque le processus de diffusion entraîne plusieurs voies, ce qui est souvent le cas dans des situations réelles. La résolution numérique directe de l'équation de Schrödinger sera donc une tâche délicate dans des situations réelles.

L'imposition de conditions aux limites de diffusion est numériquement la tâche la plus difficile pour obtenir une solution de l'équation de Schrödinger pour des problèmes de diffusion en présence de plusieurs voies ouvertes. Dans ce cas, l'équation intégrale de diffusion dans l'espace des moments développée par Lippmann et Schwinger fournit un grand avantage. Les conditions aux limites sont automatiquement incorporées dans cette équation [8, 9, 10]. Lippmann et Schwinger ont pu exprimer le problème de diffusion dans l'espace des moments en termes d'équations intégrales de type Fredholm de seconde catégorie [6]. Le développement original de ce type de stratégie étant strictement correct seulement pour un potentiel de diffusion à une seule voie. Plus tard, Lippmann étend ce travail pour inclure une diffusion aux voies multiples [10].

Pour un problème simple voie à deux corps, après discrétisation, l'équation de Lippmann-Schwinger originale se transforme en un ensemble d'équations algébriques linéaires qu'on peut résoudre par inversion de matrice (par ex). Dans un processus de discrétisation, on doit avoir besoin de manipuler des intégrales aux valeurs principales qui nécessitent un certain soin particulier. Plusieurs façons de manipuler de telles intégrales sont actuellement connues. La procédure d'inversion de matrices rencontrée dans la résolution de l'équation de Lippmann-Schwinger entraîne une accumulation d'erreurs numériques engendrant des difficultés dans l'obtention des résultats souhaités. Le besoin de stratégies puissantes pour résoudre des problèmes de diffusions réelles peut être grandement contourné. Parmi ces stratégies on peut citer les approches variationnelles et les séries itératives de Neumann.

Les algorithmes spécifiques basés sur les stratégies citées ci-dessus ont souvent été utilisés pour la résolution numérique des modèles de collisions en physique atomique, moléculaire et nucléaire. Deux types d'approches variationnelles existent en général pour résoudre un problème de diffusion. Le premier est basé sur l'équation de Schrödinger et exploite les expressions stationnaires de certaines observables tel que le déphasage de diffusion. Le deuxième type est basé sur la nature opérationnelle de la matrice de transition et exploite des expressions stationnaires de cet opérateur et les observables qui sont étroitement liées aux

éléments de matrice de cet opérateur. Dans les deux cas, la solution est développée sur une base de fonctions bien connues, et les coefficients de développement sont donc déterminés variationnellement en résolvant un système algébrique d'équations linéaires souvent rencontré dans la résolution directe. Pour des applications rigoureuses des méthodes variationnelles, les fonctions de base considérées forment généralement un ensemble complet de fonctions de base orthonormées. Malheureusement, dans une implémentation pratique, il se trouve qu'une telle base est rarement formulée et souvent c'est une base de fonctions linéairement dépendant qui est utilisée. Dans ces méthodes, certaines intégrales sont calculées soit dans une configuration d'espace ou bien dans l'espace des moments et en conséquence des solutions d'équations algébriques sont obtenues.

L'approche variationnelle pose certaines difficultés. En effet, le succès d'un calcul variationnelle dépend d'une conjecture initiale correcte. A moins que la conjecture initial soit appropriée et on peut trouver des résultats précises avec un nombre petit de fonction de base, mais la convergence peut être lente.

Si le nombre de fonction de base augmente, il y'aura compétition entre précision et accumulation d'erreurs numériques. Dans certaines situations c'est le problème d'accumulation d'erreurs qui domine et pose des difficultés pour arriver à des résultats correctes. En pratique, un système d'équations linéaire devient presque singulier quand le nombre de fonction de base augmente et ceci impose aussi une limite en précision finale. Puisque les fonctions d'ondes du continuum de diffusion ne sont pas de carré sommable, des intégrales peuvent être rencontrées dans l'approche variationnelle avec des fonctions non L^2 , qui sont plus difficiles à évaluer que celles rencontrées dans les calculs des états liées. En dépit de ces difficultés, l'approche variationnelle a émergé dans les deux dernières décennies comme étant l'un des outils les plus puissants dans la résolution des problèmes de diffusion.

L'avantage d'utiliser les séries de Neumann de l'équation de Lippmann-Schwinger [6,7] est qu'elles nécessitent seulement des opérations de multiplications successives de type matrice-vecteurs où l'accumulation d'erreurs est faible. Ainsi, si les séries de Neumann convergent de manière satisfaisante, ceci conduit à une précision élevée dans les résultats souhaités. Malheureusement, dans la plupart des problèmes de diffusion, les séries de Neumann divergent à l'exception lorsqu'il s'agit de processus à très haute énergies. Dans ce cas, en introduisant un terme de soustraction dans l'équation originale de Lippmann-Schwinger, on peut écrire une équation intégrale auxiliaire de diffusion ne souffrant pas de singularité. Cette équation est appelé équation de la matrice Γ qui permet à son tour une

convergence rapide des solutions itératives du problème de diffusion à basse énergie. Si la convergence des solutions itératives de la matrice Γ n'est pas satisfaisante, une solution peut être cherchée par d'autres moyens. On peut, par exemple, utiliser les méthodes variationnelles ou bien d'autres méthodes similaires pour trouver la solution du problème de diffusion. Un avantage dans les équations de la matrice Γ est qu'elle ne contient pas d'intégrale à valeur principale. Cependant, après obtention de la matrice Γ on doit évaluer une intégrale simple à valeur principale sur les éléments de la matrice Γ , une tâche qui peut se faire aisément. Une solution de problème de diffusion utilisant une équation auxiliaire non singulière comme l'équation de la matrice Γ est un autre outil puissant pour obtenir des résultats satisfaisants.

La situation est encore plus compliquée quand il s'agit d'un problème à voies multiples à plusieurs particules et la plus part de ces problèmes d'intérêt physique entre dans cette catégorie. Bien que les équations de Lippmann-Schwinger manipulent la solution de problème de diffusion, il est pratiquement impossible d'extraire une solution numérique à cause de la nature male définie et du découplément qui existe dans ce système d'équation. Rigoureusement, ce type de problème a été reformulé en termes d'équation intégrale de Fadéev-Yakubovskii [11, 12, 13] dans le cas d'un potentiel à courte portée. Dans le cas de trois ou quatre particules, ces équations ont été résolues pour certains problèmes de diffusion nucléaire. Quand le nombre de particules est supérieur à quatre, ces équations deviennent assez compliquées pour être traité numériquement. Pour des potentiels à longues portées (physique atomique et nucléaire), ces équations deviennent males définies. Dans ce dernier cas, des modèles de diffusions à voies multiples avec solution unique ont été proposés et utilisés avec un grand succès en physique nucléaire, atomique et moléculaire. Ce sont des équations aux voies de réaction couplées en physique nucléaire [14, 15] et les équations close coupling en physique atomique et moléculaire [14, 15, 16]. Toutes ces équations approchées peuvent être trouvées sous forme d'un système d'équations intégrale couplées avec solution unique. Ce système d'équations couplées peut être résolu numériquement comme dans le cas des équations de Lippmann-Schwinger simple voie.

Le problème de diffusion aux voies multiples sort du cadre de ce travail de thèse. Une analyse du problème dans le cas d'une diffusion simple voie sera entamée par la suite. On utilisera une description indépendante du temps suivi d'un traitement en termes de fonctions d'onde. On finira par introduire la notion de matrice de transition et les éléments qui s'y rapportent. Les solutions de l'équation de Lippmann-Schwinger pour un processus simple voie seront traitées dans le cadre d'une approche variationnelle de Schwinger élaboré par

notre groupe [17, 18, 19]. Ces solutions seront définies en termes d'amplitude de transition variationnelle nécessaire pour l'évaluation des sections efficaces.

I.3.1 description indépendante du temps

Il faut savoir que les processus de diffusions dépendent explicitement du temps. Cependant, dans un traitement numérique des états de diffusion et des états liés, une formulation indépendante du temps est généralement utilisée. Dans ce paragraphe, nous montrons combien une description du problème indépendant du temps est possible. En effet, les problèmes d'états liés est de diffusion sont gouvernés par l'équation de Schrödinger dépendante du temps ;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (\text{I.7})$$

où l'Hamiltonien total du système $H = H_0 + U$ avec H_0 l'énergie cinétique totale aussi appelé hamiltonien libre et U le potentiel d'interaction.

Pour un potentiel indépendant du temps, la dépendance en fonction du temps du problème des états liés est donnée par le facteur de phase $\exp(-i \mathcal{E}_b t/\hbar)$, où \mathcal{E}_b est l'énergie de l'état lié. En effet, toute les valeurs moyennes cherchées et probabilité en relation avec le module au carré $|\psi(t)|^2$ sont indépendant du temps et ne change pas au cours du temps. Un tel état lié est donc absolument stable et ne change pas avec le temps. Quoique les processus de diffusions sont explicitement dépendants du temps, une description indépendante du temps est possible [6,7]. Supposons que le centre de diffusion se trouve à l'origine et que la diffusion prenne place à $t = 0$. La particule incidente peut être décrite par un paquet d'onde $|\phi(t)\rangle$ satisfaisant l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = H_0|\phi(t)\rangle \quad (\text{I.8})$$

avec la condition de normalisation

$$\langle \phi(t) | \phi(t) \rangle = \int d^3x \phi^*(\vec{x}, t) \phi(\vec{x}, t) = 1 \quad (\text{I.9})$$

où $\phi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x} | \phi(t) \rangle$ est la représentation dans l'espace de configuration de la fonction d'onde.

Le mouvement de la particule incidente est décrit par l'état d'une particule libre $\phi(t)$ dans le passé infini loin du centre de diffusion. Cette état évolue en fonction du temps d'une manière assez compliqué jusqu'à ce que la particule interagit avec le centre de diffusion à $t = 0$. Elle sera, finalement, détectée dans le future infinis loin du centre de diffusion. Toute

solution de l'équation précédente peut s'écrire sous forme d'une superposition de fonction d'onde plane de vecteur d'onde \vec{k} et d'énergie \mathcal{E}_k :

$$\phi(\vec{x}, t) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3k a(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x} - \frac{\mathcal{E}_k t}{\hbar})} \quad (\text{I.10})$$

où $\mathcal{E}_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, avec m la masse réduite du système quantique.

La condition de normalisation impose une contrainte à la fonction poids $a(\vec{k})$ de la forme :

$$\int d^3k |a(\vec{k})|^2 = 1 \quad (\text{I.11})$$

où $|a(\vec{k})|^2$ est la probabilité pour que la particule libre ait un moment \vec{k} .

Si l'état de la particule libre s'approche de l'état d'une particule de moment défini \vec{k}_0 , alors $|a(\vec{k})|^2$ sera forcément atteinte si on a $\vec{k} = \vec{k}_0$. Idéalement, la représentation d'une particule par un paquet d'onde de moment fixe \vec{k}_0 est donnée par $a(\vec{k}) = \delta(\vec{k} - \vec{k}_0)$. Cependant, comme les paquets d'ondes sont solutions de l'équation de Schrödinger, alors elle se propage dans l'espace avec le temps. Ainsi, pour un traitement réaliste du processus de diffusion, il est utile de savoir si la description en paquet d'onde sera significative ou non. Le problème de diffusion dynamique est gouverné par l'équation de Schrödinger et comme dans le passé infini, l'état de diffusion est essentiellement celui d'une particule libre. Nous avons donc la condition aux limites asymptotiques :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} [|\psi^*(t)\rangle - |\phi(t)\rangle] = 0 \quad (\text{I.12})$$

Même si seul existe la condition au limite précédente pour définir une formulation mathématique du processus de diffusion, il est raisonnable pour un potentiel indépendant du temps qu'il soit possible de développer une théorie de diffusion indépendante du temps. Pour un tel potentiel, l'évolution en fonction du temps de l'état de diffusion est donné par :

$$|\psi^+(t)\rangle = e^{-\frac{H}{\hbar}t} |\psi^+(0)\rangle \quad (\text{I.13})$$

L'évolution en fonction du temps de l'état d'une particule libre est donnée par :

$$|\phi^+(0)\rangle = \Omega^{(+)} |\phi(t)\rangle \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \exp\left(i\frac{H}{\hbar}t\right) \exp\left(-i\frac{H_0}{\hbar}t\right) |\phi(t)\rangle \quad (\text{I.14})$$

où

$$\Omega^{(+)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \exp\left(i\frac{H}{\hbar}t\right) \exp\left(-i\frac{H_0}{\hbar}t\right) \quad (\text{I.15})$$

C'est l'opérateur indépendant du temps de Möller qui relie un état libre à l'instant t à un état de diffusion à l'instant t .

Une condition suffisante d'existence de la limite précédente est que le potentiel devra avoir une norme finie [6]. Comme l'opérateur de Möller est indépendant du temps, il est donc possible de développer une théorie de diffusion indépendante du temps. Pour un potentiel courte portée sans singularité, on peut formuler cette théorie de diffusion en termes d'opérateur de Möller $\Omega^{(+)}$. Une formulation indépendante du temps est possible si dans la description en paquet d'ondes on considère des états idéalisés d'énergie et de moment bien défini, correspondant au paquet d'ondes défini auparavant. Nous assumons, par conséquent, la forme indépendante du temps :

$$|\phi(t)\rangle = \int d^3k a(\vec{k}) \exp\left(-i \frac{\mathcal{E}_k}{\hbar} t\right) |\phi_{\vec{k}}\rangle \quad (\text{I.16})$$

où $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ est un état idéalisé (onde plane) de moment bien défini \vec{k} satisfaisant l'équation de Schrödinger d'une particule libre :

$$(\mathcal{E}_k - H_0)|\phi_{\vec{k}}\rangle = 0 \quad (\text{I.17})$$

La représentation dans l'espace de configuration de $\phi_{\vec{k}}$ est donnée par :

$$\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \phi_{\vec{k}} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (\text{I.18})$$

Si la condition aux limites précédente est maintenue et que l'opérateur de Möller existe, il est raisonnable d'avoir la fonction d'onde de diffusion sous la forme :

$$|\psi^+(t)\rangle = \int d^3k a(\vec{k}) \exp\left(-i \frac{\mathcal{E}_k}{\hbar} t\right) |\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle \quad (\text{I.19})$$

où $|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle$ est l'état de diffusion idéalisé de moment bien défini \vec{k} satisfaisant l'équation de Schrödinger :

$$(\mathcal{E}_k - H)|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = 0 \quad (\text{I.20})$$

La représentation indépendante du temps reliant l'état libre et l'état de diffusion implique que pour le potentiel est indépendant du temps. La dépendance en temps à la fois des états libre et de diffusion est gouvernée par un facteur de phase trivial $\exp\left(-i \frac{\mathcal{E}_k}{\hbar} t\right)$. En revanche, une détermination des états indépendants du temps $|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle$, cohérente avec les conditions aux limites de diffusions sont suffisantes pour une description dépendante du temps du processus de diffusion.

I.3.2 Description en termes de fonction d'onde

Considérons dans un premier temps, le cas le plus simple d'une diffusion simple voie d'une particule interagissant avec un centre de force via un potentiel local de courte

portée $U(r)$. Ce traitement est aussi valable pour une diffusion de deux particules dans un système du centre de masse CM. Ceci est possible dans la mesure où on peut séparer le mouvement du centre de masse CM du mouvement relatif des deux particules. Ce mouvement relatif est responsable de la diffusion et peut être traité de la même façon que le mouvement d'une particule dans un champ central. La fonction d'onde $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger dans l'espace de configuration :

$$(\mathcal{E}_k - \mathcal{H})\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = 0 \quad (\text{I.21})$$

Le potentiel d'interaction U décroît plus rapidement que $1/r$ à l'infini et est sans singularité ailleurs. Le vecteur \vec{k} représente le vecteur d'onde incident et \mathcal{E}_k l'énergie totale du système dans le référentiel du centre de masse CM. L'indice supérieur (+) sur ψ indique qu'il s'agit d'une solution avec une fonction d'onde sortante.

Pour les états liés, l'équation de Schrödinger ci-dessus permet d'avoir une solution seulement à des énergies discrètes négatives cohérente avec la croissance exponentielle de la condition aux limites asymptotiques. Ces énergies sont les énergies des états liés. Une condition au limite physique correcte exclut toutes solutions correspondantes à d'autres énergies négatives.

Pour un problème de diffusion, l'énergie totale \mathcal{E}_k est donnée et la solution de l'équation de Schrödinger donne la condition aux limites asymptotiques pour la fonction d'onde. Généralement il est plus commode d'écrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$(E - H)|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = [\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2 + V(\vec{r})]|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = 0 \quad (\text{I.22a})$$

où l'on a :

$$V(\vec{r}) = 2mU(\vec{r})/\hbar^2 \text{ et } E = K^2 = 2m\mathcal{E}_k/\hbar^2 \quad (\text{I.22b})$$

V : Le potentiel d'interaction.

E : L'énergie du centre de masse CM.

H : Le Hamiltonien total.

H_0 : Le Hamiltonien libre.

Dans l'unité $\hbar^2/2m$, où m est la masse réduite, la condition aux limites asymptotiques satisfaite par la fonction d'onde est :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(r) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\exp(ikz) + f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r} \right] \quad (\text{I.23})$$

C'est la superposition d'une fonction d'onde plane dans la direction z et une fonction d'onde sphérique sortante. L'angle θ représente l'angle entre la direction de l'onde diffusée (\vec{k}') et la direction incidente (\vec{k}) et $f(\theta)$ est l'amplitude de l'onde sortante sphérique. C'est l'amplitude de transition de l'onde sphérique dépendant de l'angle θ . L'angle azimutal ϕ n'apparaît pas en raison de la symétrie sphérique du potentiel. L'équation précédente représente une condition aux limites d'état régulier. Ceci veut dire qu'on est en présence d'un faisceau de particules incident monoénergétique parallèle pouvant être approché par une onde plane incidente. La cible étant composée de centres de diffusion isolés bien séparés. La plus part des particules incidents du faisceau monoénergétique ne sont pas diffusées et se déplacent en ligne droite sans être déviées. Un petit nombre seulement de particules sont diffusées et forme l'onde sortante. L'amplitude de transition $f(\theta)$ de l'onde sphérique constitue une mesure de la diffusion et ainsi est appelé amplitude de diffusion. La densité de courant de probabilité pour l'onde sphérique diffusée est donné par :

$$J = v |f(\theta)|^2 / r^2 \quad (I.24)$$

où $v = \hbar k / m$ est la vitesse relative du système.

En utilisant l'expression du courant de probabilité J , Le nombre de particules détectés par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ sera donné par :

$$N = v |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (I.25)$$

Par définition, la section efficace différentielle est le nombre de particules diffusées par unité d'angle solide par unité de temps et par unité de flux incident :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (I.26)$$

Une intégration sur l'angle solide, donne la section efficace totale :

$$\sigma(E) = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (I.27)$$

La section efficace totale représente le nombre de particules diffusées par unité de temps et par unité de flux incident et donne la probabilité de diffusion de l'onde sphérique à l'énergie $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Que l'étude soit élaborée d'un point de vue théorique ou expérimental, la théorie des collisions repose en grande partie sur l'analyse de ce type de grandeurs appelées communément sections efficaces.

Au lieu de résoudre une équation différentielle de type Schrödinger, on peut formuler une théorie de diffusion en termes d'équations intégrales. Dans la résolution d'équations

différentielles nous devons imposer des conditions aux limites à la solution du problème. Toute solution d'une équation différentielle ne satisfait pas automatiquement les conditions aux limites physiques du problème. Les équations intégrales de diffusions incorporent automatiquement ces conditions aux limites. Elles sont l'équivalent des équations différentielles de diffusion avec les conditions aux limites correctes. Pour dériver les équations intégrales de diffusions, on peut réécrire l'équation (I.22) sous la forme :

$$(E - H_0)\psi_k^{(+)}(\vec{r}) = V(\vec{r})\psi_k^{(+)}(\vec{r}) \quad (I.28)$$

L'opérateur $(E - H_0)$ nécessite une inversion afin de transformer l'équation précédente à une équation intégrale. En utilisant l'identité $E = k^2$ et la relation de fermeture $\int d^3q |\phi_{\vec{q}}\rangle\langle\phi_{\vec{q}}| = I$ dans l'espace des moments, l'inverse de l'opérateur $(E - H_0)$ est mis sous la forme :

$$G_0(k^2) \equiv \frac{1}{k^2 - H_0} = \int d^3q \frac{|\phi_{\vec{q}}\rangle\langle\phi_{\vec{q}}|}{k^2 - q^2} \quad (I.29)$$

où l'état propre $|\phi_{\vec{q}}\rangle$ défini dans l'espace des moments satisfait l'équation :

$$(E - H_0)|\phi_{\vec{q}}\rangle \equiv (k^2 + \nabla_{\vec{r}}^2)\phi_{\vec{q}}(\vec{r}) = 0 \quad (I.30)$$

Dans la région de diffusion, l'opérateur énergie cinétique est défini positif. Ainsi l'opérateur de l'équation (I.29) est singulier. L'intégrale singulière dans le membre droit de cette équation aura un sens si seulement une stratégie d'intégration bien définie sera fournie au point singulier $q = k$. De la théorie des variables complexes, on sait que l'opérateur inverse dans l'équation (I.29) aura un sens si la valeur principale est prise en considération ou bien si une partie imaginaire infiniment petite est introduite dans le dénominateur. Lippmann et Schwinger [9] sont les premiers à avoir utilisé cette astuce dans la théorie de diffusion pour déterminer un inverse approché cohérent avec la condition aux limites asymptotique (I.23). Deux possibilités pour cet opérateur inverse connues par les fonctions de Green, $G_0^{(\pm)}(k^2)$ sont obtenues si on considère les éléments de matrice dans l'espace de configuration de l'équation (I.29) :

$$G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) = \langle \vec{r} | G_0^{(\pm)}(k^2) | \vec{r}' \rangle = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{\exp[i\vec{q} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})]}{k^2 - q^2 \pm i0} \quad (I.31)$$

$$G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (I.32)$$

Une fonction de Green avec signe $+(-)$ est appelée fonction de Green d'onde sortante (entrante). Pour dériver (I.32), les intégrales angulaires dans les équations (I.31) sont évaluées en premier donnant :

$$G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) = \frac{1}{4\pi^2 |\vec{r}' - \vec{r}|} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{q \sin(q|\vec{r}' - \vec{r}|)}{k^2 - q^2 \pm i0} \quad (\text{I.33})$$

L'intégrale si dessus est évaluée par le théorème de Cauchy pour obtenir l'équation (I.32). La fonction de Green (I.31) est complexe en dessus du seuil de diffusion à $k^2 = 0$ et possède une branche de coupure le long de l'axe réel des énergies nommés coupure unitaire.

La fonction de Green est symétrique c'est-à-dire :

$$-G_0^{(\pm)}(\vec{r}', \vec{r}, k^2) = G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) \quad (\text{I.34})$$

Elle satisfait l'équation différentielle :

$$(\nabla_r^2 + k^2)G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) = \delta^3(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{I.35})$$

L'équation (I.35) est obtenu par opération de $E - H_0 = k^2 + \nabla_r^2$ sur l'équation (I.29) et (I.31). Le comportement asymptotique de la fonction de Green (I.32) quand $r \rightarrow \infty$ est donnée par :

$$\lim_{r \rightarrow \infty} G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) \rightarrow -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(\pm ikr)}{r} \exp(\mp i\vec{k}' \cdot \vec{r}') \quad (\text{I.36})$$

où la limite est prise dans la direction du vecteur d'onde sortant :

$$\vec{k}' = k \frac{\vec{r}}{r} \quad (\text{I.37})$$

En imposant la condition aux limites (I.36) à la solution de l'équation différentielle (I.35), la fonction de Green (I.32) est obtenue [6]. En formulant la théorie de diffusion en termes de fonctions de Green bien définies, les conditions aux limites de diffusion seront donc automatiquement incorporées.

La fonction de Green $G^{(+)}(k^2)$ possède une onde sphérique sortante dans la région asymptotique comme le montre l'équation (I.36). Cette fonction de Green peut être utilisée pour construire la fonction d'onde de diffusion. En appliquant la fonction de Green sortante $G^{(+)}(k^2)$ à l'équation de diffusion de Lippmann-Schwinger (I.28) pour l'onde sortante de diffusion $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ on aboutit à la solution :

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \int d^3r' G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}', k^2) V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') \quad (\text{I.38})$$

Quand on opère à gauche de l'équation (I.38) par $(E - H_0)$, on obtient une équation équivalente à l'équation de Schrödinger. Cependant, l'équation intégrale de type (I.38) est souvent écrite sous forme d'opérateur :

$$|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = |\phi_{\vec{k}}\rangle + G_0^{(+)}(k^2)V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle \quad (\text{I.39})$$

avec le propagateur de Green :

$$G_0^{(\pm)}(k^2) = (k^2 - H_0 \pm i0)^{-1} \quad (\text{I.40})$$

Dans le passage à une forme opérationnelle, la représentation dans l'espace de configuration ainsi que l'intégration sur l'état intermédiaire, ont été supprimées. La quantité $K = G_0^{(+)}(k^2)V$ est appelé noyau (Kernel) de l'équation intégrale (I.39). Des formes opérationnelles formelles similaires pour l'équation de diffusion sont souvent écrites. La même équation opérationnelle peut être exprimée soit dans une représentation d'espace de configuration soit en représentation en impulsion. Des observables physiques sont étroitement liées à certain éléments de matrices représentées par ces opérateurs que ce soit dans l'espace de configuration ou bien dans l'espace des impulsions. Si la fonction de Green entrante $G^{(-)}(k^2)$ est utilisée au lieu de la fonction de Green sortante, on obtient la fonction d'onde entrante $|\psi_{\vec{k}}^{(-)}\rangle$, satisfaisant l'équation de Lippmann-Schwinger :

$$|\psi_{\vec{k}}^{(-)}\rangle = |\phi_{\vec{k}}\rangle + G_0^{(-)}(k^2)V|\psi_{\vec{k}}^{(-)}\rangle \quad (\text{I.41})$$

Asymptotiquement, la fonction d'onde $\psi_{\vec{k}}^{(-)}(\vec{r})$ possède une onde plane et une onde sphérique entrante et les fonctions d'ondes conjuguées doivent satisfaire les équations :

$$\langle \psi_{\vec{k}}^{(-)} | = \langle \phi_{\vec{k}} | + \langle \psi_{\vec{k}}^{(-)} | V G_0^{(+)}(k^2) \quad (\text{I.42})$$

$$\langle \psi_{\vec{k}}^{(+)} | = \langle \phi_{\vec{k}} | + \langle \psi_{\vec{k}}^{(+)} | V G_0^{(-)}(k^2) \quad (\text{I.43})$$

ainsi que les conditions de normalisations :

$$\langle \psi_{\vec{p}}^{(\pm)} | \psi_{\vec{p}'}^{(\pm)} \rangle = \langle \phi_{\vec{p}} | \phi_{\vec{p}'} \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (\text{I.44})$$

En utilisant le comportement asymptotique (I.36) de la fonction de Green d'onde sortante, il est possible de vérifier que le comportement asymptotique de la fonction d'onde sortante, solution de l'équation de Lippmann-Schwinger (I.38) est la même que celle donnée par l'équation (I.23). Si on prend la limite $r \rightarrow \infty$ dans l'équation de Lippmann-Schwinger (I.38) et on utilise l'équation (I.36) nous obtenons le comportement asymptotique désiré :

$$f(\theta) = -2\pi^2 \int d^3r \phi_{\vec{k}'}(\vec{r}) V(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \equiv -2\pi^2 \langle \phi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle \quad (\text{I.45})$$

C'est une condition cohérente reliant la fonction d'onde de diffusion à l'amplitude de diffusion. L'équation (I.45) implique que, contrairement à la résolution de l'équation de Schrödinger, où la condition aux limites asymptotiques doit être imposée afin d'extraire une

solution, la solution de l'équation de Lippmann-Schwinger (I.38) inclue automatiquement la condition aux limites de diffusion. Pour les potentiels non singuliers à courte portée, l'équation (I.38) est de type Fredholm et par conséquent appropriée pour un traitement avec les techniques numériques standards.

I.3.3 Description en termes de matrice de transition

La matrice de transition, appelée souvent matrice t , regroupe les éléments de matrice de l'opérateur $t(k^2)$, dit opérateur de transition, dans l'espace des impulsions. Contrairement à la description en fonction d'onde, où les observables de diffusion sont extrait du comportement asymptotique de la fonction d'onde, la matrice t est directement liés aux observables de diffusion (déphasage et section efficace). Dans un problème réel, l'approche de la matrice de transition offre un avantage considérable par rapport à la description en fonction d'onde.

La matrice de transition est défini par :

$$\langle \phi_{\vec{k}'} | t(k^2) | \phi_{\vec{k}} \rangle = \langle \phi_{\vec{k}'} | V | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle = \langle \psi_{\vec{k}'}^{(-)} | V | \phi_{\vec{k}} \rangle \quad (\text{I.47})$$

En substituant les éléments de matrice de transition (I.46) dans l'expression (I.45), l'amplitude de diffusion devient :

$$f(\theta) = -2\pi^2 \langle \phi_{\vec{k}'} | t(k^2) | \phi_{\vec{k}} \rangle \quad (\text{I.48})$$

En termes de la matrice t , la section efficace différentielle (I.24) devient :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 \frac{m^2}{\hbar^4} |\langle \phi_{\vec{k}'} | t(k^2) | \phi_{\vec{k}} \rangle|^2 \quad (\text{I.49})$$

Dans l'équation (I.49), les facteurs m et \hbar on été réintroduits. Ainsi la matrice t est étroitement liée à l'amplitude de diffusion $f(\theta)$ et la section efficace $d\sigma/d\Omega$.

Des solutions formelles des équations de Lippmann-Schwinger (I.39) et (I.41) peuvent être donnés par :

$$|\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}\rangle = (I - G_0^{(\pm)}V)^{-1} |\phi_{\vec{k}}\rangle = |\phi_{\vec{k}}\rangle + G^{(\pm)}(k^2)V|\phi_{\vec{k}}\rangle \quad (\text{I.50})$$

où l'on à la fonction de Green total :

$$G^{(\pm)}(k^2) = (k^2 - H + i0)^{-1} \quad (\text{I.51})$$

satisfaisant les conditions aux limites d'onde sortante (+) et d'onde entrante (-). L'équation (I.50) peut être établie en utilisant l'identité suivante satisfaite par les fonctions de Green :

$$G^{(\pm)}(k^2) = G_0^{(\pm)}(k^2) + G^{(\pm)}(k^2)V G_0^{(\pm)}(k^2) \quad (I.52a)$$

$$G^{(\pm)}(k^2) = G_0^{(\pm)}(k^2) + G_0^{(\pm)}(k^2)V G^{(\pm)}(k^2) \quad (I.52b)$$

A partir de la définition (I.46) et de l'équation (I.51) on peut définir l'opérateur de transition par :

$$t(k^2) = V + V G^{(+)}(k^2)V \quad (I.53)$$

Les éléments de la matrice t de l'équation (I.46) sont les éléments de l'opérateur de transition $t(k^2)$ dans l'espace des impulsions. On peut avoir les identités utiles :

$$G^{(+)}(k^2)V = G_0^{(+)}(k^2)t(k^2) \quad (I.54a)$$

$$V G^{(+)}(k^2) = t(k^2)G_0^{(+)}(k^2) \quad (I.54b)$$

À partir des équations (I.53) et (I.54) on trouve que la matrice t satisfait les équations intégrales de Lippmann-Schwinger,

$$t(k^2) = V + V G_0^{(+)}(k^2)t(k^2) \quad (I.55)$$

$$t(k^2) = V + t(k^2)G_0^{(+)}(k^2)V \quad (I.56)$$

On utilise la relation de fermeture pour les états liés et les états de diffusion $|\psi_B\rangle$ et $|\psi_{\vec{q}}^{(\pm)}\rangle$, respectivement de l'Hamiltonien H

$$\sum_B |\psi_B\rangle\langle\psi_B| + \int d^3\vec{q} |\psi_{\vec{q}}^{(\pm)}\rangle\langle\psi_{\vec{q}}^{(\pm)}| = I \quad (I.57)$$

La représentation spectrale de la fonction de Green total $G^{(+)}(k^2)$ de l'équation (I.52) peut être écrite comme suit :

$$G^{(+)}(k^2) = \sum_B \frac{|\psi_B\rangle\langle\psi_B|}{k^2 - E_B} + \int d^3\vec{q} \frac{|\psi_{\vec{q}}^{(\pm)}\rangle\langle\psi_{\vec{q}}^{(\pm)}|}{k^2 - q^2 + i0} \quad (I.58)$$

Il faut noter cependant, que la somme discrète porte toujours sur les états liés $|\psi_B\rangle$ tandis que l'intégrale porte sur les états du continuum de diffusion $|\psi_{\vec{q}}^{(\pm)}\rangle$.

A partir de l'équation (I.58), nous remarquons que les éléments de matrice de la fonction de Green sont des fonctions analytiques d'énergie dans le plan complexe des énergies à l'exception de quelques pôles simples à des énergies réelles E_B et une coupure du côté de l'axe des énergies réelles positives. En utilisant l'équation (I.58) dans l'équation (I.53) pour la matrice t , nous obtenons l'expression suivante :

$$\langle \phi_{\vec{p}} | t(k^2) | \phi_{\vec{p}'} \rangle = \langle \phi_{\vec{p}} | V | \phi_{\vec{p}'} \rangle + \sum_B \frac{f_B(\vec{p})^* f_B(\vec{p}')}{k^2 - E_B} + \int d^3 q \frac{\langle \phi_{\vec{p}} | t(q^2) | \phi_{\vec{q}} \rangle \langle \phi_{\vec{q}} | t(q^2) | \phi_{\vec{p}'} \rangle^*}{k^2 - q^2 + i0} \quad (I.59)$$

$$\langle \phi_{\vec{p}} | t(k^2) | \phi_{\vec{p}'} \rangle = \langle \phi_{\vec{p}} | V | \phi_{\vec{p}'} \rangle + \sum_B \frac{f_B(\vec{p})^* f_B(\vec{p}')}{k^2 - E_B} + \int d^3 q \frac{\langle \phi_{\vec{p}} | t(q^2) | \phi_{\vec{q}} \rangle \langle \phi_{\vec{q}} | t(q^2) | \phi_{\vec{p}'} \rangle^*}{k^2 - q^2 + i0} \quad (I.60)$$

Dans l'équation (I.59) les éléments de matrice dans l'espace des impulsions d'un potentiel total Hermitien $V(\vec{r})$ est donné par :

$$\langle \phi_{\vec{p}} | V | \phi_{\vec{p}'} \rangle = \int d^3 r \langle \phi_{\vec{p}} | \vec{r} \rangle V(\vec{r}) \langle \vec{r} | \phi_{\vec{p}'} \rangle \quad (I.61a)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 r \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}) V(r) \quad (I.61b)$$

$$= \frac{1}{2\pi Q} \int_0^\infty r dr \sin(Qr) V(r) \quad (I.61c)$$

où l'on a $\vec{Q} = \vec{p}' - \vec{p}$.

Quand le terme potentiel de l'équation (I.60) est substitué pour la matrice t dans l'équation (I.48), nous obtenons l'approximation de Born (première approximation de Born) pour l'amplitude de transition, donné par :

$$f_B(\theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}) U(\vec{r}) \quad (I.62)$$

m : Masse réduite.

$\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}'$: Le transfert d'impulsion.

θ : L'angle entre \vec{k} et \vec{k}' dans le plan complexe des énergies.

Les éléments de la matrice t possèdent aussi des pôles simples à des états liés et une branche de coupure le long de l'axe des énergies réelles.

Par conséquent, les éléments de la matrice t sont complexes pour des énergies réelles au dessus du seuil de diffusion. Cette coupure au niveau de la fonction de Green libre (I.31) à des énergies positives et est appelée coupure d'unitarité.

I.4 Conclusion

Dans ce chapitre, quelques éléments de la théorie des collisions ont été évoqués. Nous avons défini le régime des vitesses et les différents processus de collision les plus probables dans ce régime. Les équations intégrales de Lippmann-Schwinger en termes de fonctions de Green et des éléments de matrice de transition sont préférablement utilisées dans ce texte. Ce choix nous offre le privilège d'un accès direct aux sections efficaces en termes d'éléments de matrice de transition qui nous serviront par la suite dans l'extraction de l'information sur les processus de collisions.

Bibliographie

- [1] C. P. Ballance, N. R. Badnell and K. A. Berrington, *J. Phys. B.* 34, 3287 (2001).
- [2] A. D. Whiteford, N. R. Badnell, C. P. Ballance, S. D. Loch, M. G. O'Mullane et H. P. Summers, *J. Phys. B* 35, 3729(2002).
- [3] W.A. Schroeder, T. R. Nelson, A. B. Borisov, J. W. Longworth, K. Boyer et C. K. Rhodes, *J. Phys. B* 34, 297 (2001).
- [4] J. Zeng, J. Yuan et Q. Lu, *J. Phys. B* 34, 2823 (2001).
- [5] M. K. Inal and J. Dubau, *J. Phys. B.* 20, 4221 (1987).
- [6] R. G. Newton, *Théorie de diffusions des ondes et des particules*, Springer-Verlag, Berlin(1982).
- [7] S. K. Adhikari et K. L. Kowalski, *Dynamical Collision Theory and its Applications* (Academic press, Boston, 1991).
- [8] S. K. Adhikari, *Variational Principles and the Numerical Solutions of Scattering Problem*, John Wiley & Sons, New York (1998).
- [9] B. A. Lippmann et J. Schwinger, *Phys. Rev.* 79, 469 (1950).
- [10] B. A. Lippmann, *Phys. Rev.* 102, 264 (1956).
- [11] L. D. Faddeev, *Mathematical Aspects of Three Body Problem in Quantum Scattering Theory* (Davey, New York, 1965).
- [12] A. Yakubovskii, *Yad. Fiz.* 5, 1312(1967).
- [13] C. Lovelace, *Phys. Rev.* 135, B1225 (1964).
- [14] P. G. Burke et M. J. Seaton, *Methods in Compt. Physics* 10(1971)1.
- [15] B. H. Bransden, *Atomic Collision Theory*, 2nd ed., W. A. Benjamin, New York (1983)
- [16] B. H. Bransden et M. R. C. McDowell, *Physics Reports (Physics Letters)* 30, 3(1977)207.
- [17] M. Bouamoud, *Thèse de doctorat es-science*, Université de Bordeaux I(1988).
- [18] B. Lasri, *Thèse de doctorat es-science*, Université Abou Bakr Belkaid de Tlemcen(2007).
- [19] R. Gayet et M. Bouamoud, *Nucl. Instr. and Methods* B42 515(1989).

CHAPITRE II
COLLISIONS ET
APPROXIMATIONS

II.1 Introduction

Quelque éléments de l'approximation de Born sont traités dans les paragraphes qui suivent. Il s'agit de l'approximation de Born au premier ordre [1, 2, 3, 4] qui est valable et donne des résultats satisfaisants à des énergies d'impact suffisamment grandes pour que le couplage au transfert de charge soit négligé. Un traitement en termes de fonction d'ondes planes vient par la suite dans le but d'évaluer les intégrales nécessaires pour le calcul des sections efficaces et les paramètres qui s'y rattachent. Les termes de l'approximation de Born de second ordre [5] seront traités dans une partie ultérieure dans la cadre des équations de Lippmann-Schwinger [6] et le principe variationnel de Schwinger [7].

II.2 Collisions et approximation de Born

II.2.1 Hamiltonien du système

On se limite aux processus à un électron actif (simple excitation dans notre cas). L'atome cible (électron+C⁺) est représenté par un ion C⁺ de charge (+1) lié à l'électron actif situé à la distance r de C⁺. La masse du noyau cible C⁺ est grande devant celle de l'électron, de sorte que l'on peut confondre le centre de masse du système C⁺-électron avec celui du noyau cible C⁺. Dans le référentiel du centre de masse du système projectile-cible, le Hamiltonien total s'écrit :

$$H_{rel} = H_{cible} + H_{proj} + V_{int} \quad (\text{II.1})$$

Le Hamiltonien H_{rel} est composé de trois parties :

- Un Hamiltonien atomique qui décrit le mouvement non perturbé par le projectile, de l'électron actif autour de la cible, il s'écrit :

$$H_{cible} = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 + V_{cible}(\vec{r}) \quad (\text{II.2})$$

où V_{cible} est le potentiel induit par la cible sur l'électron actif.

- Le Hamiltonien H_{proj} décrivant le mouvement relatif du projectile par rapport à la cible :

$$H_{proj} = -\frac{1}{2\mu} \vec{\nabla}_{\vec{R}}^2 \quad (\text{II.3})$$

Le potentiel V_{int} d'interaction entre le projectile et les composants de la cible (ion C⁺ et électron actif).

$$V_{int} = \frac{Z_p}{R} - \frac{Z_p}{|\vec{R} - \vec{r}|} \quad (\text{II.4})$$

Dans l'approximation de Born, le potentiel d'interaction est supposé suffisamment petit pour être traité comme une perturbation, c'est une approximation valable si le rapport $|Z_p|/v_p$ est petit devant l'unité.

II.2.2 Matrice de transition et facteur de forme

Soient $\phi_i(\vec{r})$ et $\phi_f(\vec{r})$ les fonctions d'onde initiale et finale de la cible et soient $(2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}}$ et $(2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}}$ les fonctions d'onde propre de H_{proj} décrivant l'onde plane associée au projectile de vecteurs quantités de mouvements initial et final \vec{K}_i et \vec{K}_f respectivement.

Dans le cadre de l'approximation de Born au premier ordre, l'élément de matrice de transition est donné par [8, 9, 10, 11, 12]

$$T_{if}^{(B)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}} \phi_f(\vec{r}) \left| V_{int} \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}} \phi_i(\vec{r}) \right\rangle \quad (\text{II.5})$$

On montre que :

$$T_{if} = -\frac{2Z_p}{(2\pi)^2 q^2} F_{if}(\vec{q}) \quad (\text{II.6})$$

avec le facteur de forme F_{if} qui représente le terme intégral de l'élément de matrice de transition :

$$F_{if}(\vec{q}) = \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) d^3r \quad (\text{II.7})$$

où \vec{q} est le vecteur quantité de mouvement transféré à la cible.

La conservation de la quantité de mouvement impose que :

$$\vec{q} = \vec{K}_f - \vec{K}_i \quad (\text{II.8})$$

où le vecteur \vec{q} représente la quantité de mouvement transférée à la cible.

II.2.3 Section efficace

La densité de probabilité de transition s'écrit (règle d'or de Fermi) :

$$W_{if} = 2\pi |T_{if}|^2 \rho(E) \quad (\text{II.9})$$

où $\rho(E)$ représente la densité d'état final dans l'espace des énergies accessibles au projectile diffusé.

La section efficace différentielle de diffusion $d\sigma/d\Omega$ est définie comme étant le nombre de particules diffusées dans l'élément d'angle solide $d\Omega$, pendant l'unité de temps et par unité de courant de probabilité [13]. Pour une particule incidente décrite par l'onde plane $\psi(\vec{R}) = (2\pi)^{-3/2} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{R}}$, le courant de probabilité est donné par [14] :

$$\vec{J}_i = \frac{1}{(2\pi)^3} \cdot \frac{\vec{K}_i}{m_p} = \frac{1}{(2\pi)^3} \vec{v}_i \quad (\text{II.10})$$

La section efficace différentielle $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{W_{if}}{|\vec{J}_i|}$ s'écrit alors :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4}{v_p} |T_{if}|^2 \rho(E) \quad (\text{II.11})$$

La densité $\rho(E)$ correspond aux états d'énergies du projectile diffusé décrit par l'onde plane $\psi_f(\vec{R}) = (2\pi)^{-3/2} e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{R}}$. Lorsque l'impulsion \vec{K} du projectile diffusé pointe dans l'angle solide $d\Omega$ autour de \vec{K}_p , comprise dans un intervalle dE_f centré en $E_f = \vec{K}_f^2 / m_p$. L'élément de volume d^3K dans l'espace des impulsions s'écrit :

$$d^3K = K^2 dK d\Omega \quad (\text{II.12})$$

En remplaçant la variable K par l'énergie E ($E = K^2 / 2m_p$), on a :

$$d^3K = \rho(E) dE d\Omega \quad (\text{II.13})$$

Sachant que $\frac{dK}{dE} = \frac{m_p}{K}$, on en déduit l'expression de $\rho(E)$:

$$\rho(E) = m_p K \quad (\text{II.14})$$

Ainsi, la section efficace différentielle de diffusion avec une impulsion pointant autour de \vec{K}_f peut se réécrire :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4m_p^2 \frac{v_f Z_p^2}{v_p q^4} |F_{ij}(\vec{q})|^2 \quad (\text{II.15})$$

avec v_f la vitesse du projectile diffusé.

Pour accéder à la section efficace totale de diffusion, il est utile de déterminer au préalable la section efficace différentielle en q , module du vecteur quantité de mouvement transférée \vec{q} .

D'après la relation (II.8),

$$q^2 = K_i^2 + K_f^2 - 2K_i K_f \cos\theta \quad (\text{II.16})$$

En dérivant à gauche et à droite, nous obtenons :

$$2q dq = 2K_i K_f \sin\theta d\theta \quad (\text{II.17})$$

ou bien de manière équivalente :

$$\sin\theta d\theta = q dq / K_i K_f \quad (\text{II.18})$$

La quantité $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ est remplacée par un terme en $dq d\phi$ dans l'expression de la section efficace différentielle (II.15). L'intégration sur l'angle azimutal ϕ est égale à 2π par raison de symétrie cylindrique. Nous obtenons alors une expression simplement différentielle en q de la section efficace :

$$\frac{d\sigma}{dq} = 8\pi \frac{Z_p^2}{v_p^2} \frac{|F_{ij}(q)|^2}{q^3} \quad (\text{II.19})$$

Nous intégrons la relation (II.19) sur q pour obtenir la section efficace totale :

$$\sigma = 8\pi \frac{Z_p^2}{v_p^2} \int_{q_{min}}^{q_{max}} \frac{|F_{ij}(q)|^2}{q^3} dq \quad (\text{II.20})$$

Un minimum de transfert d'impulsion q_{min} est obtenu en considérant la conservation de l'énergie :

$$K_f^2 - K_i^2 = 2m_p(E_f - E_i) \quad (\text{II.21})$$

C'est à dire :

$$q_{min} = K_f - K_i = \frac{E_f - E_i}{v_p} \quad (\text{II.22})$$

En considérant q le résultat d'une collision binaire avec des particules lourdes $q_{max} = 2v_p$. L'intégrale sur q (II.20) est une dépendance asymptotique en $\ln(v_p)$ [15] à grande vitesse de collision. La section efficace totale de transition du niveau E_i vers le niveau E_f dépend donc fortement de la nature du projectile : elle varie avec sa charge Z_p et sa vitesse v_p de façon quasi proportionnelle à $(Z_p/v_p)^2$. Un résultat très important pour décrire les mécanismes mettant en jeu plusieurs électrons actifs.

II.3 Excitation électronique dans l'approximation PWBA

La méthode de calcul des probabilités d'excitation électronique dans l'approximation «Plane Wave Born Approximation» (PWBA) est présentée dans ce paragraphe.

II.3.1 Hamiltonien du système

Soit m_p et Z_p la masse et la charge du projectile et m_c la masse de la cible. La masse de la cible est très grande devant la masse de l'électron. Le centre de masse du système cible-électron peut être confondu avec celui de la cible. Le potentiel V_{cible} dénotera le potentiel sous lequel l'électron voit la cible.

Le Hamiltonien du système peut s'écrire :

$$H_{rel} = -\frac{1}{2} \vec{v}_{\vec{r}}^2 + V_{cible}(r) - \frac{1}{2\mu} \vec{v}_{\vec{R}}^2 + \frac{Z_p}{R} - \frac{Z_p}{|\vec{R}-\vec{r}|} \quad (\text{II.23})$$

μ est la masse réduite du projectile et de la cible.

$$\mu = \frac{m_p m_c}{m_p + m_c} \quad (\text{II.24})$$

Le Hamiltonien H_{rel} se compose de trois parties :

- Le Hamiltonien atomique :

$$H_{cible} = -\frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}}^2 + V_{cible}(r) \quad (\text{II.25})$$

qui décrit le mouvement, non perturbé par le projectile, de l'électron actif autour de la cible.

- Le Hamiltonien du projectile :

$$H_{proj} = -\frac{1}{2\mu}\nabla_{\vec{R}}^2 \quad (\text{II.26})$$

qui décrit le mouvement relatif du projectile par rapport à la cible.

- Le potentiel d'interaction :

$$V_{int} = \frac{Z_p}{R} - \frac{Z_p}{|\vec{R}-\vec{r}|} \quad (\text{II.27})$$

Dans l'approximation de Born, on suppose que le potentiel d'interaction est suffisamment faible pour être traité comme une perturbation.

II.3.2 Fonction d'onde

La fonction d'onde totale se compose d'une fonction d'onde électronique et d'une fonction d'onde du projectile. La fonction d'onde électronique est fonction propre du Hamiltonien atomique tel que :

$$H_{cible}\phi = E\phi \quad (\text{II.28})$$

La fonction d'onde décrivant le mouvement du projectile est fonction propre du Hamiltonien projectile. Comme celui ci se réduit à un terme d'énergie cinétique, la fonction propre est une onde plane en $e^{i\vec{K}\vec{R}}$ tel que :

$$H_{proj} \cdot e^{i\vec{K}\vec{R}} = E_{coll}e^{i\vec{K}\vec{R}} \quad (\text{II.29})$$

où E_{coll} représente l'énergie relative de collision tel que :

$$K = \sqrt{2\mu E_{coll}} \quad (\text{II.30})$$

II.3.3 Matrice de transition

Dans le cadre de l'approximation de Born au premier ordre, c'est simplement l'élément de matrice du potentiel d'interaction V_{int} pris entre l'état initial et l'état final:

$$T_{if}^{(B)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \left\langle e^{i\vec{k}_f\vec{R}} \phi_f(\vec{r}) \left| V_{int} \right| e^{i\vec{k}_i\vec{R}} \phi_i(\vec{r}) \right\rangle \quad (\text{II.31})$$

La conservation de l'impulsion impose que la quantité de mouvement $\vec{q} = \vec{K}_i - \vec{K}_f$ soit transférée à la cible. Le moment transféré \vec{q} est décomposé en deux composantes, l'une transverse notée $\vec{\eta}$ (perpendiculaire à la vitesse relative initiale) et l'autre longitudinale notée $\vec{\eta}'$ (parallèle à la vitesse relative initiale).

$$\vec{q} = \vec{\eta} + \vec{\eta}' \quad (\text{II.32})$$

Si l'on dénote par ε l'énergie transférée à l'électron de la cible ; i.e. :

$$\varepsilon = E_f - E_i \quad (\text{II.33})$$

La conservation de l'énergie suggère que soit satisfaite l'équation :

$$\frac{K_i^2}{2\eta} + E_i = \frac{K_f^2}{2\eta} + E_f \quad (\text{II.34})$$

Ce qui conduit pour l'énergie transférée à :

$$\varepsilon = \frac{K_i^2}{2\mu} - \frac{K_f^2}{2\mu} \quad (\text{II.35})$$

Soit encore :

$$\varepsilon = \frac{1}{2\mu} (K_i - K_f)(K_i + K_f) \quad (\text{II.36})$$

Si on sait que la composante longitudinale du moment transféré s'écrit :

$$\eta' = K_i - K_f \cos\theta \quad (\text{II.37})$$

Si encore l'angle θ est petit, alors:

$$\eta' \approx K_i - K_f \quad (\text{II.38})$$

De cette manière, si l'énergie transférée est petite devant l'énergie cinétique du projectile, alors :

$$\frac{1}{2\mu} (K_i + K_f) \approx \frac{2}{2\mu} K_i = v_p \quad (\text{II.39})$$

Ce qui conduit à :

$$\eta' = \frac{\varepsilon}{v_p} \quad (\text{II.40})$$

où v_p est la vitesse du projectile.

L'élément de matrice de transition peut se mettre sous la forme :

$$T_{if}^{(B)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint e^{i(\vec{K}_i - \vec{K}_f)\vec{R}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) \left(\frac{Z_p}{R} - \frac{Z_p}{|\vec{R} - \vec{r}|} \right) d^3 R d^3 r \quad (\text{II.41})$$

Après développement on aboutit à la forme :

$$T_{if}^{(B)} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint e^{i(\vec{K}_i - \vec{K}_f)\vec{R}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) \left(\frac{Z_p}{R} \right) d^3 R d^3 r + \frac{1}{(2\pi)^3} \iint e^{i(\vec{K}_i - \vec{K}_f)\vec{R}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) \left(-\frac{Z_p}{|\vec{R} - \vec{r}|} \right) d^3 R d^3 r \quad (\text{II.42})$$

On suppose que la vitesse du projectile est grande devant la vitesse de l'électron actif. On fait donc l'hypothèse de l'approximation soudaine. Dans ce cas on peut considérer que les fonctions d'onde électroniques ne dépendent pas de la distance projectile-cible et on peut écrire :

$$\left\langle \phi_f(\vec{r}) \left| \frac{1}{R} \right| \phi_i(\vec{r}) \right\rangle \approx \frac{\delta_{if}}{R} \quad (\text{II.43})$$

Puisque il s'agit d'une collision inélastique, on peut négliger le terme (II.43). On obtient :

$$T_{if}^{(B)} = -Z_p \frac{1}{(2\pi)^3} \iint e^{i\vec{q}\vec{R}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) \left(\frac{1}{|\vec{R}-\vec{r}|} \right) d^3R d^3r \quad (\text{II.44})$$

où $\vec{q} = \vec{K}_i - \vec{K}_f$ représente le vecteur transfert d'impulsion.

L'intégration sur R se réalise facilement. En effet, il s'agit de l'intégrale de Bethe :

$$\int e^{i\vec{q}\vec{R}} / |\vec{R} - \vec{r}| d^3R = \frac{4\pi}{q^2} e^{i\vec{q}\vec{r}} \quad (\text{II.45})$$

L'élément de matrice de transition de Born se simplifie et devient :

$$T_{if}^{(B)} = -\frac{2Z_p}{(2\pi)^2 q^2} \int e^{i\vec{q}\vec{r}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) d^3r \quad (\text{II.46})$$

On définit le facteur de forme par :

$$F_{if}(\vec{q}) = \int e^{i\vec{q}\vec{r}} \phi_f^*(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) d^3r \quad (\text{II.47})$$

D'où l'élément de matrice de transition :

$$T_{if}^{(B)} = -\frac{2Z_p}{(2\pi)^2 q^2} F_{if}(\vec{q}) \quad (\text{II.48})$$

Pour évaluer le facteur de forme, décomposons les trois fonctions de l'intégrand en parties radiale et angulaire :

$$e^{i\vec{q}\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(qr) Y_l^{m*}(\hat{q}) Y_l^m(\hat{r}) \quad (\text{II.49})$$

où $j_l(qr)$ est une fonction de Ricatti-Bessel sphérique d'ordre l et d'argument réel.

Les deux autres termes sont des harmoniques sphériques dont les arguments sont les angles polaire et azimutal, θ et φ respectivement.

Pour les deux états liés on a :

$$\phi_i(\vec{r}) = R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i}^{m_i}(\hat{r}) \quad (\text{II.49})$$

et

$$\phi_f(\vec{r}) = R_{n_f l_f}(r) Y_{l_f}^{m_f}(\hat{r}) \quad (\text{II.50})$$

Avec une partie radiale réelle, et une partie angulaire complexe.

II.3.4 Calcul des éléments de matrice de transition

Dans le facteur de forme on substitue les fonctions par leur décomposition et on obtient :

$$F_{if} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l \times \int j_l(qr) R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) Y_l^{m*}(\hat{q}) Y_l^m(\hat{r}) Y_{l_i}^{m_i}(\hat{r}) Y_{l_f}^{m_f*}(\hat{r}) d^3 r \quad (\text{II.51})$$

L'intégration sur \hat{r} se fait grâce aux propriétés des harmoniques sphériques :

$$Y_l^{m*}(\hat{r}) = (-1)^m Y_l^{-m}(\hat{r}) \quad (\text{II.52})$$

$$\int Y_{l_1}^{m_1}(\hat{r}) Y_{l_2}^{m_2}(\hat{r}) Y_{l_3}^{m_3}(\hat{r}) d^3 r = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}} \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{II.53})$$

Le facteur de forme devient donc :

$$F_{if} = \sqrt{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^{m_f} Y_l^{m*}(\hat{q}) \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ m_i & m & -m_f \end{pmatrix} \zeta_{l_i l_f}^l(q) \quad (\text{II.54})$$

où :

$$\zeta_{l_i l_f}^l(q) = \int J_l(qr) R_{n_i l_i}(r) R_{n_f l_f}(r) r^2 dr \quad (\text{II.55})$$

Ce qui donne pour l'élément de matrice de transition :

$$T_{if}^{(B)} = -\frac{2^{3/2} Z_p}{(2\pi)^3 q^2} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{(2l_i+1)(2l+1)(2l_f+1)} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^{m_f} Y_l^{m*}(\hat{q}) \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ m_i & m & -m_f \end{pmatrix} \zeta_{l_i l_f}^l(q) \quad (\text{II.56})$$

II.3.5 Amplitude de diffusion

L'amplitude de diffusion est obtenue à partir de l'élément de matrice de transition par une simple transformation de Fourier à deux dimensions :

$$a_{if}(\rho, \nu) = \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{v_p} \int d^2 \eta e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}} T_{if}^{(B)} \quad (\text{II.57})$$

On obtient donc l'amplitude de diffusion sous la forme suivante :

$$a_{if}(\rho, \nu) = -\frac{2Z_p}{v_p \sqrt{\pi}} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{(2l_i+1)(2l+1)(2l_f+1)} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^{m_f} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ m_i & m & -m_f \end{pmatrix} A \quad (\text{II.58})$$

avec :

$$A = \int d^2 \eta \frac{e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}}}{q^2} Y_l^{m*}(\hat{q}) \zeta_{l_i l_f}^l(q) \quad (\text{II.59})$$

Les vecteurs $\vec{K}_i(\theta_{K_i} = 0)$, $\vec{K}_f(\theta_{K_f}; \varphi_{K_f})$, $\vec{\eta}(\theta_\eta = \frac{\pi}{2}; \varphi_\eta)$ et $\vec{q}(\theta_q; \varphi_q)$ sont coplanaires.

Ils ont donc le même angle azimutal :

$$\varphi_{K_f} = \varphi_\eta = \varphi_q$$

Le paramètre d'impact $\vec{\rho}(\theta_\rho = \frac{\pi}{2}; \varphi_\rho)$ est dans un plan perpendiculaire au moment initial du projectile \vec{K}_i et contient la composante transverse du moment transféré $\vec{\eta}$. L'angle azimutal entre $\vec{\rho}$ et $\vec{\eta}$ vaut $\varphi_\eta - \varphi_\rho$.

En séparant l'intégrale A en partie radiale et angulaire, on aura :

$$A = \int_0^\infty \eta d\eta \frac{\zeta_{l_i l_f}^l(q)}{q^2} \int_0^{2\pi} d\rho_\eta e^{i\eta\rho\cos\Delta\varphi} Y_l^{m*}(\theta_q, \varphi_\eta) \quad (\text{II.60})$$

$$\text{Avec : } \Delta\varphi = \varphi_\eta - \varphi_\rho$$

Or les harmoniques sphériques sont reliées aux polynômes de Legendre par :

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \cdot P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \quad (\text{II.61})$$

Mais compte tenu de la propriété :

$$Y_l^{m*}(\theta, \varphi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \varphi) \quad (\text{II.62})$$

On aura alors :

$$Y_l^{m*}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l-m)!}} \cdot P_l^{-m}(\cos\theta) e^{-im\varphi} \quad (\text{II.63})$$

Où bien :

$$Y_l^{m*}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \cdot P_l^m(\cos\theta) e^{-im\varphi} \quad (\text{II.64})$$

$$\text{Puisque : } P_l^{-m}(\cos\theta) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^m(\cos\theta)$$

L'intégrale A devient alors :

$$A = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \times \int_0^\infty \eta d\eta \frac{\zeta_{l_i l_f}^l(q)}{q^2} P_l^m(\cos\theta_q) \int_0^{2\pi} d\rho_\eta e^{i\eta\rho\cos(\varphi_\eta - \varphi_\rho)} e^{-im\varphi_\eta} \quad (\text{II.65})$$

L'intégrale sur φ_η est bien connue :

$$\int_0^{2\pi} d\beta e^{iz\cos\beta} e^{-im\beta} = 2\pi i^{-m} J_{-m}(z) \quad (\text{II.66})$$

Pour m entier, $(-1)^m = (1)^{-m}$ et on a de plus $(-1)^m J_{-m}(z) = J_m(z)$ où les $J_m(z)$ sont des fonctions de Bessel régulières d'indice entier.

L'intégrale angulaire devient alors :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi_\eta e^{i\eta\rho\cos(\varphi_\eta-\varphi_\rho)} e^{-im\varphi_\eta} - 2\pi(-1)^m(-1)^{-m}J_m(\eta\rho)e^{-im\varphi_\rho} \quad (\text{II.67})$$

D'où l'intégrale A :

$$A = (-1)^m\sqrt{\pi}\sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{(l+m)!}} \int_0^\infty \eta d\eta \frac{\zeta_{l_i l_f}^l(q)}{q^2} P_l^m(\cos\theta_q) J_m(\eta\rho) e^{-im\varphi_\rho} \quad (\text{II.68})$$

L'amplitude de diffusion s'écrit finalement :

$$a_{if}(\rho, v) = -\frac{2z_p}{v_p} \sum_{l=0}^\infty i^l (2l+1) \sqrt{(2l_i+1)(2l_f+1)} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \sum_{m=-l}^{+l} (-1)^{m_f} (-i)^m \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \begin{pmatrix} l_i & l & l_f \\ m_i & m & -m_f \end{pmatrix} \times \int_0^\infty d\eta \frac{\eta}{q^2} \zeta_{l_i l_f}^l(q) P_l^m(\cos\theta_q) J_m(\eta\rho) e^{-im\varphi_\rho} \quad (\text{II.69})$$

La symétrie des $3j$ impose :

$$m = m_f - m_i \quad (\text{II.70a})$$

$$l_{\min} \leq l \leq l_{\max} \quad (\text{II.70b})$$

où :

$$l_{\min} = \sup\{|l_i - l_f|, m\} \quad (\text{II.70c})$$

$$l_{\max} = l_i + l_f \quad (\text{II.70d})$$

Il faut noter que ces éléments de symétrie rendent la sommation sur les moments angulaires plus simple et plus pratique.

II.4 Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, nous avons discuté de deux approximations habituellement utilisées dans les problèmes de diffusion. Nous avons discuté de l'approximation de Born au premier et deuxième ordre ainsi que l'approximation de Born des ondes planes (PWBA). Nous avons défini la matrice de transition et les éléments de matrice correspondant. L'amplitude de diffusion a été déduite de la matrice de transition par la fameuse transformé de Fourier. L'accès à l'amplitude de diffusion a été rendu facile par des simplifications apportées par les propriétés de symétries des éléments $3j$ de Wigner.

Bibliographie

- [1] G S Khandelwal et B-H Choi, *J. Phys.* **B1** 1218(1968).
- [2] D. R. Bates, *Atomic and Molecular Processes*, (New York, Academic Press, 1962).
- [3] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (Addison-Wesley Pub., Inc, 1994).
- [4] K. L. Bell, D. J. Kennedy et A. E. Kingston, *J. Phys.* **B1** 218(1968).
- [5] A. R. Holt et B. L. Moiseiwitsch, *J. Phys.* **B1** 36(1968)
- [6] B. A. Lippmann et J. Schwinger, *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950)
- [7] J. Schwinger, *Phys. Rev.* **56**, 750 (1947)
- [8] A. Messiah, *Mécanique Quantique 1 et 2*, Dunod (1959).
- [9] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, Springer-Verlag (1990).
- [10] B. H. Bransden et C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, John Wiley & Sons (1983).
- [11] N. F. Mott et H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, Oxford University Press (1965).
- [12] M. R. C. MacDowell et J. P. Coleman, *Introduction to the Theory of the Ion-Atom Collisions*, North Holland, Amsterdam (1970).
- [13] B. H. Bransden, *Atomic Collision Theory*, Benjamin, New York (1983).
- [14] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, *Mécanique Quantique I et II*, Hermann(1973).
- [15] J. H. McGuire, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1153 (1982).

CHAPITRE III
PRINCIPE
VARITIONNEL DE
SCHWINGER

III.1 Introduction

Une description microscopique correcte des processus quantiques dans certain domaine de la physique moderne doit satisfaire l'équation de Schrödinger avec des conditions aux limites appropriées. Cette conjoncture, généralement exigeante, nécessite souvent l'utilisation de méthodes d'approximation de plus en plus sophistiquées, menant parfois à des situations extrêmement laborieuses, du moment qu'on se trouve contraint d'investiguer dans des problèmes plus compliqués que le mouvement d'un électron dans le champ de deux particules chargées.

C'est dans ce même créneau, que la théorie variationnelle a été employée comme outil d'approximation par Schrödinger [1] dans ses premiers travaux initiés tout à fait au début du fondement de la théorie quantique. Depuis cette période, plusieurs auteurs ont utilisé et développé des méthodes variationnelles pour des problèmes d'états liés et de diffusion. Ces méthodes ont été réexaminées dans plusieurs ouvrages et articles pour les états liés [2] et pour les états de diffusion [3,4]. En effet, une vingtaine d'année plus tard, Hulthén [5] a établi la première technique variationnelle pour le calcul des états de diffusion alors que la méthode de Rayleigh-Ritz [6,7] devait être développée, bien avant, pour le calcul des états liés. Cette dernière a été appliquée dans le traitement de l'état fondamental des systèmes atomiques, moléculaires et nucléaires puis étendue pour la théorie de Hylleraas-Undheim [8] dans le calcul des états excités de certain système quantique.

D'autres méthodes variationnelles (quadratiques en H : dites méthodes variationnelles quadratiques) ont été suggérées pour résoudre le problème des valeurs et vecteurs propres des états liés. Si bien que ces méthodes soient en relation étroite avec la méthode variationnelle de Rayleigh-Ritz, d'autre méthode variationnelle basées sur les multiplicateurs de Lagrange ont été développée et mise à l'épreuve.

En ce qui concerne les problèmes de diffusion, Hulthén [9,10], Kohn [11], Hulthén [12] et Feshbach [13] ont proposé ce qu'ils appellent méthode variationnelle classique. De son coté, Schwinger développe une méthode variationnelle basée sur une idée complètement différente. Immédiatement après établissement de la méthode variationnelle classique pour les états de diffusion, plusieurs auteurs [14, 15, 16] ont pu montrer qu'à ces méthodes a toujours été associées l'apparence de singularités [14] (anomalie [16]) ou pseudo-résonance [17]). Plusieurs auteurs [16, 18] ont tenté, avec un moindre succès, de construire une méthode ne souffrant pas de singularités. Des méthodes absolument exemptes d'anomalies ont été

suggérées par Abdel-Raouf [19] pour résoudre des problèmes de diffusion. Malheureusement, le plus grand effort a été investi, à l'époque, dans la résolution de problèmes des états liés.

En général, la plupart des méthodes variationnelles mentionnées plus haut, ont montré satisfaction par comparaison des résultats avec l'expérience. Cependant, une théorie variationnelle unifiée qui traite le problème des états liés conjointement avec celui des états de diffusion a toujours motivé les théoriciens. La première tentative dans ce sens a été mise au point par Kato [20] dans l'esprit de trouver la relation entre méthode variationnelle classique et méthode variationnelle de Schwinger. Peu après, Kato [21] suivi de Roussopoulos [22] ont montré que les deux types de méthodes dérivent d'une même fonctionnelle variationnelle. Un peu plus tard, Singh et Stauffer [23] ont présenté une formulation unifiée pour ces méthodes en utilisant la théorie des opérateurs linéaires de l'espace de Hilbert et les équations de Lippmann-Schwinger. Cependant, il a été montré plus tard [24,25]), que les méthodes variationnelle de type Hulthén et les méthodes variationnelle quadratiques diffèrent essentiellement dans l'espace de fonctions tests considérées.

La méthode variationnelle de Kohn [10] et les méthodes variationnelle qui en dérivent font partie des méthodes variationnelle classiques mentionnées auparavant. Ces méthodes nécessitent l'évaluation d'intégrales sur des fonctions non L^2 . Ces intégrales sont souvent difficiles à évaluer numériquement. En revanche, les méthodes développées par la suite sont basées en grande partie sur les principes variationnels utilisant des fonctions L^2 uniquement. Le principe variationnel de Schwinger est le premier principe variationnel de ce type [26]. Il a été originalement suggéré pour le calcul de déphasages de diffusion.

III.2 Principe variationnel et équations intégrales de Fredholm

Les principes variationnels ont montré leurs efficacités dans la résolution d'une grande variété de problèmes de physique mathématiques y compris les équations intégrales de diffusion. Différents types de principes variationnels ont été considérés pour les problèmes de diffusion quantique. La formulation de ces principes variationnels est largement maîtrisée dans le contexte de l'équation intégrale de Fredholm [27, 28, 29].

L'équation intégrale de Fredholm peut se mettre sous la forme :

$$F(x) = B(x) + \kappa F(x) \quad (\text{III.1})$$

où $F(x)$ est l'inconnu, $B(x)$ est le terme de Born connu et κ le noyau qui satisfait l'égalité :

$$\kappa F(x) = \int_0^\infty dy \kappa(x, y) F(y) \quad (\text{III.2})$$

La solution formelle de l'équation (III.1) est donnée par :

$$F(x) = JB(x) = \int_0^\infty dy J(x, y) B(y) \quad (\text{III.3})$$

avec :

$$J = (I - \kappa)^{-1} \quad (\text{III.4})$$

Une tentative numérique directe pour résoudre l'équation (III.1) procède par une construction de l'opérateur J de l'équation (III.4). Si jamais une erreur existe dans cette construction, alors la même erreur se propage à la solution (III.3). Cependant, une expression variationnelle pour la résolution du problème peut être développée à partir de l'opérateur identité suivant :

$$F = F_t + J_t B - J_t(I - \kappa)F_t + (J - J_t)(I - \kappa)(F - F_t) \quad (\text{III.5})$$

En négligeant le dernier terme de cette identité, qui est d'une différence de second ordre, on peut se contenter de l'expression variationnelle simple :

$$[F(x)] = F(x) + J B(x) - J(I - \kappa)F(x) \quad (\text{III.6})$$

Il faut noter que l'expression (III.6) dans laquelle l'indice t sur les fonctions tests a été omis, est stationnaire par rapport à une petite variation de J et $F(x)$ autour de leurs valeurs exactes. En utilisant les équations (III.3) et (III.4), la propriété variationnelle de l'équation (III.6) peut être vérifiée avec les quantités test :

$$F_t(x) = F_E(x) + \Delta F(x) \quad (\text{III.7})$$

$$J_\kappa = J_E + \Delta J \quad (\text{III.8})$$

L'expression (III.6) devient :

$$[F(x)] = F_E(x) + \Delta F(x) + J_E B(x) + \Delta J B(x) - (J_E + \Delta J)(I - \kappa)[F_E(x) - \Delta F(x)] \quad (\text{III.9a})$$

$$[F(x)] = F_E(x) - \Delta J(I - \kappa)\Delta F(x) \quad (\text{III.9b})$$

Pour dériver l'équation (III.9), nous avons utilisé les équations (III.3) et (III.4). Les indices E et t désignent respectivement exact et test.

Dans l'équation (III.9), le terme linéaire en erreurs Δ a été éliminé et seul le terme quadratique en Δ est maintenu. La propriété variationnelle ci-dessus peut être exploitée pour développer une stratégie d'amélioration successive pour un calcul numérique de la manière suivante.

A ce propos, les fonctions d'essai sont choisies sous la forme :

$$F_t(x) = \sum_{i=1}^n a_i u_i(x) \quad (\text{III.10})$$

$$J_t(x, y) = \sum_{j=1}^n b_j(x) v_j(y) \quad (\text{III.11})$$

Les fonctions $u_i(x)$ et $v_j(y)$ sont deux ensembles de fonctions choisies arbitrairement avec ces fonctions tests, l'expression (III.6) devient :

$$[F(x)] = \sum_{i=1}^n a_i j_i(x) + \sum_{j=1}^n b_j(x) \langle v_j | B \rangle - \sum_{j=1}^n b_j(x) \sum_{i=1}^n a_i [\langle v_j | u_i \rangle - \langle v_j | \kappa u_i \rangle] \quad (\text{III.12})$$

où l'on a l'intégrale :

$$\langle A | B \rangle = \int_0^\infty dx A(x) B(x) \quad (\text{III.13})$$

En exigeant que l'expression (III.12) soit stationnaire par rapport à de petites variations de a_i et $b_j(x)$ autour de leurs valeurs exactes, on obtient les solutions pour les coefficients sous la forme :

$$a_i = \sum_{j=1}^n D_{ij}^{(n)} \langle v_j | B \rangle \quad (\text{III.14})$$

$$b_j(x) = \sum_{i=1}^n u_i(x) D_{ij}^{(n)} \quad (\text{III.15})$$

avec :

$$(D^{-1})_{ij} = \langle v_j | u_i \rangle - \langle v_j | \kappa u_i \rangle \quad (\text{III.16})$$

Il faut noter qu'après inversion de l'équation (III.16) la matrice D est indépendante. Ces résultats pour a_i et $b_j(x)$ sont substitués dans l'équation (III.12) pour conduire à l'estimation variationnelle suivante :

$$[F_n(x)] = \sum_{i,j=1}^n u_i(x) D_{ij}^{(n)} \langle v_j | B \rangle \quad (\text{III.17})$$

Cependant, l'équation variationnelle (III.17) est étroitement liée au principe variationnel de Schwinger [26, 30, 31].

Le principe variationnel (III.6) peut être aussi écrit dans une forme fractionnaire équivalente :

$$[F(x)] = F(x) J B(x) / J (I - \kappa) F(x) \quad (\text{III.18})$$

La nature variationnelle de l'équation (III.18) peut être vérifiée en utilisant les fonctions tests (III.7) et (III.8).

III.3 Principe variationnel de Schwinger

Au cours des trois dernières décennies, les méthodes variationnelles et plus particulièrement celles qui dérivent du principe variationnel de Schwinger ont eu beaucoup de succès dans l'étude des processus d'excitation directe des atomes par impact d'ions aux vitesses intermédiaires. Ces méthodes sont basées sur les équations de Lippmann-Schwinger et les opérateurs qui s'y rattachent. Elles exploitent les propriétés variationnelles des paramètres qui en découlent tout en tenant, avec une grande souplesse, leurs avantages dans leurs capacités à se satisfaire d'une fonction d'onde d'essai comme approximation raisonnable de la fonction d'onde réelle du problème considéré.

Parmi les opérateurs qui suscitent l'intérêt des méthodes variationnelles basées sur le principe variationnel de Schwinger on trouve l'amplitude de transition qui peut être obtenue dans une forme stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion autour de leurs valeurs exactes.

III.3.1 Amplitude de transition de Schwinger

Le principe variationnel de Schwinger pour les éléments de la matrice de transition t est basé sur l'identité :

$$\begin{aligned} \langle p' | t | p \rangle &= \langle p' | V | \tilde{\psi}_p^{(+)} \rangle + \langle \tilde{\psi}_{p'}^{(-)} | V | p \rangle - \langle \tilde{\psi}_{p'}^{(-)} | V G_0^{(+)} V | \tilde{\psi}_p^{(+)} \rangle \\ &+ \langle \tilde{\psi}_{p'}^{(-)} - \psi_{p'}^{(-)} | (V - V G_0^{(+)} V) | \tilde{\psi}_p^{(+)} - \psi_p^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (\text{III.19})$$

Les fonctions d'ondes $|\psi_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \psi_{p'}^{(-)}|$ satisfaisant aux conditions d'ondes sortantes et entrantes vérifient les équations de Lippmann-Schwinger :

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = |p\rangle + G_0^{(+)} V |\psi_p^{(+)}\rangle \quad (\text{III.20})$$

$$\langle \psi_{p'}^{(-)}| = \langle p'| + \langle \psi_{p'}^{(-)}| V G_0^{(+)} \quad (\text{III.21})$$

Les fonctions d'ondes $|\tilde{\psi}_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_{p'}^{(-)}|$ sont supposées être des approximations aux fonctions d'ondes de diffusion exactes $|\psi_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \psi_{p'}^{(-)}|$ respectivement.

L'équation (III.19) est une identité indépendante de $|\tilde{\psi}_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_{p'}^{(-)}|$. Cependant, si $|\tilde{\psi}_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \tilde{\psi}_{p'}^{(-)}|$ sont de bonnes approximations des fonctions d'ondes exactes $|\psi_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \psi_{p'}^{(-)}|$

respectivement, le dernier terme de l'équation (III.19) est de second ordre en déviations. Les équations (III.19), (III.20) et la plus part des équations qui vont suivre sont valables pour des observables d'ondes variationnels. Dans ces équations la dépendance en énergie de la matrice t et la fonction de Green et le moment angulaire (symboles) ont été supprimés et la notation de Dirac est utilisée pour des raisons de commodité :

$$\langle p'|t|p\rangle = t_L(p', p, K^2) \quad (III.22)$$

En retenant seulement les termes d'ordres 1 en déviation dans l'équation (III.19) et en supprimant l'indice A de la fonction d'onde approchée, nous obtenons une forme bilinéaire de l'amplitude de transition dans le principe variationnel de Schwinger :

$$[\langle p'|t|p\rangle] = \langle p'|V|\psi_p^{(+)}\rangle + \langle \psi_{p'}^{(-)}|V|p\rangle - \langle \psi_{p'}^{(-)}|(V - VG_0^{(+)}V)|\psi_p^{(+)}\rangle \quad (III.23)$$

En introduisant des fonctions d'essais dans le principe variationnel défini si dessus, il est possible d'aboutir à des valeurs approchées de l'amplitude de transition. Mais si par contre, se sont des fonctions d'ondes exactes qui sont injectées dans ce principe, alors chacun des trois termes devient identiquement égale à la matrice exacte de t et le principe variationnel de Schwinger sous sa forme bilinéaire conduit à une identité. La majorité des principes variationnels de ces paragraphes sont basés sur des formes bilinéaires semblables. La présente construction du principe variationnel doit être comparée à celle de l'équation (III.6) en relation avec l'équation de Fredholm standard. La majorité des discussions liées à l'équation (III.6) sont valables dans ce cas. En particulier, comme dans l'équation (III.18), on a la forme fractionnaire équivalente pour le principe variationnel de Schwinger :

$$[\langle p'|t|p\rangle] = \frac{\langle p'|V|\psi_p^{(+)}\rangle \langle \psi_{p'}^{(-)}|V|p\rangle}{\langle \psi_{p'}^{(-)}|(V - VG_0^{(+)}V)|\psi_p^{(+)}\rangle} \quad (III.24)$$

Cette matrice t est obtenue en considérant les trois termes constituant la forme bilinéaire (III.23) du principe variationnel de Schwinger. Il faut noter que les deux formes fractionnaire et bilinéaire sont cohérentes avec la définition même de l'amplitude de transition :

$$[\langle p'|t|p\rangle] = \langle p'|V|\psi_p^{(+)}\rangle = \langle \psi_{p'}^{(-)}|V|p\rangle = \langle \psi_{p'}^{(-)}|(V - VG_0^{(+)}V)|\psi_p^{(+)}\rangle \quad (III.25)$$

Pour des fonctions d'essais réelles, L^2 ou non, le potentiel de l'équation (III.24) est réel et Hermitien et par conséquent, les formes variationnelles de Schwinger (III.23) et (III.24) satisfassent les conditions d'unitarité et de symétrie inverse par rapport au temps. La forme séparable (III.23) pour la matrice t est particulièrement utile si on est intéressé par la

résolution de problème multi-particules. C'est la version de matrice de transition t du principe variationnel qui est considéré dans cette section. Cependant, la forme alternative suivante du principe variationnel de Schwinger peut être obtenue si la fonction d'onde test de l'équation (III.23), est réécrite en termes des éléments de la matrice t :

$$\begin{aligned} [\langle p'|t|p\rangle] = & \\ \langle p'|V(I + G_0^{(+)}t_1)|p\rangle - \langle p'|(I + t_2G_0^{(+)})V|p\rangle - & \\ \langle p'|(I + t_2G_0^{(+)})V - V G_0^{(+)}V(I + G_0^{(+)}t_1)|p\rangle & \end{aligned} \quad (III.26)$$

Dans l'équation (III.26), t_1 et t_2 sont deux estimations test indépendantes pour la matrice exacte t . La propriété de stationnarité de l'équation (III.26) peut être établie si nous utilisons l'équation de Lippmann-Schwinger pour la matrice de transition t . Nous allons voir dans une section ultérieure, comment la forme fractionnaire de l'expression stationnaire (III.26) peut être utilisée itérativement dans une stratégie de calculs approximatifs.

Dans les équations (III.23) et (III.24) on note l'existence d'une intégrale multiple sur la fonction de Green. La difficulté associée à cette intégrale multiple peut être réduite par exemple, en considérant la forme alternative [32].

$$[\langle p'|t|p\rangle] = \langle p'|\chi_p^{(+)}\rangle + \langle \chi_{p'}^{(-)}|p\rangle - \langle \chi_{p'}^{(-)}|(V^{-1} - G_0^{(+)})|\chi_p^{(+)}\rangle \quad (III.27)$$

où nous avons introduit les facteurs de forme :

$$|\chi_p^{(+)}\rangle = V |\psi_p^{(+)}\rangle \quad (III.28)$$

$$\langle \chi_{p'}^{(-)}| = \langle \psi_{p'}^{(-)}| V \quad (III.29)$$

L'expression variationnelle de Schwinger (III.27) est stationnaire à l'ordre 1 par rapport à des variations des fonctions d'essais $|\chi_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \chi_{p'}^{(-)}|$. Dans l'équation (III.27) on a une intégrale simple sur les fonctions de Green libre. Cependant, dans la même équation apparaît une intégrale sur le potentiel inverse V^{-1} qui mérite une attention spéciale.

On peut aussi réécrire le principe variationnel de Schwinger (III.23) ou bien (III.27) dans la forme suivant :

$$[\langle p'|t|p\rangle] = \langle p'|V|\psi_p^{(+)}\rangle + \langle \chi_{p'}^{(-)}|p\rangle - \langle \chi_{p'}^{(-)}|(I - G_0^{(+)}V)|\psi_p^{(+)}\rangle \quad (III.30)$$

qui est stationnaire à l'ordre 1 par rapport à de petites variations des fonctions d'essais $|\psi_p^{(+)}\rangle$ et $\langle \psi_{p'}^{(-)}|$. Contrairement aux équations (III.23) et (III.24), Dans la forme (III.30) du principe

variationnel, nous avons affaire à une intégrale simple sur la fonction de Green et aucune intégrale sur l'opérateur inverse V^{-1} .

Les expressions (III.27) et (III.30) peuvent aussi être écrites dans des formes fractionnaires équivalentes :

$$[\langle p' | t | p \rangle] = \frac{\langle p' | \chi_p^{(+)} \rangle \langle \chi_{p'}^{(-)} | p \rangle}{\langle \chi_{p'}^{(-)} | (V^{-1} - G_0^{(+)}) | \chi_p^{(+)} \rangle} \quad (\text{III.31})$$

$$[\langle p' | t | p \rangle] = \frac{\langle p' | V | \psi_p^{(+)} \rangle \langle \chi_{p'}^{(-)} | p \rangle}{\langle \chi_{p'}^{(-)} | (I - G_0^{(+)} V) | \psi_p^{(+)} \rangle} \quad (\text{III.32})$$

Les principes variationnelles (III.30) et (III.32) ne sont pas symétrique par inversion de temps. Cependant, ceci ne constitue pas un obstacle pour les applications numériques. Par équivalence au principe variationnel (III.32) on peut transposer les principes variationnels :

$$[\langle p' | t | p \rangle] = \langle \psi_{p'}^{(-)} | V | p \rangle + \langle p' | \chi_p^{(+)} \rangle - \langle \psi_{p'}^{(-)} | (I - V G_0^{(+)}) | \chi_p^{(+)} \rangle \quad (\text{III.33})$$

et

$$[\langle p' | t | p \rangle] = \frac{\langle p' | \chi_p^{(+)} \rangle \langle \psi_{p'}^{(-)} | V | p \rangle}{\langle \psi_{p'}^{(-)} | (I - V G_0^{(+)}) | \chi_p^{(+)} \rangle} \quad (\text{III.34})$$

Une procédure de calcul utilisant les principes variationnels cités auparavant est obtenue en prenant les fonctions d'essais comme combinaisons linéaire des fonctions de base d'un ensemble donnée. Dans une situation idéale, ces fonctions de base doivent être orthonormées et linéairement indépendantes. Cependant, ces conditions ne sont pas toujours réalisées dans un calcul numérique. Les coefficients de développement de la fonction d'essai en termes des fonctions de base sont déterminés en considérant la propriété de stationnarité.

Une stratégie de calcul numérique peut être développée à partir du principe variationnel (III.23) avec le choix des fonctions d'essais :

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = \sum_{i=1}^n a_i(p) |f_i\rangle \quad (\text{III.35})$$

$$\langle \psi_{p'}^{(-)} | = \sum_{j=1}^n \langle f_j | b_j(p') \quad (\text{III.36})$$

où a_i et b_j sont des coefficients à déterminer par les exigences variationnelles et les fonctions $|f_i\rangle$ forment l'ensemble des fonctions de la base.

Nous avons utilisé le même ensemble des états de base pour les deux fonctions d'essais. Ceci n'est pas essentiel, mais l'avantage est de maintenir le résultat symétrique par inversement du temps.

Pour déterminer les coefficients a_i et b_j , nous substituons les équations (III.35) et (III.36) dans le principe variationnel de Schwinger (III.23) et nous exigeons que l'expression résultant soit stationnaire par rapport à des variations indépendantes de a_i et b_j , il s'ensuit que :

$$b_j(p') = \sum_{i=1}^n \langle p' | V | f_i \rangle D_{ij}^{(n)} \quad (\text{III.37})$$

$$a_i(p) = \sum_{j=1}^n D_{ij}^{(n)} \langle f_j | V | p \rangle \quad (\text{III.38})$$

où,

$$(D^{-1})_{ji} = \left\langle f_j \left| \left(V - V G_0^{(+)} V \right) \right| f_i \right\rangle, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (\text{III.39})$$

Ici $D^{(n)}$ est une matrice de $n \times n$, construite par inversion de la matrice, sans doute, non singulière, D^{-1} de l'équation (III.39). Avec ces coefficients du développement, les fonctions d'essais des équations (III.35) et (III.36) deviennent :

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = \sum_{i,j=1}^n |f_i\rangle D_{ij}^{(n)} \langle f_j | V | p \rangle \quad (\text{III.40})$$

$$\langle \psi_{p'}^{(-)} | = \sum_{i,j=1}^n \langle p' | V | f_i \rangle D_{ij}^{(n)} \langle f_j | \quad (\text{III.41})$$

En substituant les résultats du calcul effectué plus haut dans l'équation (III.33), nous obtenons la matrice t de Schwinger dans une forme dégénérée de rang (n).

$$[\langle p' | t | p \rangle] = \sum_{i,j=1}^n \langle p' | V | f_i \rangle D_{ij}^{(n)} \langle f_j | V | p \rangle \quad (\text{III.42})$$

Pour $n = 1$, l'équation (III.42) se réduit à la forme fractionnaire de rang-1 (III.24) pour le principe variationnel de Schwinger et par conséquent elle doit être considéré comme une généralisation multi-rang du résultat de rang-1 (III.24). Le résultat (III.42) peut être, reconnu comme étant l'unique résultat obtenu avec la méthode bien connue des moments pour résoudre les équations intégrale de Fredholm (i.e. équation (III.17)).

La matrice t de rang n de l'équation (III.42) est obtenue si on résous l'équation de Lippmann-Schwinger avec le potentiel dégénéré de rang n suivant:

$$[\langle p' | V_n | p \rangle] = \sum_{i,j=1}^n \langle p' | V | f_i \rangle B_{ij}^{(n)} \langle f_j | V | p \rangle \quad (\text{III.43})$$

où la matrice B $n \times n$ est définie par ces élément inverses :

$$(B^{-1})_{ji} = \langle f_j | V | f_i \rangle, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (\text{III.44})$$

Pour un développement réel des fonctions $|f_i\rangle$ et un potentiel Hermitien réel V le potentiel de rang n , $\langle p' | V | p \rangle$ est aussi réel est Hermitien. Par conséquent la matrice variationnel t (III.42), satisfais automatiquement la condition d'unitarité et les déphasages résultants sont réels. Le potentiel de rang n de l'équation (III.43) possède la propriété d'être exact quand il opère sur tout combinaison linéaire des fonctions $|f_i\rangle$, $i = 1, \dots, n$ puisque,

$$\langle f_j | V_n = \langle f_j | V, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{III.45})$$

$$V_n | f_i \rangle = V | f_i \rangle, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{III.46})$$

En assurant que l'ensemble des fonctions $|f_i\rangle$ devient complet quand $n \rightarrow \infty$, dans la même limite $V_n \rightarrow V$, et $t_n \rightarrow t$. Par conséquent, plus le nombre de fonctions introduit dans la base est grand, plus le résultat sur la matrice t sera meilleur.

Une stratégie de calcul doit être développée à partir du principe variationnel (III.30) avec le choix des fonctions d'essais :

$$|\psi_p^{(+)}\rangle = \sum_{i=1}^n a_i(p) |f_i\rangle \quad (\text{III.47})$$

$$\langle \chi_{p'}^{(-)} | = \sum_{j=1}^n \langle \nu_j | b_j(p') \quad (\text{III.48})$$

où a_i et b_i , $i = 1, \dots, n$ sont les coefficients d'expansion et $|f_i\rangle$ et $\langle \nu_i |$, $i = 1, \dots, n$ forment l'ensemble des fonctions de base.

Comme le principe variationnel (III.30) n'est pas symétrique, il n'est pas nécessaire de prendre le même ensemble de fonction de base pour deux fonctions d'essais. Après nous substituons les fonctions (III.47) et (III.48) dans le principe variationnel (III.40) et exigeons que l'expression résultant des calculs soit stationnaire par rapport à des variations indépendantes de a_i et b_j . Nous aurons alors :

$$b_i(p') = \sum_{j=1}^n \langle p' | V | f_j \rangle C_{ij}^{(n)} \quad (\text{III.49})$$

$$a_i(p) = \sum_{j=1}^n C_{ij}^{(n)} \langle \nu_i | p \rangle \quad (\text{III.50})$$

où :

$$(C^{-1})_{ji} = \langle \nu_i | (I - G_0^{(+)} V) | f_j \rangle, \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (\text{III.51})$$

Quand ces coefficients sont substitués dans les équations (III.47), (III.48) et (III.30), nous obtenons la matrice variationnelle t de rang n :

$$[\langle p'|V_n|p\rangle] = \sum_{i,j=1}^n \langle p'|V|f_i\rangle C_{ij}^{(n)} \langle v_i|p\rangle \quad (\text{III.52})$$

L'équation (III.52) peut être comparée avec l'équation (III.17) obtenue par la méthode des moments pour une équation générale de Fredholm. Ce résultat devrait être déduit à partir de l'équation (III.42) en prenant $\langle v_j| = \langle f_j|V$, pour une raison que les principes variationnels (III.23) et (III.30) sont aussi lié par une relation telle que $\langle x_{p'}^{(-)}| = \langle \psi_{p'}^{(-)}|$.

Finalement, si nous prenons $V|f_i\rangle = |v_i\rangle$ et une équation semblable pour son transpose dans l'équation (III.42). Nous obtenons la forme alternative du principe variationnel de Schwinger :

$$[\langle p'|V_n|p\rangle] = \sum_{i,j=1}^n \langle p'|v_i\rangle U_{ij}^{(n)} \langle v_j|p\rangle \quad (\text{III.53})$$

avec :

$$(U^{-1})_{ji} = \langle v_j| \left(V^{-1} - G_0^{(+)} \right) |v_i\rangle, \quad i = 1, \dots, n \quad (\text{III.54})$$

Ce résultat est unitaire et symétrique par inversion de temps. Le développement (III.34) peut aussi être dérivé à partir de la forme trilineaire (III.27) en faisant un développement du facteur de forme χ des équations (III.28) et (III.29) en termes des fonctions de base $v_i, i = 1, \dots, n$. Comme ces facteurs de forme sont engendrés par le potentiel, alors ils sont L^2 .

III.3.2 Choix des fonctions de base

Plusieurs formes du principe variationnel de Schwinger ont été discutées jusqu'ici. Il est maintenant nécessaire d'évoquer le problème de choix de la base. Un choix correct des fonctions de base est fondamental pour le succès du principe variationnel dans une application numérique. Les fonctions d'essais d'une méthode variationnelle doivent être choisies en satisfaisant certaines propriétés asymptotiques de la fonction qu'elles approchent. Le choix doit aussi refléter les propriétés du potentiel en considération : courte portée ou non, dépendance en énergie ou non, Hermitien ou non, et ainsi de suite.

Les fonctions d'essais $|v_p^{(+)}\rangle$ et $\langle v_{p'}^{(-)}|$ des principes variationnels de Schwinger (III.23), où bien (III.24) peuvent être prises dans L^2 . Cependant, ces fonctions d'ondes de diffusion sont non normalisables, dépendantes en énergie et ont un comportement oscillatoire à l'infini. Si ce comportement asymptotique est inclus dans la fonction d'essais, on peut s'attendre à une convergence rapide.

L'inclusion de condition aux limites asymptotiques correctes dans la méthode variationnelle de Schwinger basé sur l'équation (III.23) ou bien (III.24) est désirable

uniquement pour obtenir une convergence rapide. Dans l'équation (III.42) les fonctions d'essais sont toujours multipliées par le potentiel. Ainsi, pour un potentiel de très courte portée, le comportement asymptotique longue portée de la fonction d'essais se trouve écarté. De ce fait, pour des potentiels de très courtes portées, il n'ya aucun avantage réel à utiliser des fonctions d'essai oscillatoires.

Pour un potentiel de courte portée, les fonctions exactes (III.28) et (III.29) sont L^2 . Dans l'équation (III.53) les fonctions d'essais doivent donc être choisies dans L^2 . Il existe deux fonctions dans les principes variationnels (III.30) à (III.34). La fonction exacte ψ non-normalisable et la fonction χ qui est une fonction L^2 . Pour un calcul numérique, ces deux fonctions peuvent être prise dans L^2 . Cependant, pour une bonne convergence, la fonction approchée ψ doit avoir un comportement oscillatoire à l'infini, tandis que la fonction approché χ doit être prise dans L^2 .

La méthode variationnelle de Schwinger (III.53) a aussi été utilisée avec succès dans le calcul numérique pour un potentiel local dans un espace de configuration [11]. Cependant, dans cette forme, on est en présence d'une intégrale sur l'opérateur potentiel inverse V^{-1} qui ne peut être défini pour toutes variables d'espace de moment et de configuration. Ceci ne constitue pas un obstacle, du moment que nous nous intéressons aux éléments de matrice $\langle \psi_j | V | \psi_i \rangle$ qui doivent être fini pour des fonctions d'essais appropriées et non pas à l'opérateur inverse V^{-1} même si celui-ci diverge. Par exemple, pour un potentiel de Yukawa $V(r) \approx \frac{\exp(-\mu r)}{r}$, et par conséquent pour $V^{-1}(r) \approx r \exp(\mu r)$, tel que $V^{-1}(r)$ diverge quand $r \rightarrow \infty$. Cette divergence peut être taclé par la fonction L^2 suivante: $\psi_j(r) = \langle r | \psi_j \rangle = \langle \psi_j | r \rangle = \exp(-j\alpha r)$ $j = 1, \dots, n$ avec $\alpha > \frac{\mu}{r}$. Alors, les éléments de matrice $\langle \psi_j | V^{-1} | \psi_i \rangle$ sont finis. Dans ce cas l'ensemble des fonctions de base est supposé être une bonne représentation de la fonction $\langle r | V | \psi_k^{(+)} \rangle$ qui est une fonction L^2 pour un potentiel courte-portées. L'équation (III.53) a été rarement utilisée dans les calculs numériques. Comme cette méthode variationnelle nécessite le développement d'intégrales simples par rapport à la méthode variationnelle de Schwinger habituelle (III.42), elle doit recevoir plus d'attention dans le future. Cependant, la plus part des potentiels communément utilisés en physique nucléaire et atomique sont non locale et présentent un cœur répulsif à courtes distances et une attraction longue portée. Pour de tel potentiels V^{-1} est singulier à r fini, et un soin particulier dans le

choix des fonctions de base est nécessaire en utilisant (III.53) qu'il ne l'est dans l'application simple avec les potentiels de Yukawa ou exponentiels.

III.4 Formulation variationnel

En mécanique quantique non relativiste et indépendante du temps, l'équation de Schrödinger est équivalente dans sa forme au problème aux valeurs propres conventionnelles.

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{III.55})$$

ou bien de manière équivalente :

$$(H - E)|\psi\rangle = |0\rangle \quad (\text{III.56})$$

où E et H sont l'énergie totale et le Hamiltonien totale respectivement d'un système quantique décrit par le vecteur $|\psi\rangle$.

La contrainte de Schrödinger peut être réinitialisée en accord avec l'équation (III.56) comme suit; un vrai système physique ou processus physique décrit par l'observable $(H - E)$ est bien exprimé, microscopiquement, par le développement sur $|\psi\rangle$ si et seulement si le vecteur de Schrödinger $(H - E)|\psi\rangle$ définit un espace nul.

Il est clair que l'équation (III.56) peut être écrite sous la forme [33, 34] :

$$\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle = 0 \quad (\text{III.57})$$

où $|\delta\psi\rangle$ est une variation arbitraire de $|\psi\rangle$. L'équation (III.57) vérifie aussi le principe variationnel :

$$\partial \langle \psi | H - E | \psi \rangle = 0 \quad (\text{III.58})$$

Suivant la notation de Wildermuth et Tang [35], l'espace de développement $|\psi\rangle$ peut être obtenu, de façon similaire pour les problèmes des états liés et de diffusion, par la conjecture :

$$|\psi\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle + \int a_j |\psi_j\rangle dj \quad (\text{III.59})$$

L'ensemble $\{|\psi_K\rangle\}$ est composé de vecteurs linéairement indépendants, mais pas nécessairement orthogonaux satisfaisant les mêmes conditions aux limites que $|\psi\rangle$.

La variation sur $|\psi\rangle$ est donnée par :

$$|\delta\psi\rangle = \sum_K \delta a_K |\psi_K\rangle \quad (\text{III.60})$$

Des équations (III.59), (III.60) et (III.57) nous obtenons :

$$\langle \psi_k | H - E | \psi \rangle = 0 \quad (\text{III.61})$$

où k représente tout les états possibles du système considéré.

Pour les calculs pratiques, $|\psi\rangle$ est remplacé par un espace de développement test $|\psi_t^{(n)}\rangle$ définie par :

$$|\psi_t^{(n)}\rangle = \sum_k^n a_k |\psi_k\rangle \quad (\text{III.62})$$

où n est la dimension de $|\psi_t^{(n)}\rangle$.

De façon similaire, les équations (III.57), (III.58) et (III.61) se réduisent aux formules suivantes :

$$\langle \delta\psi_t^{(n)} | H - E | \psi_t^{(n)} \rangle = 0 \quad (\text{III.63})$$

$$\delta \langle \psi_t^{(n)} | H - E | \psi_t^{(n)} \rangle = 0 \quad (\text{III.64})$$

et :

$$\langle \psi_k^{(n)} | H - E | \psi_t^{(n)} \rangle = 0; \quad k = 1, \dots, n \quad (\text{III.65})$$

L'avantage dans l'utilisation de l'équation (III.65) qui est pratiquement équivalente à l'équation (III.63) et (III.64) pour l'estimation des propriétés de certain système quantique réside dans le fait que le vecteur $|\psi_t^{(n)}\rangle$ est libre de toutes restrictions appart celles qui ont un aspect physique. Il est tout-à-fait légitime qu'on puisse lui attribuer toutes les valeurs nécessaires pour décrire le comportement arbitraire d'un système quantique. Cependant, les points faibles de (III.65) sont simple à identifiés [36, 37]. Ayant assumé que l'espace de développement test $|\psi_t^{(n)}\rangle$ d'un système d'état lié est composé de n vecteurs orthogonaux, alors l'équation (III.65) produit n états liés (n valeurs pour E). Certains de ces états sont caractéristiques de l'Hamiltonien H et les autres sont dépourvus de sens physiques. Pour des systèmes réels, autre que le système à un électron, nous avons n pseudo-états, dont certains constituent de bonne approximation des états physiques réels et certains sont insignifiant. Aussi, si $|\psi_t^{(n)}\rangle$ est considéré comme la superposition de vecteurs décrivant les régions asymptotiques et d'interaction du problème de collisions, alors l'équation (III.65) peut conduire à l'apparition de fausses singularités [38].

L'équation (III.65) exige aussi que les projections du vecteur de Schrödinger $(H - E)|\psi_t^{(n)}\rangle$ dans l'espace $\{|\psi_K\rangle\}$ soient nulles. Pour la généralisation de cette idée nous réécrivons (III.65) comme suit :

$$\langle\phi_S|H - E|\psi_t^{(n)}\rangle = 0 \quad (\text{III.66})$$

où $|\phi_S\rangle$, est appelé espace des fonctions tests du vecteur $(H - E)|\psi_t^{(n)}\rangle$ [24,25] et peuvent être choisi en incluant les composantes de l'espace de développement test. En effet, le formalisme de projection donné par les équations (III.63), (III.65) et (III.66) est une conséquence directe du principe variationnel (III.64) et par conséquent, tout changement en terme de ces équations se déduits du changement dans le principe de base.

III.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons discuté des principes variationnels depuis le fondement de la théorie quantique avec Schrödinger jusqu'au principe variationnel de Schwinger utilisé pour les calculs sur les états liés et les états de diffusion. Nous avons montré l'efficacité des méthodes variationnelle dans la résolution des équations intégrales de type Fredholm. Nous avons pu constater le lien étroit entre équations de Lippmann-Schwinger et les équations intégrales de type Fredholm.

Bibliographie

- [1] E. Schrodinger, Ann. d. Phys. **81**, 8 (1926).
- [2] R. Courant et D. Hilbert, Methods of Mathematical Physics (Interscience Publishers, Inc., New-York, 1953) Vol. I.
- [3] P.M. Morse and H. Feschbach, Methods of Mathematical Physics (McGraw-Hill, Inc., 1953) Part I, II.
- [4] J. Callaway, Phys. Reports **45**, 89 (1978).
- [5] L. Hulthen, Kgl. Fysiograf. Sillskap. Lund Froh. **14**, 257 (1944).
- [6] M. A. Abdel-Raouf, Phys. Rept. **84**, 163 (1982).
- [7] G. Arfken, Mathematical Methods for Physicists, Academic Press, INC., 3ème edition (1985).
- [8] E. A. Hylleraas et B. Undheim, Z. Phys. **65**, 759 (1930).
- [9] L- Hulthen and P.O. Olsson, Phys. Rev. **79**, 532 (1950).
- [10] L. Hulthen and S. Kavlen, Phys. Rev. **87**, 297 (1952).
- [11] W. Kohn, Phys. Rev. **74** A948) 1763.
- [12] L. Hulthen, Arkiv Math. Astron. Fysik **35A**, 1 (1948).
- [13] H. Feschbach et S.I. Rubinow, Phys. Rev. **88**, 484 (1952).
- [14] C. Schwartz, Ann. Phys. (NY) **16**, 36 (1961).
- [15] C. Schwartz, Phys. Rev. **124**, 1468 (1961).
- [16] R.K. Nesbet, Phys. Rev. **A175**, 134 (1968).
- [17] I. Shimamura, J. Phys. Soc. (Japan) **31**, 852 (1971).
- [18] K. Takatsuka et T. Fueno, Phys. Rev. **A19**, 1011 (1979).
- [19] M. A. Abdel-Raouf, J. Phys. **B12**, 3349 (1979).
- [20] T. Kato, Phys. Rev. **80**, 475 (1950).
- [21] T. Kato, Progr. Theor. Phys. (Japan) **6**, 394 (1951).
- [22] P. Roussopoulos, Comp. rend. **236**, 1858 (1953).
- [23] S.R. Singh et A.D. Stauffer, Nuovo Cim. **B22**, 139 (1974).
- [24] M.A. Abdel-Raouf, J. Phys. **B12**, 3349 (1979).
- [25] M.A. Abdel-Raouf, Act. Phys. Hung. **48**, 31 (1980).
- [26] J. Schwinger, Phys. Rev. **56**,750 (1947).
- [27] B. Selçuk, Methods in Sciences and Engineering, Wiley-Interscience, INC (2006).
- [28] C. Guilpin, Manuel de Calcul Numérique Appliqué, EDP Science.

- [29] P. M. Morse et H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill Book Company, Inc (1953) Part I.
- [30] Takatsuka, K., et V. McKoy, *Phys. Rev.* **A23**, 2352 (1981a).
- [31] Takatsuka, K., et V. McKoy, *Phys. Rev.* **A23**, 2358 (1981b).
- [32] C. Schwartz, *Phys. Rev.* **124**, 1468 (1961a).
- [33] K. Wildermuth, *The Structure of Nuclei*, Trieste Lectures (IAEA, Vienna, 1972) p. 117.
- [34] K. Wildermuth, *Act. Phys. Austr. Suppl.* **9** 1 (1972).
- [35] K. Wildermuth and Y.C. Tang, *A Unified Theory of the Nucleus* (Vieweg, Braunschweig, 1977).
- [36] E.W. Schmid, *Acta. Phys. Austr. Suppl.* IX, 44 (1972).
- [37] J. Schwager and E.W. Schmid, *Nucl. Phys.* **A205** 168 (1973).
- [38] J. Schwager, *Nuovo Cim.* **A18** 783 (1973).

CHAPITRE IV
EXCITATION D'UN
SYSTEME
HYDROGENOÏDE

VI.1 Introduction

Les processus d'interaction (excitation, capture et ionisation) examinés à la lumière des systèmes simples (hydrogène et hydrogénoïdes) ont suscité beaucoup d'intérêt de la part des théoriciens [1-8] et expérimentateurs [9-13]. Des techniques et méthodes d'approximation théoriques (références déjà citées) ont été conçues et développées à ce sujet et les résultats des calculs comparés aux mesures directement accessibles par l'expérience ont toujours constitué la preuve sur la fiabilité et l'efficacité des modèles avancés. Parmi ces techniques et méthodes d'approximation, le principe variationnel de Schwinger constitue à lui seul un outil extrêmement puissant dans l'estimation des sections efficaces et des paramètres qui s'y rattachent. Ce principe a toujours motivé le groupe de physique théorique initié par Bouamoud [14] et c'est dans ce même créneau que nous voulons, par le biais de ce travail de thèse, apporter notre contribution dans le calcul et estimation sur les processus d'interaction ion-atome hydrogénoïde en incluant, dans une partie ultérieure, le continuum discrétisé sur un ensemble de fonctions pseudo-états de la cible.

Pour se faire, nous appliquons le principe variationnel de Schwinger pour estimer les sections efficaces d'excitation de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires. Ce sont les éléments de matrice de transition variationnelle qui sont développés en premier. Il faut noter cependant, que la principale contribution à la transition considérée se produit à petit angle (diffusion vers l'avant) pour une collision de type $H^+ \rightarrow H$ à une énergie de l'ordre de 50keV [15]. Dans une telle situation, le projectile décrit une trajectoire rectiligne et par conséquent nous pouvons traiter le problème dans le cadre de l'approximation eikonale [16].

Nous tenons à signaler que dans la majorité de cette partie, nous avons imité les hypothèses et développements avancés par notre groupe [4, 5, 6, 7, 8] et que le long de ce travail, c'est l'unité atomique qui est adoptée sauf mention explicite.

IV.2 Amplitude de transition variationnel

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

Dans la méthode du paramètre d'impact [17], la séparation internucléaire est donnée par :

$$\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z} \tag{IV.1a}$$

$$\vec{z} = \vec{v} \cdot t \tag{IV.1b}$$

$$\vec{\rho} \cdot \vec{v} = 0 \tag{IV.1c}$$

où :

\vec{R} est la distance internucléaire.

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

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

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

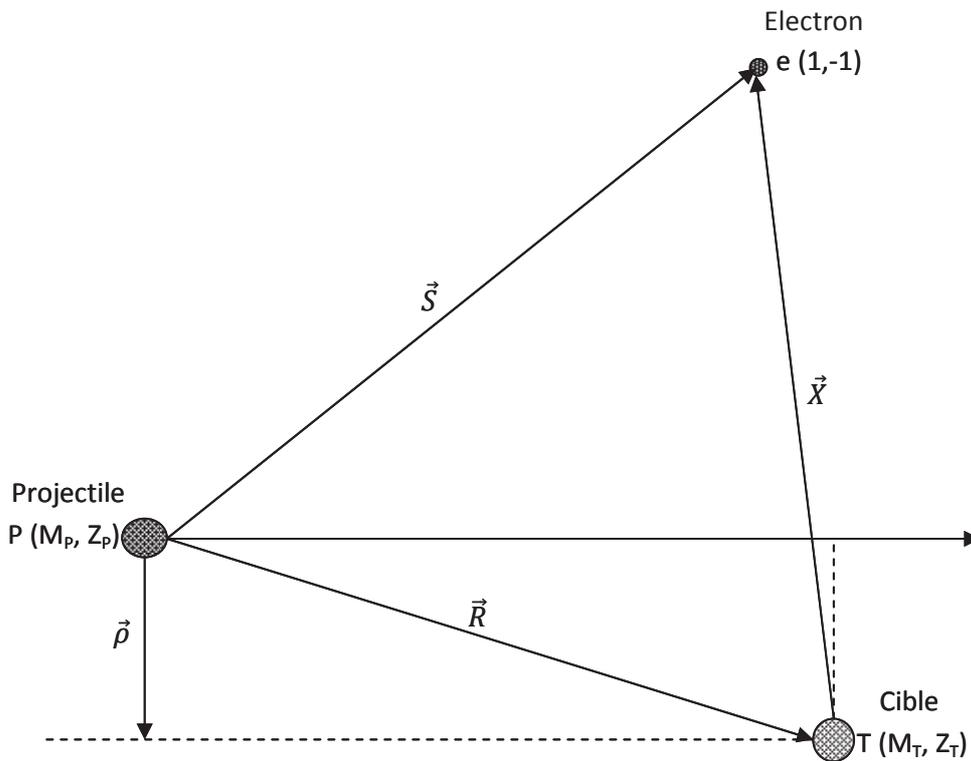


Figure IV.1 : Système projectile-cible

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

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

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

$$H = H_c + V_c \tag{IV.2}$$

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

avec

$$H_T = -\frac{\Delta_x}{2} - \frac{Z_T}{x} \tag{IV.3}$$

et

$$T_P = -\frac{1}{2\mu} \Delta_R \quad (\text{IV.4})$$

où μ représente la masse réduite donnée par :

$$\mu = \frac{M_P(M_T+1)}{M_P+M_T+1} \quad (\text{IV.5})$$

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

$$V_C = \frac{Z_P Z_T}{R} - \frac{Z_P}{S} \quad (\text{IV.6})$$

En 1972 Janev et Salin [18] ainsi que Belkic, Gayet et Salin (1979) [19] ont montré que les sections efficaces totales sont indépendantes du potentiel interagragat donnée par :

$$V_{\text{int}} = \frac{Z_P(Z_T-1)}{R} \quad (\text{IV.7})$$

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

$$V = V_C - \frac{Z_P(Z_T-1)}{R} \quad (\text{IV.8a})$$

$$V = Z_P \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{S} \right) \quad (\text{IV.8b})$$

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

$$\left\{ -i\mathcal{V} \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\alpha(z)\rangle = 0 \quad (\text{IV.9a})$$

$$\left\{ -i\mathcal{V} \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\beta(z)\rangle = 0 \quad (\text{IV.9b})$$

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

$$\alpha(z) = \langle \vec{x}, z | \alpha(z) \rangle = e^{-i\frac{\epsilon_\alpha z}{v}} \varphi_\alpha(\vec{x}) \quad (\text{IV.10a})$$

$$\beta(z) = \langle \vec{x}, z | \beta(z) \rangle = e^{-i\frac{\epsilon_\beta z}{v}} \varphi_\beta(\vec{x}) \quad (\text{IV.10b})$$

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

Dans la méthode du paramètre d'impact, les états de diffusion $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $|\psi_\beta^-(z)\rangle$, vecteurs propres de l'Hamiltonien total du système, satisfont respectivement aux conditions d'onde sortante et entrante. Il faut ajouter que les notations $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ et $|\alpha(z)\rangle$ et $|\beta(z)\rangle$ signifient que les états de diffusion $|\psi_\alpha^+\rangle$ et $|\psi_\beta^-\rangle$ ainsi que $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ ne dépendent pas seulement des coordonnées électroniques \vec{x} mais aussi de la composante z de R .

Les états de diffusion $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ et $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ sont déterminés par les équations de Lippman-Schwinger eikonales suivantes [17] :

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z')V(z')|\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (\text{IV.11a})$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z')V(z')|\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (\text{IV.11b})$$

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

$$\left\{-i\mathcal{V}\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V\right\}|\psi_\alpha^\pm(z)\rangle = 0 \quad (\text{IV.12a})$$

$$\left\{-i\mathcal{V}\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V\right\}|\psi_\beta^\pm(z)\rangle = 0 \quad (\text{IV.12b})$$

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

$$\left\{-i\mathcal{V}\frac{\partial}{\partial z} + H_T(z)\right\}G_T^\pm(z-z') = -\delta(z-z') \quad (\text{IV.13})$$

En utilisant les conditions initiales :

$$G_T^+(z) = 0 \quad z < 0 \quad (\text{IV.14a})$$

$$G_T^-(z) = 0 \quad z > 0 \quad (\text{IV.14b})$$

En résolvant l'équation (IV.13) pour le propagateur de Green G_T^+ , il est simple de montrer que :

$$G_T^+(z-z')|\alpha(z')\rangle = -\frac{i}{\mathcal{V}}|\alpha(z)\rangle\theta(z-z') \quad (\text{IV.15a})$$

$$G_T^+(z-z')|\beta(z')\rangle = -\frac{i}{\mathcal{V}}|\beta(z)\rangle\theta(z-z') \quad (\text{IV.15b})$$

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

Ce qui est équivalent, par définition, au résultat :

$$G_T^+(z-z')|\alpha(z')\rangle = \begin{cases} -\frac{i}{\mathcal{V}}|\alpha(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{IV.16a})$$

Un résultat pareil pour $\beta(z)$; c'est à dire :

$$G_T^+(z-z')|\beta(z')\rangle = \begin{cases} -\frac{i}{v}|\beta(z)\rangle & z > z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{IV.16b})$$

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

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

On peut également démontrer que l'amplitude de transition se met sous une autre forme donnée par Janev et Salin [18]; soit :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z d[\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{IV.18a})$$

En réécrivant cette expression sous la forme :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} + \lim_{z \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^z \frac{dz}{dz} d[\beta(z)|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{IV.18b})$$

et en utilisant les expressions (IV.9a, b) et (IV.12a, b), nous aurons :

$$\left\{ -i v \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) \right\} |\beta(z)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} |\beta(z)\rangle = -\frac{i}{v} H_T |\beta(z)\rangle \quad (\text{IV.19})$$

et

$$\left\{ -i v \frac{\partial}{\partial z} + H_T(z) + V \right\} |\psi_\beta^\pm(z)\rangle = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} |\psi_\alpha^+(z)\rangle = -\frac{i}{v} (H_T + V) |\psi_\alpha^+(z)\rangle \quad (\text{IV.20})$$

L'équation (IV.18b) devient enfin :

$$a_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\beta(z)|H_T + V - H_T|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{IV.21a})$$

$$a_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\beta(z)|V|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{IV.21b})$$

À partir des équations de Lippmann-Schwinger (IV.21a), (IV.21b) et de l'expression (IV.17) de l'amplitude de transition $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, cette dernière est écrite sous d'autres formes :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\beta(z)|V|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{IV.22a})$$

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\psi_\beta^-(z)|V|\alpha(z)] \quad (\text{IV.22b})$$

$$= \delta_{\beta\alpha} - \frac{i}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dz [\psi_\beta^-(z)|V - V G_T^+ V|\psi_\alpha^+(z)] \quad (\text{IV.22c})$$

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

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

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

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

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

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

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

$$|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = |\psi_{\alpha}^{+}\rangle + |\delta\psi_{\alpha}^{+}\rangle \quad (\text{IV.25a})$$

$$|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle = |\psi_{\beta}^{-}\rangle + |\delta\psi_{\beta}^{-}\rangle \quad (\text{IV.25b})$$

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

$$|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = \sum_{i=1}^N \tilde{a}_i |i\rangle \quad (\text{IV.26a})$$

$$|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle = \sum_{j=1}^N \tilde{b}_j |j\rangle \quad (\text{IV.26b})$$

De manière similaire au traitement quantique, l'expression de l'amplitude de transition $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ donnée par la relation (IV.24) est stationnaire par rapport à de petites variations des états de diffusion $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ et $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ autour de leurs valeurs exactes.

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

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right)(\beta|V|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+})\left(-\frac{i}{v}\right)(\tilde{\psi}_{\beta}^{-}|V|\alpha)/\left(-\frac{i}{v}\right)(\tilde{\psi}_{\beta}^{-}|V - VG_T^+V|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}) \quad (\text{IV.27})$$

conduit à la forme :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{v}\right)\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i)(D^{-1})_{ij}(j|V|\alpha) \quad (\text{IV.28})$$

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

$$D_{ji} = (j|V - VG_T^+V|i) \quad (\text{IV.29})$$

Remarque :

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

VI.3 Calcul de l'amplitude de transition**VI.3.1 Amplitude de transition eikonale**

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

$$T_{\beta\alpha} = \langle \beta | V | \psi_\alpha^+ \rangle \quad (\text{IV.30})$$

au premier ordre en $\frac{1}{\mu}$ où μ représente la masse réduite du système en collision, la fonction d'onde de diffusion s'écrit [19] [21] :

$$\psi_\alpha^+(\vec{R}, \vec{x}) \approx \text{Exp}(i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{R}) \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{IV.31})$$

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

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

$$T_{\beta\alpha} = \int d\vec{R} d\vec{x} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}} \varphi_\beta^* V(\vec{R}, \vec{x}) \psi_\alpha^{+E}(\vec{\rho}, \vec{z}, \vec{x}) \quad (\text{IV.32})$$

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

$$\vec{q} = \vec{k}_\alpha - \vec{k}_\beta \quad (\text{IV.33})$$

$$\vec{q} = q_v \cdot \hat{v} - \vec{\eta} \quad (\text{IV.34})$$

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

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

$$\frac{k_\alpha^2}{2\mu} + \epsilon_\alpha = \frac{k_\beta^2}{2\mu} + \epsilon_\beta \quad (\text{IV.35})$$

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

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

$$q_\nu = \frac{\epsilon_\beta - \epsilon_\alpha}{\nu} + O\left(\frac{1}{\mu}\right) \quad (\text{IV.36})$$

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

$$\vec{q}\vec{R} \approx \frac{\epsilon_\beta - \epsilon_\alpha}{\nu} z + \vec{\eta} \cdot \vec{\rho} \quad (\text{IV.37})$$

En reportant cette expression approchée de $\vec{q}\vec{R}$ dans l'amplitude de transition donnée par la relation (IV.32), on obtient la forme suivante :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}} (\beta|V|\psi_\alpha^{+E}) \quad (\text{IV.37})$$

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

$$\langle \vec{x}, z|k\rangle = e^{-iz\epsilon_k/\nu} \varphi_k(\vec{x}) \quad (\text{IV.38})$$

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

Dans le cas où $\alpha \neq \beta$ et à l'aide de l'expression (IV.22a) la forme (IV.37) de l'amplitude de transition dans l'approximation eikonale devient [17] :

$$T_{\beta\alpha}(\vec{\eta}) = i\nu \int d^2\vec{\rho} e^{i\vec{\eta}\vec{\rho}} \rho^{2iZ_P(Z_T-1)/\nu} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) \quad (\text{IV.39})$$

Notons que dans cette dernière expression, nous avons réintroduit le facteur de phase $\rho^{2iZ_P(Z_T-1)/\nu}$ représentant la contribution du potentiel interagregat (IV.7).

VI.3.2 Section efficace d'excitation

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

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_\alpha}{k_\beta} |T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})|^2 \quad (\text{IV.40})$$

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

Dans le cas où l'énergie incident est très supérieure à la différence d'énergie ($\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta$) entre les états de la cible $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ et à partir de la relation (IV.34) on se permet d'écrire dans le cas de faible transfert d'impulsion longitudinale :

$$k_\alpha/k_\beta \approx 1 \quad (\text{IV.41})$$

Ce qui conduit à la section efficace différentielle :

$$\frac{d\sigma_{\beta\alpha}}{d\Omega} = \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right| \quad (\text{IV.42})$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\varphi_\beta \int_0^\pi \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \left| \frac{\mu T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{IV.43})$$

En différentiant \vec{q}^2 calculée à partir des expressions (IV.33a) et (IV.33b), et en utilisant la relation (IV.41), nous pouvons écrire :

$$\eta d\eta \approx \mu^2 v^2 \sin(\theta_\beta) d\theta_\beta \quad (\text{IV.44})$$

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

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int_0^{2\pi} d\rho_\eta \int_0^{+\infty} d\eta \eta \left| \frac{T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})}{2\pi} \right|^2 \quad (\text{IV.45})$$

En remplaçant $T_{\beta\alpha}(\vec{\eta})$ par son expression (IV.39), et en appliquant la transformée de Fourier à deux dimensions nous aurons pour la section efficace totale :

$$\sigma_{\beta\alpha} = \int d^2\vec{\rho} |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad (\text{IV.46})$$

Puisque le système présente une symétrie azimutale on aura :

$$\sigma_{\beta\alpha} = 2\pi \int_0^{+\infty} d\rho \rho |a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})|^2 \quad (\text{IV.47})$$

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

Nous avons souligné précédemment que l'amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est variationnelle, et qu'une forme approchée noté $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ est complètement déterminée par l'expression (IV.28) quand on développe les états de diffusion approchés dans un sous-espace vectoriel de dimension N .

Remarque :

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

La partie qui suit est consacré à l'évaluation des éléments de matrice de type $\langle i|V|j\rangle$ et $\langle i|VG_T^+V|j\rangle$ nécessaire pour le calcul de l'amplitude de transition $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ qui constitue une partie majeure dans la mise en œuvre du principe variationnel de Schwinger.

VI.4 Evaluation de l'amplitude de transition variationnelle

Notre objectif dans cette partie est de déterminer l'amplitude $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$. Cette dernière nécessite l'évaluation des éléments de matrice de type $\langle i|V|j\rangle$ dit de Born1 et de type $\langle i|VG_T^+V|j\rangle$ dit de Born2, où $|i\rangle$ et $|j\rangle$ sont solutions de l'équation de Schrödinger avec l'Hamiltonien H_T de la cible. Il faut rappeler également que la notation $(\int \dots)$ signifie que l'intégration est effectuée sur la composante z de \vec{R} et les coordonnées électroniques \vec{x} de la cible.

VI.4.1 Détermination des éléments de matrice de premier ordre $\langle i|V|j\rangle$

Dans le chapitre précédent nous avons exprimé les éléments $\langle i|V|j\rangle$ par :

$$\langle i|V|j\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle i|V|j\rangle \quad (\text{IV.48})$$

où les vecteurs $|i\rangle$ et $|j\rangle$ possèdent la forme donnée par la relation (IV-10a, b), et représentent aussi bien les états initiales et final $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$.

Soit :

$$\langle \vec{x}, z|k\rangle = e^{-i\frac{\epsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \quad \text{avec } k = \alpha, \beta \quad (\text{IV.49})$$

On aura alors :

$$\langle i|V|j\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int d\vec{x} e^{i\frac{\epsilon_i}{v}z} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) e^{-i\frac{\epsilon_j}{v}z} \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{IV.50})$$

si on note :

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{IV.51})$$

on aura :

$$\langle i|V|j\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i\frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{v}z} W_{ij}(\vec{\rho}, z) \quad (\text{IV.52})$$

où ϵ_i et ϵ_j désignent respectivement les énergies associées aux états électroniques $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_j\rangle$

On montre que $W_{ij}(\vec{\rho}, z)$ se met sous la forme :

$$W_{ij}(\vec{\rho}, z) = e^{i(m_j - m_i)\rho_R} W_{ij}(\rho, z) \quad (\text{IV.53})$$

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

Nous donnons ci-après les différentes propriétés de symétrie des éléments W_{ij} utiles dans l'élaboration des formes simplifiées des éléments de matrice à traiter numériquement. La consommation en temps de calcul et en matière de stockage mémoire de données sera considérablement réduite suite à l'usage de ces propriétés de symétrie. Il faut noter cependant, que, dans les éléments W_{ij} , nous avons volontairement ignoré la dépendance explicite en $\vec{\rho}$ (module et angle) et ceci dans le but de rendre l'écriture moins encombrant.

$$W_{ij}(z) = W_{ij}^*(z) \quad (\text{IV.54a})$$

$$W_{ij}(z) = W_{ji}(z) \quad (\text{IV.54b})$$

$$W_{ij}(-z) = (-1)^{l_i - l_j - m_i - m_j} W_{ij}(z) \quad (\text{IV.54c})$$

$$W_{-i, -j}(z) = (-1)^{m_i - m_j} W_{ij}(z) \quad (\text{IV.54d})$$

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

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

Si on pose :

$$d_{ij} = \frac{\epsilon_i - \epsilon_j}{v} \quad (\text{IV.55})$$

on aura les éléments :

$$(i|V|j) = \left[\int_{-\infty}^0 dz + \int_0^{+\infty} dz \right] e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad (\text{IV.56})$$

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

$$G_{ij}(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad (\text{IV.57})$$

En utilisant les propriétés de symétrie des éléments $W_{ij}(z)$ on obtient les propriétés suivantes pour la fonction G_{ij} :

$$G_{ij}(-x, -y) = (-1)^{l_i + l_j + m_i - m_j} G_{ij}^*(x, y) \quad (\text{IV.58})$$

$$G_{ij}(x, y) = G_{ji}^*(x, y) \quad (\text{IV.59})$$

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

Par conséquent, l'expression (IV.56) devient :

$$(i|V|j) = G_{ij}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(0, +\infty) \quad (\text{IV.60})$$

où l'intervalle d'intégration $]-\infty, +\infty[$ peut être transformé en une seule intégration dans l'intervalle $[0, +\infty[$.

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

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

$$W_{ij}(\rho, z) \approx W_{ij}^{as}(\rho, z) \quad \left(z \geq \tilde{z}_{ij} \text{ et } \tilde{z}_{ij} \geq \frac{3}{2}\rho \right) \quad (\text{IV.61})$$

et par la suite nous aurons :

$$G_{ij}(0, +\infty) = G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij}) + G_{ij}^{as}(0, \tilde{z}_{ij}) \quad (\text{IV.62})$$

où

$$G_{ij}(0, \tilde{z}_{ij}) = \int_0^{+\infty} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}(z) \quad (\text{IV.63})$$

et

$$G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}) = G_{ij}^{as}(\tilde{z}_{ij}, +\infty) = \int_{\tilde{z}_{ij}}^{+\infty} dz e^{id_{ij}z} W_{ij}^{as}(z) \quad (\text{IV.64})$$

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

VI.4.2 Détermination des éléments de matrice de deuxième ordre $(i|VG_T^+V|j)$

La difficulté majeure du principe variationnel de Schwinger réside dans l'évaluation des éléments de matrice $(i|VG_T^+V|j)$. En effet, le sous-espace des états engendrés par les bases $|i\rangle$ et $|j\rangle$ doit être bien choisi pour décrire convenablement les états de diffusion d'une part, et d'autre part une mauvaise représentation de l'opérateur G_T^+ entraîne une erreur dans le calcul

de ces éléments qui modifie l'amplitude de transition et par conséquence les prédictions physiques.

Dans le but de décrire convenablement les processus physiques nous avons investi tous nos efforts dans une représentation adéquate de G_T^+ ; condition d'une bonne évaluation des éléments $(i|VG_T^+V|j)$. Pour ce faire, nous avons développé l'opérateur eikonal G_T^+ sur une base complète formée par les états électroniques de la cible, états propres de H_T .

On peut montrer que l'opérateur eikonal G_T^+ peut s'écrire sous la forme :

$$G_T^+(z, z') = -\frac{i}{v} \exp\left(-\frac{i}{v} \int_{z'}^z H_T(u) du\right) \theta(z - z') \quad (\text{IV.65})$$

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

En substituant l'opérateur G_T^+ par la forme obtenue dans l'élément de matrice $(i|VG_T^+V|j)$ et en introduisant les relations de fermeture :

$$\sum_{\nu} |\nu\rangle\langle\nu| = 1 \text{ et } \int d\nu |\nu\rangle\langle\nu| = 1 \quad (\text{IV.66})$$

nous pouvons alors écrire

$$(i|VG_T^+V|j) = [\Sigma + f]_{\nu} (i|V|\nu) \left(-\frac{i}{v}\right) \theta(z - z') (\nu|V|j) \quad (\text{IV.67})$$

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

Il faut noter que, comme les vecteurs $|j\rangle$, les vecteurs $|\nu\rangle$ ont la forme :

$$\langle\vec{x}, z|k\rangle = e^{-i\frac{\epsilon_k}{v}z} \varphi_k(\vec{x}) \text{ avec } (k = \nu, j) \quad (\text{IV.68})$$

En développant l'expression (IV.67), et en utilisant la propriété de la fonction θ :

$$\theta(z - z') = \begin{cases} 1 & z \geq z' \\ 0 & z < z' \end{cases} \quad (\text{IV.69})$$

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

$$(i|VG_T^+V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) [\Sigma + f]_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{\nu j}z'} W_{\nu j}(z') \quad (\text{IV.70})$$

où

$$(i|VG_T^+V|j) = \left(-\frac{i}{v}\right) [\Sigma + f]_{\nu} \int_{-\infty}^{+\infty} dz' e^{id_{ij}z'} W_{\nu j}(z') \int_{z'}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \quad (\text{IV.71})$$

Conformément à l'expression (IV.61), et en définissant les régions asymptotiques par les valeurs $\tilde{z}_{i\nu}$ et $\tilde{z}_{\nu j}$, nous avons à considérer deux cas :

- Pour $\tilde{z}_{i\nu} > \tilde{z}_{vj}$ il est plus facile d'utiliser la relation (IV.70) dans le calcul des éléments de matrice $(i|VG_T^+V|j)$. En effet l'intégration sur z est analytique au delà de \tilde{z}_{vj} , donc dès que $z > \tilde{z}_{vj}$ l'intégration double se réduit à une intégrale simple.

- Pour $\tilde{z}_{i\nu} < \tilde{z}_{vj}$ il est avantageux d'utiliser la forme (IV.71). Il faut noter que l'utilisation des relations de symétrie de W_{ij} (IV.54a-d) et celles des éléments $(i|VG_T^+V|j)$ déterminées dans l'annexe A-I, nous permet de trouver la forme (IV.70), et par la suite de mettre un programme unique de traitement numérique dans le but de calculer les éléments de matrice.

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

$$(i|VG_T^+V|j) = \left(-\frac{i}{\nu}\right) [\Sigma + f]_{\nu} + H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) \quad (IV.72)$$

où

$$H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) \int_{-\infty}^z dz' e^{id_{vj}z'} W_{vj}(z') \quad (IV.73)$$

En utilisant les propriétés de symétrie de W_{ij} et de la fonction G_{ij} définie par l'expression (IV.57) nous pouvons écrire (Annexe A-I) :

$$H_{ij}^{\nu}(-\infty, +\infty) = G_{vj}^*(0, +\infty) \{ (-1)^{l_{\nu}+l_j+m_{\nu}-m_j} G_{i\nu}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j} G_{ij}^*(0, +\infty) \} + H_{ij}^{\nu}(0, +\infty) + (-1)^{l_i+l_j+m_i-m_j+1} H_{ij}^{\nu*}(0, +\infty) \quad (IV.74)$$

où

$$H_{ij}^{\nu}(0, +\infty) = H_{ij}^{\nu}(0, \tilde{z}_{vj}) + H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{vj}, \tilde{z}_{i\nu}) + H_{ij}^{\nu}(\tilde{z}_{i\nu}, +\infty) \quad (IV.75)$$

avec la fonction

$$H_{ij}^{\nu}(x, y) = \int_x^y dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}(z) G_{vj}(0, z) \quad (IV.76)$$

Les intégrales de l'expression (IV.75) ont les trois caractéristiques suivantes :

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

$$H_{ij}^{\nu as}(\tilde{z}_{i\nu}) = \int_{\tilde{z}_{i\nu}}^{+\infty} dz e^{id_{i\nu}z} W_{i\nu}^{as}(z) G_{vj}^{as}(z) \quad (IV.77a)$$

Où $G_{vj}^{as}(z)$ est donnée par l'expression (IV.64).

Cette forme $H_{ij}^{\nu as}(\tilde{z}_{i\nu})$ est explicitée dans l'annexe V.

Nous avons remarqué que pour des valeurs de ν , nombre quantique principal des états $| \nu \rangle$ très grands, les erreurs d'arrondis entraînent une instabilité de calcul. Ainsi pour tenir compte de l'ensemble des états du spectre discret, nous avons cherché une méthode de développement en $1/\nu^3$ comme celle introduite par Bethe et Salpeter [22] qui nous permet de limiter les calculs numériques à des états de ν pas trop élevés et qui garantit la stabilité pour chaque couple d'états $|i\rangle$ et $|j\rangle$.

IV.4.3 Les éléments $W_{ij}(\vec{R})$ du spectre discrets

Les éléments $W_{ij}(\vec{R})$ nécessaires pour l'évaluation des amplitudes de transitions eikonale de Born à l'ordre 1 et 2 sont donnés par la relation :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) V(\vec{R}, \vec{x}) \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{IV.81})$$

dans ces éléments figure le potentiel effectif :

$$V(\vec{R}, \vec{x}) = Z_p \left[\frac{1}{R} - \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} \right] \quad (\text{IV.82})$$

ainsi que les fonctions hydrogéoïde $\varphi_i^*(\vec{x})$ et $\varphi_j(\vec{x})$ données, d'une façon générale par :

$$\varphi_k(\vec{x}) \equiv \varphi_{n_k l_k m_k}(\vec{x}) = R_{n_k l_k}(x) Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) \quad (\text{IV.83a})$$

telle que :

$$R_{n_k l_k}(x) = e^{-\frac{Z_T x}{n_k}} \sum_{\mu=0}^{n_k - l_k - 1} B_{k\mu} x^{l_k + \mu} \quad (\text{IV.83b})$$

où :

$$B_{k\mu} \equiv B_{n_k l_k \mu} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(n_k + l_k)! (n_k - l_k - 1)!]^{1/2} \frac{(2Z_T)^{l_k + \mu + 3/2}}{n_k^{l_k + \mu + 2}} \frac{(-1)^\mu}{(n_k - l_k - 1 - \mu)! (2l_k + 1 + \mu)! \mu!} \quad (\text{IV.83c})$$

$Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x})$ est une harmonique sphérique [23, 24, 25] dont l'expression est :

$$Y_{l_k}^{m_k}(\hat{x}) = \left[\frac{2l_k + 1}{4\pi} \right]^{1/2} \left[\frac{(l_k - m_k)!}{(l_k + m_k)!} \right]^{1/2} (-1)^{m_k} P_{l_k}^{m_k}(\cos \theta_x) e^{im_k \varphi_x} \quad (\text{IV.83d})$$

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

Les fonctions $P_{l_k}^{m_k}$ sont les fonctions de Legendre associées définies par [26, 27, 28, 29]:

$$P_{l_k}^{m_k}(x) = (1 - x^2)^{\frac{m_k}{2}} \frac{d^{m_k}}{dx^{m_k}} P_{l_k}(x) \quad \text{pour } m_k \geq 0 \quad (\text{IV.83e})$$

$$P_{l_k}^{-m_k}(x) = (-1)^{m_k} \frac{(l_k - m_k)!}{(l_k + m_k)!} P_{l_k}^{m_k}(x) \quad \text{pour } -m_k < 0 \quad (\text{IV.83f})$$

où les $P_{l_k}(x)$ représentent les polynômes de Legendre.

Les deux expressions (IV.81) et (IV.82) nous permettent d'écrire :

$$W_{ij} = Z_p \left[\frac{\delta_{ij}}{R} - I(\vec{R}) \right] \quad (\text{IV.84a})$$

$$I(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} \varphi_j(\vec{x}) \quad (\text{IV.84b})$$

Si on utilise le développement multipolaire [29] :

$$\frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{R}) \quad (\text{IV.84c})$$

où $r_{<}$ et $r_{>}$ désignent respectivement le plus petit et le plus grand des modules R et x , l'intégrale (IV.84b) devient :

$$I(\vec{R}) = \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} L_l(R) Y_l^{m*}(\hat{R}) Y_l^m(\hat{R}) \cdot J \quad (\text{IV.85a})$$

avec :

$$L_l(R) = \int_0^{+\infty} dx x^2 R_i(x) R_j(x) \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} \quad (\text{IV.85b})$$

et J une intégrale bien connue sous la forme :

$$J = (-1)^{m_i} \int d\hat{x} Y_l^m(\hat{x}) Y_{l_i}^{-m_i}(\hat{x}) Y_{l_j}^{-m_j}(\hat{x}) \quad (\text{IV.85c})$$

dont la valeur s'écrit en termes des moments :

$$J = (-1)^{m_i} \left[\frac{(2l+1)(2l_i+1)(2l_j+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \quad (\text{IV.85d})$$

En utilisant les propriétés des coefficients 3J [30, 31] de Wigner nous obtenons les règles de sélection suivantes pour que J soit non nulle :

$$l + l_i + l_j = 2p \quad p \in N \quad (\text{IV.86a})$$

$$|l_i - l_j| \leq l \leq l_i + l_j \quad (\text{IV.86b})$$

$$m = m_i - m_j \quad (\text{IV.86c})$$

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

$$L_0(R) = \frac{1}{R} \int_0^R dx x^2 R_i(x) R_j(x) + \int_R^{+\infty} dx x R_i(x) R_j(x) \quad (\text{IV.87a})$$

$$L_0(R) = \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{1}{R} \int_R^{+\infty} dx x^2 R_i(x) R_j(x) + \int_R^{+\infty} dx x R_i(x) R_j(x) \quad (\text{IV.87b})$$

En explicitant les fonctions radiales $R_i(x)$ et $R_j(x)$ suivant l'expression (IV.83b), nous aurons :

$$L_0(r) = \frac{\delta_{ij}}{R} - \frac{e^{-\alpha_{ij}R}}{R} \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N_0-1)!}{(\alpha_{ij})^{N_0}} \sum_{p=0}^{N_0-1} C_{N_0}(p) (\alpha_{ij}R)^p \quad (\text{IV.87c})$$

Avec

$$\alpha_{ij} = Z_T \left(\frac{1}{n_i} + \frac{1}{n_j} \right) \quad (\text{IV.87d})$$

$$N_0 = l_i + l_j + \mu + \nu + 3 \quad (\text{IV.87e})$$

$$C_{N_0}(p) = \begin{cases} 1 & \text{pour } p = 0 \\ \frac{1}{p!} + \frac{1}{N_0-1} \frac{1}{(p-1)!} & \text{pour } 1 \leq p \leq N_0 - 1 \end{cases} \quad (\text{IV.87f})$$

Pour $l \neq 0$, nous obtenons :

$$L_{l \neq 0}(r) = \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \int_0^{+\infty} dx \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij}x} \quad (\text{IV.88})$$

L'intégrale sur x conduit aux intégrales suivantes :

$$\int_0^{+\infty} dx \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij}x} = \frac{1}{R^{l+1}} \int_0^R dx x^{N-1} e^{-\alpha_{ij}x} + R^l \int_R^{+\infty} dx x^{N-2(l+1)} e^{-\alpha_{ij}x} \quad (\text{IV.89a})$$

$$\int_0^{+\infty} dx \frac{(r_{<})^l}{(r_{>})^{l+1}} x^{N_0-1} e^{-\alpha_{ij}x} = \frac{1}{R^{l+1}} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} \frac{(\alpha_{ij}R)^p}{p!} \right\} + R^l \frac{[N-2(l+1)]!}{\alpha_{ij}^{N-(2l+1)}} e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{q=0}^{N-2(l+1)} \frac{(\alpha_{ij}R)^q}{q!} \quad (\text{IV.89b})$$

où N est défini comme :

$$N = N_0 + l \quad (\text{IV.89c})$$

L'équation (IV.88) devient alors :

$$L_{l \neq 0}(R) = \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \left\{ 1 - e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij}R)^p \right\} \quad (\text{IV.90a})$$

Avec les coefficients :

$$C_{N,l}(p) = \begin{cases} \frac{1}{p!} & \text{pour } 0 \leq p \leq 2l \\ \frac{1}{p!} - \frac{1}{(N-1)!} \frac{[N-2(l+1)]!}{[p-2(l+1)]!} & \text{pour } 2l+1 \leq p \leq N-1 \end{cases} \quad (\text{IV.90b})$$

A partir des expressions (IV.87b) et (IV.90a), l'intégrale $I(\vec{R})$ définie par l'expression (IV.85a) devient :

$$I(\vec{R}) = \frac{\delta_{ij}}{R} + \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} Y_l^m(\hat{R}) \cdot J \quad (\text{IV.91a})$$

$$J = \sum_{\mu,\nu} B_{i\mu} B_{j\nu} \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \frac{1}{R^{l+1}} \left\{ (1 - \delta_{l,0}) - e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij}R)^p \right\} \quad (\text{IV.91b})$$

En explicitant $Y_l^{m*} \hat{R}$ et l'intégrale J et en utilisant les règles paires de sélection (IV.86a-c), la somme sur l peut être limitée à des valeurs soit paires, soit impaires et la somme sur m à un seul terme ($m = m_i - m_j$).

On aura alors, à partir de (IV.84a) :

$$W_{ij}(\vec{R}) = W_{ij}(\vec{R}_0) e^{-im\varphi_R} \quad (\text{IV.92a})$$

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

$$W_{ij}(\vec{R}_0) = Z_p \sum_{l=l_{\min}}^{l_{\max}} A_{ll_i l_j}^{mm_i m_j} \sum_{\mu=0}^{n_i-l_j-1} \sum_{\nu=0}^{n_i-l_j-1} B_{n_i l_i \mu} B_{n_j l_j \nu} \frac{P_l^m(\cos(\theta_R))}{R^{l+1}} \times \frac{(N-1)!}{(\alpha_{ij})^N} \left\{ e^{-\alpha_{ij}R} \sum_{p=0}^{N-1} C_{N,l}(p) (\alpha_{ij}R)^p - (1 - \delta_{l,0}) \right\} \quad (\text{IV.92b})$$

avec :

$$A_{ll_i l_j}^{mm_i m_j} = (-1)^{m_j} [(2l_i + 1)(2l_j + 1)]^{\frac{1}{2}} \frac{[(l-m)!]^{\frac{1}{2}}}{[(l+m)!]^{\frac{1}{2}}} \times \left[\begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & l_i & l_j \\ m & -m_i & m_j \end{pmatrix} \right] \quad (\text{IV.92c})$$

Avec les conditions :

$$l_{\min} = \sup[|l_i - l_j|, |m_i - m_j|] \quad (\text{IV.92d})$$

$$l_{\max} = l_i + l_j \quad (\text{IV.92e})$$

L'expression (IV.81) peut être mise sous la forme :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \langle j_i | V(\vec{R}, \vec{x}) | j_j \rangle \quad (\text{IV.93a})$$

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 :

$$W_{ij}(\vec{R}) = \langle \varphi_i | \mathfrak{R} V(\vec{R}_0, \vec{x}) \mathfrak{R}^{-1} | \varphi_j \rangle \quad (\text{IV.93b})$$

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

Il vient alors :

$$W_{ij}(\vec{R}) = e^{i(m_j - m_i)\varphi_R} \langle \varphi_i | V(\vec{R}_0, \vec{x}) | \varphi_j \rangle \quad (\text{IV.93c})$$

soit encore :

$$W_{ij}(\vec{R}) = e^{-im\varphi_R} W_{ij}(\vec{R}_0) \quad (\text{IV.93d})$$

avec bien sûr :

$$m = m_j - m_i \quad (\text{IV.93e})$$

De la même manière on peut déduire une relation analogue pour $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$. En effet, par analogie avec l'expression (II.26) de l'opérateur de transition T , on peut écrire, à partir des deux relations : $\langle k|\Theta|k'\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle k|\Theta|k'\rangle$ ainsi que la relation (III.37) :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \langle \beta | a(\vec{\rho}) | \alpha \rangle \quad (\text{IV.94a})$$

où encore :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \langle \beta | \mathfrak{R} a(\vec{\rho}_0) \mathfrak{R}^{-1} | \alpha \rangle \quad (\text{IV.94b})$$

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

On aura donc

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = e^{i(m_\alpha - m_\beta)\varphi_R} \langle \beta | a(\vec{\rho}_0) | \alpha \rangle \quad (\text{IV.94c})$$

qui s'écrit encore :

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = e^{i(m_\alpha - m_\beta)\varphi_R} a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}_0) \quad (\text{IV.94d})$$

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

IV.4.4 Les éléments W_{ij} du pseudo-spectre

Les éléments W_{ij} du paragraphe précédent ont été évalués pour le spectre discret d'une cible hydrogène. Ils représentent, d'une manière explicite, les transitions entre états discrets de la cible dans l'unique voie envisagée dans le processus après impact du proton projectile.

Dans le paragraphe qui suit, c'est la contribution du continuum dans le processus d'excitation de la cible qui est recherchée. Cette contribution, qui est faible sans être négligeable, dérive nécessairement d'un couplage entre voie principale d'excitation et voies intermédiaires d'ionisation de la cible et de capture sur le projectile. Pour la voie principale d'excitation, ce couplage peut être entièrement attribué aux transitions entre états discrets et états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible.

Pour des transitions entre états discrets et états du continuum, il n'est pas aussi évident d'évaluer les éléments W_{ij} , facilement tractable dans le cas des transitions entre états discrets de la cible. En effet, les états du continu et les états liés de la cible ne sont pas normalisés de la même manière. Les états liés sont normalisés par un delta de Kronecker tandis que les états du continu sont normalisés par un delta de Dirac dans l'espace des énergies.

Pour pallier à cette difficulté de normalisation rencontrée lors de l'évaluation des éléments de transition voir même de recouvrement entre les états liés et les états du continu de la cible, nous avons adopté un moyen de discrétisation des états du continu de la cible via une procédure d'orthogonalisation de Gram-Schmidt sur l'ensemble des états exactes ou quasi exactes de la cible.

Les fonctions d'onde quasi exactes Φ_{jl} adoptées dans ce travail pour représenter l'état j de la cible de moment angulaire l sont les fonctions d'onde de type Slater de Callaway et Unnikrishnan. Ces fonctions d'onde qui s'écrivent comme combinaisons linéaires d'orbitales de Slater se présentent en termes de paramètres variationnels ξ_i pour les puissances entières de la position radiale r sous la forme :

$$\Phi_{jl} = \sum_i c_{ji} r^{n_i} e^{-\xi_i r} \quad (\text{IV.95})$$

Ces fonctions d'onde doivent répondre à un minimum d'exigence comme critère de choix des fonctions d'onde des états de la cible. Parmi les différents critères de choix qui existent dans la littérature (Bransden et al, 1977[32]), nous exigeons à ces fonctions d'ondes d'avoir au moins le comportement des fonctions d'onde de l'état fondamental et des premiers états excités de l'atome hydrogène.

Il faut noter que les fonctions orbitales de Slater non orthogonales qui constituent l'ensemble des éléments sur lequel sont développées les fonctions d'onde de Callaway et Unnikrishnan sont des fonctions décroissantes vérifiant les conditions de rebroussement autour du point de singularité près du noyau (Bouferguene et al [33]). Ces fonctions orbitales qui imitent le comportement des fonctions d'onde hydrogéoïdes sont donc bien adaptées au problème qui nous intéresse.

Cependant, comme nous l'avons déjà mentionné auparavant, les fonctions orbitales de Slater ne sont pas orthogonales. Pour remédier à cet inconvénient et rendre le calcul des éléments W_{ij} facilement tractable, nous exigeons comme conditions supplémentaires que : (i)- les fonctions d'ondes quasi exactes des états et pseudo-états de la cible soit construites sur la base d'un ensemble complet de fonctions d'ondes orthogonales. (ii)- Ces fonctions d'onde orthogonales soit elles-mêmes générées par développement sur l'ensemble des fonctions orbitales de Slater non orthogonales via une procédure d'orthonormalisation de Gram-Schmidt. Sur la base de ces considérations, le calcul des éléments W_{ij} nécessite seulement l'évaluation d'intégrales déjà examinées dans le cas des transitions entre états liés de la cible.

Ces intégrales sont exprimées en termes de fonctions gamma incomplètes (ANNEXE A-I) définies et tabulées dans Abramovitz&Stegun [28].

IV.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons suivi une stratégie de calcul développée par notre groupe. Nous avons utilisé le principe variationnel de Schwinger eikonal sous forme fractionnaire pour évaluer les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires. Les amplitudes de transition entre états discrets de la cible ont été évaluées en premier. Ces grandeurs vitales vont nous permettre par la suite un accès direct aux sections efficaces d'excitation dans la gamme des énergies considérées.

Les transitions entre états liés et états du continuum de la cible ne sont pas directement recherchées dans ce manuscrit. Le continuum proche du seuil d'ionisation est représenté en premier par des pseudo-états de la cible dont les énergies sont positives. Ces pseudo-états sont discrétisés ensuite sur la base d'un ensemble complet de fonctions L^2 de carrés sommables. L'ensemble des fonctions de carrés sommables est soit l'ensemble orthonormé des fonctions hydrogénéoïdes soit l'ensemble des fonctions L^2 de type Slater orthonormalisée par une procédure d'orthonormalisation de Gram-Schmidt.

Bibliographie

- [1] R. Gayet et J. Hanssen, *J. Phys.* **B25** 825-37 (1992).
- [2] R. Gayet et J. Hanssen, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* **B86** (1994) 52-61.
- [3] B. Brendlé, R. Gayet et K. Wohrer, *Phys. Rev. Lett.* **54** 2007(1985).
- [4] M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I, (1988).
- [5] R. Gayet et M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* **B42** 515 (1989).
- [6] A. Bouserhane, B. Lasri et M. Bouamoud, *Physical and Chemical News Journal.* **27** (2006)
- [7] B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal,* **28** (2006)
- [8] B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal,* **20** 12(2004).
- [9] D. P. Higgins, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys. B.* **29** 1919 (1996).
- [10] D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner et K-H Schartner, *J. Phys. B.* **27** 4195(1994).
- [11] T. J. Morgan, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B6** 2118(1973).
- [12] M. B. Shah et H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B14** 2361(1981).
- [13] M. B. Shah, D. S. Elliott et H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B20** 2481(1987).
- [14] B. Lasri, Thèse de Doctorat Es Sciences Physique, Faculté des Sciences, Université Abou-Bakr Belkaid Tlemcen (2007).
- [15] B. Brendlé, R. gayet, J. P. Rozet et K. Wohrer, *phys. Rev. Lett.* **54** 2007 (1985).
- [16] R. J. Glauber, *Lectures in Theoretical Physics*, ed. by W. E. Brittin and L. G. Dunham, Interscience Publishers, Inc., New York, Volume I, page 315, (1959).
- [17] R. McCarroll et A. Salin, *J. Phys.* **B1** 163 (1968).
- [18] R. K. Janev et A. Salin, *Ann. Phys. N.Y.* **73** 136 (1972).
- [19] DZ. Belkic, R. Gayet et A. Salin, *phys. Report* **56** (1979) 279.
- [20] R. McCarroll et A. Salin, *C. R. Acad. Sci. Paris* **263** 329 (1966).
- [21] R. McCarroll et A. Salin, *J. Phys.* **B1** 163 (1968).
- [22] H. A. Bethe, et E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms* (Springer-Verlag, Berlin, 1957).
- [23] R. G. Newton, *Quantum Physics a Text for Graduate Students*, Springer-Verlag NY., Inc. (2002).

- [24] J. Zablouil, R. Hammerling, L. Szuniogh et P. Weinberger, *Electron Scattering in Matter*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2005).
- [25] B. H. Bransden et C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Scientific & Technical (1983).
- [26] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, Inc. (1985).
- [27] A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov et O.I. Marichev, *Integrals and Series*, Gordon and Breach Science Publishers (1992).
- [28] M. Abramowitz et I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, National Bureau of Standard 1972.
- [29] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (1991).
- [30] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Company Publishing, Inc. (1994).
- [31] V. Devanathan, *Angular Momentum Techniques in Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Publishers (2002).
- [32] B. H. Bransden et M. R. C. McDowell, *Physics Reports(Section C of Physics Letters)*, **30** 3(1977) pp 207-303
- [33] A. Bouferguene, M. Fares et D. Rinaldi, *J. Chem. Phys.* **100** 11(1994) 8156

CHAPITRE V
METHODE L^2

V.1 Introduction

Une méthode L^2 de fonction de carré sommable sera décrite dans le but d'approcher la fonction d'onde de diffusion. Dans ce genre de calcul, les équations close-coupling sont habituellement utilisées pour trouver une solution au problème. Nous décrivons la méthode de la matrice J qui est souvent utilisée dans les méthodes close-coupling. Le principe de base de la méthode de la matrice J est de mettre la matrice Hamiltonien du système développé sur les fonctions L^2 sous forme tridiagonale semblable à la matrice de Jacobi et ensuite résoudre le problème par une méthode close-coupling approprié.

Moyennant le principe de base de la méthode de la matrice J , dans ce paragraphe les pseudo-états issus du développement de la fonction d'onde du continuum sur un ensemble complet de fonctions L^2 de type Laguerre seront utilisés ultérieurement dans l'évaluation de l'amplitude de transition variationnelle entre états liés et états du continuum de la cible. L'amplitude de transition ainsi déterminée nous servira par la suite dans l'estimation de la contribution du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible.

V.2 Méthode L^2

L'idée d'employer des fonctions L^2 de carré sommable est d'approcher la fonction d'onde de diffusion solution de l'équation de Schrödinger. Pour décrire la diffusion d'un électron (un proton) par des cibles atomiques on utilise souvent les équations close-coupling en termes de pseudo-états. Dans ce modèle on utilise une base finie de fonctions L^2 pour diagonaliser le Hamiltonien de la cible qui possède un spectre discret de fonctions d'onde L^2 correspondant à des états liés et en addition, un spectre continu d'états d'énergies positives dont les fonctions d'ondes ne sont pas L^2 mais sont normalisé dans le sens de la fonction δ . La diagonalisation dans une base L^2 finie donne des états d'énergies négatives et positives. La base est habituellement choisie telle que les voies fondamentales soit décrite de manière adéquate tandis que les autres états liés sont collectivement approchés par le reste des énergies négatives. Les états d'énergies positives et les fonctions L^2 associées approchent le continuum de la cible.

Une nouvelle méthode conçue dans le but d'améliorer les calculs sur les processus de diffusion entièrement avec des fonctions L^2 de type Laguerre débute quand Heller et Yamani [1] tentent de bénéficier de tout l'avantage des propriétés analytiques d'un Hamiltonien donné et aussi de la base L^2 utilisée pour décrire la fonction d'onde. Spécifiquement, ils développent leur théorie fondamentale en utilisant des fonctions de bases de type Laguerre appropriées

pour des ondes de diffusions. Le Hamiltonien non couplé H_0^0 qui comprend uniquement l'opérateur énergie cinétique est traité de manière exacte dans l'espace couvert par la base complète L^2 . La partie restant du Hamiltonien, i.e. la partie correspondant au potentiel, est approché pour obtenir certain degré d'exactitude V^{approx} , tel que le Hamiltonien résultant $H_0^0 + V^{approx}$ soit aussi exactement soluble dans l'espace complet L^2 . Cette méthode est connue, par la suite, sous l'appellation de méthode de la matrice J en raison de la diagonalisation de H_0^0 qui conduit à un problème soluble de la matrice de Jacobi. Dans un deuxième article, Heller et Yamani [2] ont appliqué leur méthode pour les fonctions d'ondes de type s dans le cas d'un processus de collision électron-hydrogène. Ils ont montré l'utilité de la méthode dans la production du déphasage exacte de Burke et Smith [3] pour l'échange statique de diffusion. Considérant la présence de pseudo-états, l'accord entre leurs résultats et ceux de Burke et Mitchell [4] pour une diffusion élastique et inélastique juste en dessous et en dessus du seuil d'ionisation est assez remarquable bien que le nombre et position des pseudo-résonnances, soit différents dans les deux méthodes. Callaway [5] avait montré que les résultats pour une cible hydrogène sont largement améliorés si certaines fonction L^2 sont ajoutés au développement, qui, quoique se ne sont pas des fonctions propres exactes de la cible, permettent l'inclusion approché des contributions du continuum.

Depuis le travail motif de Heller et al [6, 7], Heller et Yamani [1, 2], et Yamani et Reinhardt [8] qui ont développé une approche systématique pour illustrer le contexte mathématique dans lequel les fonctions L^2 pouvaient approcher les solutions des problèmes de diffusions dans le continuum, les fonctions L^2 de type Laguerre ont été largement utilisées pour décrire les processus de diffusion.

V.3 Méthode de pseudo-état

Dans une méthode de pseudo-état, le Hamiltonien de la cible est diagonalisé dans une base L^2 finie. Les solutions qui ont des énergies positives sont appelées pseudo-états en raison qu'elles ne sont pas des fonctions propres vraies de la cible et leurs énergies varient avec le type de fonctions de base. L'utilisation de développement L^2 comme pseudo-états a été initiée pour la première fois par Rotenberg [9] quant il a introduit l'ensemble d'une base Sturmienne, complet mais non-orthogonal, avec un spectre continu pour faire des calculs sur les collisions élastique proton-hydrogène utilisant un développement close-coupling.

Plus tard, Burke et al [10] ont introduit les calculs close-coupling en pseudo-état dans les processus de diffusion électron-hydrogène. Depuis alors, la méthode pseudo-état continu de

jouer un rôle important dans l'étude des problèmes de diffusion et plus particulièrement, les collisions de type électron-hydrogène. La convergence de cette méthode a été en premier recherchée par Burke et al [11] via un développement close-coupling modifié qui augmentait les quelques premiers états propres de l'atome d'hydrogène avec des pseudo-états choisis d'être orthogonaux entre eux, avec les états propres représentant les états liés et avec ceux du continuum. Ils appliquent ce développement pour calculer les déphasages de diffusion élastique électron-hydrogène pour les ondes s, p, d et f de la cible. Ils ont signalé que la méthode close coupling des pseudo-état produit une convergence considérablement améliorée dans les déphasages élastiques à partir des valeurs close coupling. Geltmann et Burke [12] de leur côté, ont appliqué le développement pseudo-états pour l'excitation 1s et 2p de l'atome d'hydrogène. Ils ont conclu que le calcul pseudo-état semble être plus élaboré que d'autres calculs effectués en termes d'ondes partielles.

Burke et Webb [13] ont rapporté des calculs de sections efficaces d'excitation $1s \rightarrow 2s$ et $1s \rightarrow 2p$ dans une collision électron-hydrogène qui s'accordent qualitativement avec l'expérience dans la gamme d'énergie à partir de l'énergie proche du seuil d'ionisation jusqu'à 54,4 eV. Burke et Mitchell [4] ont étudié la convergence du développement pseudo-état du système électron-hydrogène aux énergies intermédiaires. Ils ont utilisé les pseudo-état $\overline{3s}$, $\overline{4s}$ et $\overline{5s}$ pour étudier la convergence des sections efficaces d'excitation $1s \rightarrow 2p$. Ils trouvent, en particulier, que l'inclusion d'un pseudo-état simple noté $\overline{3s}$ donne une section efficace d'excitation d'une précision améliorée de 10%.

Cinq ans plus tard, Poet [14] a développé une nouvelle méthode pour résoudre le problème de diffusion électron-hydrogène. Son modèle donne des solutions de très hautes précisions en employant la nature séparable de l'équation de Schrödinger projetée des ondes s pour les états s de la cible.

Le modèle de Poet est ainsi devenu une référence pour l'étude de convergence des méthodes close-coupling. Il a discuté ensuite la précision de la méthode close-coupling pseudo-état et trouve que l'inclusion de seulement un des pseudo-état produisait des sections efficaces $1s \rightarrow 2s$ précises jusqu'à 20%. Poet [15], a suggéré l'importance d'inclusion de pseudo-états qui représente les états du continuum pour augmenter la précision des résultats close-coupling. Une conséquence caractéristique de toutes les études utilisant les développements en pseudo-état est l'apparition de pseudo-résonance en dessus du seuil

d'ionisation dans les états singulet. La structure pseudo-résonante n'apparaît pas dans les états triplets.

Oza et Callaway [16] ont testé quatre pseudo-états différents basées sur un développement close-coupling pour calculer les sections efficaces élastiques et d'excitation $1s \rightarrow 2s$, $1s \rightarrow 3s$, et $2s \rightarrow 3s$. Ils ont observé des pseudo-structures seuils sur les sections efficaces de diffusion élastique et d'excitation. Ils ont noté que des résultats précis peuvent être obtenus en moyennant sur la structure pseudo-résonante. Oza [17] de son côté a étudié la convergence du développement close-coupling pour un ensemble de fonctions de base plus large. Il trouve que le développement pseudo-état converge. La structure pseudo-résonante a été réduite à tel point que le moyennage n'est pas nécessaire pour obtenir de bons résultats pour la plus part des énergies.

Bien que nous devions nous limiter à un développement incluant seulement les pseudo-états s où les sections efficaces associées sont des approximations aux problèmes d'ordre zéro des états s qui ont fait l'objet de plusieurs travaux (Temkin [18], Reinhardt [19]). Il est aussi intéressant de citer d'autres travaux employant ensemble contenant un nombre d'états de la cible assez large. Callaway et Wooten [20] ont utilisé une méthode variationnelle algébrique pour tester la convergence du développement pseudo-état pour la diffusion électron-hydrogène dans la gamme d'énergie 10-30eV. Ils utilisaient les états $1s$, $2s$, $2p$ et $3d$ (exactes) augmentés de trois pseudo-états additionnels de type s , trois pseudo-états additionnelles de type p et un seul pseudo-état de type d . Ils ont varié les paramètres des pseudo-états pour éviter les pseudo-résonances non physiques.

Bransden et Dewangan [21] ont utilisé des développements pseudo-états introduit par Callaway et Wooten [20] pour tester la convergence des approximations de Born de second ordre pour l'excitation de l'hydrogène atomique par impact de proton. Ils ont montré que les développements pseudo-état pouvaient fournir une bonne représentation des contributions des états intermédiaires. Vanwyngaarden et Walters [22] utilisaient une méthode close-coupling multi-pseudo-état pour vérifier la convergence des amplitudes de Born de second ordre des ondes partielles. Commençant avec un ensemble de 9 états et pseudo-états de Fon et al [23] ($1s - 2s - \overline{3s} - \overline{4s}$, $2p - \overline{3p} - \overline{4p}$, $\overline{3d} - \overline{4d}$) ils ont donc construit un ensemble de pseudo-état amélioré composé des états propres exacts $1s$, $2s$ et $2p$ augmentés de six pseudo-états additionnels de types s , p et d respectivement. Ils ont utilisé l'ensemble des pseudo-états améliorés pour calculer les sections efficaces différentielles élastique et d'excitation.

Madison et Callaway [24] ont déterminé la précision de plusieurs ensembles de bases de pseudo-état en termes d'amplitude d'onde distordue de second ordre. Ils ont formé un ensemble de base amélioré en combinant les ensembles des états de base s, p et d qui peuvent être utilisés dans d'autres calculs close-coupling.

V.4 Développement L^2 des ondes de coulomb

V.4.1 Introduction

Dans ce paragraphe, les fonctions d'ondes de la cible dans un développement sur une base L^2 de Yamani et Reinhardt [8] sont décrites. Nous présentons le développement en série de Fourier pour les états liés et du continuum dans la base L^2 . En utilisant cette base particulière, l'équation de Schrödinger dans l'espace des coordonnées est transformée en un système d'équations matricielles entièrement équivalent de dimensions infinies. La solution de ce système conduit à l'identification des coefficients de Fourier avec une classe généralisée de polynômes orthogonaux.

La convergence du développement de Fourier pour les états liés et les états du continuum est recherchée par troncature de la base aux N premières fonctions de base. La convergence de la série L^2 vers la fonction d'onde exacte de Coulomb [25]) quand $N \rightarrow \infty$ est prouvé pour toutes les fonctions d'ondes discrètes et du continuum dans une représentation en coordonnées.

V.4.2 Les états du continuum

Le Hamiltonien radial des fonctions d'onde partielle de Coulomb pour un système ayant un électron ($-e$) et un noyau ($+ze$) peut être écrit comme :

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{z}{r} \quad (\text{V.01})$$

Où, l est le nombre quantique orbital, z le nombre atomique et r la distance entre électron et noyau.

(L'unité atomique, $e = m_e = \hbar = 1$ est utilisée tout au long de ce travail)

Les fonctions L^2 de type Laguerre de Yamani et Reinhardt [8] qui sont non orthogonale, sont donnée par :

$$\phi_r^l(r) = (\lambda r)^{l+1} e^{-\frac{\lambda r}{2}} L_n^{2l+1}(\lambda r) \quad n; l = 0, \dots \quad (\text{V.02})$$

La matrice de recouvrement de $\phi_n^l(r)$ a une structure tridiagonale simple donnée par :

$$\langle \phi_m^l | \phi_n^l \rangle = \int_0^\infty \phi_m^l(r) \phi_n^l(r) dr \quad (\text{V.03})$$

$$= \frac{1}{\lambda} \left[(2m + 2l + 1) \frac{\Gamma(m+2l+1)}{\Gamma(m)} \delta_{m,n} - (m + 2l + 1) \frac{\Gamma(m+2l+3)}{\Gamma(m)} \delta_{m-1,n} - (m + 1) \frac{\Gamma(m+2l+3)}{\Gamma(n+2)} \delta_{m+1,n} \right] \quad (\text{V.04})$$

A partir du résultat bien connu que les polynômes de Laguerre $L_r^\alpha(x)$ sont complet dans L^2 avec une fonction poids, xe^{-x} (Higgins [26]), il est facile de voir que les $\phi_n^l(r)$ sont complet avec le produit scalaire défini dans l'équation (V.03). Donc si nous notons que la fonction :

$$\gamma_n^l(r) = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2l+2)} \cdot \frac{\phi_n^l(r)}{r} \quad (\text{V.05a})$$

forme une séquence biorthogonale avec $\phi_n^l(r)$ satisfaisant la condition :

$$\langle \gamma_n^l | \phi_m^l \rangle = \delta_{nm} \quad (\text{V.05b})$$

On peut montrer que (Higgins, [26]) les $\phi_n^l(r)$, forment une base pour l'espace de Hilbert. Aussi, on peut donc construire la fonction d'onde de la cible comme combinaison linéaire sur la base de ces fonctions i.e.

$$|U_{q1}\rangle = \sum_{n=0}^\infty a_n(q) |\phi_n^l\rangle \quad (\text{V.06})$$

où les coefficients $a_n(q)$ sont donnés par :

$$a_n(q) = \langle \gamma_n^l | U_{q1} \rangle \quad (\text{V.07})$$

Les valeurs propres et les vecteurs propre de H_1 sont déterminées par la solution du problème matriciel :

$$H_1 |U_{q1}\rangle = E_q |U_{q1}\rangle \quad (\text{V.08})$$

avec les énergies propres :

$$E_q = \frac{1}{2} q^2 \quad (\text{V.09})$$

Les coefficients $a_n(q)$ de l'expression L^2 et les valeurs propres E_q , sont déterminés en exigeant que :

$$\langle \phi_m^l | H_1 - E_q | U_{q1} \rangle = 0, \quad m = 0, 1, \dots \quad (\text{V.10})$$

Après réarrangement, l'équation (V.09) se réduit à :

$$\sum_{n=0}^\infty \left[-\frac{\lambda^2}{2} \left\{ \langle \phi_m^l | \frac{d^2}{d(\lambda r)^2} | \phi_n^l \rangle - l(l+1) \langle \phi_m^l | \frac{1}{(dr)^2} | \phi_n^l \rangle - 2\frac{z}{\lambda} \langle \phi_m^l | \frac{1}{\lambda r} | \phi_n^l \rangle \right\} - E_q \langle \phi_m^l | \phi_n^l \rangle \right] a_n(q) = 0 \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{V.11})$$

En appliquant les formules de récurrence des polynômes de Laguerre [Erdélyi et al [27], page 188-190]

$$yL_n^{\alpha+1}(y) = (n + \alpha + 1)L_n^\alpha(y) - (n + 1)L_{n+1}^\alpha(y) \quad (\text{V.12a})$$

$$yL_n^{\alpha+1}(y) = (n + \alpha)L_{n-1}^\alpha(y) - (n - y)L_n^\alpha(y) \quad (\text{V.12b})$$

$$L_n^{\alpha-1}(y) = L_n^\alpha(y) - L_{n-1}^\alpha(y) \quad (\text{V.12c})$$

$$(n + \alpha)L_n^{\alpha-1}(y) = (n + 1)L_{n+1}^\alpha(y) - (n + 1 - y)L_n^\alpha(y) \quad (\text{V.12d})$$

Les relations d'orthogonalité des polynômes de Laguerre (Magnus et al [28], Szegő [29],)

$$\int_0^\infty e^{-y} y^\alpha L_m^\alpha(y) L_n^\alpha(y) dy = \begin{cases} 0 & \text{pour } n \neq m \\ \Gamma(1 + \alpha) \binom{n + \alpha}{n} & \text{pour } n = m \end{cases} \quad (\text{V.13})$$

et la formule de différentiation correspondante (Erdélyi et al [30], page 188-190),

$$\frac{d^m}{dx^m} [y^\alpha e^{-x} L_n^\alpha(y)] = \frac{\Gamma(m+n)}{\Gamma(n)} e^{-x} y^{\alpha-m} L_{n+m}^{\alpha-m}(y) \quad (\text{V.14})$$

L'équation (V.10) devient finalement :

$$2 \left[\left(m + l + 1 - 2 \frac{z}{\lambda} \right) x + 2 \frac{z}{\lambda} \right] b_m(q) - (m + 2l + 1) b_{m-1}(q) - (m + 1) b_{m+1}(q) = 0 \quad (\text{V.15})$$

où les coefficients de la séquence sont donnés par :

$$b_m(q) = \frac{\Gamma(m+2l+2)}{\Gamma(m+1)} a_n(q) \quad (\text{V.16})$$

et

$$x = \frac{E - \lambda^2/8}{E + \lambda^2/8} \quad (\text{V.17})$$

Il est claire que (Chihara [31]) l'équation (V.14) est tout simplement la relation de récurrence des polynômes de Pollaczek en terme de la variable x . Yamani et Reinhardt [8] considèrent ces derniers comme étant les polynômes de Coulomb-Pollaczek attractifs. La variable x se trouve à l'intérieur de l'intervalle $[-1, +1]$ pour des énergies positives tandis que les états liés correspondent à des valeurs de x à l'extérieur de cette intervalle dépendant de λ .

Pour initialiser la récurrence on pose :

$$b_{-1}(q) = 0, \quad b_0(q) = 1 \quad (\text{V.18})$$

L'équation (V.5) peut être réécrite comme

$$|U_{ql}\rangle = B_l(q) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2l+2)} P_n^{l+1}(x) |\phi_n^l\rangle \quad (\text{V.19})$$

où $B_l(q)$ est un facteur de normalisation et $P_n^{l+1}(q)$ sont les polynômes de Coulomb-Pollaczek attractifs. Le développement si dessus est formellement exact et le spectre est continu pour des énergies positives. Le facteur de normalisation du continuum $B_l(q)$ est donc déterminé par la condition :

$$\langle \gamma_m^l | U_{ql} \rangle = \langle \chi_m^l | \chi_{ql} \rangle \quad (\text{V.20})$$

où :

$$\langle \chi | \chi_{ql} \rangle = (2qr)^{l+1} e^{-iqr} e^{\pi\gamma/2} \frac{|\Gamma(l+1-i\gamma)|}{\Gamma(2l+2)} \times {}_1F_1(l+1-i\gamma; 2l+2; -2iqr) \quad (\text{V.21})$$

avec :

$$\gamma = z/q \quad (\text{V.22})$$

est la fonction d'onde partielle exacte du continuum normalisé à la fonction δ dans l'espace $q/2\pi$.

Après certain réarrangement de l'équation (V.19) et en notant que (Erdélyi et al [30], page 188-190) :

$$L_m^{2l+1}(\lambda r) = \frac{\Gamma(m+2l+2)}{\Gamma(m+1)\Gamma(2l+2)} {}_1F_1(-m; 2l+2; \lambda r) \quad (\text{V.23})$$

on aura :

$$B_l(q) \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(2l+m+2)} P_m^{l+1}(x) = \frac{2l}{\lambda l+1} q^{l+1} e^{\pi\gamma/2} \frac{|\Gamma(l+1-i\gamma)|}{[\Gamma(2l+2)]^2} I_{ml}(q) \quad (\text{V.24})$$

où :

$$I_{ml}(q) = \int_0^\infty (\lambda r)^{2l+1} e^{-\left(\frac{\lambda}{2}-iq\right)r} {}_1F_1(-m; 2l+2; \lambda r) {}_1F_1(l+1; 1-i\gamma; 2l+2; -2qr) \quad (\text{V.25})$$

L'intégrale (V.24) est évaluée en utilisant Gradshteyn et Ryzik ([32], page 861) :

$$\int_0^\infty e^{-st} t^{c-1} {}_1F_1(a; c; t) {}_1F_1(\alpha; c; \beta t) dt = \Gamma(c)(s-1)^{-a}(s-\beta)^{-\alpha} s^{a+\alpha-c} \times {}_2F_1[a, \alpha; c; \beta(s-1)^{-1}(s-\beta)^{-1}] \quad (\text{V.26})$$

Avec les conditions $Re\ c > 0$, $Re\ s > Re\ \beta + 1$

Une substitution dans (V.24) après des manipulations fastidieuses quoique élémentaire nous permet d'écrire les coefficients :

$$B_l(q) = 2^{l+1} |\Gamma(l+1-i\gamma)| [1-x^2]^{\frac{(l+1)}{2}} e^{(\theta-\frac{\pi}{2})\gamma} \quad (\text{V.26})$$

avec :

$$\theta = \arccos x; \quad 0 \leq \theta \leq \pi \quad (\text{V.27})$$

Pour aboutir à (V.26) la représentation suivante (Erdélyi et al[30] page 219), Szegő [33],[34]) de $P_m^{l+1}(x)$ a été utilisé :

$$P_m^{l+1}(x) = \frac{\Gamma(m+2l+2)}{\Gamma(m+1)\Gamma(2l+2)} e^{im\theta} {}_2F_1[-m; l+1-iy; 2l+2; 1-e^{-2i\theta}] \quad (\text{V.28})$$

La représentation des fonctions de Coulomb au moyen du développement de Fourier (V.19) est formellement équivalente à la forme de l'équation (V.21) dans l'espace de coordonnées.

V.4.3 Les états liés

Suivant, le résultat (V.19) on peut écrire :

$$\langle r|U_{nl}\rangle = A_{nl} \sum_{v=0}^{\infty} \frac{\Gamma(v+1)}{\Gamma(v+2l+1)} P_v^{l+1}(X_n^l) \langle r|\phi_v^l\rangle \quad (\text{V.29})$$

où l'on peut poser (Landau et Lifshitz [35]) :

$$rR_{nl}(r) = \langle r|nl\rangle = \frac{1}{n^{l+2}\Gamma(2l+2)} \sqrt{\frac{\Gamma(n+1+1)}{\Gamma(n-1)}} (2r)^{l+1} e^{-\frac{r}{n}} \times {}_1F_1\left(-n+l+1; 2l+2; \frac{2r}{n}\right) \quad (\text{V.30})$$

avec $n = l+1, l+2, \dots$

Ce sont les fonctions d'ondes exactes des états liés dont les énergies propres correspondant sont données par

$$E_{nl} = -1/2n^2 \quad (\text{V.31})$$

où bien, en terme de la variable X ,

$$X_n^l = -(\lambda^2 + 4n^{-2})/(\lambda^2 - 4n^{-2}) \quad (\text{V.32})$$

Les coefficients de normalisation A_n^l de l'équation (V.29) sont déterminés de la même façon que pour les états du continuum. Nous exigeons seulement que soit satisfaite l'équivalence :

$$\langle \gamma_m^l|U_{nl}\rangle = \langle \gamma_m^l|nl\rangle \quad (\text{V.33})$$

où, les $|\gamma_m\rangle$ sont donnés par l'équation (V.5a).

En substituant les équations (V.29) et (V.30) dans (V.33) nous avons :

$$A_{nl} \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+2l+2)} P_m^{l+1}(X_n^l) = \frac{1}{n^{l+2}[\Gamma(n+l+1)]^2} \sqrt{\frac{\Gamma(n+1+1)}{\Gamma(n-1)}} (2\lambda)^{l+1} \times I_{mn}^l \quad (\text{V.34})$$

où :

$$I_{mn}^l = \int_0^{\infty} dr r^{2l+1} e^{-\left(\frac{1}{n} + \frac{\lambda}{2}\right)r} {}_1F_1(-m; 2l+2; \lambda r) \times {}_1F_1\left(-n+l+1; 2l+2; \frac{2r}{n}\right) \quad (\text{V.35})$$

En utilisant l'intégrale (V.25), on obtient :

$$A_{mn}^l \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+2l+2)} P_m^{l+1}(X_n^l) = \frac{(2\lambda)^{l+1}}{n^{l+2}\Gamma(2l+2)^2} \sqrt{\frac{\Gamma(n+1+1)}{\Gamma(n-l)}} \times$$

$$z^m (-z)^{n-l-1} \left[\frac{1}{n} - \frac{\lambda}{2} \right]^{-2l-2} {}_1F_1(-m, -n+l+1; 2l+2; l-z^{-2}) \quad (\text{V.36})$$

où :

$$z = \left(\frac{1}{n} - \frac{\lambda}{2} \right) / \left(\frac{1}{n} + \frac{\lambda}{2} \right) \quad (\text{V.37})$$

Notons que la continuation analytique du polynôme P_m^{l+1} donné en équation (V.28) à des énergies négatives est achevée par la substitution $e^{i\theta} \rightarrow z$. Il est donc clair que l'on trouve :

$$A_{nl} = \frac{(2\lambda)^{l+1}}{n^{l+2}} (-z)^{n-l-1} \left[\frac{1}{n} + \frac{\lambda}{2} \right]^{-2l-2} \times \sqrt{\frac{\Gamma(n+1+1)}{\Gamma(n-l)}} \quad (\text{V.38})$$

Pour le comportement de la convergence des séries (V.29), nous considérons le comportement des $m^{\text{ième}}$ termes S_{ml} donnés en équation (V.36). Le comportement pour m grand de ${}_2F_1(-m; -n+l+1; 2l+2; 1-z^2)$ est analysé en notant que :

$${}_2F_1(-m; -n+l+1; 2l+2; l-z^2) = \sum_{p=0}^{n-l-1} \frac{(-m)_p (-n+l+1)_p [(1-z^2)]^p}{(2l+2)_p \Gamma(p+1)}; \quad m > n-l-1 \quad (\text{V.39})$$

Le comportement à grand m est déterminé par le développement (V.39). En utilisant l'expression explicite du symbole de Pochhammer :

$$(a)_p = a(a+1) \dots a(a+p-1) = \frac{\Gamma(a+p)}{\Gamma(a)} \quad (\text{V.40})$$

en notant :

$$(-m)_p = (-1)^p \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+1-p)} \quad (\text{V.41})$$

et, la formule asymptotique de la fonction gamma (Abramowitz et Stegun [36], p 257) :

$$\Gamma(av+b) \approx (2\pi)^{\frac{1}{2}} e^{-av} (av)^{av+b-\frac{1}{2}}; \quad |\arg(av)| < \pi, \quad a > 0 \quad (\text{V.42})$$

on trouve :

$${}_2F_1(-m; n+l+1; 2l+2; l-z^2) = [1-z^2]^{n-l-1} m^{n-l-1} \frac{\Gamma(2l+2)}{\Gamma(n+1+1)} + O(m^{n-l-1}) \quad (\text{V.43})$$

Par conséquent, le $m^{\text{ième}}$ terme du développement de Fourier (Winata [37]) aura la forme :

$$S_m^l(n, r) = m^{n-\frac{3}{4}} z^m (z^{-1} - z)^{n-l-1} \left[\frac{1}{n} + \frac{\lambda}{2} \right]^{-2l-2} \times [\Gamma(n-1)\Gamma(n+l+1)]^{-\frac{1}{2}} (\lambda r)^{\frac{1}{4}} \pi^{\frac{1}{2}} \times$$

$$\left\{ \cos \left[2(m\lambda r)^{\frac{1}{2}} - \left(1 + \frac{3}{4} \right) \pi \right] + O \left[m^{-\frac{5}{4}} \right] \right\} \quad (\text{V.44})$$

Il faut noter que le $m^{\text{ième}}$ terme S_m^l de la série de Fourier est dominé par le terme $m^{n-3/4} z^m$. Dès que $|z| < 1$ à partir de l'équation (V.42) le comportement à grand m est essentiellement

celui de z^m . Pour une valeur fixé de λ , le taux de convergence de la série de Fourier pour les états liés doit varier en devenant plus faible à la limite des nombres quantique principale n , dès que $z \rightarrow -1$. Il apparait donc comme conséquence inévitable pour la base de fonction de type Laguerre que le développement sur les états liés n'est pas totalement couvert à un taux optimum.

Le développement de Fourier des états liés de l'hydrogène et ceux du continuum. Le taux de convergence est influencé par le choix de λ dans l'exposant de l'ensemble des fonctions de base, devient retardée en augmentant le nombre quantique n . Le développement du continuum converge mais très lentement, elles ne sont pas absolument convergentes.

V.5 Pseudo-états

Dans les applications pratiques sur les processus électron-atome, l'ensemble complet des fonctions d'ondes de la cible, doit être approché, pour rendre les équations numériquement tractables. Pour le système électron-hydrogène, une manière de faire, est de discrétiser le Hamiltonien de l'hydrogène dans une base finie de fonctions L^2 . Les fonctions de base sont souvent choisies pour inclure exactement les voies qui nous intéressent. Le spectre d'énergie résultant est composé d'un certain nombre d'énergies exactes et le reste des énergies propres sont distribué sur des énergies négatives et positives. Ces états qui ne correspondent pas à des états physiques dans un sens volontairement identifiable sont appelés pseudo-états. Dans ces sections, les pseudo-états dérivés à partir de la base de Laguerre sont étudiés. Leurs relations avec le développement de Laguerre dérivé dans ce chapitre sont décrites dans le paragraphe qui suit.

V.5.1 Relation du développement L^2 avec les pseudo-états

Considérons une base de pseudo-états construite à partir des N premières fonctions de Laguerre (IV.2), un tel pseudo-état peut donc être exprimé par

$$|\phi_{Ni}^l\rangle = \sum_{m=0}^{N-1} C_{Nim}^l |\phi_m^l\rangle \quad (\text{V.51})$$

Les pseudo-états sont normalisés comme suit :

$$\langle \phi_{Nj}^l | \phi_{Ni}^l \rangle = \delta_{ij} \quad i, j = 1, \dots, N \quad (\text{V.52})$$

Le système d'équations matricielles satisfait par les coefficients C_{Nim}^l est identique à celui du système de base infinie (équation (V.9) et (V.14)) pourvue que la condition $b_n = 0$ soit imposée dans l'équation (V.14). Mais ceci est équivalent à l'exigence :

$$P_n^{l+1}(X) = 0 \quad (\text{V.53})$$

Dans l'équation (V.53), puisque $P_n^{l+1}(X)$ est un polynôme de degré N de la variable X , ils existent N solutions notées $X = X_{Ni}^l ; i = 0, 1, \dots, N - 1$ et par conséquent N solutions correspondant à l'énergie E via l'équation (V.17). Les pseudo-énergies correspondants ε_{Ni}^l obtenues à partir de l'équation (V.53) sont donnée par :

$$\varepsilon_{Ni}^l = \frac{\lambda^2}{8} \left(\frac{1+X_{Ni}^l}{1-X_{Ni}^l} \right) \quad (\text{V.54})$$

Si en plus, nous utilisons le fait que C_{Nim}^l est proportionnel à $b_m(X_{Ni}^l)$, nous pouvons écrire :

$$C_{Nim}^l = C_{Ni}^l \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+2l+2)} P_m^{l+1}(X_{Ni}^l) \quad (\text{V.55})$$

Les coefficients de normalisation C_{Ni}^l sont déterminés en utilisant (V.51) et (V.52) avec l'aide des relations de récurrences des polynômes de Laguerre (V.12) et de la relation d'orthogonalité (V.13) donnant :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\lambda} C_{Ni}^l \left[\sum_{m=0}^{N-1} \left\{ \frac{[\Gamma(m+1)]^2}{[\Gamma(m+2l+2)]^2} (m+2l+2)\Gamma(2l+2) \binom{m+2l+1}{m} \{P_m^{l+1}(X_{Ni}^l)\}^2 - \right. \right. \\ & \left. \frac{\Gamma(m+1)\Gamma(m+2)}{\Gamma(m+2l+3)\Gamma(m+2l+2)} (m+1)\Gamma(2l+2) \binom{m+2l+2}{m+1} P_m^{l+1}(X_{Ni}^l) P_{m+1}^{l+1}(X_{Ni}^l) - \frac{\Gamma(m)\Gamma(m+l)}{\Gamma(m+2l+1)\Gamma(m+2l+2)} \times \right. \\ & \left. \left. (m+2l+1)\Gamma(2l+2) \binom{m+2l}{m-1} P_{m-1}^{l+1}(X_{Ni}^l) P_m^{l+1}(X_{Ni}^l) \right\} \right] = 1 \quad (\text{V.56}) \end{aligned}$$

Avec l'aide de la relation de Christoffel-Darboux qui est satisfaite par les polynômes de Pollaczek :

$$\begin{aligned} & (X - Y) \sum_{m=0}^{N-1} \frac{\Gamma(m+1) \binom{m+l+1+\frac{2Z}{\lambda}}{\lambda}}{\Gamma(m+2l+2)} P_m^{l+1}(X) P_m^{l+1}(Y) = \\ & \frac{1}{2} \frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N+2l+1)} [P_N^{l+1}(X) P_{N-1}^{l+1}(Y) - P_{N-1}^{l+1}(X) P_N^{l+1}(Y)] \quad (\text{V.57}) \end{aligned}$$

on peut écrire :

$$\sum_{m=0}^{N-1} \frac{\Gamma(m+1) \binom{m+2l+1+\frac{2Z}{\lambda}}{\lambda}}{\Gamma(m+2l+2)} [P_m^{l+1}(X)]^2 = \frac{1}{2} \frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(N+2l+1)} P_{N-1}^{l+1}(X) \frac{d}{dX} P_N^{l+1}(X) \quad (\text{V.58})$$

Ainsi, après quelques manipulations algébriques élémentaires, on obtient pour le facteur de normalisation des états liés :

$$[C_{Ni}^l]^2 = \frac{\lambda}{1-X_{Ni}^l} \frac{\Gamma(N+2l+1)}{\Gamma(N+1)} \left[P_{N-1}^{l+1}(X_{Ni}^l) \left\{ \frac{d}{dX} P_N^{l+1}(X) \right\}_{X=X_{Ni}^l} \right]^{-1} \quad (\text{V.59})$$

Les pseudo-états définis par (V.56) peuvent donc être écrite sous la forme :

$$|\phi_{Ni}\rangle = C_{Ni}^l \sum_{m=0}^{N-1} \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma(m+2l+2)} P_m^{l+1}(X_{Ni}^l) |\phi_m^l\rangle \quad (\text{V.60})$$

Il s'est avéré qu'un choix du facteur d'échelle $\lambda = 1.02$ (Winata[37]) assure une bonne

approximation des trois états les plus basses aux états exactes $1s, 2s, 3s$ de l'hydrogène. Raison pour laquelle une base avec ces exposants est préférée dans des calculs close-coupling.

Le choix $\lambda = 1$ a été délibérément évité puisque ce choix quoiqu'il assure un état $2s$ correcte, il est la cause de l'indépendance de la relation de récurrence en x .

V.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons passé en revue une méthode développée dans le but de représenter le continuum de manière adéquate. Une méthode basée sur la mise en forme tridiagonale de la matrice Hamiltonien équivalente à la matrice de Jacobi. La diagonalisation de la matrice Hamiltonien tridiagonale aboutit aux énergies propres discrètes de la cible. Les énergies positives issues des éléments hors diagonale constituent un pseudo-spectre correspondant aux pseudo-états de la cible. Les pseudo-états seront développés sur l'ensemble complet des états propres discrets orthonormés de la cible pour une application bien déterminée.

Bibliographie

- [1] E. J. Heller et H. A. Yamani, Phys. Rev. A. **9** (1974a), 1201.
- [2] E. J. Heller et H. A. Yamani, Phys. Rev. A. **9** (1974b), 1209.
- [3] P. G. Burke et K. Smith, Rev. Mod. Phys. **34**(1962), 458.
- [4] P. G. Burke et J. F. B. Mitchell, J. Phys. **B6** (1973), 320.
- [5] J. Callaway, Adv. Phys. **29** (1980) 771.
- [6] E. J. Heller, W. P. Reinhardt et H. A. Yamani, J. Comp. Phys. **13** (1973a), 536.
- [7] E. J. Heller, T. N. Rescigno, W. P. Reinhardt, Phys. Rev **A8** (1973b), 2946.
- [8] H A Yamani et W P Reinhardt, Phys. Rev. **A11** (1975) 1144
- [9] M. Rotenberg, Ann. Phys. N. Y. **19** (1962), 262.
- [10] P. G. Burke, D. F. Gallaher et S. Geltman, J. Phys. **B2** (1969), 1142.
- [11] P. G. Burke, K. A. Berington et C. V. Sukumar, J. Phys. **B14** (1981), 289.
- [12] S. Geltmann et P. G. Burke, J. Phys. **B3** (1970), 1062.
- [13] P. G. Burke and T. G. Webb, J. Phys. **B3** (1970), L131.
- [14] R. Poet, J. Phys. **B.11** (1978), 3081.
- [15] R. Poet, J. Phys. **B.14** (1981), 91.
- [16] D. H. Oza et J. Callaway, Phys. Rev. **A27** (1983), 2840.
- [17] D. H. Oza, Phys. Rev. **A30** (1984), 1101.
- [18] A. Temkin, Phys. Rev. A **126** (1962), 130.
- [19] W. P. Reinhardt, Phys Rev **A2** (1970), 1767.
- [20] J. Callaway et J. Wooten, Phys. Rev. **A9** (1974), 1924.
- [21] B. H. Bransden et D. P. Dewangan, J. Phys. **B12** (1979), 1377.
- [22] W. L. Van Wyngaarden et H. R. J. Walters, J. Phys. **B 19** (1986), 929.
- [23] W. C. Fon, K. A. Berrington, P. G. Burke et A. E. Kingston, J. Phys. **B14** (1981), 1041.
- [24] D. H. Madison et J. Callaway, J. Phys. **B20** (1987), 4197.
- [25] A. T. Stelbovics et T. Winata, Aust. J. Phys. **43** (1990), 485.
- [26] J. R. Higgins, Completeness and basis Properties of Sets of Special Functions, Cambridge University Press, Cambridge (1977).
- [27] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger et F. G. Tricomi, Higher Transcendental Functions, vol. II, McGraw-Hill Book Co. Inc., New York (1953), p. 188-190
- [28] W. Magnus, F. Oberhettinger et R. P. Soni, Formulas and Theorems for The Special Functions of Mathematical Physics, Springer-Verlag New York Inc, New York (1966).
- [29] G. Szegő, Orthogonal polynomials, (Amer. Math. Soc., Povidence, RI, 1975)p. 100

- [30] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger et F. G. Tricomi, Higher Transcendental Functions, vol. II, McGraw-Hill Book Co. Inc., New York (1953), p. 219
- [31] T. S. Chihara, an Introduction to Orthogonal Polynomials, Gordon and Breach, Science Publishers Inc., New York (1978).
- [32] S. Gradshteyn I. M. Ryzik, Table of Integrals, Series and Products, Academic Press (1980).
- [33] G. Szegő, Proceeding of Amer. Math. Soc. **1** (1950) pp. 731-737
- [34] G. Szegő, Orthogonal polynomials, (Amer. Math. Soc., Povidence, RI, 1975)p. 393
- [35] L. D. Landau et E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics (non-relativistic Theory), Pergamon Press, Oxford (1965).
- [36] M. Abramowitz et I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (with Formulas, Graphs, and Mathematical tables), Dover Publications Inc., New York (1972).
- [37] T. Winata, PhD Thesis, Murdoch University(1991)

CHAPITRE VI
DISCRETISATION DU
CONTINU ATOMIQUE

VI.1 Introduction

Nous essayons, dans les paragraphes qui suivent, de trouver une représentation adéquate des fonctions d'onde du continuum d'état nécessaire pour l'évaluation de la matrice de transition entre états discrets et états du continuum de la cible. Nous développons les fonctions d'ondes du continuum proche du seuil d'ionisation de l'atome H sur un ensemble complet de fonctions de carrés sommables de type Laguerre en suivant une stratégie développée dans le cadre de la méthode de la matrice J.

VI.2 Discrétisation dans L^2 du continuum d'état

Le sujet qui nous préoccupe par la suite est de trouver une représentation adéquate du continuum d'état. Nous cherchons, en premier, une solution de l'équation aux valeurs propre du Hamiltonien H qui s'écrit habituellement

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (\text{VI.01})$$

L'énergie E associée peut être soit discrète pour les états liés ou bien continues pour les états de diffusion. Dans la plus part des cas, la fonction d'onde couvre un espace de fonctions de carrée sommable avec des éléments de bases $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$, où la fonction d'onde peut être développée sur la base de ces fonctions sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum f_n(E)|\phi_n\rangle \quad (\text{VI.02})$$

Les fonctions de base doivent être compatibles avec le domaine du Hamiltonien H . Elles doivent, en outre, satisfaire les conditions aux limites du problème. Plus particulièrement, quand on veut calculer le spectre discret, le choix de la base est limité aux fonctions qui engendrent une représentation diagonale de l'opérateur Hamiltonien. On cherche donc, un ensemble $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ de base L^2 qui vérifie l'équation aux valeurs propre $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ donnant un spectre discret du Hamiltonien H . le spectre continu est obtenu à partir de l'analyse d'une somme infinie des fonctions de la base complète.

Dans ce paragraphe, on exige à la matrice hermitienne représentant l'opérateur d'onde d'être seulement tridiagonale. Ainsi, l'action de l'opérateur d'onde sur les éléments de la base peut se mètre sous la forme générale [1]:

$$(H - E)|\phi_n\rangle \sim |\phi_n\rangle + |\phi_{n-1}\rangle + |\phi_{n+1}\rangle \quad (\text{VI.03})$$

En multipliant à gauche par le bras $\langle\phi_n|$ il en résulte une équation sous forme d'une relation de récurrence en δ de Kronecker :

$$\langle\phi_m|H - E|\phi_n\rangle = (a_n - z)\delta_{n,m} + b_n\delta_{n,m-1} + b_{n-1}\delta_{n,m+1} \quad (\text{VI.04})$$

Dans l'équation (VI.04), z et les coefficients $\{a_n, b_n\}_{n=0}^{\infty}$ sont réelles et en général fonctions de l'énergie, du moment angulaire et des paramètres lié aux potentiel. Suite à une projection sur $\langle \phi_n |$, la matrice d'opérateur d'onde de Schrödinger obtenue par développement de $|\psi\rangle$ sur les $|\phi_m\rangle$ dans l'équation $(H - E)|\psi\rangle = 0$ se réduit à une relation de récurrence à trois termes de la forme :

$$zf_n = a_n f_n + b_{n-1} f_{n-1} + b_n f_{n+1} \quad (\text{VI.05})$$

Par conséquent, le problème se réduit à la recherche de la solution d'une relation de récurrence entre les coefficients de développement de la fonction d'onde ψ .

Dans la majorité des cas, la résolution de ces équations de récurrence se fait directement par correspondance avec des récurrences bien connues des polynômes orthogonaux. Il faut noter, cependant, que la solution du problème formulé par la récurrence citée dessus est obtenue pour toutes les énergies E , qu'elles soient discrètes ou continues. Ainsi, la relation de récurrence en δ de Kronecker montre clairement que le spectre discret d'énergies négatives peut être obtenu par diagonalisation en exigeant tout simplement que les coefficients b_n et $a_n - z$ soient nuls. C'est la solution régulière du problème considéré dans ce travail.

Dans l'espace de configuration, avec la coordonnée x , la fonction d'onde $\psi_E(x)$ est développée sous la forme :

$$\psi_E(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n(E) \phi_n(x) \quad (\text{VI.06})$$

C'est une série infinie dans laquelle les fonctions de base L^2 sont généralement données par :

$$\phi_n(x) = A_n w_n(x) P_n(x) \quad (\text{VI.07})$$

Le facteur A_n représente une constante de normalisation, $P_n(x)$ un polynôme de degré n en x et $w_n(x)$ la fonction poids du polynôme $P_n(x)$.

VI.2.1 Un problème de Coulomb

Dans l'espace de configuration, nous considérons la coordonnée $x = \lambda r$, où λ est un paramètre d'échelle en longueur réel et positif et r la coordonnée radiale tridimensionnelle. Ce problème ressemble à celui qu'on vient de discuter auparavant avec $P_n(x)$ proportionnel aux polynômes de Laguerre et la fonction poids $w(x) = x^\alpha e^{-\beta x}$. Les fonctions de base prennent la forme habituelle :

$$\phi_n(r) = A_n x^\alpha e^{-\beta x} L_n^\nu(x) \quad (\text{VI.08})$$

Ce sont des fonctions de type Laguerre avec $A_n = \sqrt{\lambda \Gamma(n+1) / \Gamma(n+\nu+1)}$ où n peut prendre les valeurs entière 0, 1, 2 ...; α et β sont des réels positifs.

Dans l'unité atomique ($\hbar = m = e = 1$), l'équation d'onde radiale indépendante du temps pour une particule sans spin dans un potentiel $V(r)$ à symétrie sphérique s'écrit :

$$(H - E)|\psi\rangle = \left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) - E\right)|\psi\rangle = 0 \quad (\text{VI.09})$$

où l est le nombre quantique orbital.

L'action de l'opérateur de dérivation de second ordre sur la fonction de base nous permet d'écrire :

$$\frac{d^2\phi_n}{dr^2} = \lambda^2 \frac{d^2\phi_n}{dx^2} \quad (\text{VI.10})$$

En dérivant deux fois la fonction de type Laguerre définie auparavant par rapport à la coordonnée x il en résulte l'action opérationnelle :

$$\frac{d^2\phi_n}{dr^2} = \lambda^2 A_n x^\alpha e^{-\beta x} \left[\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{2\alpha}{x} - 2\beta\right) \frac{d}{dx} - \frac{\alpha}{x^2} + \left(\frac{\alpha}{x} - \beta\right)^2 \right] L_n^\nu(x) \quad (\text{VI.11})$$

En utilisant l'équation différentielle et la formule de différenciation des polynômes de Laguerre [2, 3, 4, 5], nous obtenons l'action de l'opérateur d'onde sur les fonctions de base :

$$\frac{2}{\lambda^2}(H - E)|\phi_n\rangle = \left[\frac{n}{x} \left(2\beta + \frac{\nu+1-2\alpha}{x} \right) + \frac{l(l+1)-\alpha(\alpha-1)}{x^2} + \frac{2\alpha\beta}{x} - \beta^2 + \frac{2}{\lambda^2}(V - E) \right] |\phi_n\rangle + \frac{n+\nu}{x} \left(1 - 2\beta + \frac{2\alpha-\nu-1}{x} \right) \frac{A_n}{A_{n-1}} |\phi_{n-1}\rangle \quad (\text{VI.12})$$

La relation d'orthogonalité (annexe) exige une valeur $1/2$ pour β afin d'aboutir à une représentation tridiagonale de la matrice $\langle \phi_n | H - E | \phi_m \rangle$. Nous suggérons en plus les valeurs :

$$\alpha = l + 1, \quad \nu = 2\alpha - 1 \quad \text{et} \quad V = \frac{z}{r}.$$

La quantité z représente la charge du noyau de la cible.

Nous reprenons les fonctions de base L^2 de type Laguerre [6, 7].

$$\phi_n(r) = A_n x^{l+1} e^{-x/2} L_n^{2l+1}(x) \quad (\text{VI.13})$$

Avec les valeurs $\alpha = l + 1, \beta = 1/2, \nu = 2l + 1$

Par substitution dans l'équation d'onde opérationnelle développée auparavant et après projection sur les $\langle \phi_m |$ nous obtenons l'équation de récurrence en δ de Kronecker :

$$\frac{2}{\lambda^2} \langle \phi_m | H - E | \phi_n \rangle = \left[2(n+l+1) \left(\frac{1}{4} - \frac{2E}{\lambda^2} \right) + \frac{2Z}{\lambda} \right] \delta_{n,m} + \left(\frac{1}{4} + \frac{2E}{\lambda^2} \right) \left[\sqrt{n(n+2l+1)} \delta_{n,m+1} + \sqrt{(n+1)(n+2l+2)} \delta_{n,m-1} \right] \quad (\text{VI.14})$$

Ce qui nous permet d'écrire pour la relation de récurrence définie en début de ce paragraphe pour les coefficients de développement de la fonction d'onde :

$$\left[2(n+l+1) \frac{\sigma_-}{\sigma_+} - \frac{2Z/\lambda}{\sigma_+} \right] f_n - \sqrt{n(n+2l+1)} f_{n-1} - \sqrt{(n+1)(n+2l+2)} f_{n+1} = 0 \quad (\text{VI.15})$$

Avec $\sigma_{\pm} = \frac{2E}{\lambda^2} \pm \frac{1}{4}$ qui dépend de l'énergie E et du paramètre d'échelle λ .

En termes des polynômes $P_n(E) = \sqrt{\Gamma(n+2l+2)/\Gamma(n+1)} f_n(E)$ nous obtenons la relation de récurrence :

$$2 \left[(n+l+1) \frac{\sigma_-}{\sigma_+} - \frac{z/\lambda}{\sigma_+} \right] P_n - (n+2l+1)P_{n-1} - (n+1)P_{n+1} = 0 \quad (\text{VI.16})$$

En remplaçant n par $m-1$, la relation de récurrence (VI.15) prend la forme :

$$2[(m+l)x+b]P_{m-1} - (m+2l)P_{m-2} - mP_m = 0 \quad (\text{VI.17})$$

où bien :

$$mP_m - 2[(m+l)x+b]P_{m-1} + (m+2l)P_{m-2} = 0 \quad (\text{VI.18})$$

Les écritures (VI.17) et (VI.18) sont équivalente à des relations de récurrence entre polynômes de Pollaczek [2] définie par les conditions : $P_0 = 1$ et $P_{-1} = 0$ avec $n = 0, 1, \dots$ et $m = 1, 2, \dots$

Ces relations de récurrences entre polynômes de Pollaczek nous permettent d'obtenir, pour des énergies positives (continuum), Les coefficients :

$$f_n(E) = \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2l+2)}} P_n^{l+1} \left(-\frac{z}{\sqrt{2E}}, \cos^{-1} \left(\frac{E-\lambda^2/8}{E+\lambda^2/8} \right) \right) \quad (\text{VI.19})$$

En substituant dans (VI.6), ces coefficients nous permettent à leurs tours d'écrire une solution au problème sous forme d'une série L^2 développée pour des énergies positives par Yamani et Reinhardt en 1975[8].

$$\psi^l(r, E) = N^l \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2l+2)} \times P_n^{l+1} \left(-\frac{z}{\sqrt{2E}}, \cos^{-1} \left(\frac{E-\lambda^2/8}{E+\lambda^2/8} \right) \right) \times (\lambda r)^{l+1} e^{-\lambda r/2} L_n^{2l+1}(\lambda r) \quad (\text{VI.20})$$

avec N^l représentant une constante de normalisation

VI.2.2 Spectre discret des états liés

Pour déterminer le spectre discret ($E < 0$), reprenons les relations de récurrences en δ de Kronecker définies auparavant. La matrice correspondant aura une forme diagonale en réalisant les conditions $b_n = 0$ et $a_n - z = 0$

Ces conditions se traduisent par les équations

$$\frac{1}{4} + \frac{2E}{\lambda^2} = 0 \quad (\text{VI.21})$$

$$2(n+1) \left(\frac{1}{4} - \frac{2E}{\lambda^2} \right) + \frac{2z}{\lambda} = 0 \quad (\text{VI.22})$$

De ces deux équations, il en résulte le spectre d'énergie des états liés pour le problème qui nous intéresse:

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2} \left(\frac{z}{n+l+1} \right)^2 ; \lambda = \lambda_n = \frac{2|z|}{(n+l+1)} \quad (\text{VI.23})$$

Soit pour les états liés $s(l = 0)$

$$E_{n,0} = -\frac{1}{2} \left(\frac{z}{n+1} \right)^2 ; \lambda_n = \frac{2|z|}{(n+1)} \quad (\text{VI.24})$$

avec, bien sûr : $n = 0, 1, \dots$

VI.2.3 Pseudo-spectre des états du continuum

Les relations de récurrence entre polynôme de Pollaczek :

$$mP_m - 2[(m+l)x + b]P_{m-1} + (m+2l)P_{m-2} = 0 \quad (\text{VI.25})$$

On peut les réécrire, en substituant $n+1$ à m , sous la forme :

$$(n+1)P_{n+1} - 2[(n+l+1)x + b]P_n + (n+2l+1)P_{n-1} = 0 \quad (\text{VI.26})$$

Il faut noter cependant, que les relations de récurrences (VI.26) qui sont vérifiées pour $x = (2E/\lambda^2 - 1/4)/(2E/\lambda^2 + 1/4)$ dont les valeurs se trouvent nécessairement entre -1 et $+1$ pour des énergies positives (continuum) se réduisent dans le cas qui nous intéresse en faisant $l = 0$ pour les états s à :

$$(n+1)P_{n+1} - 2[(n+1)x + b]P_n + (n+1)P_{n-1} = 0 \quad (\text{VI.27})$$

Avec les conditions $P_{-1} = 0$ et $P_0 = 1$ par définition même de ces polynômes, on peut générer ces derniers par le système

$$\begin{cases} P_1 - 2(x+b)P_0 + P_{-1} = 0 & m = 1 \\ 2P_2 - 2(2x+b)P_1 + 2P_0 = 0 & m = 2 \\ mP_m - 2(mx+b)P_{m-1} + mP_{m-2} = 0 & m \geq 2 \end{cases} \quad (\text{VI.28})$$

Les premiers polynômes en x sont :

$$P_1 = 2(x+b) \quad (\text{VI.29a})$$

$$P_2 = 2(2x+b)(x+b) + 1 \quad (\text{VI.29b})$$

$$3P_3 - 2(3x+b)P_2 + 3P_1 = 0 \quad (\text{VI.29c})$$

Ces séquences nous serviront par la suite pour le calcul des coefficients de développement du continuum sur l'ensemble complet des fonctions L^2 de type Laguerre.

VI.6 Conclusion

Nous avons vu, dans ce chapitre, qu'il est possible de trouver une représentation adéquate du continuum d'état de la cible. Nous avons suivi une stratégie élaborée dans le cadre de la méthode de la matrice J et par suite nous avons pu discrétiser le continuum sur la base des

fonctions de carrés sommables issus d'une diagonalisation de la matrice Hamiltonien préalablement mise sous forme tridiagonale par la même stratégie.

Il s'est avéré que les éléments de la diagonale génèrent les énergies exactes de la cible avec les fonctions propres associées. Ces fonctions propres étant de type Laguerre orthonormées, elles constituent la base sur laquelle ont été développées les fonctions d'onde dont les énergies propres sont positives et qui sont issus des éléments hors diagonale de la matrice J .

Bibliographie

- [1] A. D. Alhaidari, *Ann. Phys.* **317**, 152 (2005)
- [2] G. Szegő, *Amer. Math. Soc. Proc.* **1**, 731 (1950)
- [3] G. Szegő, *Orthogonal polynomials*, (Amer. Math. Soc. Providence, RI, 1975)
- [4] F. Jędrzejewski, *Introduction Aux Méthodes Numérique*, (Springer-Verlag, 2005)
- [5] M. Abramowitz et I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulae, Graphs and Mathematical tables*, National Bureau of Standard, Applied Mathematic Series. 55 (1972)
- [6] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, (Academic Press, Inc. 1985)
- [7] B. Selçuk, *Mathematical Methods in Science and Engineering*, (John Wiley & Sons, Inc. 2006)
- [8] H. A. Yamani et W. P. Reinhardt, *Phys. Rev. A* **11**, 1144 (1975)

CHAPITRE VII
PERFORMANCE DES
CALCULS

VII.1 Introduction

Dans les paragraphes qui suivent, nous passons en revue les procédures de calcul utilisées dans ce manuscrit. Les sections efficaces d'excitations sont discutées dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact en utilisant le principe variationnel de Schwinger. Nous ne faisons que reproduire les résultats obtenus par Bouamoud et son groupe pour des énergies d'impact entre 15 et 200KeV.

Pour mettre en clair l'effet de couplage entre excitation et capture, nous avons étendu le calcul à des énergies en dessous de 15KeV. En effet, pour une collision proton-Hydrogène (proton-hydrogénoïde), le processus de capture électronique devient plus ou moins probable quand l'énergie d'impact est inférieure à 40KeV. Le couplage s'accroît entre excitation et capture dans l'intervalle d'énergie allant de 1KeV à 40KeV et la compétition demeure en faveur d'une capture électronique quand on se dirige vers les plus basses énergies alors qu'elle est en faveur de l'excitation quand on se dirige vers les énergies moyennes autour de 70KeV. Les fonctions d'onde adoptées dans ce travail et qui nous ont servi de moyen de première nécessité pour accéder aux sections efficaces seront discutées en premier.

VII.2 Performance des calculs sur L^2

VII.2.1 Performance des calculs sur une base de fonctions de type Laguerre

Il a été convenu, dans ce travail de thèse, d'entamer une investigation sur le continuum d'état de la cible et la contribution de celui-ci dans les sections efficaces d'excitation aux énergies intermédiaires. Il nous a paru presque impossible de passer en revue tout les travaux développés dans ce sens. Cependant, Aux cours de notre lecture, nous avons été attirés par une technique initiée par Heller et Yamani en 1974[1], [2] et développée par Yamani et Fishman [3], Yamani et Reinhardt[4] un an après et baptisée méthode de la matrice J. Cette technique est basée sur une représentation tridiagonale [5], [6], [7], [8], [9], [10] de l'Hamiltonien de la cible dans un espace de fonctions complètement L^2 et tire profit des propriétés remarquables dont jouissent les polynômes orthogonaux (de type Laguerre en particulier) et les fonctions orthogonales associées.

Les fonctions hydrogène sont des fonctions de type Laguerre [10], [11], [12] et la stratégie de Heller et Yamani peut être employée avec succès dans le but d'obtenir une formulation tridiagonale de l'Hamiltonien d'une cible hydrogène ou hydrogénoïde. En effet, grâce aux propriétés analytiques des polynômes de Laguerre et des fonctions associées (Annexe A-VI), nous avons obtenu, dans le cadre d'un modèle d'états à moment angulaire $l = 0$ (états ns), les séquences récursives(VI.27) du chapitre VI permettant de générer des polynômes d'une classe

généralisée représentant les coefficients de développement du continu atomique sur la base des fonctions hydrogène. Une seule difficulté rencontrée dans ce type de calcul est celui de la renormalisation et la convergence relativement aux fonctions exactes de Coulomb [13]. En effet, l'inclusion d'un grand nombre de pseudo-états requiert un effort machine considérable et coûteux ce qui nous a contraint à se restreindre aux premiers états et pseudo-états de la cible et se contenter des coefficients de développement établis par Winata [14].

VII.2.2 Performance des calculs sur une base de fonctions de type Slater

Il est très avantageux de traiter avec des polynômes orthogonaux et des fonctions orthogonales. Les fonctions L^2 de Callaway et al [15], [16] de type Slater ne sont pas orthogonales. Cependant, ces fonctions [17], [18], [19], [20] deviennent assez favorites dans la mesure où elles sont capables d'imiter les premiers états exacts de l'atome cible hydrogène. Ces fonctions L^2 dont les énergies propres sont négatives et qui approche le spectre discret (états liés) de l'atome cible sont volontairement retenues dans notre développement. Les fonctions L^2 de Callaway dont les énergies sont positives et qui ne représente que virtuellement les états de la cible sont appelées pseudo-états. Ces pseudo-états, non normalisables par un delta de Kronecker, sont ajoutés par la suite dans le but d'approcher le continuum d'état de la cible et tenir compte des transitions vers les états du continu atomique dans la gamme des énergies qui nous intéresse. Cependant, la combinaison dans un même développement, des états discrets et des états du continuum n'est pas toujours souhaitable pour la simple raison que ces états ne sont pas normalisable de la même manière. Pour palier à cette difficulté, une stratégie d'orthogonalisation de Gram-Schmidt [10](QR dans la version matricielle[21],[22]) employée comme moyen de discrétisation des états du continuum (pseudo-états) sur la base des états propre de la cible nous a offert la possibilité de s'affranchir du problème de normalisation et d'assurer l'orthogonalité entre états propre et entre pseudo-états et états propres de la cible.

Dans un développement close coupling pour une diffusion électron-hydrogène atomique, Burke et Mitchell [23] utilisent les premiers états propres 1s et 2s de la cible hydrogène isolée. A ces états 1s et 2s de moment angulaire orbital $L=0$, ils ajoutent des pseudo-états de configurations (\overline{ns}) dont le comportement est régis par l'ensemble des fonctions de la forme :

$$\Phi_n = \sum_{j=1}^j A_{nj} r^{j-1} e^{-\alpha r} \quad (01)$$

Le paramètre α prend la valeur 0.5 permettant à la fonction Φ_n d'avoir le même comportement que l'état hydrogène 2s, tandis que les coefficients A_{nj} sont choisis de telle

manière que les fonctions Φ_n soient orthogonales et orthogonales aux fonctions hydrogène 1s et 2s. La convergence dans le développement close coupling a été examinée en ajoutant aux états 1s-2s au moins un pseudo-état parmi les pseudo-états $\overline{3s}$, $\overline{4s}$ et $\overline{5s}$.

Dans un calcul plus élaboré, les états et pseudo-états de Callaway et Wooten [16], [17], [19] (états : 1s, 2s, 2p, 3d et pseudo-états : $\overline{3s}$, $\overline{4s}$, $\overline{5s}$, $\overline{3p}$, $\overline{4p}$, $\overline{5p}$ et $\overline{4d}$), pour un moment angulaire orbital donné, sont construits par diagonalisation de l'Hamiltonien de la cible dans une base d'orbitales de type Slater de la forme $r^j e^{-\alpha_j r}$ avec les exposants j et α_j choisis de telle sorte que les quelques énergies propres les plus basses soient exactes. Les sections efficaces obtenues sont en bon accord avec les calculs de Burke et Webb [24] qui utilisent une approximation close coupling dans laquelle les états hydrogène 1s, 2s et 2p sont retenus en addition de deux pseudo-états de configuration $\overline{3s}$ et $\overline{3p}$ de la forme :

$$R_{\overline{3s}}(r) = (a_1 + a_2 r + a_3 r^2) e^{-\alpha r} \quad (\text{VII.02})$$

$$R_{\overline{3p}}(r) = (b_1 + b_2 r) e^{-\beta r} \quad (\text{VII.03})$$

Les paramètres linéaires a_i et b_i dans le développement de Burke et Webb sont déterminés de telle sorte que les fonctions $R_{\overline{3s}}$ et $R_{\overline{3p}}$ soient normalisées et orthogonales aux états hydrogène 1s, 2s et 2p. Tandis que, les paramètres α et β doivent garantir une décroissance exponentielle des pseudo-états considérés semblable en ordre de grandeur à celle des états propres $n=2$ respectivement. Les énergies d'excitation des pseudo-états doivent coïncider avec le seuil d'ionisation de l'atome d'hydrogène dont la valeur bien connue est de 13.6 eV. Comme il a été mentionné auparavant [11], les calculs pseudo-états des sections efficaces totales 1s-2s et 1s-2p de Burke et Webb ont apporté une nette amélioration par rapport au calcul close coupling habituel.

Un atout commun partagé entre les fonctions L^2 utilisées dans les travaux cités auparavant subsiste bien sûr dans le profil simple qui leur procure une flexibilité inégalable. En effet, ces fonctions sont habituellement représentées en monômes ou polynômes multipliés par une exponentielle décroissante dont l'intégrale aboutit en général à des fonctions gamma complètes ou incomplètes définies et tabulées dans l'ouvrage de référence d'Abramowitz et Stegun [25]. Nous tenons à rappeler que les fonctions radiales de Callaway et Unnikrishnan [16] que nous avons adoptées dans ce travail font partie de cette catégorie de fonctions dont le produit scalaire, à un opérateur près agissant sur l'une des fonctions, converge. Si l'opérateur en action est l'opérateur unité, alors il s'agit d'une intégrale de recouvrement entre orbitales radiales. Si c'est l'opérateur énergie cinétique, l'intégrale est une intégrale d'énergie cinétique

et finalement si c'est un opérateur potentiel, alors c'est une intégrale d'énergie potentielle. Une combinaison des deux dernières intégrales n'est autre que l'intégrale énergie totale du système et l'identification de cette intégrale, à un coefficient près, au recouvrement des deux orbitales radiales constitue l'équation de Schrödinger du système dans sa version matricielle.

Dans le but d'intégrer l'équation de Schrödinger, une discrétisation par un algorithme de Numerov [26], [27], [28], [29], [30], [31] (ANNEXE AVII) sur une grille de points dans une région bien définie nous a permis de tester plus ou moins sévèrement les fonctions radiales de Callaway et Unnikrishnan correspondant aux trois premiers états liés et les quelques états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible. Les énergies propres positives et négatives des états du continuum et des états liés respectivement sont localisées en un point bien déterminé de la grille de Numerov. Ce point tournant (turning point) [26] est obtenu par la méthode classique de la sécante pour la recherche des zéro d'une fonction $q(r)$ (ANNEXE AVII) en parcourant l'intervalle radial délimitant la grille de Numerov de l'extrémité gauche vers l'extrémité droite et inversement.

Deux points successifs constituant les conditions aux limites gauches de l'intervalle radial, séparés par le pas de discrétisation, sont nécessaires pour initialiser la procédure d'intégration de l'équation de Schrödinger dans un sens progressif allant de gauche à droite dans la grille de Numerov. Deux autres points constituant les conditions aux limites droites de l'intervalle radial, séparés par le pas de discrétisation, sont nécessaires pour intégrer l'équation de Schrödinger dans le sens régressif allant de droite à gauche dans la grille de Numerov. Toute fois, la fonction $q(r) = 2(E - V(r))$ dont il s'agit de rechercher les nœuds au cours de la procédure de discrétisation ne peut être que la différence d'énergie propre et d'énergie potentielle de l'équation de Schrödinger. En spécifiant la coordonnée du point tournant par un indice t , la fonction $q(r)$ est nécessairement nulle en ce point et l'on peut écrire de manière équivalente $E_t = V(r_t)$ où E_t et $V(r_t)$ représentent l'énergie propre et l'énergie potentielle au point r_t respectivement.

VII.3 Résultats et discussion

En utilisant le code Fortran développé par Bouamoud [32, 33] dans la cadre du principe variationnel de Schwinger, nous avons tenté de reproduire les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires. Les sections efficaces d'excitation à l'état $n=2$, $2p$ et $2s$ en particulier sont illustrés en figures ci dessous. Il nous semble tout à fait raisonnable de retrouver les profils obtenus par Bouamoud puisqu'aucune modification n'a été apportée au niveau de la procédure de calcul dans

l'intervalle d'énergie d'impact 15-200KeV à l'exception de l'excitation à l'état 2s (figure. 8) où nous avons étendu l'intervalle d'impact à 2KeV. Les figures 1, 2 et 3 représentent les sections efficaces d'excitation à l'état $n=2$. Les figures 4, 5 et 6 représentent les sections efficaces d'excitation à l'état 2p ($2p_{-1}$, $2p_0$ et $2p_{+1}$) tandis que les figures 7 et 8 représentent les sections efficaces d'excitation à l'état 2s. Les sections efficaces d'excitation à l'état $n=2$ résultent essentiellement de la contribution concurrentielle des transitions vers les états 2s et 2p ($2p_{-1}$, $2p_0$ et $2p_{+1}$) depuis l'état fondamental 1s.

Dans l'ensemble des figures 1-7, les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires sont comparées avec les calculs théoriques (Schw55 [32], Schw1414 [36], Ford et al [37], Schakeshaft [38] et Slim et al [39]) d'une part et les résultats expérimentaux (Barnett et al [40], Detleffsen et al [41] et Higgins et al [42]) d'autre part. Il faut noter cependant que, dans toutes ces figures, les sections efficaces exécutent approximativement le même profil à l'exception dans la zone d'intervalle d'énergie autour de 60KeV où les sections efficaces d'excitation sont sous estimées jusqu'à 10% par rapport aux mesures expérimentales. Ce désagrément est dû probablement aux contributions jusqu'alors ignorées de l'ensemble du spectre discret et continu de la cible dans les sections efficaces d'excitation aux énergies intermédiaires.

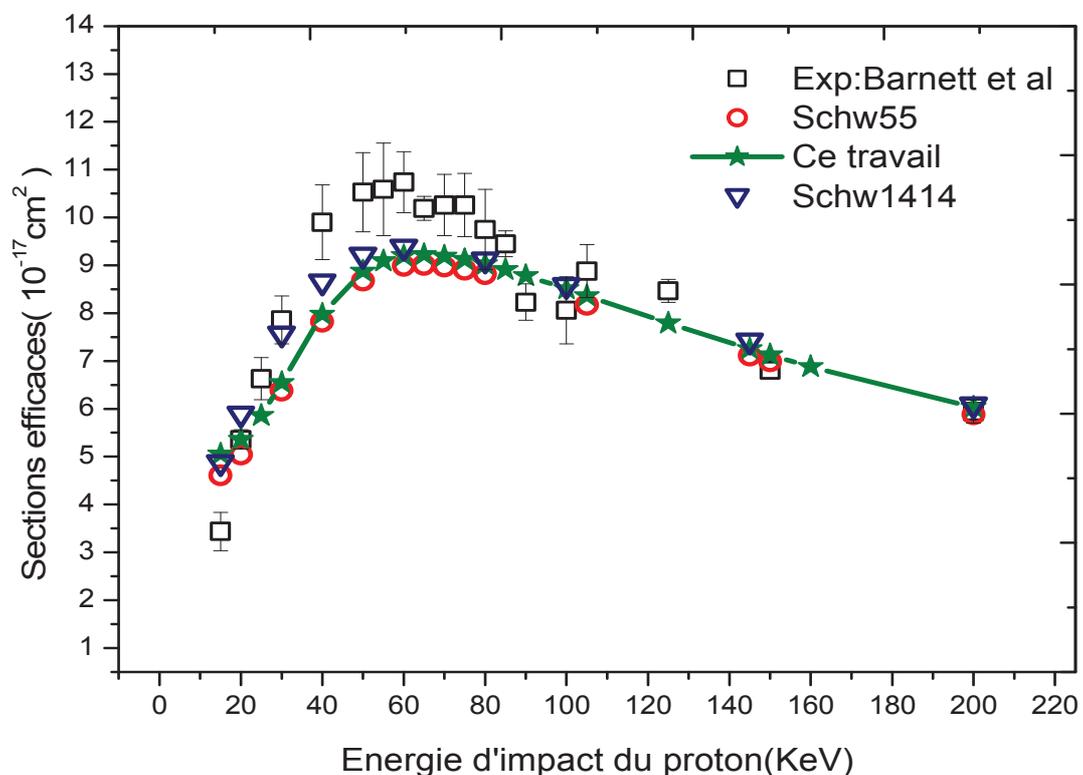


Figure. 1 Sections efficaces d'excitation à l'état $n=2$ de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Barnet et al	Erreur	Schw55	Ce travail	Schw1414	Ford et al
15	3,44	0,4	4,61019	5,05103	4,88095	3,53
20	5,36	0,2	5,04321	5,36091	5,8959	--
25	6,63	0,44	--	5,86188	--	--
30	7,86	0,5	6,37903	6,54723	7,56984	7,58
40	9,9	0,78	7,82491	7,97652	8,65498	--
50	10,53	0,83	8,67789	8,8755	9,21497	--
55	10,59	0,97	--	9,09241	--	--
60	10,74	0,64	8,98945	9,19753	9,38251	9,44
65	10,19	0,25	9,00817	9,22356	--	--
70	10,26	0,64	8,97543	9,18989	--	--
75	10,26	0,66	8,90713	9,11981	--	--
80	9,75	0,84	8,8187	9,0239	9,12	9,13
85	9,45	0,27	--	8,91028	--	--
90	8,2304	0,38	--	8,78335	--	--
100	8,0609	0,7	--	8,50806	8,58294	9,64
105	8,88	0,55	8,17512	8,36475	--	--
125	8,47	0,24	--	7,79242	--	7,959
145	--	--	7,1151	7,25407	7,42016	--
150	6,8068	--	6,99295	7,12718	--	7,334
160	--	--	--	6,88331	--	--
200	5,9423	0,24	5,88469	6,03275	6,08357	6,309

Tableau 01 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état n=2 de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17} cm^2

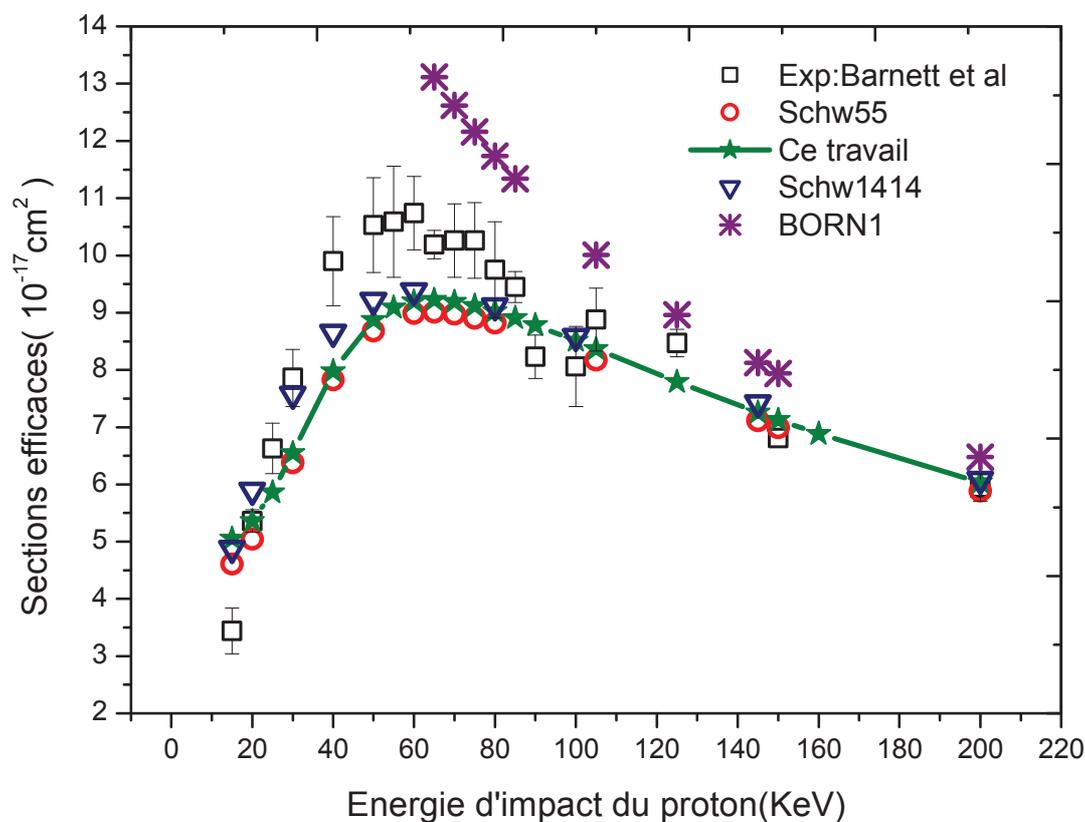


Figure. 2 Sections efficaces d'excitation à l'état n=2 de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Barnet et al	Erreur	Schw55	Ce travail	Schw1414	Born1
15	3,44	0,4	4,61019	5,05103	4,88095	
20	5,36	0,2	5,04321	5,36091	5,8959	
25	6,63	0,44	--	5,86188	--	
30	7,86	0,5	6,37903	6,54723	7,56984	
40	9,9	0,78	7,82491	7,97652	8,65498	
50	10,53	0,83	8,67789	8,8755	9,21497	
55	10,59	0,97	--	9,09241	--	
60	10,74	0,64	8,98945	9,19753	9,38251	
65	10,19	0,25	9,00817	9,22356	--	13,11764
70	10,26	0,64	8,97543	9,18989	--	12,62018
75	10,26	0,66	8,90713	9,11981	--	12,16065
80	9,75	0,84	8,8187	9,0239	9,12	11,735
85	9,45	0,27	--	8,91028	--	11,33971
90	8,2304	0,38	--	8,78335	--	--
100	8,0609	0,7	--	8,50806	8,58294	--
105	8,88	0,55	8,17512	8,36475	--	10,00498
125	8,47	0,24	--	7,79242	--	8,96119
145	--	--	7,1151	7,25407	7,42016	8,1231
150	6,8068	--	6,99295	7,12718	--	7,93846
160	--	--	--	6,88331	--	--
200	5,9423	0,24	5,88469	6,03275	6,08357	6,47874

Tableau 02 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état n=2 de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17} cm^2

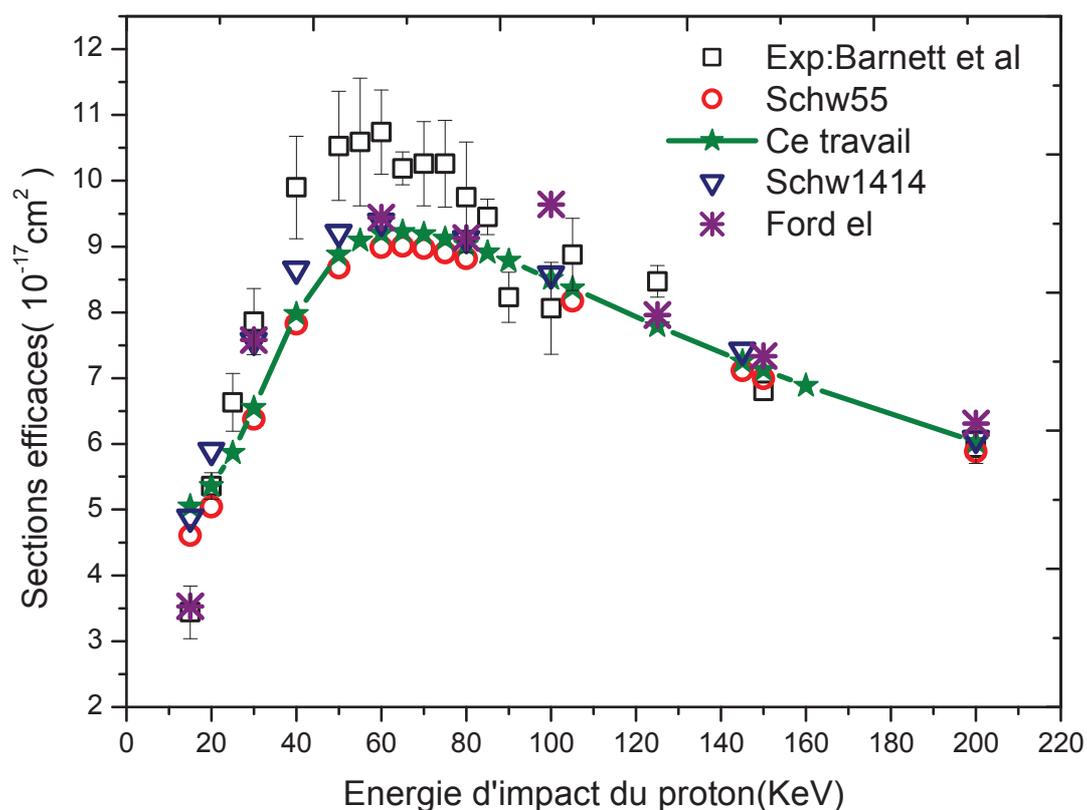


Figure. 3 Sections efficaces d'excitation à l'état n=2 de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Barnet et al	Erreur	Schw55	Ce travail	Schw1414	Ford et al
15	3,44	0,4	4,61019	5,05103	4,88095	3,53
20	5,36	0,2	5,04321	5,36091	5,8959	--
25	6,63	0,44	--	5,86188	--	--
30	7,86	0,5	6,37903	6,54723	7,56984	7,58
40	9,9	0,78	7,82491	7,97652	8,65498	--
50	10,53	0,83	8,67789	8,8755	9,21497	--
55	10,59	0,97	--	9,09241	--	--
60	10,74	0,64	8,98945	9,19753	9,38251	9,44
65	10,19	0,25	9,00817	9,22356	--	--
70	10,26	0,64	8,97543	9,18989	--	--
75	10,26	0,66	8,90713	9,11981	--	--
80	9,75	0,84	8,8187	9,0239	9,12	9,13
85	9,45	0,27	--	8,91028	--	--
90	8,2304	0,38	--	8,78335	--	--
100	8,0609	0,7	--	8,50806	8,58294	9,64
105	8,88	0,55	8,17512	8,36475	--	--
125	8,47	0,24	--	7,79242	--	7,959
145	--	--	7,1151	7,25407	7,42016	--
150	6,8068	--	6,99295	7,12718	--	7,334
160	--	--	--	6,88331	--	--
200	5,9423	0,24	5,88469	6,03275	6,08357	6,309

Tableau 03 : Sections efficaces totale d'excitation à l'état n=2 de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17}cm^2

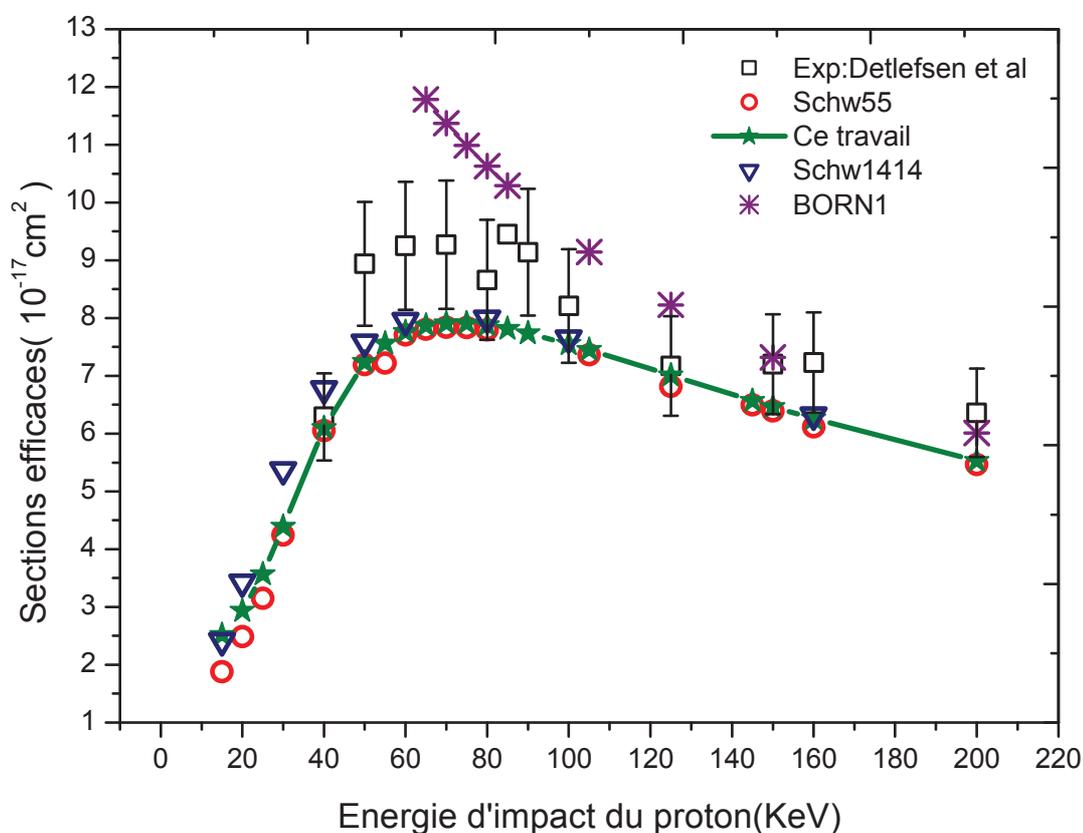


Figure. 4 Sections efficaces d'excitation à l'état 2p de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Detleffsen	Erreur	Schw55	Ce travail	Shakeshaft	Ford et al	Slim et al
15	--	--	1,8808	2,51777	2,46	2,58	
20	--	--	2,4871	2,93521	--	--	
25	--	--	3,1471	3,56616	4,85	--	
30	--	--	4,243	4,38907	--	5,78	6,82
40	6,29	0,7548	6,0525	6,0928	6,89	--	8,04
50	8,94	1,0728	7,1893	7,2377	6,88	--	8,39
55	--	--	7,2188	7,56017	--	--	--
60	9,25	1,11	7,7055	7,75934	7,29	7,92	8,42
65	--	--	7,8057	7,86918	--	--	--
70	9,27	1,1124	7,8437	7,91072	--	--	--
75	--	--	7,8365	7,90848	7,97	--	8,22
80	8,66	1,039	7,7984	7,87355	--	7,89	--
85	9,45	--	--	7,8153	--	--	8,08
90	9,14	1,0968	--	7,73892	--	--	--
100	8,21	0,9852	--	7,55255	--	7,62	7,86
105	--	--	7,3636	7,44859	--	--	--
125	7,17	0,8604	6,8161	7,00703	--	7,13	--
145	--	--	6,4971	6,56836	6,53	--	6,89
150	7,2	0,864	6,3928	6,46275	--	6,64	--
160	7,23	0,867	6,1149	6,25788	--	--	--
200	6,36	0,7632	5,4688	5,52758	5,55	5,79	5,81

Tableau 04 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17}cm^2

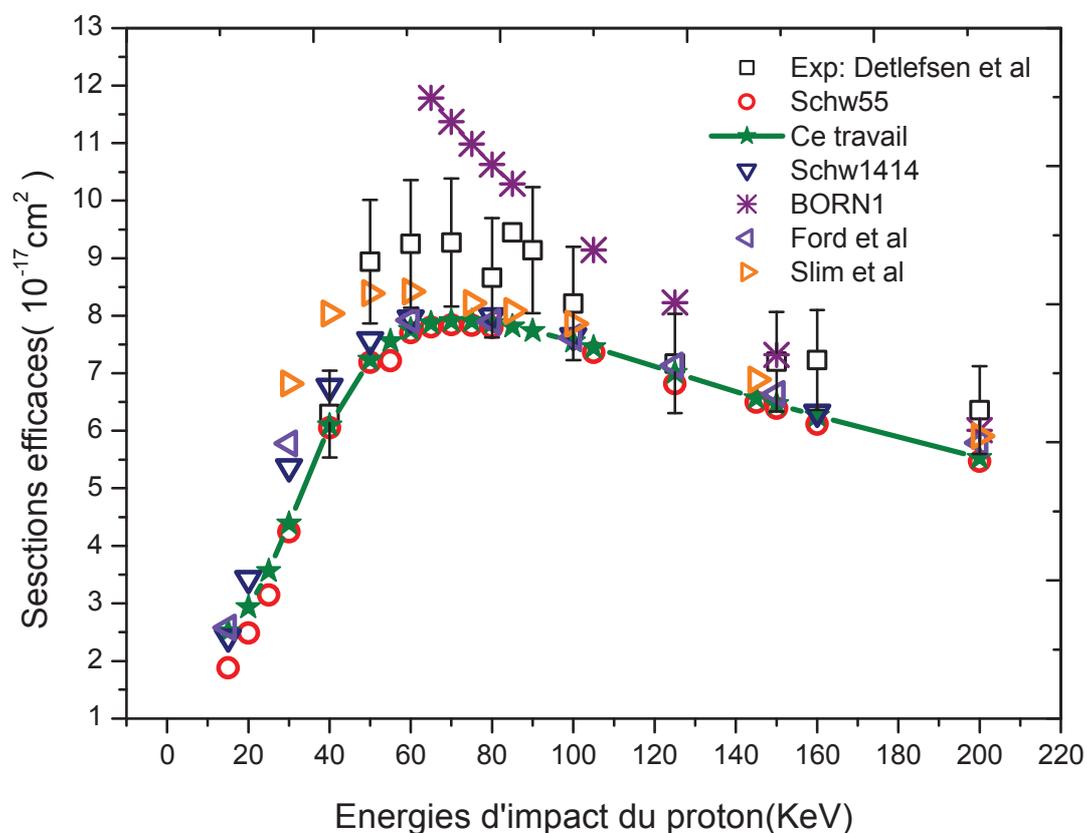


Figure. 5 Sections efficaces d'excitation à l'état 2p de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Detleffsen et al	Erreur	Schw55	Ce travail	Schw1414	Born1	Ford et al	Slim et al
15	--	--	1,8808	2,51777	2,4114		2,58	
20	--	--	2,4871	2,93521	3,4292		--	
25	--	--	3,1471	3,56616	--		--	
30	--	--	4,243	4,38907	5,371		5,78	6,82
40	6,29	0,7548	6,0525	6,0928	6,7689		--	8,04
50	8,94	1,0728	7,1893	7,2377	7,5804		--	8,39
55	--	--	7,2188	7,56017	--		--	--
60	9,25	1,11	7,7055	7,75934	7,9536		7,92	8,42
65	--	--	7,8057	7,86918	--	11,784	--	--
70	9,27	1,1124	7,8437	7,91072	--	11,371	--	--
75	--	--	7,8365	7,90848	--	10,986	--	8,22
80	8,66	1,039	7,7984	7,87355	7,997	10,627	7,89	--
85	9,45	--	--	7,8153	--	10,291	--	8,08
90	9,14	1,0968	--	7,73892	--	--	--	--
100	8,21	0,9852	--	7,55255	7,6528	--	7,62	7,86
105	--	--	7,3636	7,44859	--	9,1415	--	--
125	7,17	0,8604	6,8161	7,00703	--	8,2274	7,13	--
145	--	--	6,4971	6,56836	--	--	--	6,89
150	7,2	0,864	6,3928	6,46275	--	7,3207	6,64	--
160	7,23	0,867	6,1149	6,25788	6,3197	--	--	--
200	6,36	0,7632	5,4688	5,52758		6,0094	5,79	5,91
15	--	--	1,8808	2,51777	2,4114		2,58	

Tableau 05 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17}cm^2

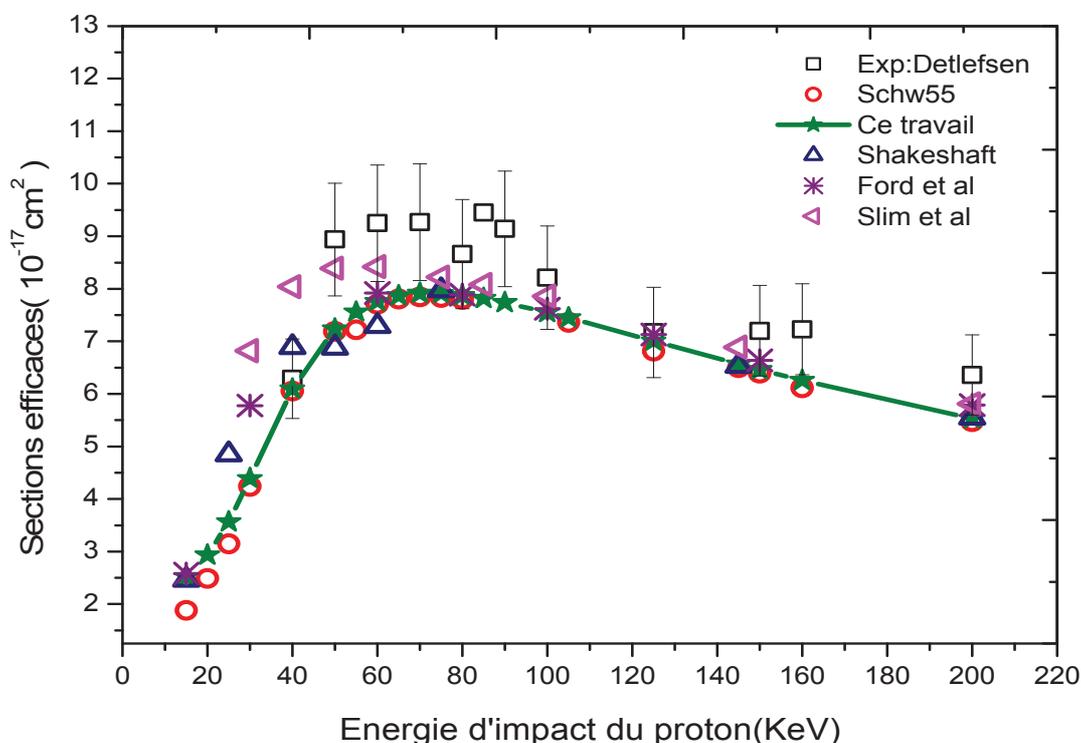


Figure. 6 Sections efficaces d'excitation à l'état 2p de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Detleffsen	Erreur	Schw55	Ce travail	Shakeshaft	Ford et al	Slim et al
15	--	--	1,8808	2,51777	2,46	2,58	
20	--	--	2,4871	2,93521	--	--	
25	--	--	3,1471	3,56616	4,85	--	
30	--	--	4,243	4,38907	--	5,78	6,82
40	6,29	0,7548	6,0525	6,0928	6,89	--	8,04
50	8,94	1,0728	7,1893	7,2377	6,88	--	8,39
55	--	--	7,2188	7,56017	--	--	--
60	9,25	1,11	7,7055	7,75934	7,29	7,92	8,42
65	--	--	7,8057	7,86918	--	--	--
70	9,27	1,1124	7,8437	7,91072	--	--	--
75	--	--	7,8365	7,90848	7,97	--	8,22
80	8,66	1,039	7,7984	7,87355	--	7,89	--
85	9,45	--	--	7,8153	--	--	8,08
90	9,14	1,0968	--	7,73892	--	--	--
100	8,21	0,9852	--	7,55255	--	7,62	7,86
105	--	--	7,3636	7,44859	--	--	--
125	7,17	0,8604	6,8161	7,00703	--	7,13	--
145	--	--	6,4971	6,56836	6,53	--	6,89
150	7,2	0,864	6,3928	6,46275	--	6,64	--
160	7,23	0,867	6,1149	6,25788	--	--	--
200	6,36	0,7632	5,4688	5,52758	5,55	5,79	5,81
15	--	--	1,8808	2,51777	2,46	2,58	

Tableau 06 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état 2p de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17}cm^2

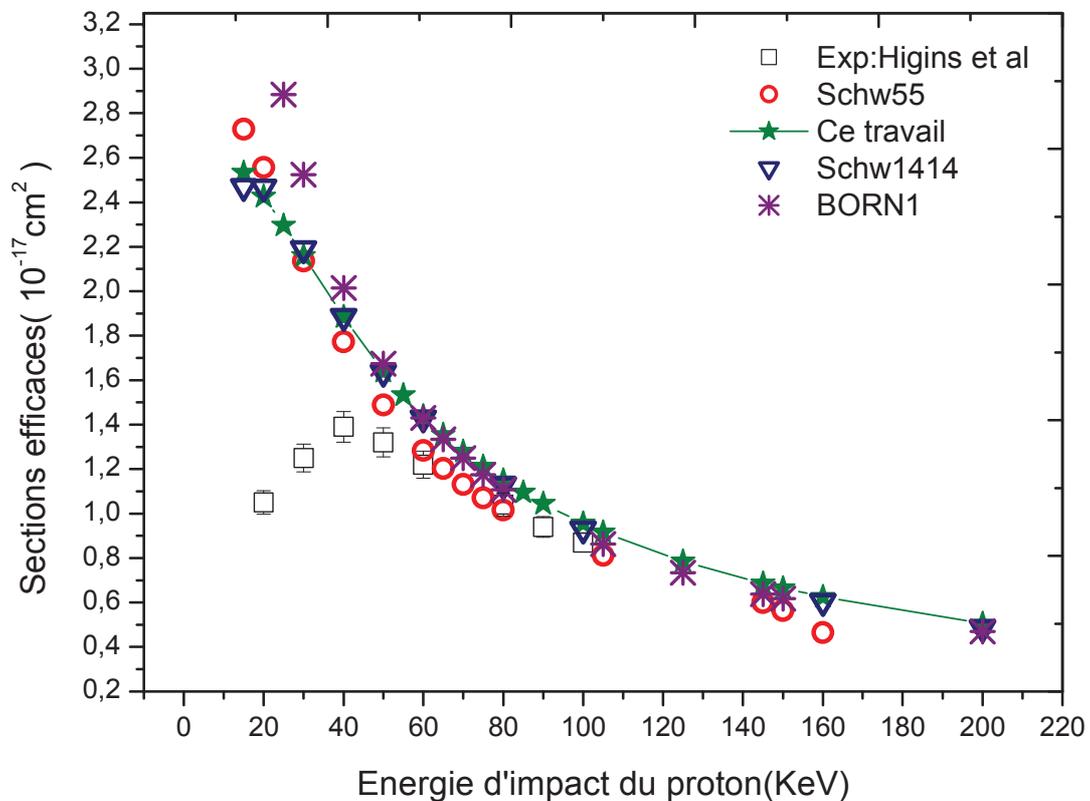


Figure. 7 Sections efficaces d'excitation à l'état 2s de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Higgins et al	Erreur	Schw55	Ce travail	Schw1414	Born1
15		--	2,7294	2,53326	2,4696	
20	1,05	0,0525	2,5562	2,4257	2,4669	
25		--	--	2,29572	--	2,8839
30	1,25	0,0625	2,136	2,15816	2,1902	2,5245
40	1,39	0,0695	1,7724	1,88372	1,886	2,0149
50	1,32	0,066	1,4886	1,6378	1,6346	1,6738
55		--	--	1,53224	--	--
60	1,22	0,061	1,284	1,43819	1,4289	1,4306
65		--	1,2025	1,35438	--	1,3335
70	--	--	1,1317	1,27917	--	1,2486
75		--	1,0706	1,21133	--	1,1739
80	1,04	0,052	1,0155	1,15035	1,1296	1,1076
85		--	--	1,09498	--	--
90	0,94	0,047	--	1,04443	--	--
100	0,87	0,0435	--	0,95551	0,92902	--
105			0,81158	0,91616	--	0,8635
125			--	0,78539	--	0,73376
145			0,60014	0,68571	--	0,63795
150			0,56464	0,66443	--	0,61778
160			0,46544	0,62543	0,60322	--
200				0,50517	0,48707	0,46965

Tableau 07 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17}cm^2

La divergence des calculs de l'approximation de Born au premier ordre(BORN1) à énergies basses et intermédiaires dans les figures 2, 4, 5 et 7 semble être indéniable. En analysant à première vue la figure 7, nous avons une forte impression que les sections efficaces d'excitation à l'état 2s divergent en côtoyant les calculs de Born au premier ordre préférentiellement applicable à haute énergie.

En revanche, l'analyse de la figure 1 conjointement avec la figure 7 si dessus montre, d'une façon irréfutable, que les sections efficaces d'excitation à l'état 2s, même si elles sont fortement surestimées, doivent passer par un maximum légèrement estompé dans la figure 7 à cause d'une limitation volontaire à 15KeV de l'intervalle d'énergie d'impact avec la cible.

Ce constat nous a invité par la suite, à élargir l'intervalle d'énergie d'impact en dessous de 15KeV jusqu'à 2KeV (figure 8). Il nous invite également à essayer de confirmer la conjecture d'existence d'un couplage entre voies de capture électronique et voies d'excitation dans cette tranche d'intervalle entre 2KeV et 40KeV voir même supérieur et de mettre l'accent sur le degré de compétition entre les voies simultanément ouvertes dans ce même intervalle. Une telle information sur une compétition dans une gamme d'énergie qualifiée de basse et intermédiaire dans laquelle contribuent toutes les voies ouvertes de façon mutuelle constitue un intérêt majeur des investigations sur les interactions ion-atome et ion-ion multichargé.

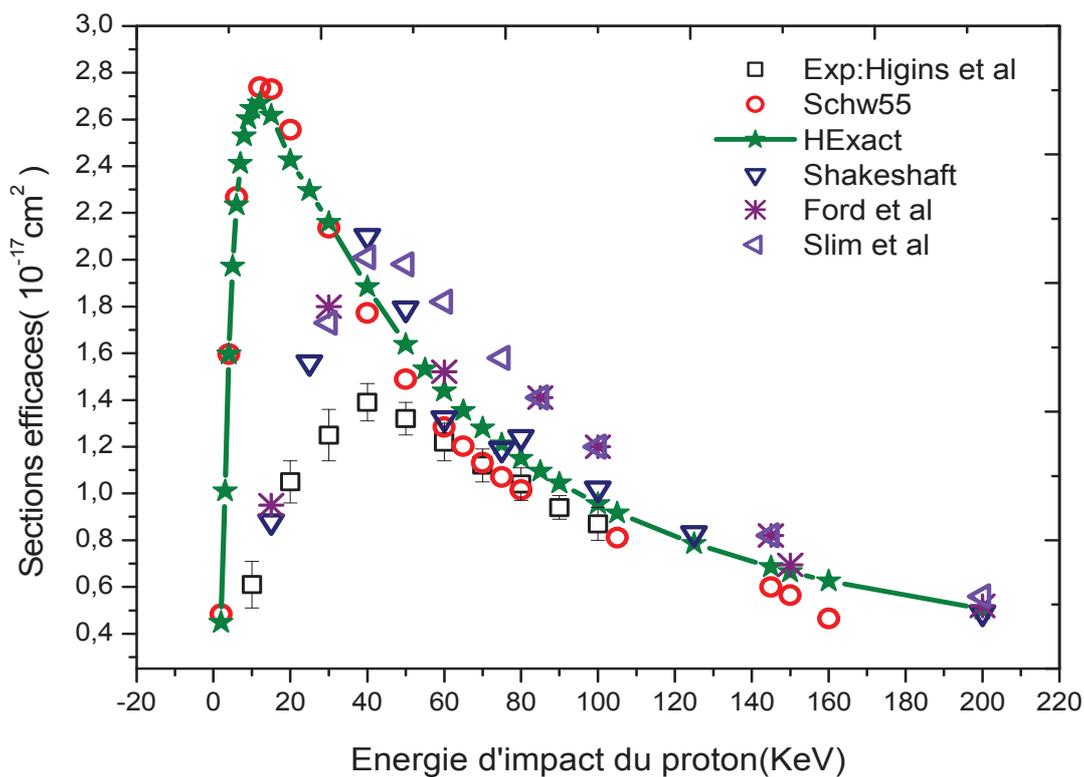


Figure. 8 Sections efficaces d’excitation à l’état 2s de l’hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie(KeV)	Higgins et al	Erreur	Schw55	HExact	Shakeshaft	Ford et al	Slim et al
2	--	--	0,48334	0,44843	--	--	
3	--	--	--	1,01061	--	--	
4	--	--	1,5966	1,5958	--	--	
5	--	--	--	1,97139	--	--	--
6	--	--	2,268	2,2341	--	--	--
7	--	--	--	2,41173	--	--	--
8	--	--	--	2,52862	--	--	--
9	--	--	--	2,60293	--	--	--
10	0,61	0,1	--	2,64598	--	--	--
12	--	--	2,7372	2,66989	--	--	--
15	--	--	2,7294	2,61821	0,88	0,95	--
20	1,05	0,09	2,5562	2,4257	--	--	--
25	--	--	--	2,29572	1,56	--	--
30	1,25	0,11	2,136	2,15816	--	1,8	1,73
40	1,39	0,08	1,7724	1,88372	2,1	--	2,01
50	1,32	0,07	1,4886	1,6378	1,79	--	1,98
55	--	--	--	1,53224	--	--	--
60	1,22	0,08	1,284	1,43819	1,32	1,52	1,82
65	--	--	1,2025	1,35438	--	--	--
80	1,04	0,07	1,0155	1,15035	1,24	--	--
100	0,87	0,07	--	0,95551	1,02	1,2	1,2
145	--	--	0,60014	0,68571	--	0,82	0,82
160	--	--	0,46544	0,62543	--	--	--
200	--	--	--	0,50517	0,49	0,519	0,56

Tableau 08 : Sections efficaces totales d’excitation à l’état 2s de l’atome d’hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l’unité 10^{-17}cm^2

Si bien que de nombreux travaux utilisant des méthodes aussi bien simples que compliquées pour résoudre ce problème soient incontournables. Nous avons vu qu'il serait judicieux d'examiner de plus près la région d'énergie proche du seuil d'ionisation, de traquer le continuum d'état de la cible dans cette région et de choisir les fonctions d'onde les mieux adaptées pour représenter ce continuum. En effet, des transitions vers des états du continuum de la cible seront possibles une fois l'ouverture d'une voie de capture électronique. L'ouverture de cette voie de capture électronique est attribuée, selon certains auteurs [43, 44, 45, 46, 47, 48], à l'existence d'un couplage entre états intermédiaires d'un atome uni He^+ susceptible de se former à petite séparation projectile-cible et les états du continuum de la cible pour des énergies inférieurs à 30KeV. Ce couplage plus ou moins fort est le plus souvent apprécié par évaluation d'intégrale de recouvrement entre fonctions d'onde du continuum de la cible et les fonctions d'onde des états intermédiaires de l'atome uni He^+ .

La capture électronique sur des états d'un atome uni He^+ , même en passant par des états intermédiaires H_2^+ [48], n'est pas la seule voie ouverte lors de l'interaction proton-hydrogène atomique pour des énergies basses et intermédiaires. En effet, une voie de capture électronique sur le projectile via ionisation de la cible peut être envisagée et les auteurs [49, 50, 51, 52, 53] qui ont analysé le processus en question suggèrent l'inclusion d'états d'ionisation lors de l'ouverture de cette voie de capture selon un mécanisme classique de Thomas à deux étapes [54] pour des énergies d'impact supérieures à 40KeV. Moins probable dans cette région d'intervalle d'énergie et particulièrement scruté à haute énergie, l'ionisation simple, en revanche, est loin d'être impliquées dans le processus selon les mêmes auteurs.

L'examen des différentes voies ouvertes lors du processus de collision proton-hydrogène atomique analysées dans la littérature référencée si dessus ne relève pas du cadre de cette thèse. Néanmoins, nous avons pu en avoir les convictions sur une contribution quasi incontestable du continuum de la cible dans les sections efficaces des voies, conjointement, ouvertes dans l'intervalle d'énergie qui nous intéresse. L'excitation d'atome par impact d'ion nu comme le proton à des énergies intermédiaires fait, catégoriquement, partie des voies compétitivement ouvertes dans le processus. Le processus d'excitation a particulièrement suscité notre intérêt dans le présent travail et les résultats des calculs sur les sections efficaces que nous avons pu obtenir sont présentés en figures.

Dans la figure 9, nous présentons les sections efficaces d'excitation à l'état 2s par impact de proton aux énergies intermédiaires. Nous tenons à rappeler que dans notre première tentative, les fonctions d'onde du continuum de la cible sont issues d'un développement L^2

sur la base des fonctions hydrogènes de type Laguerre. Nous tenons à rappeler aussi que, moyennant une stratégie empruntée de la technique de la matrice J de Yamani et Reinhardt, ce développement aboutit nécessairement à des séquences récursives (VI.27 du chapitre VI) entre polynômes d'une classe généralisée constituant les coefficients de développement des fonctions du continuum de la cible.

Energie(KeV)	Higgins et al	Erreur	Schw55	HPolyn	Shakeshaft	Ford et al	Slim et al
2	--	--	0,48334	0,45024	--	--	
3	--	--	--	1,01142	--	--	
4	--	--	1,5966	1,49292	--	--	
5	--	--	--	1,84907	--	--	--
6	--	--	2,268	2,10386	--	--	--
7	--	--	--	2,277	--	--	--
8	--	--	--	2,39213	--	--	--
9	--	--	--	2,46677	--	--	--
10	0,61	0,1	--	2,51179	--	--	--
12	--	--	2,7372	2,54212	--	--	--
15		--	2,7294	2,50037	0,88	0,95	--
20	1,05	0,09	2,5562	2,41375	--	--	--
25		--	--	2,29572	1,56	--	--
30	1,25	0,11	2,136	2,15816	--	1,8	1,73
40	1,39	0,08	1,7724	1,88372	2,1	--	2,01
50	1,32	0,07	1,4886	1,6378	1,79	--	1,98
55		--	--	1,53224	--	--	--
60	1,22	0,08	1,284	1,43819	1,32	1,52	1,82
65		--	1,2025	1,35438	--	--	--
70	--	0,07	1,1317	1,27917	--	--	--
75		--	1,0706	1,21133	1,19	--	1,58
80	1,04	0,07	1,0155	1,15035	1,24	--	--
85		--	--	1,09498	--	1,41	1,41
90	0,94	0,05	--	1,04443	--	--	--
100	0,87	0,07	--	0,95551	1,02	1,2	1,2
105			0,81158	0,91616	--	--	--
125			--	0,78539	0,829	--	--
145			0,60014	0,68571	--	0,82	0,82
150			0,56464	0,66443	--	0,694	--
160			0,46544	0,62543	--	--	--
200				0,50517	0,49	0,519	0,56

Tableau 09 : Sections efficaces totales d'excitation à l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17}cm^2

Dans la figure 9 où nous avons utilisé un pseudo-état noté ($\underline{3s}$), les sections efficaces (HPolyn) d'excitation à l'état 2s sont améliorées de 10% par rapport aux sections efficaces (Schw55) de Bouamoud. Les profils sont vraisemblablement les mêmes pour des énergies supérieurs à 40KeV. Ces résultats des calculs sur les sections efficaces seront d'autant plus meilleurs si le nombre de pseudo-état inclus dans le développement est important.

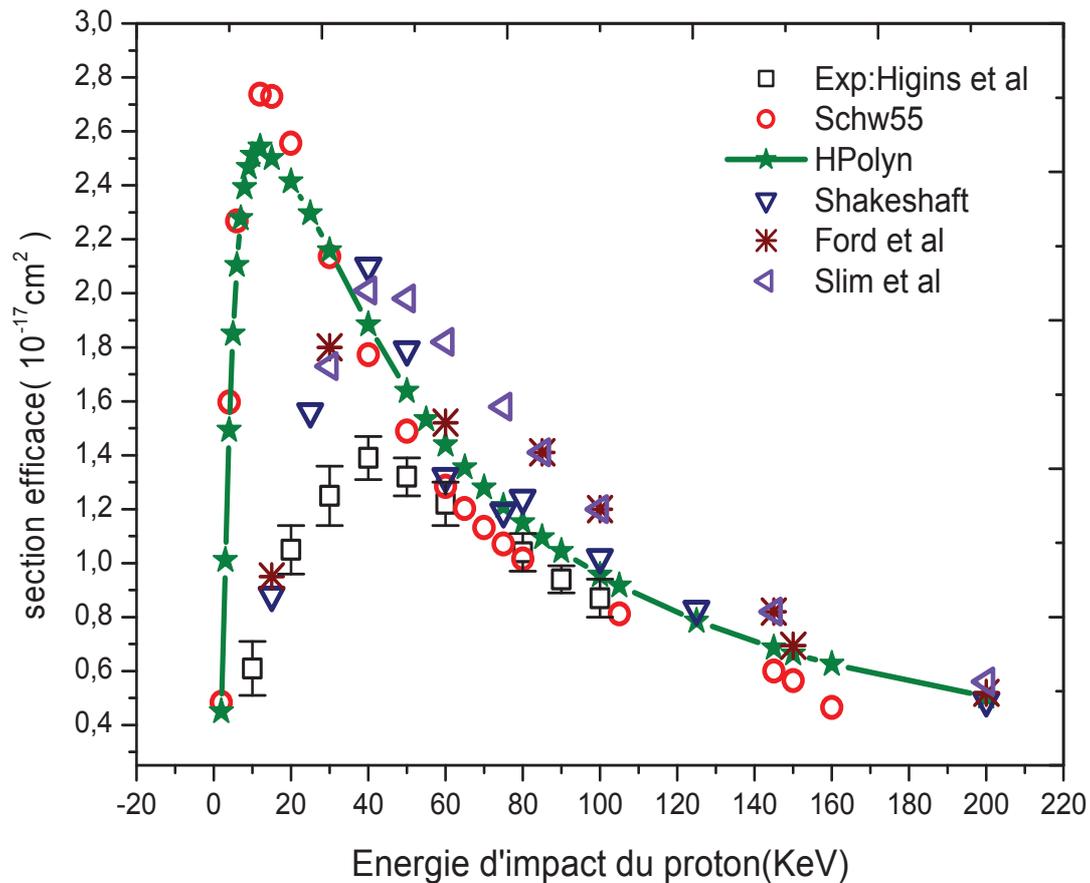


Figure. 9 Sections efficaces d'excitation à l'état 2s de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Hormis les avantages cités auparavant, les calculs tendent, malheureusement, à devenir de plus en plus lourds et fastidieux à chaque fois que le nombre de pseudo-état augmente nécessitant ainsi, un effort machine considérable et coûteux. Les fonctions de type Slater, particulièrement souple et maniable et d'une flexibilité inégalable, ont été choisies pour pallier aux difficultés rencontrées plus haut. Elles nous ont épargné le problème de convergence généralement coûteux en matière de temps machine.

Les fonctions d'onde radiales de Callaway et Unnikrishnan sont des fonctions de type Slater. Ces fonctions ont été plus ou moins sévèrement testées moyennant une procédure de discrétisation de Numerov relativement détaillée dans ce manuscrit. Le comportement de ces fonctions pour différentes valeurs de l'énergie propre E , qu'elle soit négative ou positive, et du facteur d'échelle ζ peut être apprécié en analysant les figures si dessous.

En effet, dans la zone de spectre discret (figure 10-13) où les énergies sont négatives (états liés) ainsi que dans la zone proche du seuil d'ionisation de la cible (figure 14-17) où les énergies sont légèrement positives (continuum proche), le comportement observé nous semble

qualitativement comparable au comportement exact de l'hydrogène atomique dans son état fondamental et dans ses premiers états excités.

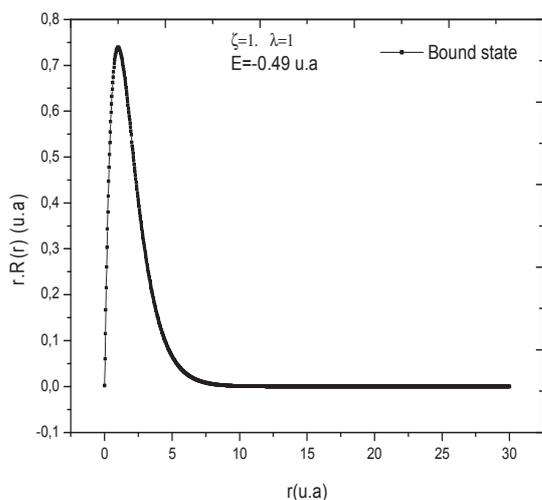


Figure. 10 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

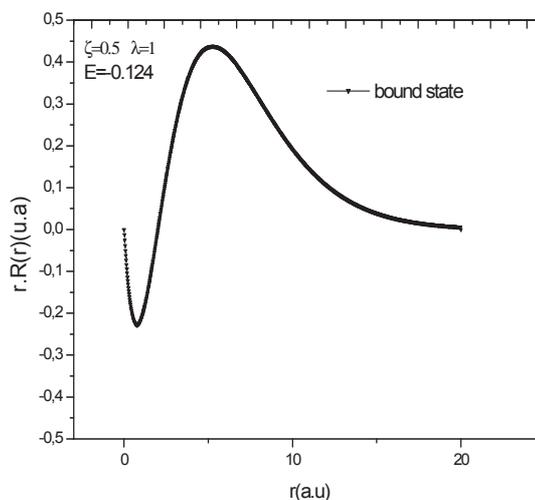


Figure. 11 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

Le comportement du continuum proche du seuil d'ionisation dont les énergies sont légèrement positives semble avoir un caractère oscillant comparable au comportement exact de l'hydrogène atomique légèrement éloigné du seuil d'ionisation.

Dans les figures 10-13, sont illustrées les fonctions d'ondes de Callaway et Unnikrishnan validées numériquement par la procédure de Numerov pour l'état fondamental et les premiers états excités avec les facteurs d'échelle et les énergies appropriées. Il s'agit des états 1s, 2s et 3s quasi exactes volontairement retenus dans notre développement.

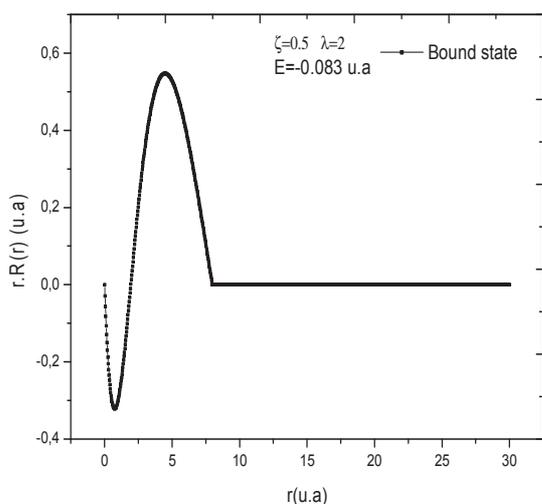


Figure. 12 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

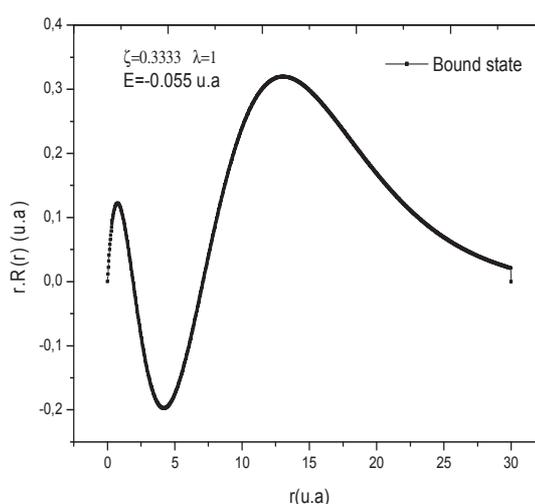


Figure. 13 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

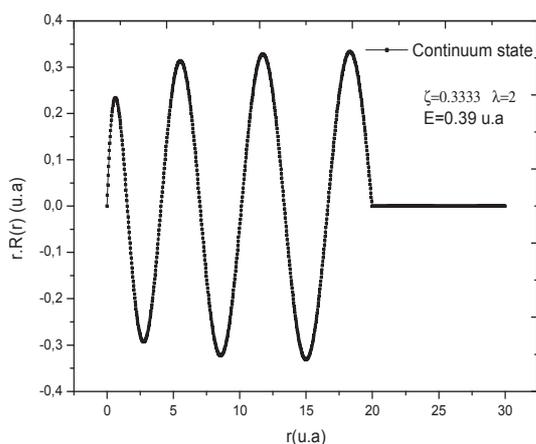


Figure. 14 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

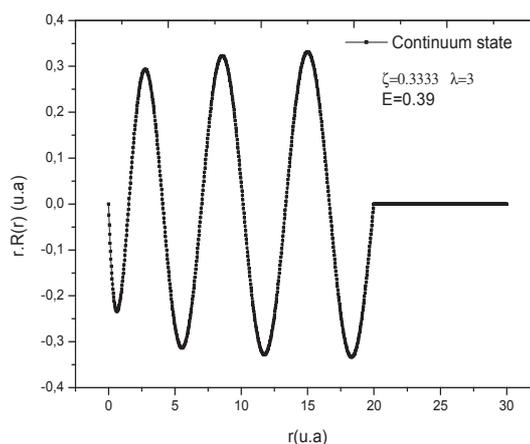


Figure. 15 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

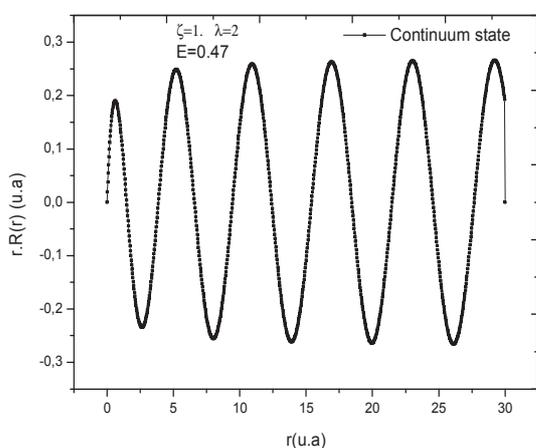


Figure. 16 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

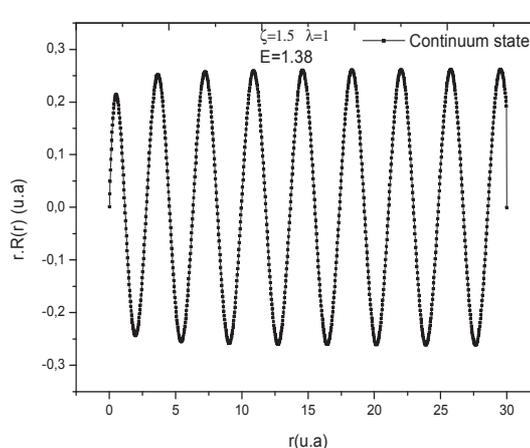


Figure. 17 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

Ce résultat nous a offert, par la suite, l'opportunité d'en saisir l'avantage en essayant de décrire convenablement le continuum proche du seuil d'ionisation de l'atome cible. Pour se faire, nous avons procédé par un algorithme d'orthogonalisation de Gram-Schmidt (figure 18-29) où nous avons, dans un premier temps, discrétisé le continuum proche sur la base même des fonctions de Callaway et Unnikrishnan de type Slater quasi exactes.

Le seul inconvénient rencontré avec les fonctions de type Slater, malgré leurs souplesses, est que leur nombre doit être limité pour ne pas avoir affaire, sans le vouloir, au phénomène de perte d'orthogonalité en progressant dans les calculs. Pour éviter ce désagrément non désirable de perte d'orthogonalité, un test sévère a été implémenté dans l'algorithme de Gram-Schmidt afin d'assurer un contrôle permanent de l'orthogonalité entre états et pseudo-états de la cible.

Nous sommes loin d'être exigeant dans notre analyse et pour ne pas trop juger de la qualité des fonctions obtenues, nous nous sommes contentés de leurs aspects démonstratifs. Il nous semble en effet, qu'elles sont bien adaptées pour donner les résultats souhaités. Le profil est bien proche de celui des fonctions exactes de l'hydrogène atomique avec les énergies appropriées. Ces fonctions d'ondes quasi exactes ainsi qu'un certain nombre de fonctions d'onde du continuum d'énergie sont représentées en figure 18-29 avec les distributions radiales associées.

Il est tout à fait clair que ces fonctions ne sont pas les seules adoptées dans ce genre de calculs. Les fonctions de type Slater sont choisies pour leurs souplesses et maniabilités lorsqu'il s'agit d'évaluer des intégrales de type recouvrement, énergie cinétique et énergie potentielle nécessaires pour la résolution d'équations aux valeurs propres par exemple ainsi que des intégrales moléculaires mono et multiélectronique rencontrées dans des équations de type Hartree en général[34], [35].

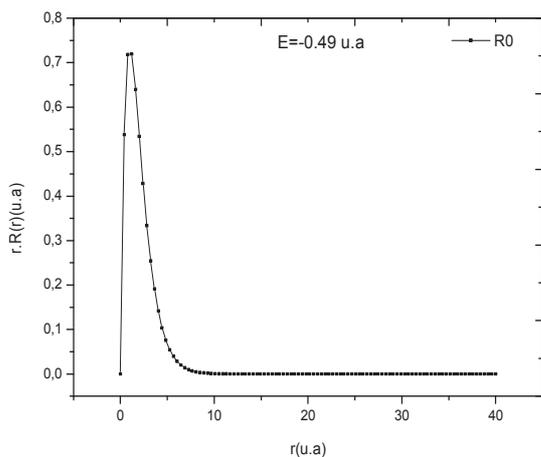


Figure. 18 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

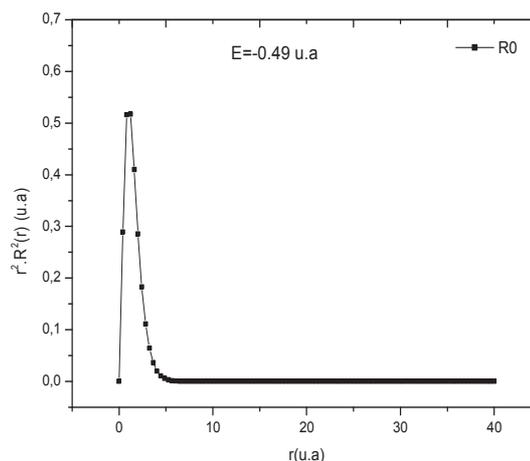


Figure. 19 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

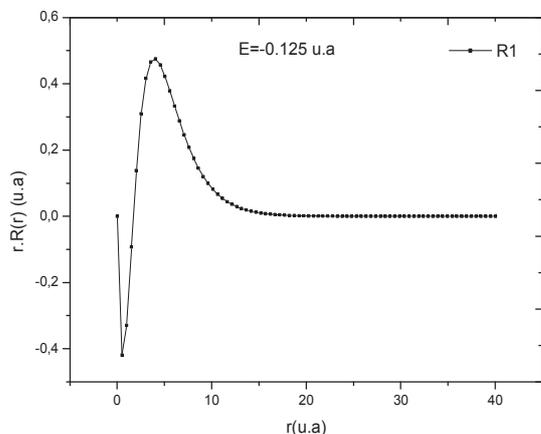


Figure. 20 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

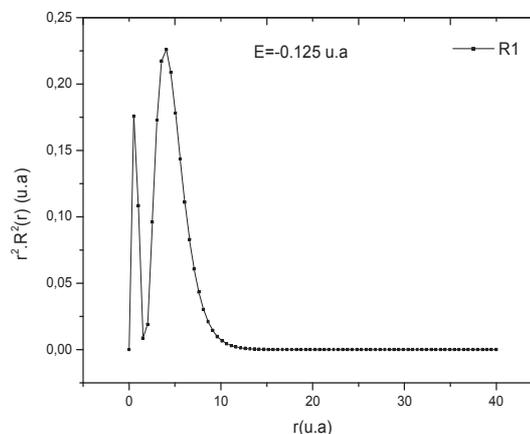


Figure. 21 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

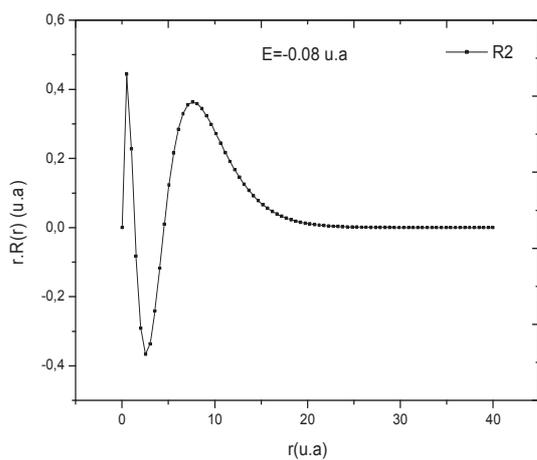


Figure. 22 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

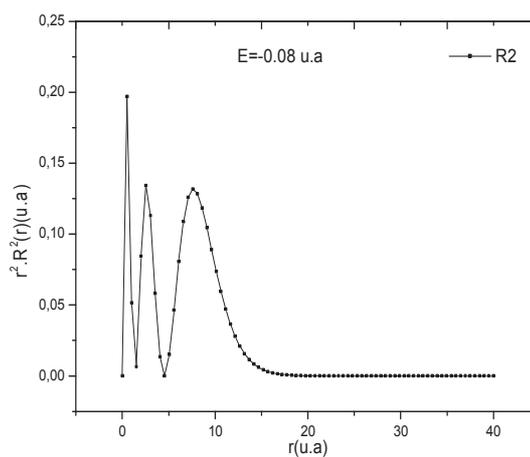


Figure. 23 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

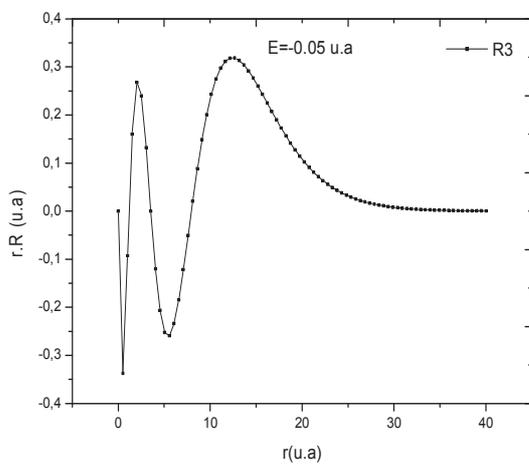


Figure. 24 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

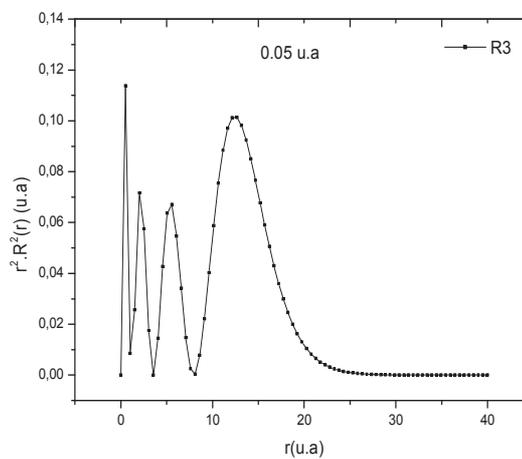


Figure. 25 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

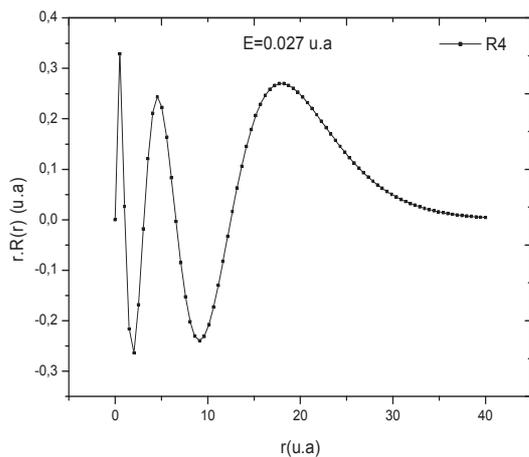


Figure. 26 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

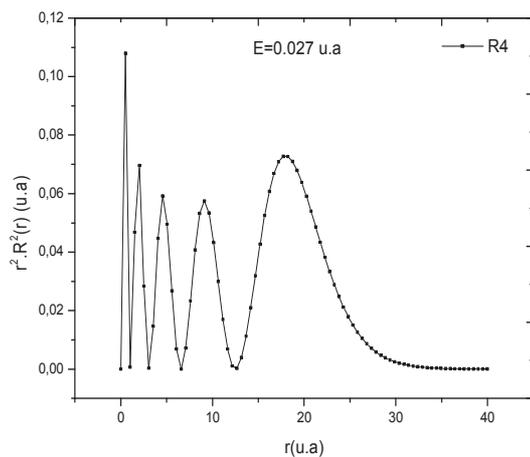


Figure. 27 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

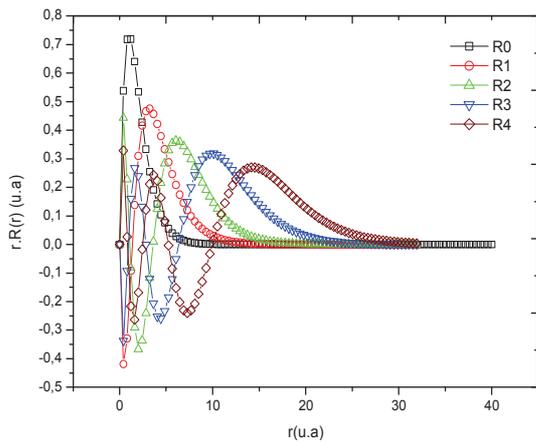


Figure. 28 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

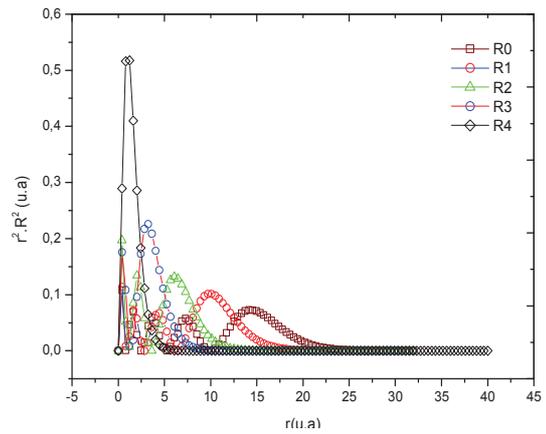


Figure. 29 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

La même procédure d'orthogonalisation est utilisée (figure. 30-35), dans un deuxième temps, pour discrétiser le continuum proche du seuil d'ionisation de l'atome cible mais cette fois ci sur la base des fonctions d'onde exactes de l'hydrogène atomique.

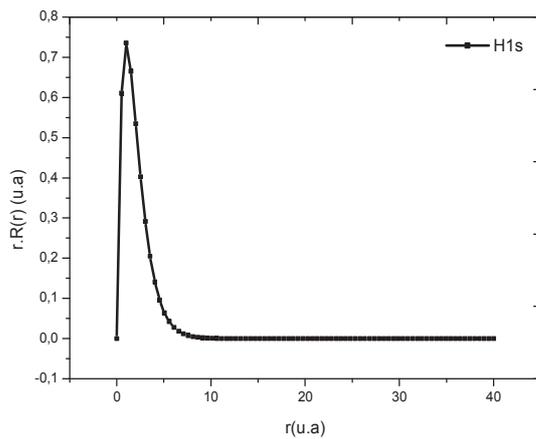


Figure. 30 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

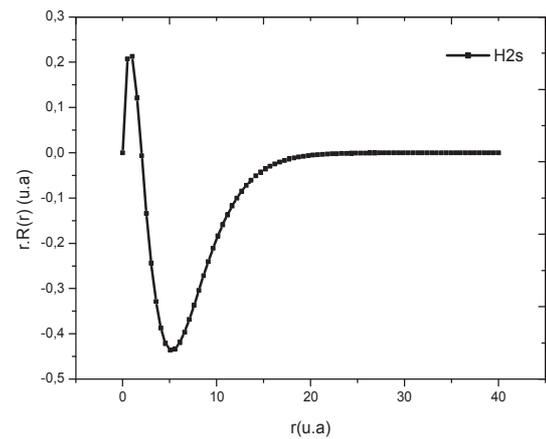


Figure. 31 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

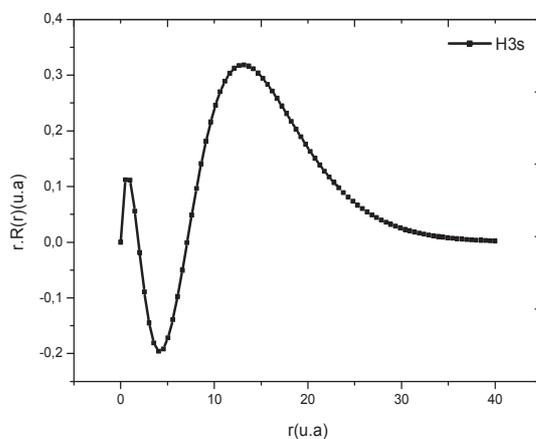


Figure. 32 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

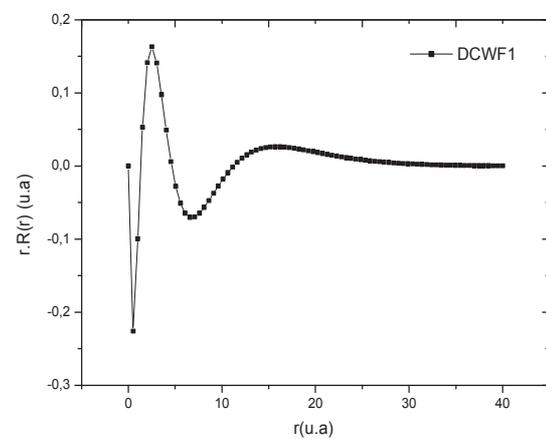


Figure. 33 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

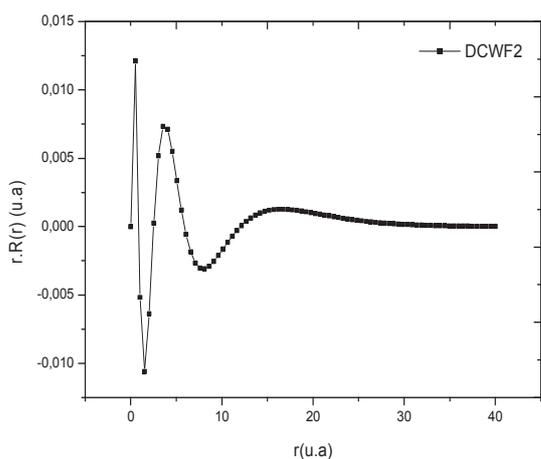


Figure. 34 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

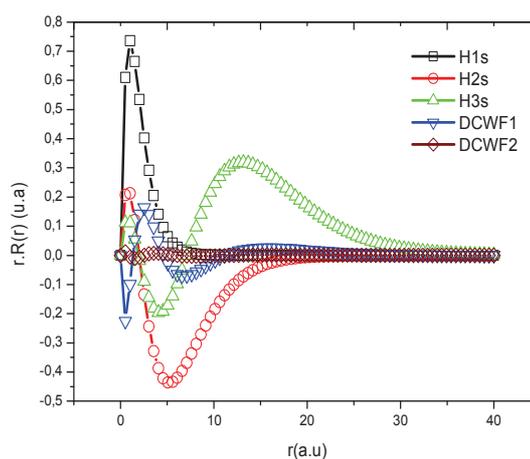


Figure. 35 Fonction d'onde radiale de Callaway et Unnikrishnan

Les pseudos-états issus de la discrétisation par la procédure d'orthonormalisation de Gram-Schmidt sur l'ensemble complet des fonctions de Callaway et Unnikrishnan de type Slater sont utilisés pour estimer la contribution du continuum (CalGram, figure. 36-38) dans les sections efficaces d'excitation de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires. Dans la figure 36, sont illustrées les sections efficaces d'excitation à l'état 2s issues de la discrétisation d'une fonction d'onde du continuum sur l'ensemble complet des fonctions d'onde quasi exactes de Callaway et Unnikrishnan de type Slater. Les sections efficaces de la figure 36, montrent une nette amélioration par rapport aux sections efficaces issues d'un développement sur l'ensemble des fonctions de type Laguerre(HPolyn) sur la même figure 36.

Dans la figure 38, nous avons reproduit les mêmes sections efficaces (CalGram) de la figure 36 pour les confronter avec les sections efficaces (HGram) de la figure 37, issues d'une procédure de discrétisation par orthonormalisation de Gram-Schmidt sur un ensemble complet des fonctions d'ondes exactes de l'atome hydrogène. Les sections efficaces (HGram) illustrés dans la figure 37, semblent encore plus améliorées tant par rapport aux sections efficaces (HPolyn) illustrées sur la même figure 37, que les sections efficaces (CalGram) illustrées sur les figure 36 et 38. Ces résultats nous semblent assez raisonnables dans la mesure où, dans les sections efficaces d'excitation de la cible hydrogène (HGram) par impact de proton, est comptabilisée la contribution de deux états du continuum de la cible développées sur les états exacts de l'atome hydrogène au lieu d'un seul état du continuum de la cible développé sur les états quasi exacts de Callaway et Unnikrishnan de type Slater.

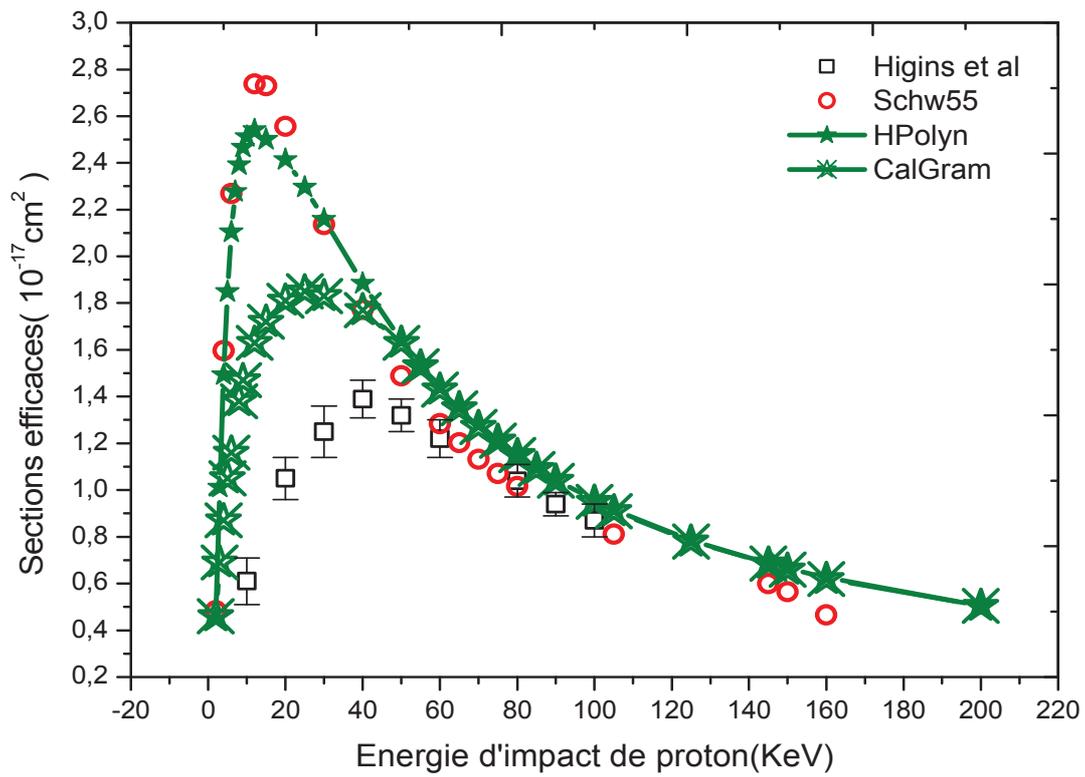


Figure. 36 Sections efficaces d'excitation à l'état 2s de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

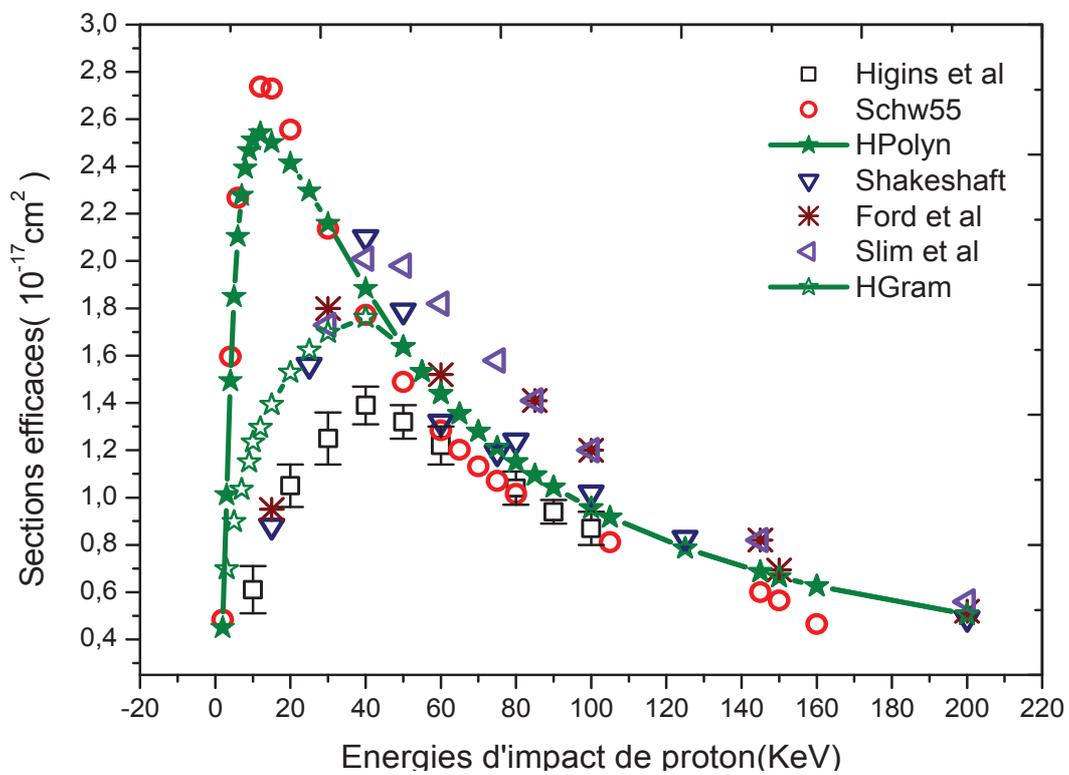


Figure. 37 Sections efficaces d'excitation à l'état 2s de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Energie (KeV)	Higgins et al	Erreur	Schw55	HPolyn	HGram	CalGram	Shakeshaft	Ford et al	Slim et al
2	--	--	0,48334	0,45024		0,46	--	--	
3	--	--	--	1,01142	0,69803	0,69	--	--	
4	--	--	1,5966	1,49292	--	0,87	--	--	
5	--	--	--	1,84907	0,89795	1,05	--	--	--
6	--	--	2,268	2,10386	--	1,16	--	--	--
7	--	--	--	2,277	1,03445	--	--	--	--
8	--	--	--	2,39213	--	1,38	--	--	--
9	--	--	--	2,46677	1,15007	1,47	--	--	--
10	0,61	0,1	--	2,51179	1,23438	--	--	--	--
12	--	--	2,7372	2,54212	1,29525	1,63	--	--	--
15		--	2,7294	2,50037	1,39255	1,72	0,88	0,95	--
20	1,05	0,09	2,5562	2,41375	1,52905	1,81	--	--	--
25		--	--	2,29572	1,62319	1,85	1,56	--	--
30	1,25	0,11	2,136	2,15816	1,69766	1,83	--	1,8	1,73
40	1,39	0,08	1,7724	1,88372	1,76116	1,77	2,1	--	2,01
50	1,32	0,07	1,4886	1,6378	1,6378	1,63	1,79	--	1,98
55		--	--	1,53224	1,53224	1,53	--	--	--
60	1,22	0,08	1,284	1,43819	1,43819	1,43	1,32	1,52	1,82
65		--	1,2025	1,35438	1,35438	1,35	--	--	--
70	--	0,07	1,1317	1,27917	1,27917	1,27	--	--	--
75		--	1,0706	1,21133	1,21133	1,21133	1,19	--	1,58
80	1,04	0,07	1,0155	1,15035	1,15035	1,15	1,24	--	--
85		--	--	1,09498	1,09498	1,09	--	1,41	1,41
90	0,94	0,05	--	1,04443	1,04443	1,04	--	--	--
100	0,87	0,07	--	0,95551	0,95551	0,95	1,02	1,2	1,2
105			0,81158	0,91616	0,91616	0,91	--	--	--
125			--	0,78539	0,78539	0,78	0,829	--	--
145			0,60014	0,68571	0,68571	0,68571	--	0,82	0,82
150			0,56464	0,66443	0,66443	0,66	--	0,694	--
160			0,46544	0,62543	0,62543	0,62	--	--	--
200				0,50517	0,50517	0,50517	0,49	0,519	0,56

Tableau 10 Sections efficaces totales d'excitation à l'état 2s de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires dans l'unité 10^{-17} cm^2

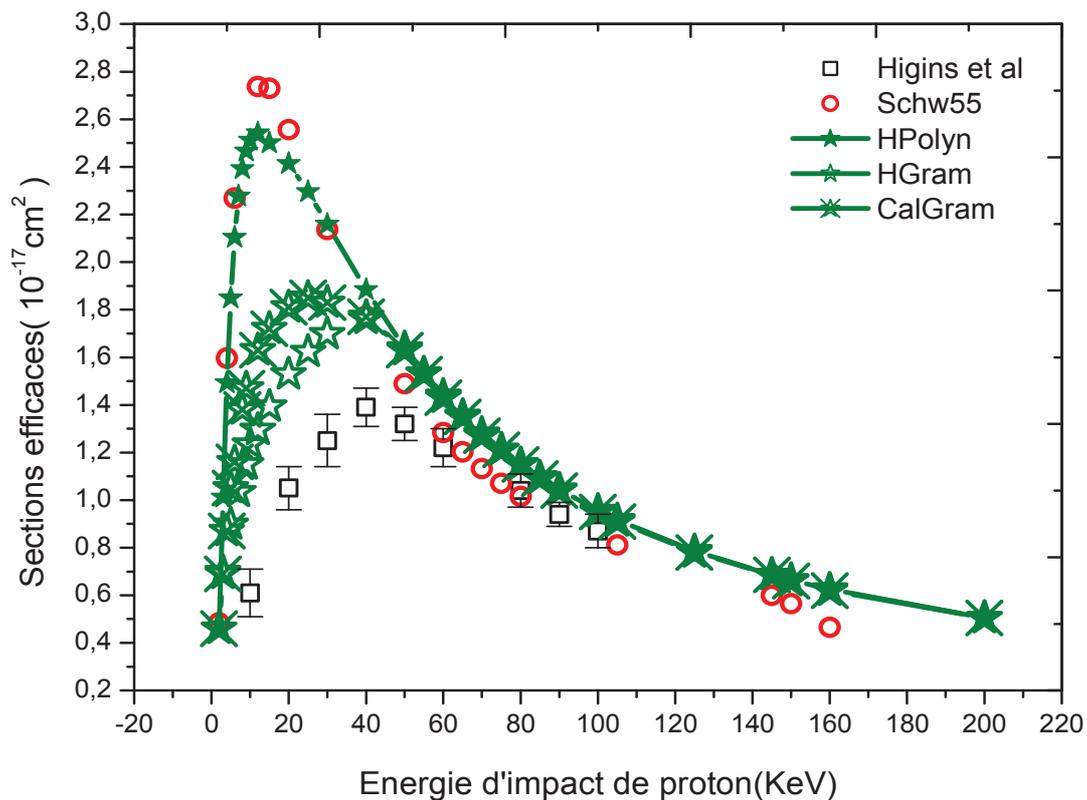


Figure. 38 Sections efficaces d'excitation à l'état 2s de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies intermédiaires

Dans l'ensemble des figures 9, 36, 37 et 38, la contribution du pseudo-continuum d'états de la cible, pas très loin du seuil d'ionisation, dans les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires semble être incontournable. La contribution du pseudo-état noté ($3s$) dans les sections efficaces (HPolyn [55]) de la figure 35 peut être évaluée jusqu'à 10% par rapport aux sections efficaces d'excitation à l'état exact 2s de l'atome hydrogène depuis son état fondamental. La contribution du pseudo-état (R4) de la figure 17, d'énergie positive, dans les sections efficaces d'excitation (CalGram [56], figure 36) de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires est estimé jusqu'à 32% par rapport aux sections efficaces d'excitation à l'état exact 2s. Par contre la contribution des deux pseudo-états DCWF1 et DCWF2, des figures 24 et 25 respectivement, dans les sections efficaces d'excitation (HGram [57], figure 37) de l'atome hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires peut être estimé autour 36% par rapport aux sections efficaces d'excitation à l'état exact 2s.

VII.4 Conclusion

Des processus multiples peuvent avoir lieu lors d'une collision ion-atome ou ion-ion multichargé. Dans une collision proton-atome d'hydrogène, les processus d'excitation, d'ionisation et de capture électronique sont des plus probables dans la gamme des énergies intermédiaires. Dans une telle collision, qualifiée d'élémentaire mais d'intérêt fondamental pour tester les différents modèles, le processus de capture électronique sur le projectile domine dans la gamme des énergies basses alors que l'ionisation simple l'emporte dans la gamme des énergies hautes. Cependant, l'excitation par impact de proton, depuis l'état fondamental à des états supérieurs est plutôt favorisée à des énergies autour de 60KeV pour une cible hydrogène.

Les trois processus, semblent avoir chacun une contribution compétitive avec les autres processus en général. En effet, pour des énergies inférieures à 60KeV par exemple, le processus de capture électronique sur le projectile devient de plus en plus favorable lorsque l'on se dirige de droite à gauche à partir du pic de 60KeV vers les énergies les plus basses jusqu'à 2KeV. En revanche, c'est l'excitation qui devient de plus en plus probable en se dirigeant de gauche à droite à partir de 2KeV vers le pic de 60KeV. La contribution des deux voies de capture et d'excitation simultanément ouverte lors du processus de collision est due principalement à l'existence d'un couplage entre états du continuum de la cible et des états intermédiaires d'un atome uni He^+ . Ce couplage qui peut être jugé par évaluation du recouvrement entre les états compétitive renseigne d'avantage sur la contribution du continuum de la cible dans les voies de sortie de la collision.

La contribution des états du continuum de la cible juste en dessus du seuil d'ionisation dans les sections efficaces d'excitation a fait le principal objectif de ce travail de thèse. Nous avons tenté dans un premier stade de représenter les états du continuum de la cible de manière adéquate. Les fonctions d'onde dont les énergies associées sont négatives doivent avoir au moins un comportement semblable à celui des trois premiers états exacts de l'atome d'hydrogène. Ce critère de choix des fonctions d'onde étant rempli sur la base d'un test Numerov, nous avons procédé par une discrétisation Gram-Schmidt des états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible sur un ensemble complet de fonctions L^2 engendré par les états exacts orthonormés ou quasi exacts préalablement orthonormalisée par la même procédure. La base ainsi obtenue peut être élargie d'avantage pour couvrir un ensemble complet plus vaste contenant les états discrets exacts ou quasi exacts et les pseudo-états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible.

Dans ce manuscrit, nous nous sommes contentés des trois premiers états exacts ou quasi exacts et de deux pseudo-états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible. Les résultats obtenus sur les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires étaient satisfaisants. Nous avons utilisé le principe variationnel de Schwinger dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact pour évaluer les sections efficaces. Aucune difficulté n'a été rencontrée dans l'insertion du continuum qui a été rendu possible à l'aide d'une formulation eikonale fractionnaire souple du principe variationnel de Schwinger et des propriétés d'orthonormalisation des états exacts et/ou quasi exacts et pseudo-états de la cible. Aucun commentaire sur la convergence remarquable des sections efficaces sauf pour le cas des fonctions de type Laguerre et la matrice J associée qui a demandé un soin particulier dans le choix du facteur d'échelle λ et par conséquent l'énergie adéquate associée.

L'accélération de la convergence dans le cas des fonctions L^2 de types Laguerre est possible si un critère de choix optimal automatisé est incorporé dans la procédure de calcul. Une sélection aléatoire peut être aussi envisagée si on aura recours aux algorithmes de randomisation existant dans les bibliothèques de programmation Fortran par exemple. Cependant, une procédure de randomisation consolidée par une sélection optimale est toujours souhaitable. L'ensemble complet des fonctions L^2 de type Slater peut être éventuellement élargi pour contenir un nombre suffisant d'états et de pseudo-états de moment orbital non nul.

Bibliographie

- [1] E. Heller et H. Yamani, *Phys. Rev. A* **9** (1974) 1201
- [2] E. Heller et H. Yamani, *Phys. Rev. A* **9** (1974) 1209
- [3] H. A. Yamani et L. Fishman, *J. Math. Phys.* **16** (1975) 410
- [4] Yamani et W. P. Reinhardt, *Phys. Rev. A* **11** (1975) 1144
- [5] A.D. Alhaidari, H. Bahlouli, M.S. Abdelmonem, F. Al-Ameen, T. Al-Abdulaal, *Phys. Lett. A* **364**(2007) 372-377
- [6] H. A. Yamani, M. S. Abdelmonem et A. D. Alhaidari, *Phys. Rev. A* **62** (2000) 052103
- [7] H. A. Yamani et M. S. Abdelmonem, *J. Phys.* **B30** (1997) 1633
- [8] D. Alhaidari, *Ann. Phys.* **317** (2005) 152-174
- [9] M. E. H. Ismail et E. Koelink, *Adv. in Appl. Math.* **46** (2010) 379-395
- [10] G. Arfken, *Mathematical Method for Physicists*, Academic Press, New York (1985).
- [11] B. H. Bransden, C. J. Joachain, *Physics of atoms and molecules*, Longman Scientific & Technical, England (1983).
- [12] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, Pergamon Press (1977).
- [13] A.T. Stelbovics, et T. Winata, *Aust. J. Phys.* **43** (1990) 485.
- [14] T. Winata, *Application of L^2 Methods in Atomic Scattering*, Ph.D. thesis, Murdoch University, Australia (1991).
- [15] B. H. Bransden et M. R. C. McDowell, *Phys. Lett.* **30C** (1977) 207
- [16] J. Callaway et K. Unnikrishnan, *Phys. Rev. A* **48** (1993) 4292.
- [17] J. Callaway et J. W. Wooten, *Phys. Rev. A* **9** (1974) 1924.
- [18] J. Callaway et J. W. Wooten, *Phys. Rev. A* **11** (1975) 1118.
- [19] J. Callaway et J. F. Williams, *Phys. Rev. A* **12** (1975) 2312.
- [20] J. Callaway, M. R. C. McDowell et L. A. Morgan, *J. Phys.* **B8** (1975) 218.
- [21] J. Stoer et R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag (1993)
- [22] G. H. Golub et C. F. Van Loan, *Matrix Computation*, Johns Hopkins university Press (1996)
- [23] P. G. Burke et J. F. B. Mitchell, *J. Phys.* **B6** (1973) 320
- [24] P. G. Burke et T. G. Webb, *J. Phys.* **B3** (1970) L13
- [25] M. Abramowitz et I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Function*, National Bureau of Standards (1970)
- [26] T. Pang, *An Introduction to Computational Physics*, Cambridge University Press, New York (2006)

- [27] M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* 146 (2002) 225-249
- [28] M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* 146 (2002) 254-260
- [29] J. Thijssen, *Computational Physics*, Cambridge University Press (2007)
- [30] J. L. D. Garret et M. A. S. Lozano, *Comput. Phys. Commun.* 180(2009)768
- [31] J. P. Leroy et R. Wallace, *Journal of Computational Physics* **67** (1986) 239-252
- [32] M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état, Université de Bordeaux-I (1988)
- [33] R. Gayet et M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **42** 515-522 (1989)
- [34] Guseinov, *J. Mol. Struct. (Theochem)* 593 (2002) 65
- [35] S. M. Mekellech, Thèse de Doctorat es Science, Université de Tlemcen.
- [36] B. Lasri, Thèse de Doctorat es Science, Université de Tlemcen
- [37] L. Ford, J. F. Reading et K. A. Hall, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 4537 (1993)
- [38] H. A. Slim et A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** L203 (1994)
- [39] R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **18** 1930 (1978)
- [40] C. F. Barnett, Oak Ridge National Laboratory Report No 6086 (1990)
- [41] D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, et K-H Schartner, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994) 4195
- [42] D P Higgins, J Geddes et H B Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** (1996) 1219
- [43] Wilets et Gallaher, *Phys. Rev.*, **147**(1966) 13-20
- [44] Gallaher et Wilets, *Phys. Rev.*, **169** (1968) 139-149
- [45] M. Cheshire, *J. Phys. B.* **1**(1968) 428-437
- [46] M. Cheshire, D F Gallaher et A J Taylor, *J. Phys. B.* **3**(1970)813-832
- [47] D. G. M. Anderson, M. J. Antal et M B McElroy, *J. Phys. B.* **7** (1974) L118
- [48] M. J. Antal, M B McElroy et D G M Anderson, *J. Phys. B.* **8** (1975) 1513
- [49] M. McCartney et D S F Crothers, *J Phys B* **27**(1994) L485-L488
- [50] M. McCartney et D S F Crothers, *J Phys B* **26**(1993) 4561
- [51] N. Toshima, *Phys. Rev. A* **42** (1990) 5739
- [52] D. Belkic, R. Gayet et A. Salin, *Phys. Rep.* **56**(1979) 279
- [53] D S F Crothers et L J Dubé, *Adv At Mol Opt Phys* **30**(1993) 287
- [54] L H Thomas, *Proc. R. Soc. A* **114**(1927)561
- [55] A. Bouserhane et M. Bouamoud, *Int. Rev. Phys. (I. RE. PHY)*, 2(2013) 223
- [56] A. Bouserhane et M. Bouamoud, *J. S. R.*, Vol. 1, N. 4(2012) p. 3-6
- [57] A. Bouserhane et M. Bouamoud, *Can. J. Phys.* (article soumis, en cours de révision)

CONCLUSION GENERALE

Des éléments de la théorie des collisions ont été évoqués au début de ce manuscrit. Nous avons défini le régime des vitesses et les différents processus de collision les plus probables dans ce régime. Nous avons utilisé les équations intégrales de Lippmann-Schwinger en termes de fonctions de Green et puis nous avons défini les éléments de matrice de transition. Ce choix nous a offert le privilège d'un accès direct aux sections efficaces en termes d'éléments de matrice de transition qui nous ont servi par la suite dans l'extraction de l'information sur les processus de collisions.

Dans la suite, nous avons discuté de deux approximations habituellement utilisées dans les problèmes de diffusion. Nous avons discuté de l'approximation de Born au premier et deuxième ordre ainsi que l'approximation de Born des ondes planes (PWBA). Nous avons défini la matrice de transition et les éléments de matrice correspondent. L'amplitude de diffusion a été déduite de la matrice de transition par la fameuse transformé de Fourier et l'accès à l'amplitude de diffusion a été rendu facile par des simplifications apportées par les propriétés de symétries des éléments S_j de Wigner.

Dans une troisième partie, nous avons discuté des principes variationnels depuis le fondement de la théorie quantique avec Schrödinger jusqu'au principe variationnel de Schwinger utilisé pour les calculs sur les états liés et les états de diffusion. Nous avons montré l'efficacité des méthodes variationnelle dans la résolution des équations intégrales de type Fredholm et nous avons pu constater le lien étroit entre équations de Lippmann-Schwinger et les équations intégrales de type Fredholm.

Dans une quatrième partie, comme application, nous avons suivi une stratégie de calcul développée par notre groupe. Nous avons utilisé le principe variationnel de Schwinger eikonal sous forme fractionnaire pour évaluer les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires. Les amplitudes de transition entre états discrets de la cible ont été évaluées en premier. Ces grandeurs vitales nous ont permis par la suite un accès direct aux sections efficaces d'excitation dans la gamme des énergies qui nous intéresse.

Les transitions entre états liés et états du continuum de la cible n'ont pas été directement recherchées dans ce manuscrit. Le continuum proche du seuil d'ionisation a été représenté en premier par des pseudo-états de la cible avec les énergies positives appropriées. Ces pseudo-états ont été discrétisés par la suite sur la base d'un ensemble complet de fonctions L^2 de carrés sommables. L'ensemble des fonctions de carrés sommables choisi été soit l'ensemble

orthonormé des fonctions hydrogénoïdes soit l'ensemble des fonctions L^2 de type Slater orthonormalisée par la procédure de Gram-Schmidt.

Dans une autre alternative, nous avons vu qu'il est possible de trouver une représentation adéquate du continuum d'état de la cible. Nous avons suivi une stratégie élaborée dans le cadre de la méthode de la matrice J et par suite nous avons pu discrétiser le continuum sur la base des fonctions de carrés sommables issus d'une diagonalisation de la matrice Hamiltonien préalablement mise sous forme tridiagonale par la même stratégie.

Il s'est avéré que les éléments de la diagonale génèrent les énergies exactes de la cible avec les fonctions propres associées. Ces fonctions propres étant de type Laguerre orthonormées, elles constituent la base sur laquelle ont été développées les fonctions d'onde dont les énergies propres sont positives et qui sont issus des éléments hors diagonale de la matrice J .

Les trois processus discutés dans ce manuscrit, à savoir, le processus d'excitation des états de la cible, le processus de capture électronique sur des états d'un atome uni He^+ et le processus de capture sur les états du projectile via ionisation de la cible, semblent avoir chacun une contribution compétitive avec les autres processus pour des énergies inférieures à 60KeV en général. La contribution des deux voies de capture et d'excitation simultanément ouverte lors du processus de collision est due principalement à l'existence d'un couplage aussi bien entre états du continuum de la cible et des états intermédiaires d'un atome uni He^+ qu'entre états du continuum de la cible et états de capture sur le projectile. Ce couplage qui peut être jugé par évaluation du recouvrement entre les états compétitive renseigne d'avantage sur la contribution du continuum de la cible dans les voies de sortie de la collision.

La contribution des états du continuum de la cible juste en dessus du seuil d'ionisation dans les sections efficaces d'excitation a fait le principal objectif de ce travail de thèse. Nous avons tenté dans un premier stade de représenter les états du continuum de la cible de manière adéquate. Les fonctions d'onde dont les énergies associées sont négatives doivent avoir au moins un comportement semblable à celui des trois premiers états exacts de l'atome d'hydrogène. A cette fin, nous avons utilisé trois alternatives. Nous avons utilisé les fonctions hydrogénoïdes, les fonctions de type Laguerre ainsi que les fonctions de type Slater. Ce critère de choix des fonctions d'onde étant rempli sur la base d'un test Numerov, en particulier pour les fonctions de type Slater, nous avons procédé par une discrétisation Gram-Schmidt des états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible sur un ensemble complet de fonctions L^2 engendré par les états exacts orthonormés ou quasi exacts préalablement

orthonormalisée par la même procédure. La base ainsi obtenue peut être élargie d'avantage pour couvrir un ensemble complet plus vaste contenant les états discrets exacts ou quasi exacts et les pseudo-états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible.

Dans ce manuscrit, nous nous sommes contentés des trois premiers états exacts ou quasi exacts et de deux pseudo-états du continuum proche du seuil d'ionisation de la cible. Les résultats obtenus sur les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires étaient satisfaisants. Nous avons utilisé le principe variationnel de Schwinger dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact pour évaluer les sections efficaces. Aucune difficulté n'a été rencontrée dans l'insertion du continuum qui a été rendu possible à l'aide d'une formulation eikonale fractionnaire souple du principe variationnel de Schwinger et des propriétés d'orthonormalisation des états exacts et/ou quasi exacts et pseudo-états de la cible. Aucun commentaire sur la convergence remarquable des sections efficaces sauf pour le cas des fonctions de type Laguerre et la matrice J associée qui demandent un soin particulier dans le choix du facteur d'échelle λ et par conséquent l'énergie adéquate associée.

L'accélération de la convergence dans le cas des fonctions L^2 de types Laguerre est possible si un critère de choix optimal automatisé est incorporé dans la procédure de calcul. Une sélection aléatoire peut être aussi envisagée si on aura recours aux algorithmes de randomisation existant dans les bibliothèques de programmation Fortran par exemple. Cependant, une procédure de randomisation consolidée par une sélection optimale est toujours souhaitable. L'ensemble complet des fonctions L^2 de type Slater peut être éventuellement élargi pour contenir un nombre suffisant d'états et de pseudo-états de moment orbital non nul.

ANNEXES

Calcul des éléments $W_{ij}(\vec{R})$

Les éléments $W_{ij}(\vec{R})$ nécessaires pour l'évaluation des amplitudes de transitions eikonale de Born à l'ordre 1 et 2 sont donnés par la relation :

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

Dans ces éléments figure le potentiel effectif :

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

Les fonctions hydrogénoïde $\varphi_i^*(\vec{x})$ et $\varphi_j(\vec{x})$ données, d'une façon générale par :

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

telle que :

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

où :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$I(\vec{R}) = \int d\vec{x} \varphi_i^*(\vec{x}) \frac{1}{|\vec{R}-\vec{x}|} \varphi_c(\vec{x}) \quad \text{AI.4b}$$

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

ANNEXE A-I

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

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

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

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

où J est une intégrale bien connue :

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

qui est égale à :

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

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

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

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

$$m = m_i - m_j \quad \text{AI.6c}$$

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

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

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

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

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

Avec

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

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

ANNEXE A-I

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

Pour $l \neq 0$, nous obtenons :

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

L'intégrale sur x conduit aux intégrales suivantes :

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

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

où N est défini comme :

$$N = N_0 + l \quad \text{AI.9c}$$

L'équation (AII.8) devient alors :

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

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

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

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

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

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 soit paires, soit impaires et la somme sur m à un seul terme ($m = m_i - m_j$).

On aura alors, à partir de (AII.4a) :

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

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

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

ANNEXE A-I

Avec :

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

$$l_{\min} = \sup[|l_i - l_j|, |m_i - m_j|] \quad \text{AI.12d}$$

$$l_{\max} = l_i + l_j \quad \text{AI.12e}$$

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

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

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 :

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

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

Il vient alors :

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

Soit :

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

Où :

$$m = m_j - m_i \quad \text{AI.13e}$$

De 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 : $\langle k | \Theta | k' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \langle k | \Theta | k' \rangle$ ainsi que la relation (III.37) :

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

Où encore :

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

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

On aura donc

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

qui s'écrit encore :

ANNEXE A-I

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

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

En termes de fonctions gamma complète et incomplète les intégrales radiales $I(\vec{R})$ nécessaires pour l'évaluation des éléments W_{ij} s'écrivent :

$$I(\vec{R}) = \frac{1}{\alpha_{ij}^{N_{R^{l+1}}}} \gamma(N, \alpha_{ij}R) + \frac{R^l}{\alpha_{ij}^{N-2(l+1)}} \Gamma(N-2l-1, \alpha_{ij}R) \quad \text{AI.15a}$$

Avec les fonctions spéciales (Abramovitz&Stegun)

$$\gamma(N, \alpha_{ij}R) = P(N, \alpha_{ij}R) \Gamma(N) \quad \text{AI.15b}$$

et

$$\Gamma(N-2l-1, \alpha_{ij}R) = \Gamma(N-2l-1) Q(N-2l-1, \alpha_{ij}R) \quad \text{AI.15c}$$

On aboutit à l'expression

$$I(\vec{R}) = \frac{1}{\alpha_{ij}^{N_{R^{l+1}}}} \Gamma(N) P(N, \alpha_{ij}R) + \frac{R^l}{\alpha_{ij}^{N-2l-1}} \Gamma(N-2l-1) Q(N-2l-1, \alpha_{ij}R) \quad \text{AI.16a}$$

Moyennant les relations entre fonctions gamma incomplètes et intégrales exponentielles

$$Q(N-2l-1, \alpha_{ij}R) = e_{N-2l-2}(\alpha_{ij}R) e^{-\alpha_{ij}R} \quad \text{AI.16b}$$

$$P(N, \alpha_{ij}R) = 1 - e_{N-1}(\alpha_{ij}R) e^{-\alpha_{ij}R} \quad \text{AI.16c}$$

On peut réécrire l'intégrale (AI.16a) en termes d'intégrales exponentielles tabulés dans l'ouvrage de référence d'Abramovitz&Stegun :

$$I(\vec{R}) = \frac{(N-1)!}{\alpha_{ij}^{N_{R^{l+1}}}} \{1 - e_{N-1}(\alpha_{ij}R) e^{-\alpha_{ij}R}\} + \frac{R^l}{\alpha_{ij}^{N-2(l+1)}} \cdot (N-2l-2)! e_{N-2l-2}(\alpha_{ij}R) e^{-\alpha_{ij}R} \quad \text{AI.16d}$$

Quelques propriétés utiles des polynômes de Laguerre

- Relations de récurrence [Abramovitz et Stegun 1972, Szegő 1939] :

$$yL_n^{\alpha+1}(y) = (n + \alpha + 1)L_n^\alpha(y) - (n + 1)L_{n+1}^\alpha(y) \quad \text{AII.1}$$

$$yL_n^{\alpha+1}(y) = (n + \alpha)L_{n-1}^\alpha(y) - (n - y)L_n^\alpha(y) \quad \text{AII.2}$$

$$L_n^{\alpha-1}(y) = L_n^\alpha(y) - L_{n-1}^\alpha(y) \quad \text{AII.3}$$

$$(n + \alpha)L_n^{\alpha-1}(y) = (n + 1)L_{n+1}^\alpha(y) - (n + 1 - y)L_n^\alpha(y) \quad \text{AII.4}$$

- Relations d'orthogonalité [Magnus et al 1966] :

$$\int_0^\infty e^{-y} y^\alpha L_m^\alpha(y) L_n^\alpha(y) dy = \begin{cases} 0 & \text{pour } n \neq m \\ \Gamma(1 + \alpha) \begin{bmatrix} n + \alpha \\ n \end{bmatrix} & \text{pour } n = m \end{cases} \quad \text{AII.5}$$

- Formule de différentiation [Erdélyi et al 1953] :

$$\frac{d^m}{dx^m} [y^\alpha e^{-x} L_n^\alpha(y)] = \frac{\Gamma(m+n)}{\Gamma(n)} e^{-x} y^{\alpha-m} L_{n+m}^{\alpha-m}(y) \quad \text{AII.6}$$

- Equations différentielles [Szegő 1939] :

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0, \quad y = L_n^\alpha(x) \quad \text{AII.7}$$

$$xz'' + (x + 1)z' + \left(n + \frac{\alpha}{2} + 1 - \frac{\alpha^2}{x}\right)z = 0, \quad z = e^{-x} x^{\alpha/2} L_n^\alpha(x) \quad \text{AII.8}$$

Algorithme de Numerov

Soit l'équation différentielle ordinaire

$$u''(x) + q(x)u(x) = s(x) \quad \text{AIII.1}$$

Cette équation se réduit à l'équation de Schrödinger dans le cas où la fonction $s(x) = 0$ et $q(x) = 2(\varepsilon - V(x))$.

La procédure de Numerov consiste à prendre une grille de points régulièrement espacés par le pas h sur un intervalle où la solution est valable et correctement définie aux extrémités de l'intervalle. On exprime ensuite le dérivé d'ordre deux par une formulation récursive sur trois points successifs de la grille.

$$\Delta_2 = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} \quad \text{AIII.2}$$

En procédons par un développement de u_{i+1} et u_{i-1} à l'ordre quatre autour des valeurs de u_i et combinant les deux expressions approchées nous obtenons :

$$u_{i+1} + u_{i-1} = 2u_i + h^2 u_i'' + \frac{h^4}{12} u_i'''' + \mathbf{0}(h^6) \quad \text{AIII.3}$$

Ce qui conduit pour Δ_2 :

$$\frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{h^2} = u_i'' + \frac{h^2}{12} u_i'''' \quad \text{AIII.4}$$

Si bien qu'au point i de la grille de Numerov nous avons :

$$u_i'' = s_i - q_i u_i \quad \text{AIII.5}$$

De telle sorte qu'au quatrième ordre :

$$u'''' = \frac{d^2}{dx^2} (-q(x)u(x) + s(x)) \quad \text{AIII.6}$$

Sur les trois points successifs de la grille

$$u''''(x) = \frac{(s_{i+1} - q_{i+1}u_{i+1}) - 2(s_i - q_i u_i) + (s_{i-1} - q_{i-1}u_{i-1})}{h^2} \quad \text{AIII.7}$$

En combinaison avec l'équation (VII.4) et (VII.5) nous aboutissons à l'algorithme de Numerov (T. Pang, 2006):

$$C_{i+1}u_{i+1} + C_{i-1}u_{i-1} = C_i u_i + d_i + \mathbf{0}(h^6) \quad \text{AIII.8}$$

avec les coefficients :

$$C_{i+1} = 1 + \frac{h^2}{12} q_{i+1} \quad \text{AIII.9}$$

ANNEXE A-III

$$C_{i-1} = 1 + \frac{h^2}{12} q_{i-1} \quad \text{AIII.10}$$

$$C_i = 2 - \frac{5}{6} h^2 q_i \quad \text{AIII.11}$$

$$d_i = \frac{h^2}{12} (s_{i+1} + 10s_i + s_{i-1}) \quad \text{AIII.12}$$

Méthode d'orthogonalisation de Gram-Schmidt

Considérons trois ensembles de fonctions (vecteurs d'états) :

- 1- $\{u_n\}$ un ensemble de fonctions linéairement indépendants, non orthogonales et non normalisées.
- 2- $\{\psi_n\}$ un ensemble de fonctions à construire, linéairement indépendants, orthogonales mais non normalisées.
- 3- $\{\varphi_n\}$ un ensemble de fonctions constitué des ψ_n normalisées.

La procédure d'orthogonalisation de Gram-Schmidt (G. Arfken) consiste à :

- 1- Initialiser les séquences de Gram-Schmidt en posant $\psi_0 = 0$ pour $n = 0$.
- 2- Construire le premier élément de la base orthonormée en normalisant ψ_0 par :

$$\varphi_0 = \psi_0 / \sqrt{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \quad \text{AIV.1}$$

- 3- Ecrire $\psi_1 = u_1 + a_{10}\varphi_0$ pour $n = 1$ en exigeant à ψ_1 d'être orthogonal à φ_0 .

C'est-à-dire

$$\langle \psi_1 | \varphi_0 \rangle = 0 \quad \text{AIV.2}$$

Ou encore

$$\langle u_1 | \varphi_0 \rangle + a_{10} \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle = 0 \quad \text{AIV.3}$$

Ce qui nous permet d'écrire le coefficient $a_{10} = -\langle u_1 | \varphi_0 \rangle$ pour un φ_0 normalisé à l'unité.

- 4- Construire le deuxième élément de la base orthonormée en normalisant ψ_1 par :

$$\varphi_1 = \psi_1 / \sqrt{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} \quad \text{AIV.4}$$

- 5- Généraliser les séquences de Gram-Schmidt sans risque de perte d'orthogonalité pour un nombre limité d'éléments de la base en faisant :

$$\varphi_i = \psi_i / \sqrt{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} \quad \text{AIV.5}$$

et

$$\psi_i = u_i + \sum_{j=0}^{i-1} a_{ij} \varphi_j \quad \text{AIV.6}$$

En écrivant les coefficients $a_{ij} = -\langle u_i | \varphi_j \rangle$, les φ_i vont constituer les fonctions (vecteurs d'état) de la nouvelle base orthonormée par construction.

Méthode de Newton-Raphson

La méthode de Newton-Raphson pour la recherche du zéro d'une fonction est basée sur une approximation linéaire d'une fonction lisse $f(x)$ autour d'une racine x_r .

Autour de x_r , le développement de Taylor de $f(x_r) = 0$ s'écrit :

$$f(x_r) \cong f(x) + (x_r - x)f'(x) + \dots = 0 \quad \text{AV.1}$$

La valeur de x peut être considérée comme une valeur test de x_r dans la $k^{\text{ième}}$ étape et la valeur de x dans l'étape suivante peut être déduite de l'expression :

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + (x_{k+1} - x_k)f'(x_k) = 0 \quad \text{AV.2}$$

Ce qui amène à écrire :

$$x_{k+1} = x_k + \Delta x = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad \text{AV.3}$$

Le nombre d'itération est augmenté jusqu'à obtenir une meilleure valeur de x qui annule $f(x)$.

Méthode d'intégration numérique de Simpson

Dans la méthode de Simpson (F. Jędrzejewski), (J. Stoer et R. Bulirsch), (T. Pang), la fonction f est remplacée par un polynôme du second degré définissant un arc de parabole passant par les points d'ordonnées $f(x_i)$, $f(x_{i+1})$ et $f(x_{i+2})$.

La quadrature de Simpson s'écrit

$$\int_a^b f(x) dx \cong \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{6} (x_{i+1} - x_i) \left(f(x_{i+1}) + f(x_i) + 4f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right) \right) \quad \text{AVI.1}$$

Pour une subdivision dans sa forme la plus simple où l'on a $x_0 = a$, $x_1 = \frac{a+b}{2}$ et $x_2 = b$ la quadrature numérique de Simpson s'écrit

$$\int_a^b f(x) dx \cong \frac{1}{3} (b - a) \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) \quad \text{AVI.2}$$

La méthode de Simpson est une méthode d'ordre 4. L'erreur dans la méthode de Simpson est donnée par

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S \right| \leq \frac{1}{2880} \frac{(b-a)^5}{n^4} \sup_{x \in [a,b]} |f^{(5)}(x)| \quad \text{AVI.3}$$

La quadrature numérique de Simpson qui approche l'intégrale de $f(x)$ s'écrit

$$S = \frac{h}{2} \sum_{i=0}^{n-1} f(a + ih) + f(a + (i + 1)h) + 4f\left(a + ih + \frac{h}{2}\right) \quad \text{AVI.4}$$

Avec le pas de discrétisation

$$h = \frac{b-a}{n-1} \quad \text{AVI.5}$$

PUBLICATIONS

Excitation Cross Section within Schwinger Variational Principal and Pseudo State Method in a Set of Slater Type Functions

Adnane Bouserhane¹, Mammar Bouamoud²

Abstract – We use Schwinger variational principle to evaluate excitation cross section of atomic hydrogen by proton impact at energy range between 2keV and 200keV. Contribution of the continuum near ionization threshold was introduced in a model using L^2 method developed in a pseudo-space spanned by a set of Slater type functions. Our results were compared with those of Bouamoud (1988-1989) using 1s, 2s and 2p state of hydrogen atom. **Copyright** © 2013 **Praise Worthy Prize S.r.l. - All rights reserved.**

Keywords: Schwinger Variational Principal, Excitation Cross Section, Pseudo State Method

Nomenclature

$ \alpha\rangle$	Initial state in the incoming channel
$ \beta\rangle$	Final state in the outgoing channel
G_T^+	Outgoing Green's function
G_T^-	Incoming Green's function
$V(z)$	Coulomb potential
\vec{z}	Direction of incidence
\vec{R}	Distance projectile-target core
$\vec{\rho}$	Impact parameter
$\vec{\vartheta}$	Collision velocity
$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$	Transition amplitude
A_{nj}	Pseudo state expansion coefficient

I. Introduction

Interaction process discussed for simple systems attracted a great deal of interest on behalf theorists [1]-[6] and experimentalists [7]-[11].

Theoretical approximation methods and techniques (references cited above) were designed and developed in this regard and calculations compared with measurements directly accessible by the experience have always been the evidence on the reliability and efficiency of advanced models. Among these techniques and approximation methods, the Schwinger variational principle is an extremely powerful tool in estimation of cross sections and parameters associated.

This principle has always motivated the theoretical physics group of Bouamoud [4], [5], [6] and it is in this same way that we want, through this work, make our contribution in the calculation and estimation on the hydrogenic ion-atom interaction process by including, in a later part, the continuum discretized on a set of the target states and pseudo-states. To be, in the first part, we apply the Schwinger variational principle to estimate excitation cross sections of atomic hydrogen by proton impact at intermediate energy.

Variational transition matrix elements are developed first. It should be noted however, that the main contribution to the considered transition occurs at small angle (the forward scattering) for a collision of type $H^+ - H$ within an energy range of 50keV [12]. In such a situation, the projectile describes a straight line trajectory and therefore we can treat the problem within the eikonal approximation [13]. We wish to point out that in the majority of this part, we imitate the assumptions and developments advanced by our group [4], [5], [6] and that in this work, it is the atomic unit which was adopted except in explicit mention.

II. Method and Theory

II.1. Schwinger Variational Transition Amplitude

In the impact parameter method where the nuclei are assumed to move in a straight line, scattering states $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ and $|\psi_\beta^-(z)\rangle$, eigenvectors of the total Hamiltonian of the system, will meet respectively outgoing and incoming wave conditions in the \vec{z} direction. Scattering states that are solutions of the Schrödinger equation within the impact parameters approximation method are determined systematically by the eikonale Lippmann-Schwinger integral equations [14]:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z')V(z')|\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (1)$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z')V(z')|\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (2)$$

It should be noted, that initial and final states of the target are not only electronic \vec{x} coordinates dependent but also dependent on the direction $\vec{z} = \vec{\vartheta}t$ of $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$ where $\vec{\rho}$ is the impact parameter checking the condition

$\vec{\rho} \cdot \vec{\vartheta} = 0$ with $\vec{\vartheta}$ is the collision velocity reported in the frame of laboratory system.

The eikonal Schwinger transition amplitude in fractional form is then written as [4], [5], [6]:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{\vartheta}\right)(\beta|V|\psi_{\alpha}^{+})\left(-\frac{i}{\vartheta}\right)(\psi_{\beta}^{-}|V|\alpha)}{\left(-\frac{i}{\vartheta}\right)(\psi_{\beta}^{-}|V - VG_T^+V|\psi_{\alpha}^{+})} \quad (3)$$

Scattering states are not known exactly.

We can take as states test vectors $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ such as:

$$|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = |\psi_{\alpha}^{+}\rangle + |\delta\psi_{\alpha}^{+}\rangle \quad (4)$$

$$|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle = |\psi_{\beta}^{-}\rangle + |\delta\psi_{\beta}^{-}\rangle \quad (5)$$

These states are developed later on the set of the basic elements in a vector space of dimension N with their respective coefficients \tilde{a}_i and \tilde{b}_j .

It will further be recalled that the transition amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ given by the relationship (3) is stationary with respect to small variations of the scattering states $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ around their exact values and inserting, in this circumstances, solutions of the equation $\delta a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = 0$ in the expression of the approximate transition amplitude $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ obtained by replacing $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, $|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle$ and $|\psi_{\beta}^{-}(z)\rangle$ by test vectors $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ respectively led us to the almost final formulation of the Schwinger variational principle:

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{\vartheta}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i)(D^{-1})_{ij}(j|V|i) \quad (6)$$

where $(D^{-1})_{ij}$ represents the element (i, j) of the matrix D^{-1} , opposite of D defined by the elements :

$$D_{ij} = (j|V - VG_T^+|i) \quad (7)$$

It should be noted however, that, during the development of approximated scattering states $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ we took into consideration first, a basis consisting only of target bound states (discrete states) and we have ignored the inclusion of capture states (continuum states) on the projectile.

This assumes that the effect of coupling between the capture and excitation must be low for the variational principle to remains reliable and this is true when the projectile charge is lower than that of the nucleus.

Subsequently, we try to estimate the continuum and its contribution in the excitation cross sections which is still not negligible in the range of energies which we are interested and more particularly between 2keV and 40keV.

II.2. Pseudo-Continuum within L^2 Method

It is very advantageous to deal with orthogonal polynomials and orthogonal functions. The L^2 Slater-type functions of Callaway et al [15], [16] are not orthogonal functions. However, those functions [17], [18], [19], [20] become quite favorite insofar as they are able to imitate the first accurate states of the target hydrogen atom.

Those L^2 functions that have associated eigen energies negative and approaching the discrete spectrum (bound states) of the target atom are voluntarily retained in our development. The L^2 functions of Callaway that have positive energies and that represent virtually the target states are called pseudo states. Those pseudo states non-normalizable by a Kronecker delta function, are added subsequently to approach the continuum of the target states and account for transitions to the continuous atomic states in the energy range in interest.

However, the combination in the same development, of discrete states and continuum states is not always desirable for the simple reason that those states are not normalizable in the same manner. To overcome this difficulty, a strategy of Gram-Schmidt orthogonalization [10], [21], [22] used as a discretization procedure of the continuum states (pseudo states) on the basis set of target eigenstates gave us the opportunity to surmount the problem of normalization and ensure orthogonality between target eigenstates and between pseudo states and target eigenstates.

In a close coupling development for electron-hydrogen atom scattering, Burke and Mitchell [23] use the first eigenstates 1s and 2s of the isolated hydrogen target. To the states 1s and 2s with angular orbital momentum $L = 0$, they add pseudo states of configurations $(\bar{n}\bar{s})$ whose behavior is governed by the set of functions of the form:

$$\Phi_n = \sum_{n=1}^j A_{nj} r^{j-1} e^{-\alpha_j r} \quad (8)$$

The parameter α takes the value 0.5 for the function Φ_n to have the same behavior that the state hydrogen 2s, while the A_{nj} coefficients are chosen in such a way that functions Φ_n are orthogonal and orthogonal to the hydrogen 1s and 2s wave functions. Convergence in the close coupling development was examined by adding to the state 1s-2s at least a pseudo-state of pseudo states $\bar{3}s$, $\bar{4}s$ and $\bar{5}s$.

In a more elaborate calculation, states and pseudo states of Callaway and Wooten [16], [17] [19] (states: 1s, 2s, $\bar{2}p$, 3d and pseudo states: $\bar{3}s$, $\bar{4}s$, $\bar{5}s$, $\bar{3}p$, $\bar{4}p$, $\bar{5}p$ and $\bar{4}d$), for a given orbital angular momentum, are built by diagonalization of the Hamiltonian of the target in a set of Slater type orbital of the form $r^{j-1}e^{-\alpha_j r}$ with selected exponent j and α_j in such a way that some low eigenenergy should be accurate. The cross sections obtained are in good agreement with calculations of Burke and Webb [24] which use a close coupling

approximation in which hydrogen states 1s, 2s and 2p are held in addition to two pseudo states of configuration $\overline{3s}$ and $\overline{3p}$ of the form:

$$R_{\overline{3s}}(r) = (a_1 + a_2r + a_3r^2)e^{-\alpha r} \quad (9)$$

$$R_{\overline{3p}}(r) = (b_1 + b_2r)e^{-\beta r} \quad (10)$$

The linear parameter a_j and b_j in the development of Burke and Webb are determined so that the $R_{\overline{3s}}$ and $R_{\overline{3p}}$ pseudo states are normalized and orthogonal to the hydrogen eigenstates 1s, 2s and 2p. While, the parameters α and β should ensure an exponential decay of the considered pseudo states similar in magnitude to that of eigenstates $n = 2$ respectively.

The excitation energies threshold to the pseudo states must coincide with the ionization threshold of the hydrogen atom with the well-known value of 13.6 eV. As it was mentioned previously [11], pseudo states calculations of excitation cross sections 1s-2s and 1s-2p of Burke and Webb brought a considerable improvement over the usual close coupling calculation.

A common advantage shared between L^2 functions used in the previously cited works remains, of course, in the simple profile providing an unconquerable flexibility. They are usually represented by monomials or polynomials multiplied by a decreasing exponential of witch summation results in general are in complete or incomplete gamma functions defined and tabulated in the reference book of Abramowitz and Stegun [25].

We would like to remind that the radial Callaway and Unnikrishnan functions [16] that we have adopted in this work make part of this category of functions which scalar product, with near operator acting on a function, converge.

So that overlapping integral occur with operator unity, while kinetic energy integral results from kinetic operator and potential energy integral results from potential operator.

A combination of the last two integrals is none other than the ultimate total energy of the system and the identification of this integral, with overlapping integral of both radial orbital is the Schrödinger equation in matrix version.

In order to integrate the Schrödinger equation, a discretization procedure by Numerov algorithm [26], [27], [28], [29], [30], [31] on a grid points with a well defined area allowed us to test more or less severely radial functions of Callaway and Unnikrishnan corresponding to the first three bound states and some states close to the continuum near of the ionization threshold of the target.

Positive and negative energy of continuum states and bound states respectively are located at a definite point of the Numerov grid. Turning point [26] is obtained by the classical secant method for finding the zero of a function $q(r)$ through the radial range delimiting the grid from the left end towards the right end and vice versa.

III. Results and Discussion

Using the FORTRAN code developed by Bouamoud [32], [33] within the framework of the Schwinger variational principle, we tried to reproduce the excitation cross sections of hydrogen atom by proton impact at intermediate energies. Excitation cross sections to $n=2$, 2p and 2s states in particular, are illustrated in figures below. It seems quite reasonable to find the profiles obtained by Bouamoud since no changes were made in the calculations procedure in the range of impact energy between 15KeV and 200KeV with the exception of the excitation to 2s state (Fig. 5) where we have extended the range of impact energy to 2KeV. Figs. 1 and 2 represent excitation cross sections to the $n = 2$ state. Fig. 3 represent excitation cross-sections to 2p state ($2p_{-1}$, $2p_0$ and $2p_{+1}$) while Figs. 4 and 5 represent excitation cross sections to the 2s state. Excitation cross sections to the state $n=2$ results essentially from competitive contribution of transitions to 2s states and 2p states ($2p_{-1}$, $2p_0$ and $2p_{+1}$) from the ground state 1s. Overall Figs. 1-5, excitation cross sections of hydrogen atom by proton impact at intermediate energies are compared with theoretical calculations (Schw55 [32], Schw1414 [34], Ford et al. [35], Schakeshaft [36] and Slim et al [37]) on one hand and the experimental results (Barnett et al [38], Detleffsen et al. [39] and Higgins et al [40]) on the other hand.

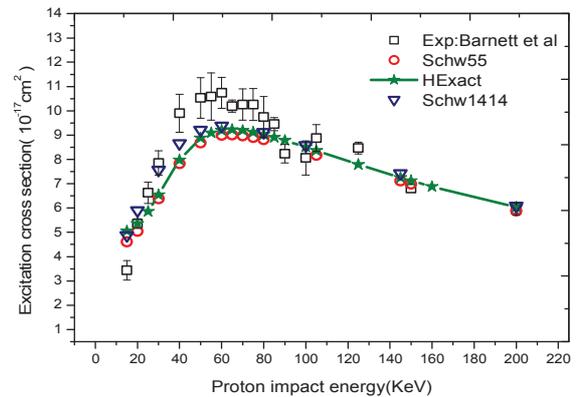


Fig. 1. Excitation cross section

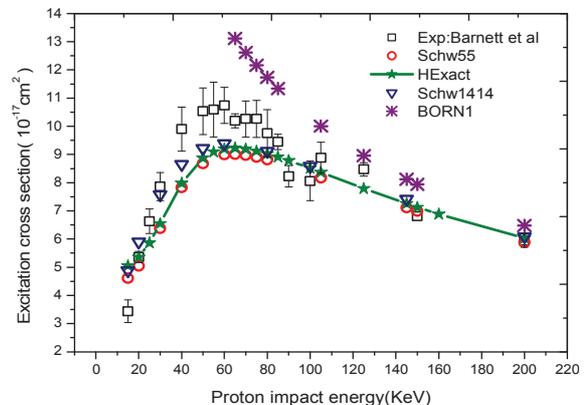


Fig. 2. Excitation cross section

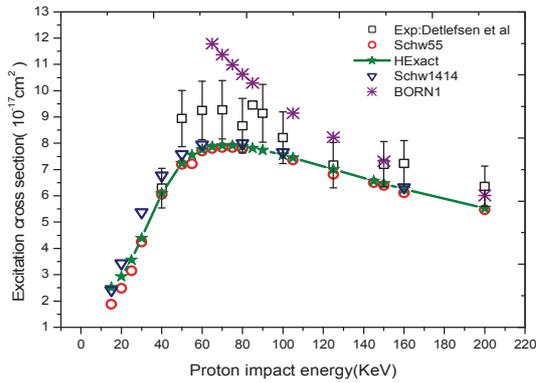


Fig. 3. Excitation cross section

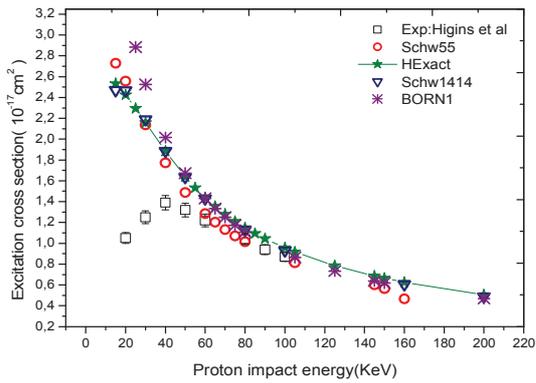


Fig. 4. Excitation cross section

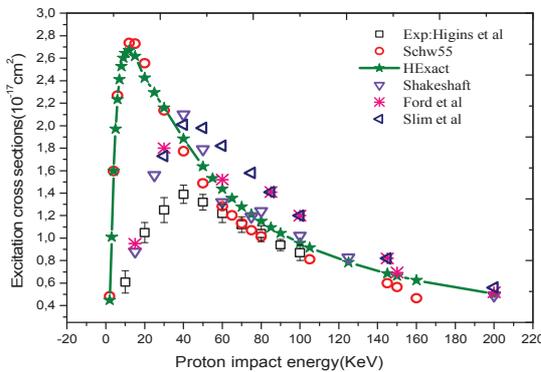


Fig. 5. Excitation cross section

Divergence of the first Born calculations (BORN1) at low intermediate energies in Figs. 2, 3 and 4 seems to be undeniable.

By analyzing Fig. 4, we have a strong impression that the 2s state excitation cross sections behave like first Born calculation preferably applicable in high energy range. On the other hand, the analysis of Fig. 1 jointly with Fig. 4 above shows, in a persuasive way, that excitation cross sections to 2s state, even if they are highly overestimated, must pass through a maximum slightly dimmed in Fig. 4 due to a voluntary limitation to 15keV of the impact energy range with the target.

This observation invited us thereafter, to expand the range of impact energy below to 15keV (Fig. 5). It also invites us to try to confirm the conjecture of the existence

of a coupling between electron capture and excitation in this interval between 2keV and 40keV and higher and focus on competition between channels simultaneously open in the same energy range. Such information on a competition in the range of energy qualified to be low and intermediate in which contributes all open channels in mutual way is a major interest of the investigations on ion-atom and ion-multicharged ion interactions.

We have seen that it would be appropriate to examine more closely the region close to the ionization threshold energy, to hunt down the continuum of the target in this region and to choose the wave functions best suited to represent this continuum. Indeed, transitions to the continuum of the target states will be possible once the opening of a channel of electron capture.

The opening of this channel of electron capture is attributed, according to some authors [41, 42, 43, 44, 45, 46], to the existence of a coupling between intermediate states of a united atom He^+ which may be produced at small separation projectile-target and target continuum states at energies lower than 30keV. This more or less strong-coupling is most often enjoyed by evaluation of overlap integral between the continuum of the target wave functions and the wave functions of the intermediate states of the united Atom He^+ .

Electron capture on intermediate states of a united atom He^+ , even passing through intermediate states H_2^+ [48], is not the single open channel during the atomic proton-hydrogen interaction at low and intermediate energies. Indeed, an electron capture on the projectile via ionization of the target can be considered and [47], [48], [49], [50], [51] authors who have analyzed the process in question suggest the inclusion of ionization states at the opening capture channel according to a classical Thomas two-step [52] mechanism for impact energies greater than 40keV.

Less likely in this energy range and particularly scrutinized in high energy range, single ionization, in contrast, is far from to be involved in the process according to the same authors.

Examination of different channels open in the proton-hydrogen atom collision process analyzed in the literature referenced above is not the scope of this work. However, we have had convictions on an almost indisputable contribution of the target continuum in cross sections of channels, jointly opened in the energy range that interests us. The excitation of atom by proton impact at intermediate energies makes, categorically, part of the channels competitively open in the process. Excitation processes has particularly attracted our interest in this work and the results of calculations on excitation cross sections that we have obtained are presented in figures below. The radial wave functions of Callaway and Unnikrishnan are Slater type functions. These functions were more or less severely tested with Numerov discretization procedure. The behavior of these functions for different values of energy E , whether negative or positive, the scale factor ζ and the power λ of r represented in figures below.

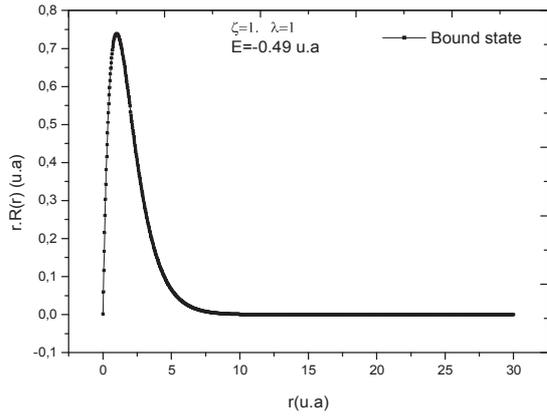


Fig. 6. Radial wave function, bound state with negative energy

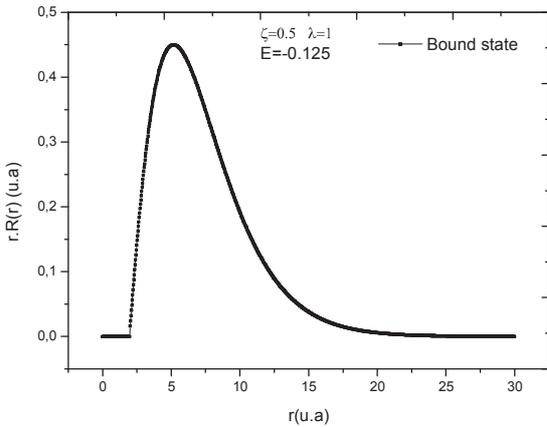


Fig. 7. Radial wave function, bound state with negative energy

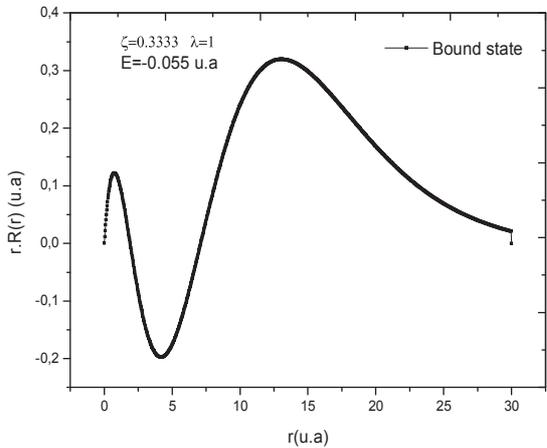


Fig. 8. Radial wave function, bound state with negative energy

This result gave us, eventually, the opportunity to take advantage when trying to properly describe the target continuum states near of the ionization threshold.

To do so, we proceed in Figs. 11-15 by a Gram-Schmidt orthogonalization algorithm where we have discretized the target continuum states represented by Callaway and Unnikrishnan functions with zero angular momentum and positive energy in a set of the first three exact hydrogen atom states 1s, 2s and 3s.

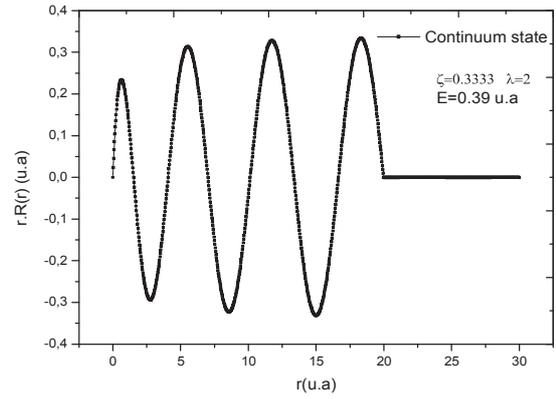


Fig. 9. Radial wave function, continuum state with positive energy

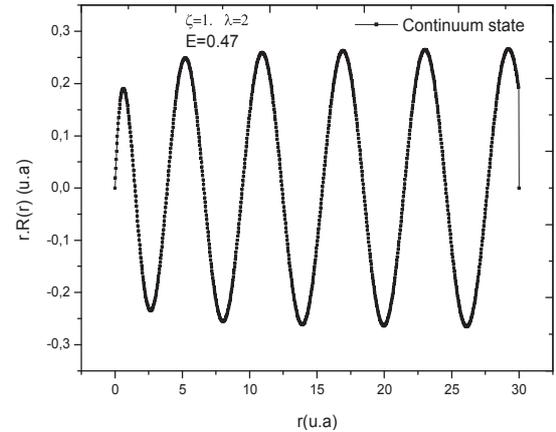


Fig. 10. Radial wave function, continuum state with positive energy

In Fig. 16, we have reproduced the same cross sections (Schw55, HExact) in Figure 5 to confront them with the excitation cross sections (CalGram), issues from contribution of continuum states discretized in pseudo states using Gram-Schmidt orthonormalization procedure on a set of Slater type functions of Callaway and Unnikrishnan.

Excitation cross sections (CalGram) shown in Fig. 16, seem significantly improved with respect to the calculation results (Schw55, HExact) in which only bound states are used.

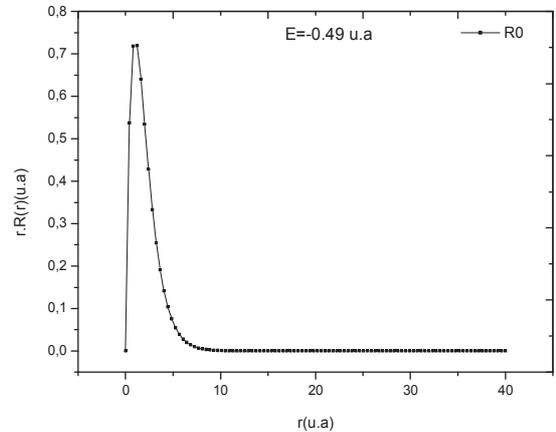


Fig. 11. Radial wave function, bound state with negative energy

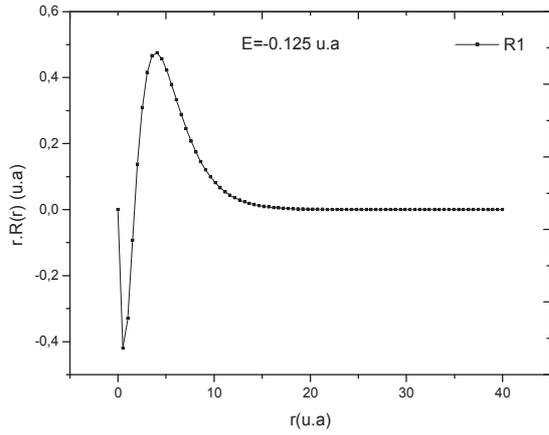


Fig. 12. Radial wave function, bound state with negative energy

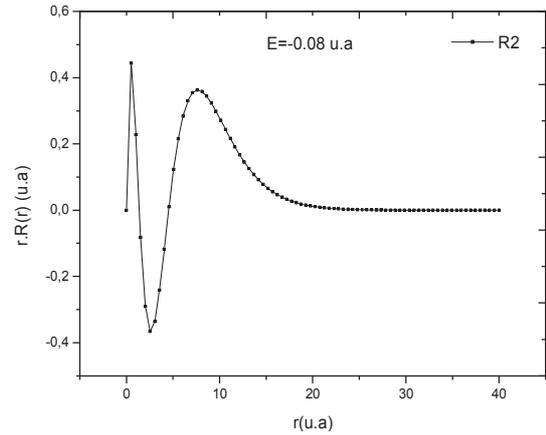


Fig. 13. Radial wave function, bound state with negative energy

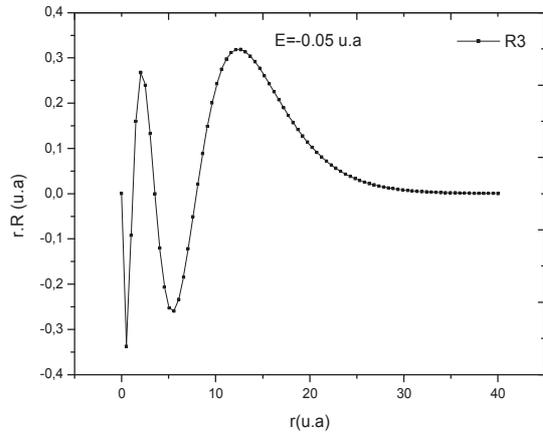


Fig. 14. Radial wave function, bound state with negative energy

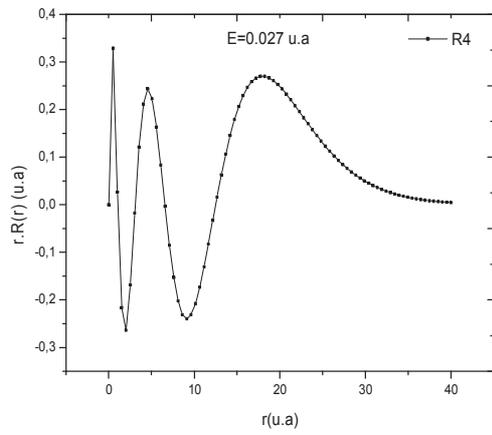


Fig. 15. Radial wave function, pseudo state with positive energy

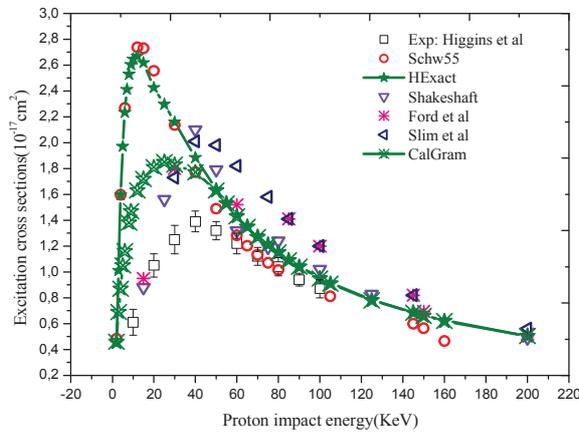


Fig. 16. Excitation cross section to 2s state with continuum pseudo-state contribution

IV. Conclusion

Contribution of the target continuum states in excitation cross section just above the ionization threshold has made the main objective of this work.

In order to represent the target continuum states adequately, the wave functions for which associated energies are negative must have at least the behavior of the three first exact states of the hydrogen atom. This criterion of choice of the wave function being filled, we

proceeded by a Gram-Schmidt discretization procedure of the continuum states near the ionization threshold of the target on a complete set of L^2 functions generated by the exact orthonormal states of hydrogen atom. The resulting basis can be expanded to cover a larger complete set containing the exact or quasi exact discrete states and target continuum pseudo states near ionization threshold of the target.

In this work, we have considered the first three exact states of hydrogen atom and two pseudo states of the

continuum near the ionization threshold of the target. The results obtained on the excitation cross sections of the hydrogen atom by proton impact at intermediate energies were satisfactory.

We used the Schwinger variational principle in the context of the impact parameter method to evaluate the cross sections. No difficulty was encountered in insertion of the continuum that was made possible by using a flexible fractional eikonal formulation of the Schwinger variational principle and orthonormalization properties of exact states or exact states and pseudo states of the target.

References

- [1] R Gayet and J Hanssen 1992, *J. Phys.* B25 825.
 [2] R Gayet and J Hanssen 1994, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* B86 52.
 [3] B Brendlé, R Gayet and K Wohrer 1985, *Phys. Rev. Lett.* 54 2007.
 [4] R Gayet and M Bouamoud 1989, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* B42 515.
 [5] B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*, 20 12(2004).
 [6] B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*. 28 (2006)97-102.
 [7] D. P. Higgins, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys.* B29 1919 (1996).
 [8] D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner et K-H Schartner, *J. Phys.* B27 4195(1994).
 [9] T. J. Morgan, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys.* B6 2118(1973).
 [10] M. B. Shah et H. B. Gilbody, *J. Phys.* B14 2361(1981).
 [11] M. B. Shah, D. S. Elliott et H. B. Gilbody, *J. Phys.* B20 2481(1987).
 [12] B. Brendlé, R. gayet, J. P. Rozet et K. Wohrer, *phys. Rev. Lett.* 54 2007(1985).
 [13] R. J. Glauber, *Lectures in Theoretical Physics*, ed. by W. E. Brittin and L. G. Dunham, Interscience Publishers, Inc., New York, Volume I, page 315, (1959).
 [14] R. K. Janev et A. Salin, *Ann. Phys. N.Y.* 73 136 (1972).
 [15] B. H. Bransden et M. R. C. McDowell, *Phys. Lett.* 30C (1977) 207
 [16] J. Callaway et K. Unnikrishnan, *Phys. Rev.* A48 (1993) 4292.
 [17] J. Callaway et J. W. Wooten, *Phys. Rev.* A9 (1974) 1924.
 [18] J. Callaway et J. W. Wooten, *Phys. Rev.* A11 (1975) 1118.
 [19] J. Callaway et J. F. Williams, *Phys. Rev.* A12 (1975) 2312.
 [20] J. Callaway, M. R. C. McDowell et L. A. Morgan, *J. Phys.* B8 (1975) 218.
 [21] J. Stoer et R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag (1993).
 [22] G. H. Golub et C. F. Van Loan, *Matrix Computation*, Johns Hopkins University Press (1996).
 [23] P. G. Burke et J. F. B. Mitchell, *J. Phys.* B6 (1973) 320.
 [24] P. G. Burke et T. G. Webb, *J. Phys.* B3 (1970) L13.
 [25] M. Abramowitz et I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Function*, National Bureau of Standards (1970).
 [26] T. Pang, *An Introduction to Computational Physics*, Cambridge University Press, New York (2006).
 [27] M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* 146 (2002) 225-249.
 [28] M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* 146 (2002) 254-260.
 [29] J. Thijssen, *Computational Physics*, Cambridge University Press (2007).
 [30] J. L. D. Garret et M. A. S. Lozano, *Comput. Phys. Commun.* 180(2009)768.
 [31] J. P. Leroy et R. Wallace, *Journal of Computational Physics* 67 (1986) 239-252.
 [32] M. Bouamoud, *Thèse de doctorat d'état*, Université de Bordeaux-I (1988).
 [33] R. Gayet et M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* B 42 515-522 (1989).
 [34] B. Lasri, *Thèse de Doctorat es Science*, Université de Tlemcen.
 [35] L. Ford, J. F. Reading et K. A. Hall, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 26 4537 (1993).
 [36] H. A. Slim et A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 L203 (1994).
 [37] R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* 18 1930 (1978).
 [38] C. F. Barnett, *Oak Ridge National Laboratory Report No 6086* (1990).
 [39] D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, et K-H Schartner, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 27 (1994) 4195.
 [40] D P Higgins, J Geddes et H B Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 29 (1996) 1219.
 [41] Wilets et Gallaher, *Phys. Rev.*, 147(1966) 13-20.
 [42] Gallaher et Wilets, *Phys. Rev.*, 169 (1968) 139-149.
 [43] M. Cheshire, *J. Phys. B.* 1(1968) 428-437.
 [44] M. Cheshire, D F Gallaher et A J Taylor, *J. Phys. B.* 3(1970)813-832.
 [45] D. G. M. Anderson, M. J. Antal et M B McElroy, *J. Phys. B.* 7 (1974) L118.
 [46] M. J. Antal, M B McElroy et D G M Anderson, *J. Phys. B.* 8 (1975) 1513.
 [47] M. McCartney et D S F Crothers, *J Phys B* 27(1994) L485-L488.
 [48] M. McCartney et D S F Crothers, *J Phys B* 26(1993) 4561.
 [49] N. Toshima, *Phys. Rev. A* 42 (1990) 5739.
 [50] D. Belkic, R. Gayet et A. Salin, *Phys. Rep.* 56(1979) 279.
 [51] D S F Crothers et L J Dubé, *Adv At Mol Opt Phys* 30(1993) 287.
 [52] L H Thomas, *Proc. R. Soc. A* 114(1927)561.

Authors' information

¹University of Béchar, Department of science, Béchar/Algeria.

²University of Naama, Naama/Algeria.



Adnane Bouserhane (born in 1965) is 'Maitre Assistant A' in the faculty of science and technology in the University of Béchar, Béchar/Algeria. He graduated Physics from the University of Tlemcen in Algeria. He prepares a doctorate of science in the university of Tlemcen/Algeria. He had four communications and three publications in international journal. His research interests are focused in ion-atom collisions and interaction of charged particle with matter.



Mammam Bouamoud (born in 1951) is professor in the University of Naama in Algeria. He graduated Physics from the University of Oran in Algeria. He is Doctor of Science from the University of Bordeaux I (France). He had more than 50 papers in international journal and proceeding. His research interests are focused in multiple electron processes occurring in ion-ion (atom) collisions in the plasma of thermonuclear fusion and interaction of ionizing particles with biological matter.



Praise Worthy Prize



1971-6796(201304)7:2;1-D

Printed from

Journal of Scientific Research

<http://www2.univ-bechar.dz/jrs/>

Continuum variational contribution in excitation cross sections of atomic hydrogen within pseudo-state method

A. Bouserhane¹, M. Bouamoud², B. Lasri³

¹ *University of Bechar Adnray1965@yahoo.fr*

² *University Abou-Bekr-Belkaïd of Tlemcen m_bouamoud@yahoo.fr*

³ *University Dr. Taher Moulay of Saida lasribo@yahoo.fr*

Published on 30 December 2012

The Editor, on behalf of the Editorial Board and Reviewers, has great pleasure in presenting this number of the Journal of Scientific Research. This journal (ISSN 2170-1237) is a periodic and multidisciplinary journal, published by the University of Bechar. This journal is located at the interface of research journals, and the vulgarization journals in the field of scientific research. It publishes quality articles in the domain of basic and applied sciences, technologies and humanities sciences, where the main objective is to coordinate and disseminate scientific and technical information relating to various disciplines.

The research articles and the development must be original and contribute innovative, helping in the development of new and advanced technologies, like the studies that have concrete ideas which are of primary interest in mastering a contemporary scientific concepts. These articles can be written in Arabic, French or English. They will not be published in another journal or under review elsewhere. The target readership is composed especially of engineers and technicians, teachers, researchers, scholars, consultants, companies, university lab, teaching techniques and literary ... The journal is obtainable in electronic form, which is available worldwide on the Internet and can be accessed at the journal URL:

<http://www2.univ-bechar.dz/jrs/>.

Director of Journal
Pr. BELGHACHI Abderrahmane

Editor in Chief
Dr. HASNI Abdelhafi d

Co-Editor in Chief
Dr. BASSOU Abdesselam

Editorial Member

TERFAYA Nazihe
BOUIDA Ahmed
LATFAOUI Mohieddine
MOSTADI Siham

Reviewers board of the Journal.

Pr. KADRY SEIFEDINE (The American University in KUWAIT)
Pr. RAZZAQ GHUMMAN Abdul (Al Qassim University KSA)
Pr. PK. MD. MOTIUR RAHMAN (University of Dhaka Bangladesh)
Pr. MAHMOOD GHAZAW Yousry (Al Qassim University KSA)
Pr. KHENOUS Houari Boumediene (King Khalid University KSA)
Pr. RAOUS Michel (Laboratory of Mechanic and Acoustic France)
Pr. RATAN Y. Borse (M S G College Malegaon Camp India)
Pr. LEBON Frédéric (University of Aix-Marseille 1 France)
Pr. MONGI Ben Ouédou (National Engineering School of Tunis)
Pr. BOUKELIF Ouéd (University of Sidi Bel Abbes Algeria)
Pr. DJORDJEVICH Alexander (University of Hong Kong)
Pr. BENABBASSI Abdelhakem (University of Bechar Algeria)
Pr. BOULARD Thierry (National Institute of Agronomic Research France)
Pr. LUCA Varani (University of Montpellier France)
Pr. NEBBOU Mohamed (University of Bechar Algeria)
Dr. FELLAH Zine El Abidine Laboratory of Mechanic and Acoustic France)
Dr. ZHEN Gao (University of Ontario Institute of Technology Canada)
Dr. OUERDACHI Lahbassi (University of Annaba Algeria)
Dr. HADJ ABDELKADER Hicham (IBISC – University of Evry France)
Dr. KARRAY M'HAMED ALI (National Engineering School of Tunis)
Dr. ALLAL Mohammed Amine (University of Tlemcen Algeria)
Dr. FOUCHAL Fazia (GEMH - University of Limoges France)
Dr. TORRES Jeremi (University of Montpellier 2 France)
Dr. CHANDRAKANT Govindrao Dighavka (L. V. H. College of Panchavati India)
Dr. ABID Chérifa (Polytech' University of Aix-Marseille France)
Dr. HAMMADI Fodil (University of Bechar Algeria)
Dr. LABBACI Boudjema (University of Bechar Algeria)
Dr. DJERMANE Mohammed (University of Bechar Algeria)
Dr. BENSAFI Abd-El-Hamid (University of Tlemcen)
Dr. BENBACHIR Maamar (University of Bechar Algeria)

Pr. BALBINOT Alexandre (Federal University of Rio Grande do Sul Brazil)
Pr. TEHIRICHI Mohamed (University of Bechar Algeria)
Pr. JAIN GOTAN (Materials Research Lab., A.C.S. College, Nandgaon India)
Pr. SAIDANE Abdelkader (ENSET Oran Algeria)
Pr. DI GIAMBERARDINO Paolo (University of Rome « La Sapienza » Italy)
Pr. SENGOUGA Nouredine (University of Biskra Algeria)
Pr. CHERITI Abdelkarim (University of Bechar Algeria)
Pr. MEDALE Marc (University of Aix-Marseille France)
Pr. HELMAOUI Abderrachid (University of Bechar Algeria)
Pr. HAMOUINE Abdelmadjid (University of Bechar Algeria)
Pr. DRAOUI Belkacem (University of Bechar Algeria)
Pr. BELGHACHI Abderrahmane (University of Bechar Algeria)
Pr. SHAILENDHRA Karthikeyan (AMRITA School of Engineering India)
Pr. BURAK Barutcu (University of Istanbul Turkey)
Pr. LAOUFI Abdallah (University of Bechar Algeria)
Dr. SELLAM Mebrouk (University of Bechar Algeria)
Dr. ABDUL RAHIM Ruzairi (University Technology of Malaysia)
Dr. BELBOUKHARI Nasser (University of Bechar Algeria)
Dr. CHIKR EL MEZOUAR Zouaoui (University of Bechar Algeria)
Dr. BENACHAIBA Chellali (University of Bechar Algeria)
Dr. KAMECHE Mohamed (Centre des Techniques Spatiales, Oran Algeria)
Dr. MERAD Lotfi (Ecole Préparatoire en Sciences et Techniques Tlemcen Algeria)
Dr. BASSOU Abdesselam (University of Bechar Algeria)
Dr. ABOU-BEKR Nabil (Universit of Tlemcen Algeria)
Dr. BOUNOUA Abdennacer (University of Sidi bel abbes Algeria)
Dr. TAMALI Mohamed (University of Bechar Algeria)
Dr. FAZALUL RAHIMAN Mohd Hafiz (University of Malaysia)
Dr. ABDELAZIZ Yazid (University of Bechar Algeria)
Dr. BERGA Abdelmadjid (University of Bechar Algeria)
Dr. Rachid KHALFAOUI (University of Bechar Algeria)
Dr. SANJAY KHER Sanjay (Raja Ramanna Centre for Advanced Technology INDIA)

Journal of Scientific Research

P.O.Box 417 route de Kenadsa
08000 Bechar - ALGERIA
Tel: +213 (0) 49 81 90 24
Fax: +213 (0) 49 81 52 44

Editorial mail: jrs.bechar@gmail.com
Submission mail: submission.bechar@gmail.com
Web: <http://www2.univ-bechar.dz/jrs/>



Continuum variational contribution in excitation cross sections of atomic hydrogen within pseudo-state method

A. Bouserhane¹, M. Bouamoud², B. Lasri³

¹ University of Bechar
Adnray1965@yahoo.fr

² University Abou-Bekr-Belkaid of Tlencen
m_bouamoud@yahoo.fr

³ University Dr. Taher Moulay of Saida
lasribo@yahoo.fr

Abstract – We use Schwinger variational principle to evaluate excitation cross section of atomic hydrogen by proton impact at energy range between 2keV and 200keV. Contribution of the continuum near ionization threshold was introduced in a model with zero angular momentum using L^2 method developed by Yamani and Reinhardt in 1974-1975. Our results were compared with those of Bouamoud (1988-1989) using 1s, 2s and 2p state of hydrogen atom.

Keywords: Schwinger variational principle, L^2 method, J matrix method of Yamani and Reinhardt.

I. Introduction

The interaction (excitation, capture and ionization) process discussed in the light of simple systems (hydrogen and hydrogen-like) attracted a great deal of interest on behalf of theorists [1]-[8] and experimentalists [9]-[13]. Theoretical approximation methods and techniques (Already cited references) were designed and developed in this regard and calculations compared with measurements directly accessible by the experience have always been the evidence on the reliability and efficiency of advanced models. Among these techniques and methods of approximation, the variational principle of Schwinger is to him only, an extremely powerful tool in the estimation of cross sections and parameters associated. This principle has always motivated the theoretical physics group of Bouamoud [14] and it is in this same niche that we want, through this work, make our contribution in the calculation and estimation on the hydrogenic ion-Atom interaction process by including, in the later part, the continuum discretized on a set of pseudo-states of the target functions. To be, in the first part, we apply the Schwinger variational principle to estimate the excitation cross sections of atomic hydrogen by proton impact at intermediate energies. Variational transition matrix elements are developed first. It should be noted however, that the main contribution to the considered transition occurs at small angle (the forward scattering) for a collision of type $H^+ - H$ within an energy range of 50Kev [15]. In such a situation, the projectile describes a straight line trajectory and therefore we can address the problem within the eikonal approximation [16]. We wish to point out that in the majority of this part, we imitate the assumptions and developments advanced by our group [4], [5], [6], [7], [8]

and that, in this work, the atomic unit was adopted except explicit mention.

II. Method and theory

In the Schwinger variational principle, the transition amplitude can be obtained in a stationary form from small changes of scattering states around their exact value.

II.1. Variational transition amplitude in the impact parameter method

In the impact parameters method where the nuclei are assumed to move in a straight line, scattering states $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ and $|\psi_\beta^-(z)\rangle$, eigenvectors of the total Hamiltonian of the system, each one associated to its correspondent Green's function G_T^+ and G_T^- must satisfy respectively outgoing and ingoing wave conditions in the direction \vec{z} . Scattering states that are solutions of the Schrödinger equation within the impact parameters approximation method are determined almost systematically by the eikonales Lippmann-Schwinger equations [17]:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z')V(z')|\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (1)$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z')V(z')|\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (2)$$

It should be noted, that initial and final states of the target are not only electronic \vec{x} coordinates dependent but also

dependent on the direction $\vec{z} = \vec{\vartheta}t$ of $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$ where $\vec{\rho}$ is the impact parameter checking the condition $\vec{\rho} \cdot \vec{\vartheta} = 0$ with $\vec{\vartheta}$ the collision velocity reported in the frame of laboratory system. The eikonal Schwinger transition amplitude in fractional form is then written as [13]:

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{\vartheta}\right)(\beta|V|\psi_{\alpha}^{+})\left(-\frac{i}{\vartheta}\right)(\psi_{\beta}^{-}|V|\alpha)}{\left(-\frac{i}{\vartheta}\right)(\psi_{\beta}^{-}|V - VG_T^{+}V|\psi_{\alpha}^{+})} \quad (3)$$

Scattering states are not known exactly. We can take as states test vectors $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ such as:

$$|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle = |\psi_{\alpha}^{+}\rangle + |\delta\psi_{\alpha}^{+}\rangle \quad (4)$$

$$|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle = |\psi_{\beta}^{-}\rangle + |\delta\psi_{\beta}^{-}\rangle \quad (5)$$

These states are developed later on the set of the basic elements in a vector space of dimension N with their respective coefficients \tilde{a}_i and \tilde{b}_j . It will further be recalled that the transition amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ given by the relationship (3) is stationary with respect to small variations of the scattering states $|\psi_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\psi_{\beta}^{-}\rangle$ around their exact values and inserting, in this circumstances, solutions of the equation $\delta a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = 0$ in the expression of the approximate transition amplitude $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ obtained by replacing $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, $|\psi_{\alpha}^{+}(z)\rangle$ and $|\psi_{\beta}^{-}(z)\rangle$ by test vectors $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ respectively led us to the almost final formulation of the Schwinger variational principle:

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{\vartheta}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i)(D^{-1})_{ij}(j|V|i) \quad (6)$$

where $(D^{-1})_{ij}$ represents the element (i, j) of the matrix D^{-1} , opposite of D defined by the elements:

$$D_{ij} = (j|V - VG_T^{+}|i) \quad (7)$$

It should be noted however, that, during the development of approximated scattering states $|\tilde{\psi}_{\alpha}^{+}\rangle$ and $|\tilde{\psi}_{\beta}^{-}\rangle$ we took into consideration first a basis consisting only of target bound states (discrete) and we have ignored the inclusion of capture states (continuum) on the projectile. This assumes that the effect of coupling between the capture and excitation must be low for the variational principle to remain reliable and this is true when the projectile charge is lower than that of the kernel.

Subsequently, we try to estimate the continuum and its contribution in the excitation cross sections which is still not negligible in the range of energies which we are interested and more particularly between 2KeV and 40KeV.

II.2. Pseudo-continuum within L^2 method

The eigenstates of the target, the basic elements of development which we have referred in the first part are hydrogen functions or in the same way, close to a factor,

Laguerre-type L^2 functions [18], [19], [20]. These polynomials or associated Laguerre-type functions, in addition to be orthogonal with some well-defined weight, they enjoy some extremely remarkable properties that offer incomparable flexibility [20], [21]. In this part, we want to take advantage of the benefits cited previously in staking the near continuum and estimate its contribution in cross sections of excitation energy between 2KeV and 200KeV. First, we must begin an analysis of an eigenvalue equation which cries in its usual form:

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (8)$$

It should be noted that in equation (8), energy E is negative for bound states and positive for scattering states. However, in the most part of the cases, the wave function solution of (8) is generated in a space of square integrable functions with the basic elements of $\{\phi_n\}_{n=0}^{\infty}$ in the form:

$$|\psi\rangle = \sum f_n(E)|\phi_n\rangle \quad (9)$$

The elements $|\phi_n\rangle$, which checks the eigenvalue equation $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$ and leading to a diagonal representation of H form the discrete spectrum H while the continuous spectrum is obtained by analysis of the infinite sum of the complete basic functions. To this end, we follow a strategy developed by Heller and Yamani in 1974 [22] then Yamani and Reinhardt in 1975 [23]. In doing so, we require only the hermitian matrix representing the wave operator $(H - E)$ to be tridiagonale [24], [25], [26], [27], [28]. Thus, action of the Schrödinger wave operator on the basic elements can take the form of a recurrence relation in the δ Kronecker [26]:

$$\langle\phi_n|H - E|\phi_n\rangle = (a_n - z)\delta_{n,m} + b_n\delta_{n,m-1} + b_{n-1}\delta_{n,m+1} \quad (10)$$

A relationship in which z and the coefficients $\{a_n, b_n\}_{n=0}^{\infty}$ are real and in general functions of energy, angular momentum and parameters related to the potential. After a projection on $\langle\phi_n|$, the Schrödinger wave operator matrix obtained by development of $|\psi\rangle$ on $|\phi_m\rangle$ in equation $(H - E)|\psi\rangle = 0$ reduces to a three-term recurrence relation of the form:

$$zf_n = a_n f_n + b_{n-1} f_{n-1} + b_n f_{n+1} \quad (11)$$

The problem is therefore reduced to solution of a recurrence relation for the expansion coefficients of the wave function ψ . It should be noted, however, that the solution to the problem stated by the above quoted recurrence is obtained for all energies E , whether discrete or continuous. Thus, the recurrence relation in δ Kronecker shows clearly that the discrete spectrum with negative energies, regular solution of the considered problem, can be obtained by Diagonalization with simply requiring that the coefficients b_n and $a_n - z$ must be zero.

In configuration space, the wave function $\psi_E(x)$ is developed in the form of an infinite series of functions $\phi_n(x) = A_n w_n(x) P_n(x)$ with coefficients $f_n(E)$ where the factor A_n is normalization constant, $P_n(x)$ a polynomial of degree n in x and $w_n(x)$ the weight function of the polynomial $P_n(x)$. In the case of the $H^+ - H$ system, L^2 functions of the bases take a form similar to that which it has previously been suggested with P_n proportional to Laguerre polynomial with weight function $w(x) = x^\alpha e^{-\beta x}$:

$$\phi_n(r) = A_n x^\alpha e^{-\beta x} L_n^\nu(x) \quad (12)$$

Functions ϕ_n are of Laguerre type with $A_n = \sqrt{\lambda \Gamma(n+1) / \Gamma(n+\nu+1)}$ where n can be integer $0, 1, 2, \dots$; α and β are real positives. We deliberately avoided direct resolution of the time independent radial wave equation for a particle without spin in a spherical symmetric potential $V(r)$. In fact, running of the remarkable properties what enjoy the Laguerre polynomials and the use of differential equation and differentiation formula relating to these famous polynomials [21], [29], [30] requires the passage to a double derivation from the variable x instead of r . We followed a strategy used by Alhaidari [26] and we were able to obtain, by suggesting value $\alpha = l + 1$, $\nu = 2l + 1$ and $\beta = 1/2$, recurrence relation in δ Kronecker between the elements of the basis $\{\phi_n\}_{n=0}^\infty$ which subsequently allowed us to write, by asking $\sigma_\pm = \frac{2E}{\lambda^2} \pm \frac{1}{4}$ and $x = \frac{(2E/\lambda^2 - 1/4)}{(2E/\lambda^2 + 1/4)}$, a recurrence relationship in terms of polynomials $P_n(E) = \sqrt{\frac{\Gamma(n+2l+2)}{\Gamma(n+1)}} f_n(E)$ in the form:

$$(n+1)P_{n+1} - 2[(n+1)l + b]P_n + (n+1+2l)P_{n-1} = 0 \quad (13)$$

It should be noted however, that the recurrence relationship for x values necessarily located between -1 and $+1$ for positive energies (continuum) reduces in the case which we are interested doing $l = 0$ for s states with the conditions $P_{-1} = 0$ and $P_0 = 1$ to:

$$(n+1)P_{n+1} - 2[(n+1)x + b]P_n + (n+1)P_{n-1} = 0 \quad (14)$$

Recursive sequences obtained from (14) with the conditions $P_{-1} = 0$ and $P_0 = 1$ for integer values $m = n + 1 = 1, 2, 3, \dots$ are the pillar of our algorithm for the calculation of the target state pseudo-continuum wave functions expansion coefficients.

III. Results and discussion:

By application of the Schwinger variational principle, we reproduce in the first part, the calculation results of excitation cross sections to the state 2s (Schw55) of Bouamoud and group [14]. Cross sections are illustrated in figure 1 (HExact) where we have registered a slight shifting due probably to more meticulousness calculations than those of Bouamoud and group.

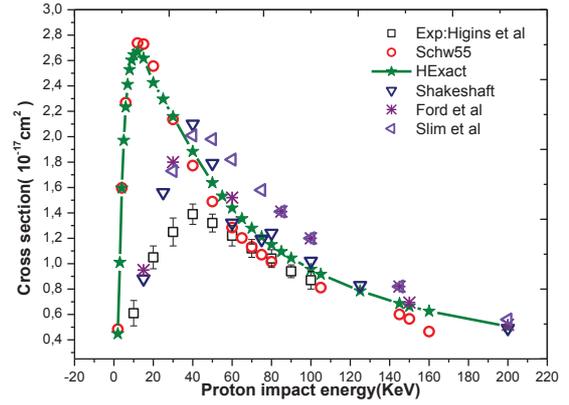


Figure 1. Excitation to the state 2s without pseudo-continuum

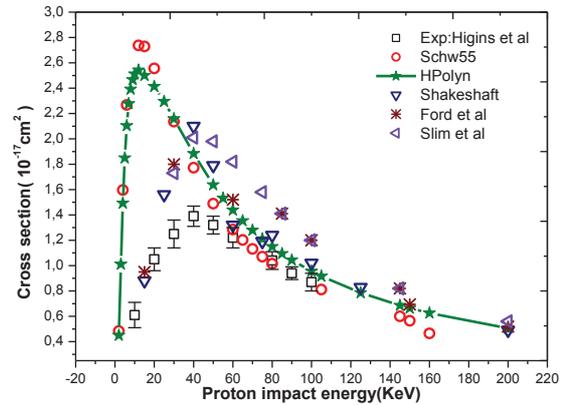


Figure 2. Excitation to 2s state within pseudo-continuum (3s)

The continuum, translated by a competition between excitation and capture in the environment near of the ionization threshold is introduced by discretization over L^2 basis function of Laguerre type generated by a set of pseudo-states functions. The results shown in figure 2 (HPolyn) mark a detachment of the maximum cross sections about 15% if there are only the contribution of the pseudo-state noted (3s) for $m=3$. However, a competitive convergence to literature (Schakeshaft, Ford et al and Slim et al) can be significantly improved by adding other pseudo-states ($m > 3$) to better describe the continuum of the target state in the low energy range between 2KeV and 40KeV.

References

- [1]- R. Gayet et J. Hanssen, J. Phys. B25 825-37 (1992).
- [2]- R. Gayet et J. Hanssen, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B86 (1994) 52-61.
- [3]- B. Brendlé, R. Gayet et K. Wöhrer, Phys. Rev. Lett. 54 2007(1985).
- [4]- M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état es sciences, Université de Bordeaux-I, (1988).
- [5]- R. Gayet et M. Bouamoud, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B42 515 (1989).
- [6]- B. Lasri, Thèse de Magistère, Institut de Physique, Université de Tlemcen, Juin (1998).

- [7]- B. Lasri, M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*, 20 12(2004).
- [8]- B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud et R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*. 28 (2006)97-102.
- [9] D. P. Higgins, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys. B.* 29 1919 (1996).
- [10]- D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner et K-H Schartner, *J. Phys. B.* 27 4195(1994).
- [11]- T. J. Morgan, J. Geddes et H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 6 2118(1973).
- [12]- M. B. Shah et H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 14 2361(1981).
- [13]- M. B. Shah, D. S. Elliott et H. B. Gilbody, *J. Phys. B* 20 2481(1987).
- [14]- B. Lasri, Thèse de Doctorat Es Sciences Physique, Faculté des Sciences, Université Abou-Bakr Belkaid Tlemcen (2007).
- [15]- B. Brendlé, R. gayet, J. P. Rozet et K. Wohrer, *phys. Rev. Lett.* 54 2007 (1985).
- [16]- R. J. Glauber, *Lectures in Theoretical Physics*, ed. by W. E. Brittin and L. G. Dunham, Interscience Publishers, Inc., New York, Volume I, page 315, (1959).
- [17]- R. K. Janev et A. Salin, *Ann. Phys. N.Y.* **73** 136 (1972).
- [18]- L. D. Landau et E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics : Non Relativistic Theory*, Pergamon Press (1991) page 120.
- [19]- B. H. Bransden et C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, Longman Group Limited (1983) page 136.
- [20]- G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic Press, Inc (1985) page 727.
- [21]- G. Szegő, *Orthogonal Polynomials*, American Mathematical Society (1975) page 100.
- [22]- E. Heller et H. Yamani, *Phys. Rev.* **A9** (1974) 1209.
- [23]- H. A. Yamani et W. P. Reinhardt, *Phys. Rev.* **A11**, 1144 (1975).
- [24]- H. A. Yamani et M. S. Abdelmonem, *J. Phys.* **B30** (1997) 1633.
- [25]- H. A. Yamani, M. S. Abdelmonem et A. D. Alhaidari, *Phys. Rev.* **A62** (2000) 052103.
- [26]- A. D. Alhaidari, *Ann. Phys.* **317** (2005) 152-174.
- [27]- A.D. Alhaidari, H. Bahlouli, M.S. Abdelmonem, F. Al-Ameen, T. Al-Abdulaal, *Phys. Lett.* **A364** (2007) 372-377.
- [28]- M. E. H. Ismail et E. Koelink, *Adv. in Appl. Math.* **46** (2010) 379-395.
- [29]- G. Szegő, *Amer. Math. Soc. Proc.* **1**, 731 (1950).
- [30]- F. Jędrzejewski, *Introduction Aux Méthodes Numérique*, (Springer- Verlag, 2005).

Journal of Scientific Research

P.O.Box 417 route de Kenadsa

08000 Bechar - ALGERIA

Tel: +213 (0) 49 81 90 24

Fax: +213 (0) 49 81 52 44

Editorial mail: jrs.bechar@gmail.com

Submission mail: submission.bechar@gmail.com

Web: <http://www2.univ-bechar.dz/jrs/>



Excitation cross section within variational principal and pseudo state method in a set of Slater type functions

Journal:	<i>Canadian Journal of Physics</i>
Manuscript ID:	cjp-2013-0243.R1
Manuscript Type:	Article
Date Submitted by the Author:	n/a
Complete List of Authors:	Bouserhane, Adnane; University, Sciences Bouamoud, Mammar; Laboratory of Theoretical Physics
Keyword:	Schwinger variational principal, Excitation cross section, pseudo state method, Slater type function

SCHOLARONE™
Manuscripts

Only

Excitation cross section within Schwinger variational principal and pseudo state method in a set of Slater type functions

Adnane Bouserhane^a and Mammar Bouamoud^b

^aUniversity of Bechar, P.O Box 417 Route de Kenadsa, Bechar, Algeria
adnray1965@yahoo.fr

^bUniversity of Naâma, Naâma/Algeria
m_bouamoud@yahoo.fr

Abstract. We use Schwinger variational principle to evaluate excitation cross section of atomic hydrogen by proton impact at energy range between 2keV and 200keV. Contribution of the continuum near ionization threshold was introduced in a model using L^2 method developed in a pseudo-space spanned by a set of Slater type functions. Our results were compared with those of Bouamoud (1988-1989) using 1s, 2s and 2p state of hydrogen atom.

Keywords : Schwinger variational principle, excitation cross section, pseudo state method, Slater type functions.

Résumé. Nous utilisons le principe variationnel de Schwinger pour évaluer les sections efficaces d'excitation de l'hydrogène atomique par impact de proton aux énergies entre 2KeV et 200KeV. La contribution du continuum proche du seuil d'ionisation est introduit dans un model utilisant une méthode L^2 développée dans un pseudo-espace engendré par un ensemble de fonctions de type Slater. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux de Bouamoud (1988-1989) utilisant les états 1s, 2s et 2p de l'atome d'hydrogène.

Mots clés : Principe variationnel de Schwinger, section efficace d'excitation, méthode pseudo-état, fonctions de type Slater

1. INTRODUCTION

Proton-Hydrogen atom Collision processes for a long time have attracted a great deal of interest on behalf theorists [1-8] and experimentalists [9-13]. Theoretical approximation methods and techniques (references cited above) were designed and developed in this regard and calculations compared with measurements directly accessible by the experience have always been the evidence on the reliability and efficiency of advanced models. Among these techniques and approximation methods, the Schwinger variational principle is an extremely powerful tool in estimation of cross sections and parameters associated. This principle has always motivated the theoretical physics group of Bouamoud [4-8] and it is in this same way that we want, through this work, make our contribution in the calculation and estimation on the hydrogenic ion-atom interaction process by including, in a later part, the continuum discretized on a set of the target states and pseudo-states. To be, in the first part, we apply the Schwinger variational principle to estimate excitation cross sections of atomic hydrogen by proton impact at intermediate energy. Variational transition matrix elements are developed first. It should be noted however, that the main contribution to the considered transition occurs at small angle (the forward scattering) for a collision of type $H^+ - H$ within an energy range of 50Kev [14]. In such a situation, the projectile describes a straight line trajectory and therefore we can treat the problem within the eikonal approximation [15].

We try, in a second part, to find an adequate representation of the continuum wave functions necessary for the evaluation of the transition matrix between discrete and continuum states of the target. We develop the wave functions of the target continuum states near the ionization threshold of the H atom on a complete and orthonormalized set of L^2 square integrable functions of Slater type in order to estimate continuum states contribution in excitation cross sections by proton impact at intermediates energy range.

We wish to point out that in the majority of first part, we imitate the assumptions and developments advanced by our group [4-8] and that in this work, it is the atomic unit which was adopted except in explicit mention.

2. THEORETICAL METHOD

2.1. Schwinger variational transition amplitude in the impact parameter formalism

The impact parameter method where the nuclei are assumed to move in a straight line, scattering states $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ and $|\psi_\beta^-(z)\rangle$, eigenvectors of the total Hamiltonian of the system, will meet respectively outgoing and incoming wave conditions in the \vec{z}

direction. Scattering states that are solutions of the Schrödinger equation within the impact parameters approximation method are determined almost systematically by the eikonal Lippmann-Schwinger integral equations [16]:

$$|\psi_\alpha^+(z)\rangle = |\alpha(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^+(z-z')V(z')|\psi_\alpha^+(z')\rangle \quad (01)$$

$$|\psi_\beta^-(z)\rangle = |\beta(z)\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' G_T^-(z-z')V(z')|\psi_\beta^-(z')\rangle \quad (02)$$

It should be noted, that initial and final states of the target are not only electronic \vec{x} coordinates dependent but also dependent on the direction $\vec{z} = \vec{\theta}t$ of $\vec{R} = \vec{\rho} + \vec{z}$ where $\vec{\rho}$ is the impact parameter checking the condition $\vec{\rho} \cdot \vec{\theta} = 0$ with $\vec{\theta}$ is the collision velocity reported in the frame of laboratory system. The eikonal Schwinger transition amplitude in fractional form is then written as [4-8].

$$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \frac{\left(-\frac{i}{\theta}\right)(\beta|V|\psi_\alpha^+) \left(\frac{i}{\theta}\right)(\psi_\beta^-|V|\alpha)}{\left(-\frac{i}{\theta}\right)(\psi_\beta^-|V-VG_T^+V|\psi_\alpha^+)} \quad (03)$$

Scattering states are not known exactly. We can take as states test vectors $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ such as:

$$|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle = |\psi_\alpha^+\rangle + |\delta\psi_\alpha^+\rangle \quad (04)$$

$$|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle = |\psi_\beta^-\rangle + |\delta\psi_\beta^-\rangle \quad (05)$$

These states are developed later on the set of the basic elements in a vector space of dimension N with their respective coefficients \tilde{a}_i and \tilde{b}_j . It will further be recalled that the transition amplitude $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ given by the relationship (03) is stationary with respect to small variations of the scattering states $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ and $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ around their exact values and inserting, in this circumstances, solutions of the equation $\delta a_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = 0$ in the expression of the approximate transition amplitude $\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$ obtained by replacing $a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$, $|\psi_\alpha^+(z)\rangle$ and $|\psi_\beta^-(z)\rangle$ by test vectors $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ respectively lead us to the final formulation of the Schwinger variational principle :

$$\tilde{a}_{\beta\alpha}(\vec{\rho}) = \left(-\frac{i}{\theta}\right) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\beta|V|i)(D^{-1})_{ij}(j|V|\alpha) \quad (06)$$

where $(D^{-1})_{ij}$ represents the element (i,j) of the matrix D^{-1} , opposite of D defined by the elements :

$$D_{ij} = (j|V-VG_T^+|i) \quad (07)$$

It should be noted however, that, during the development of approximated scattering states $|\tilde{\psi}_\alpha^+\rangle$ and $|\tilde{\psi}_\beta^-\rangle$ we took into consideration first, a basis consisting only of target bound states (discrete states) and we have ignored the inclusion of capture states (continuum states) on the projectile. This assumes that the effect of coupling between the capture and excitation must be low for the variational principle to remains reliable and this is true when the projectile charge is lower than that of the nucleus.

Subsequently, we try to estimate the continuum and its contribution in the excitation cross sections which is still not negligible in the range of energies

which we are interested and more particularly between 2KeV and 40KeV.

2.2. Pseudo-continuum within L^2 method

It is very advantageous to deal with orthogonal polynomials and orthogonal functions. The L^2 Slater-type functions of Callaway et al [17], [18] are not orthogonal functions. However, those functions [19], [20], [21], [22] become quite favorite insofar as they are able to imitate the first accurate states of the target hydrogen atom. Those L^2 functions that have associated eigen energies negative and approaching the discrete spectrum (bound states) of the target atom are voluntarily retained in our development. The L^2 functions of Callaway that have positive energies and that represent virtually the target states are called pseudo states. Those pseudo states non-normalizable by a Kronecker delta function, are added subsequently to approach the continuum of the target states and account for transitions to the continuous atomic states in the energy range in interest. However, the combination in the same development, of discrete states and continuum states is not always desirable for the simple reason that those states are not normalizable in the same manner. To overcome this difficulty, a strategy of Gram-Schmidt orthogonalisation ([12], [23], [24]) used as a discretization procedure of the continuum states (pseudo states) on the basis set of target eigenstates gave us the opportunity to surmount the problem of normalization and ensure orthogonality between target eigenstates and between pseudo states and target eigenstates.

In a close coupling development for electron-hydrogen atom scattering, Burke and Mitchell [25] use the first eigenstates 1s and 2s of the isolated hydrogen target. To the states 1s and 2s with angular orbital momentum $L = 0$, they add pseudo states of configurations ($\overline{n\bar{s}}$) whose behavior is governed by the set of functions of the form

$$\Phi_n = \sum_{j=1}^n A_{nj} r^{j-1} e^{-\alpha_j r} \quad (08)$$

The parameter α takes the value 0.5 for the function Φ_n to have the same behavior that the state hydrogen 2s, while the A_{nj} coefficients are chosen in such a way that functions Φ_n are orthogonal and orthogonal to the hydrogen 1s and 2s functions. Convergence in the close coupling development was examined by adding to the states 1s and 2s at least a pseudo-state from the set $\overline{3s}$, $\overline{4s}$ and $\overline{5s}$.

In a more elaborate calculation, states and pseudo-states of Callaway and Wooten [18], [19] [21] (1s, 2s, 2p, and 3d states and $\overline{3s}$, $\overline{4s}$, $\overline{5s}$, $\overline{3p}$, $\overline{4p}$, $\overline{5p}$ and $\overline{4d}$ pseudo-states), for a given orbital angular momentum, are built by diagonalization of the Hamiltonian of the target in a set of Slater type orbital of the form $r^{j-1} e^{-\alpha_j r}$ with selected exponent j and α_j in such a way that some low eigenenergy should be accurate. The cross sections obtained are in good

agreement with calculations of Burke and Webb [26] which use a close coupling approximation in which hydrogen states 1s, 2s and 2p are held in addition to two pseudo states of configuration $\overline{3s}$ and $\overline{3p}$ of the form

$$R_{\overline{3s}}(r) = (a_1 + a_2 r + a_3 r^2) e^{-\alpha r} \quad (09)$$

$$R_{\overline{3p}}(r) = (b_1 + b_2 r) e^{-\beta r} \quad (10)$$

The linear parameter a_j and b_j in the development of Burke and Webb are determined so that the $R_{\overline{3s}}$ and $R_{\overline{3p}}$ pseudo states are normalized and orthogonal to the hydrogen eigenstates 1s, 2s and 2p. While, the parameters α and β should ensure an exponential decay of the considered pseudo-states similar in magnitude to that of eigenstates $n = 2$ respectively.

The excitation energies threshold to the pseudo states must coincide with the ionization threshold of the hydrogen atom with the well-known value of 13.6 eV. As it was mentioned previously [13], pseudo-states calculations of excitation cross sections 1s-2s and 1s-2p of Burke and Webb brought a considerable improvement over the usual close coupling calculation.

A common advantage shared between L^2 functions used in the previously cited works remains in the simple profile providing an unconquerable flexibility. They are usually represented by monomials or polynomials multiplied by a decreasing exponential of witch summation results in general are in complete or incomplete gamma functions defined and tabulated in the reference book of Abramowitz and Stegun [27].

We would like to remind that the radial Callaway and Unnikrishnan functions [18] that we have adopted in this work make part of this category of functions witch scalar product, with near operator acting on a function, converge. So that overlapping integral occur with operator unity, while kinetic energy integral results from kinetic operator and potential energy integral results from potential operator. A combination of the last two integrals is none other than the ultimate total energy of the system and the identification of this integral, with overlapping integral of both radial orbital is the Schrödinger equation in matrix version.

In order to integrate the Schrödinger equation, a discretization procedure using Numerov algorithm [28], [29], [30], [31], [32], [33] on a grid points with a well defined area allowed us to test the radial functions of Callaway and Unnikrishnan corresponding to the first three bound states and some states close to the continuum near of the ionization threshold of the target.

Positive and negative energy of the continuum states and bound states respectively are located at a definite point of the Numerov grid. Turning point [28] is obtained by the classical secant method for finding the zero of a function $q(r) = 2(\epsilon - V(r))$ in Schrödinger equation through the radial interval

delimiting the grid from the left end towards the right end and vice versa.

2.3. TRANSITION AMPLITUDE

Radial integrals required to evaluate matrix elements D^{-1} and subsequently the transition amplitude (06) leads, for integer value N and l and inter-nuclear separation R , to the form

$$I(\vec{R}) = \frac{(N-1)!}{\alpha_{ij}^N R^{l+1}} \{1 - e_{N-1}(\alpha_{ij}R)e^{-\alpha_{ij}R}\} + \frac{R^l}{\alpha_{ij}^{N-2(l+1)}} \cdot (N-2l-2)! e_{N-2l-2}(\alpha_{ij}R)e^{-\alpha_{ij}R} \quad (11)$$

This formula and some other one which are similar with some appropriate expansion coefficients are very useful in the calculation of bound-bound states transition elements and bound-free states transition elements.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Using the FORTRAN code developed by Bouamoud [34, 35] within the framework of the Schwinger variational principle, we tried to reproduce the excitation cross sections of hydrogen atom by proton impact at intermediate energies. Excitation cross sections to $n = 2, 2p$ and $2s$ states in particular, are illustrated in figures below.

It seems quite reasonable to find the profiles obtained by Bouamoud since no changes were made in the calculations procedure in the range of impact energy between 15KeV and 200KeV with the exception of the excitation to $2s$ state (figure. 5) where we have extended the range of impact energy to 2KeV.

Figures 1 and 2 represent total excitation cross sections to the $n = 2$ state. Figure 3 represent excitation cross-sections to $2p$ state ($2p_{-1}, 2p_0$ and $2p_{+1}$) while figures 4 and 5 represent excitation cross sections to the $2s$ state. Excitation cross sections to the state $n=2$ results essentially from competitive contribution of transitions to $2s$ states and $2p$ states ($2p_{-1}, 2p_0$ and $2p_{+1}$) from the ground state $1s$. In all of figures 1-4, excitation cross sections of hydrogen atom by proton impact at intermediate energies are compared with theoretical calculations (Schw55 [34], Schw1414 [36], Ford et al. [37], Schakashaft [38] and Slim et al [39]) on one hand and the experimental results (Barnett et al [40], Detleffsen et al. [41] and Higgins et al [42]) on the other hand.

Figures 1-4, in general, proves a reasonable agreement between HExact (present calculations) and the others theoretical calculations. It will be noted, also, the acceptable agreement with experimental results of Barnett et al in figure 1-2 and Detleffsen et al in figure 3. However, illustration of cross sections in figure 4 shows a discrepancy between present calculations and experimental results of Higgins et al for the $2s$ excitation in the range of impact energy between 15KeV to 200KeV

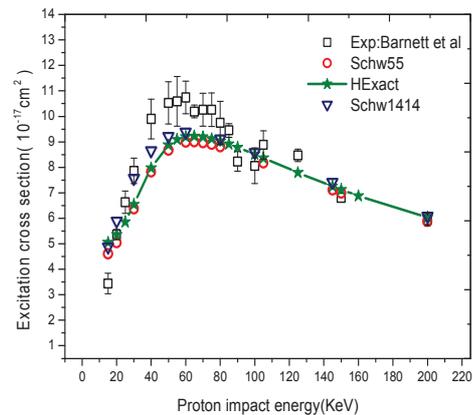


Fig. 1. Excitation cross sections to the state $n=2$, theoretical: HExact (present calculation), Schw55 and Schw1414, Experimental: Barnett et al.

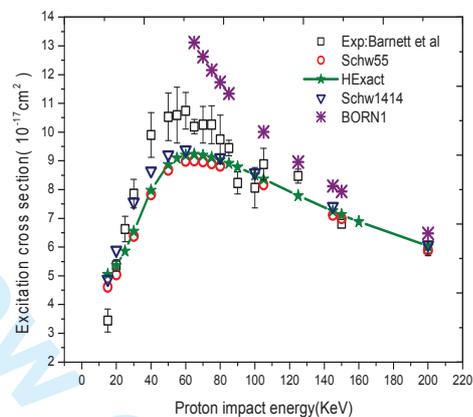


Fig. 2. Excitation cross sections to the state $n=2$, theoretical: HExact (present calculation), Schw55, Schw1414 and BORN1, Experimental: Barnett et al.

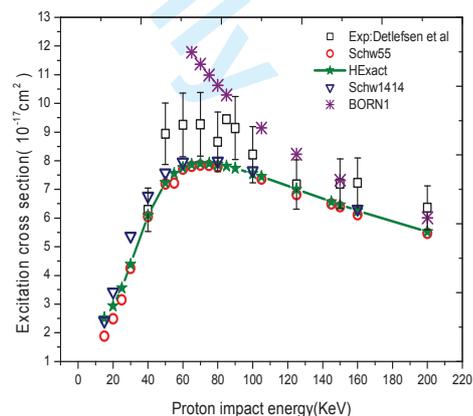


Fig. 3. Excitation cross sections to the state $2p$, theoretical: Schw55, HExact (present calculation), Schw1414 and BORN1; Experimental: Detleffsen et al

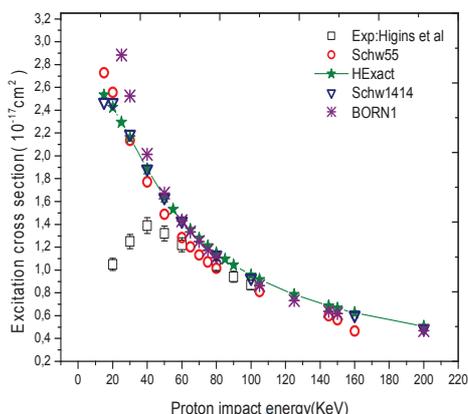


Fig. 4. Excitation cross sections to the state $2s$, theoretical: Schw55, HExact (Present calculation), Schw1414 and BORN1; experimental: Higgins et al.

The divergence of the first Born calculations (BORN1) at low and intermediate energies in figures 2, 3 and 4 seems to be undeniable. By analyzing figure 4, we have a strong impression that the $2s$ state excitation cross sections behave like first the Born calculation preferably applicable in high energy range. On the other hand, the analysis of figure 1 jointly with figure 4 above shows, in a persuasive way, that excitation cross sections to $2s$ state, even if they are highly overestimated, must pass through a maximum slightly dimmed in figure 4 due to a voluntarily limitation to 15KeV of the impact energy range with the target.

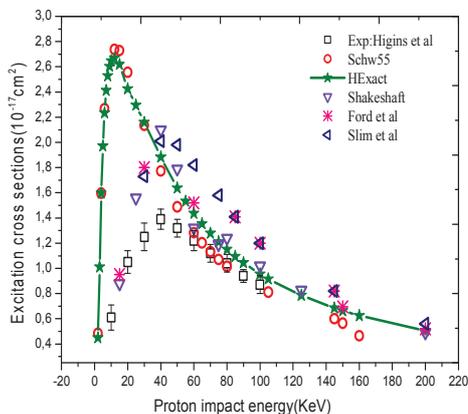


Fig. 5. Excitation cross sections to the state $2s$, theoretical: Schw55, HExact (Present calculation), Shakeshaft, Ford et al and Slim et al; experimental: Higgins et al.

This observation invited us thereafter, to expand the range of impact energy below to 15KeV (figure 5). It also invites us to try to confirm the conjecture of the existence of a coupling between electron capture and excitation in this interval between 2KeV and 40KeV and higher and focus on competition between channels simultaneously open in the same energy

range. Such information on a competition in the range of energy qualified to be low and intermediate in which contributes all open channels in mutual way is a major interest of the investigations on ion-atom and ion-multicharged ion collision.

We have seen that it would be appropriate to examine more closely the region close to the ionization threshold energy, to hunt down the continuum of the target in this region and to choose the wave functions best suited to represent this continuum. Indeed, transitions to the continuum of the target states will be possible once the opening of a channel of electron capture. The opening of this channel of electron capture is attributed, according to some authors [43, 44, 45, 46, 47, 48], to the existence of a coupling between intermediate states of a united atom He^+ which may be produced at small separation projectile-target and target continuum states at energies lower than 30KeV. This more or less strong-coupling is most often enjoyed by evaluation of overlap integral between the continuum of the target wave functions and the wave functions of the intermediate states of the united Atom He^+ .

Electron capture on intermediate states of a united atom He^+ , even passing through intermediate states H_2^+ [48], is not the single open channel in proton-hydrogen atom collision process at low and intermediate energies. Indeed, an electron capture on the projectile via ionization of the target can be considered and [49, 50, 51, 52, 53] authors who have analyzed the process in question suggest the inclusion of ionization states at the opening capture channel according to a classical Thomas two-step mechanism[54] for impact energies greater than 40KeV. Less likely in this energy range and particularly inspected at high energy range, single ionization, in contrast, is far from to be involved in the process according to the same authors.

Examination of different channels open in the proton-hydrogen atom collision process analyzed in the literature referenced above is not the scope of this work. However, we have had convictions on an almost indisputable contribution of the target continuum in cross sections of channels, jointly opened in the energy range that interests us. The excitation of atom by proton impact at intermediate energies makes, categorically, part of the channels competitively open in the process. Excitation processes has particularly attracted our interest in this work and the results of calculations on excitation cross sections that we have obtained are presented in figures below.

The radial wave functions of Callaway and Unnikrishnan are Slater type functions. These functions were severely tested within Numerov discretization procedure. The behavior of these functions for different values of energy E , whether negative or positive, the scale factor ζ and the power λ of r represented in figures below.

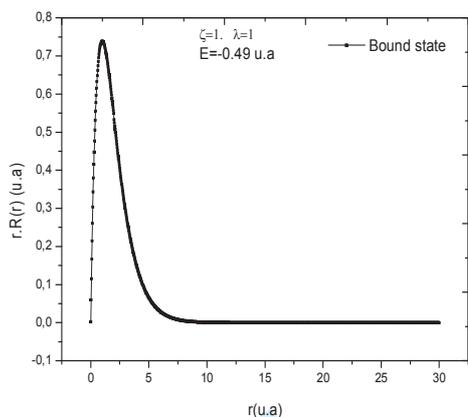


Fig. 6. Callaway and Unnikrishnan radial wave function time r , bound state 1s of hydrogen target atom with correspondent Eigen-energy -0.5au

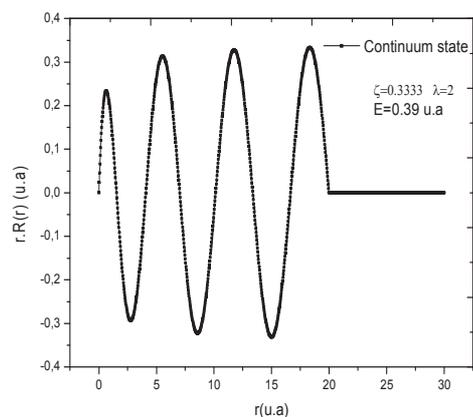


Fig. 9. Callaway and Unnikrishnan radial wave function time r , continuum state of hydrogen target atom with correspondent energy 0.39au .

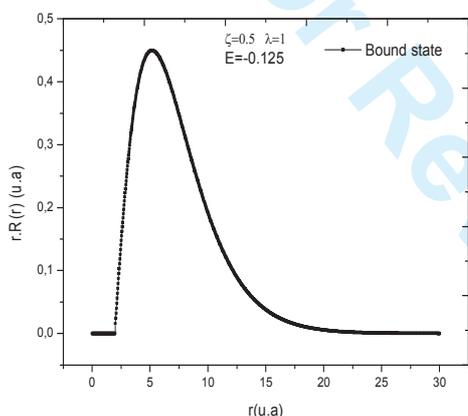


Fig. 7. Callaway and Unnikrishnan radial wave function time r , bound state 2s of hydrogen target atom with correspondent Eigen-energy -0.125au .

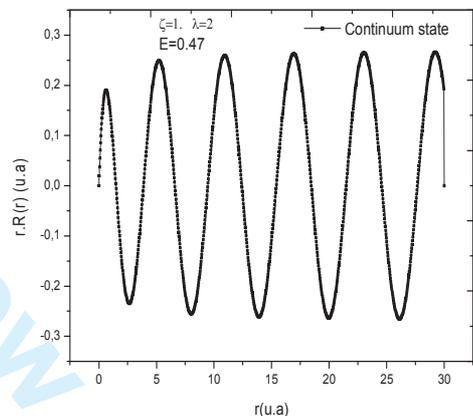


Fig. 10. Callaway and Unnikrishnan radial wave function time r , continuum state of hydrogen target atom with correspondent energy 0.47au .

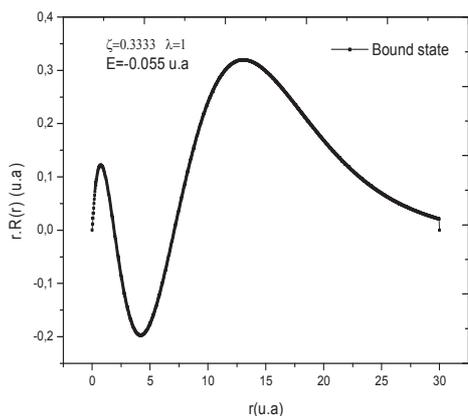


Fig. 8. Callaway and Unnikrishnan radial wave function time r , bound state 3s of hydrogen target atom with correspondent Eigen-energy -0.05au .

This result gave us, eventually, the opportunity to take advantage and trying to properly describe the target continuum states near of the ionization threshold. To do so, we proceed in figure 14 and 15 within a Gram-Schmidt orthogonalization algorithm where we have discretized the target continuum states represented by Callaway and Unnikrishnan functions with zero angular momentum and positive energy in a set of the first three exact hydrogen atom states 1s (H1s), 2s (H2s) and 3s (H3s) illustrated in figures 11, 12, and 13 with correspondent exact energies and coefficients ($E=-0.5\text{au}$, $\zeta=1$, $\lambda=1$), ($E=-0.125\text{au}$, $\zeta=0.5$, $\lambda=1$) and ($E=-0.055\text{au}$, $\zeta=0.3333$, $\lambda=1$) respectively.

Pseudo-states noted DCWF1 and DCWF2 for discretized continuum wave functions 1 and 2 obtained within Gram-Schmidt orthogonalization procedure are shown for appropriate energies and coefficients in figure 14 and 15.

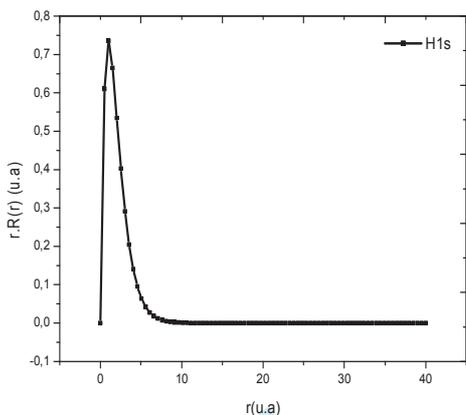


Fig. 11. Exact radial wave function time r , bound state $1s$ of hydrogen target atom with correspondent energy and coefficients $E=-0.5au$, $\zeta=1$, $\lambda=1$.

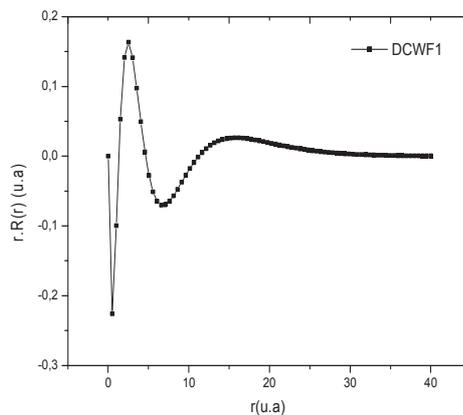


Fig. 14. Discretized continuum wave function time r , pseudo-state $\bar{3}s$ of hydrogen target atom.

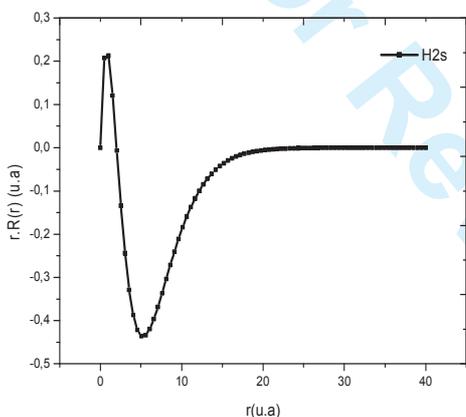


Fig. 12. Exact radial wave function time r , bound state $2s$ of hydrogen target atom with correspondent energy and coefficients $E=-0.125au$, $\zeta=0.5$, $\lambda=1$.

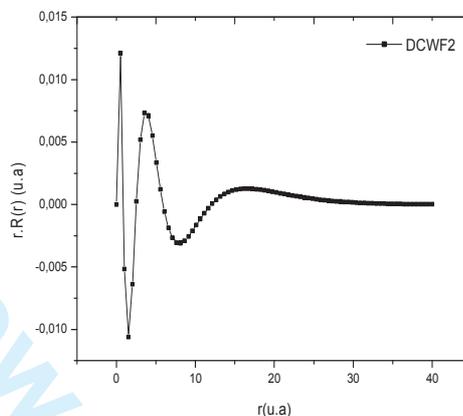


Fig. 15. Discretized continuum wave function time r , pseudo-state $\bar{4}s$ of hydrogen target atom.

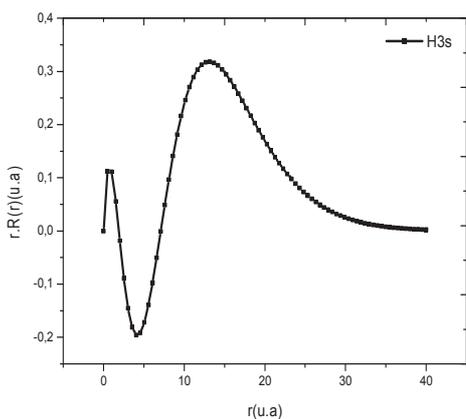


Fig. 13. Exact radial wave function time r , bound state $3s$ of hydrogen target atom with correspondent energy and coefficients $E=-0.055au$, $\zeta=0.3333$, $\lambda=1$.

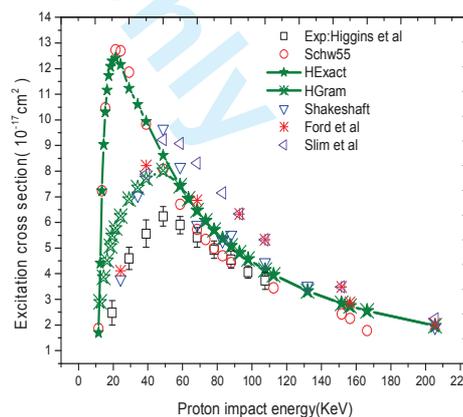


Fig. 16. Excitation cross sections to the state $2s$, HGram (Present calculation) using pseudo-states $\bar{3}s$ and $\bar{4}s$.

In figure 16, we have reproduced the same cross sections (Schw55, HExact) from figure 3 to confront them with the excitation cross sections (HGram),

issues from contribution of continuum states discretized on pseudo states using Gram-Schmidt orthonormalization procedure on a set of the three first accurate hydrogen wave functions. Excitation cross sections (HGram) shown in figure 14, seems significantly improved with respect to the calculation results (Schw55, HExact) in which only bound states 1s, 2s and 3s are used.

4. Conclusion

Contribution of the target continuum states in excitation cross section just above the ionization threshold has made the main objective of this work. In order to represent the target continuum states adequately, the wave functions for which associated energies are negative must have at least the behavior of the three first exact states of the hydrogen atom. This criterion of choice of the wave function being filled, we use a Gram-Schmidt discretization procedure of the continuum states near the ionization threshold of the target on a complete set of L^2 functions generated by the exact orthonormal states of hydrogen atom. The resulting basis can be expanded to cover a larger complete set containing the exact or quasi exact discrete states and target continuum pseudo states near ionization threshold of the target.

In this work, we have considered the first three exact states of hydrogen atom and two pseudo states of the continuum near the ionization threshold of the target. The results obtained on the excitation cross sections of the hydrogen atom by proton impact at intermediate energies were satisfactory. We used the Schwinger variational principle in the context of the impact parameter method to evaluate the cross sections. No difficulty was encountered in insertion of the continuum that was made possible by using a flexible fractional eikonal formulation of the Schwinger principle and orthonormalization properties of exact states or exact states and pseudo-states of the target.

It will be very suitable to improve the convergence and obtain better result by enlarging the basis set and adding other states and pseudo-states.

REFERENCES

1. R. Gayet and J. Hanssen 1992, *J. Phys.* **B25** 825.
2. R. Gayet and J. Hanssen 1994, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* **B86** 52.
3. B. Brendlé, R. Gayet and K. Wohrer 1985, *Phys. Rev. Lett.* **54** 2007.
4. R. Gayet and M. Bouamoud 1989, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* **B42** 515.
5. B. Lasri, M. Bouamoud and R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*, 20 12(2004).
6. B. Lasri, A. Bouserhane, M. Bouamoud and R. Gayet, *Physical and Chemical News Journal*. **28** (2006)97-102.
7. A. Bouserhane, M. Bouamoud and B. Lasri, *Journal of Scientific research N 4*, Vol. 1(2013), p. 3-6.
8. B. Lasri, M. Bouamoud and J. Hanssen, *Journal of Electron Devices*, Vol. 5(2007), pp. 127-131
9. D. P. Higgins, J. Geddes and H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B29** 1919 (1996).
10. D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner and K-H Schartner, *J. Phys.* **B27** 4195(1994).
11. T. J. Morgan, J. Geddes and H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B6** 2118(1973).
12. M. B. Shah and H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B14** 2361(1981).
13. M. B. Shah, D. S. Elliott and H. B. Gilbody, *J. Phys.* **B20** 2481(1987).
14. B. Brendlé, R. gayet, J. P. Rozet and K. Wohrer, *phys. Rev. Lett.* **54** 2007(1985).
15. R. J. Glauber, *Lectures in Theoretical Physics*, ed. by W. E. Brittin and L. G. Dunham, Interscience Publishers, Inc., New York, Volume I, page 315, (1959).
16. R. K. Janev and A. Salin, *Ann. Phys. N.Y.* **73** 136 (1972).
17. B. H. Bransden and M. R. C. McDowell, *Phys. Lett.* **30C**(1977) 207
18. J. Callaway and K. Unnikrishnan, *Phys. Rev.* **A48** (1993) 4292.
19. J. Callaway and J. W. Wooten, *Phys. Rev.* **A9** (1974) 1924.
20. J. Callaway and J. W. Wooten, *Phys. Rev.* **A11** (1975) 1118.
21. J. Callaway and J. F. Williams, *Phys. Rev.* **A12** (1975) 2312.
22. J. Callaway, M. R. C. McDowell and L. A. Morgan, *J. Phys.* **B8** (1975) 218.
23. J. Stoer and R. Bulirsch, *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag (1993).
24. G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computation*, Johns Hopkins University Press (1996).
25. P. G. Burke and J. F. B. Mitchell, *J. Phys.* **B6** (1973) 320.
26. P. G. Burke and T. G. Webb, *J. Phys.* **B3** (1970) L13.
27. M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Function*, National Bureau of Standards (1970).
28. T. Pang, *An Introduction to Computational Physics*, Cambridge University Press, New York (2006).
29. M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* **146** (2002) 225-249.
30. M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* **146** (2002) 254-260.
31. J. Thijssen, *Computational Physics*, Cambridge University Press (2007).
32. J. L. D. Garret et M. A. S. Lozano, *Comput. Phys. Commun.* **180**(2009)768.
33. J. P. Leroy and R. Wallace, *Journal of Computational Physics* **67** (1986) 239-252.
34. M. Bouamoud, Thèse de doctorat d'état, Université de Bordeaux-I (1988).
35. R. Gayet and M. Bouamoud, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **42** 515-522 (1989).
36. B. Lasri, Thèse de Doctorat es Science, Université de Tlemcen.
37. L. Ford, J. F. Reading and K. A. Hall, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 4537 (1993).
38. H. A. Slim and A. Ermolaev, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** L203 (1994).
39. R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **18** 1930 (1978).
40. C. F. Barnett, Oak Ridge National Laboratory Report No 6086 (1990).

41. D. Detleffsen, M. Anton, A. Werner, and K-H Schartner, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** (1994) 4195.
42. D. P. Higgins, J. Geddes and H. B. Gilbody, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** (1996) 1219.
43. Wilets and Gallaher, *Phys. Rev.* **147**(1966) 13-20.
44. Gallaher and Wilets, *Phys. Rev.* **169** (1968) 139-149.
45. M. Cheshire, *J. Phys. B.* **1**(1968) 428-437.
46. M. Cheshire, D. F. Gallaher and A. J. Taylor, *J. Phys. B.* **3**(1970)813-832.
47. D. G. M. Anderson, M. J. Antal and M B McElroy, *J. Phys. B.* **7** (1974) L118.
48. M. J. Antal, M B McElroy and D G M Anderson, *J. Phys. B.* **8** (1975) 1513.
49. M. McCartney and D. S. F. Crothers, *J. Phys. B.* **27**(1994) L485-L488.
50. M. McCartney and D. S. F. Crothers, *J. Phys. B.* **26**(1993) 4561.
51. N. Toshima, *Phys. Rev. A* **42** (1990) 5739.
52. D. Belkic, R. Gayet and A. Salin, *Phys. Rep.* **56**(1979) 279.
53. D S F Crothers and L J Dubé, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* **30**(1993) 287.
54. L. H. Thomas, *Proc. R. Soc. A* **114**(1927)561.

APPENDIX

Nomenclature

$ \alpha\rangle$	Initial state in the incoming channel
$ \beta\rangle$	Final state in the outgoing channel
G_T^+	Outgoing Green's function
G_T^-	Incoming Green's function
$V(z)$	Coulomb potential
\vec{z}	Direction of incidence
\vec{R}	Distance projectile-target core
$\vec{\rho}$	Impact parameter
\vec{g}	Collision velocity
$a_{\beta\alpha}(\vec{\rho})$	Transition amplitude
A_{nj}	Pseudo state expansion coefficient

For Review Only

Answer to comment

Reviewer 1

1. We use Slater type functions which are not orthogonal. These functions are used by Callaway and Unnikrishnan in the case of electron-hydrogen atom process. To adapt these functions in our model, we use Gram-Schmidt procedure to obtain a set of orthonormalized functions.
2. As we know, the problem of the united atom is discussed in the work of Cheshire et al(1970). This problem is also discussed a few years later by Anderson et al(1974) and Antal et al(1975) in the foundation of triple center approximation. In all of these works, authors suggest the inclusion of intermediate states of the united atom He^+ to improve the convergence of the calculations in proton-hydrogen atom collision process. They note that the hydrogen continuum states is strongly coupled to intermediate states of the united atom He^+ at low and intermediate energy range at small separation between the proton and the hydrogen atom target. In our model, we hope to reach this goal with addition of other continuum states among which we can find those with strong coupling with intermediate states of the united atom He^+ .

Reviewer 2

1. I have written the text in Microsoft word 2007(text.docx). Converted in word 2003 with the format text.doc for submission, the text is completely changed. I think that the loss of clarity in the text is due to this problem.
2. In figures we have represented functions of Slater type time the radial position r . therefore, the results is zero for $r = 0$.
3. Our work is focused in collision process in proto-hydrogen atom and unfortunately, I have not free access to current literature in this problem.

Reviewer 3

1. Correction and modification where written in green character.
2. A paragraph is added to clarify the pseudo-state calculation of transition amplitude (Pseudo transition amplitude).

For all reviewers:

We hope that we have answered all of questions and comments.

Authors: A. Bouserhane and M. Bouamoud

Résumé

Nous avons utilisé le principe variationnel de Schwinger eikonal sous forme fractionnaire pour évaluer les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton aux énergies intermédiaires. Les amplitudes de transition entre états discrets de la cible ont été évaluées en premier. Ces grandeurs vitales nous ont permis par la suite un accès direct aux sections efficaces d'excitation dans la gamme des énergies qui nous intéresse.

Dans le but d'apprécier la contribution des états du continuum de la cible, le continuum proche du seuil d'ionisation a été représenté en premier par des pseudo-états de la cible avec les énergies positives appropriées. Ces pseudo-états ont été discrétisés sur la base d'un ensemble complet de fonctions L^2 de carrés sommables. L'ensemble des fonctions de carrés sommables choisi été soit l'ensemble orthonormé des fonctions hydrogénoïdes soit l'ensemble des fonctions L^2 de type Slater orthonormalisée par la procédure de Gram-Schmidt. Comme résultat, les sections efficaces d'excitation de l'atome d'hydrogène par impact de proton se sont vues nettement améliorées dans la gamme des énergies considérées.

Mots clé : principe variationnel de Schwinger, méthode L^2 , méthode pseudo-état

Abstract

The eikonal Schwinger variational principle in fractional form was used to assess the excitation cross sections of hydrogen atom by proton impact at intermediate energies. The transition amplitudes between discrete states of the target are evaluated first. Those vital quantities have allowed us direct access to excitation cross sections in the energy range in interests.

In order to appreciate the continuum contribution near the ionization threshold, the continuum was first represented by target pseudo-states with appropriate positive energies. Those pseudo-states have been discretized subsequently on the basis of a complete set of L^2 square integrable functions. The set of square integrable functions was chosen to be either the orthonormal set of hydrogen-like functions or L^2 Slater type functions orthonormalized within the Gram-Schmidt procedure. As a result, excitation cross sections of hydrogen atom by proton impact views significantly improved in the range of considered energies.

Key word: Schwinger variational principle, L^2 method, pseudo-state method

ملخص

تم استعمال المبدأ التغيري لشوينجر على شكل كسري لحساب المقاطع الفعالة لإثارة ذرة الهيدروجين في حالة تصادمها مع البروتون عند الطاقات الوسطية. سعت الإنتقال بين حالات الإستمرارية للهدف تم إحتسابها في أول الأمر. هذه الكميات الحيوية مكنتنا فيما بعد من الولوج المباشر للمقاطع الفعالة للإثارة في المجال الطاقوي الذي نحن بصدده.

لقد تم إقحام الحالات الذرية ذوات الاستمرارية الطاقوية في حدود التأين لكي يتسنى لنا معرفة مدى تأثير هذه الحالات على الاثارة المباشرة للذرة. وقد تم ذلك بالتعبير عنها في بادىء الأمر عن طريق حالات تقريبية غير واقعية للهدف بطاقات موجية قريبة من الواقع. هذه الحالات التقريبية تم نشرها على أساس مجموعة كاملة من الدوال ذات التوزيع التكاملي L^2 . مجموعة الدوال ذات التوزيع التكاملي المستعملة هي إما مجموعة الدوال الهيدروجينية المتعامدة وإما مجموعة الدوال L^2 من فئة سليتر التي أتم تعامدها على طريقة جرام-شميد. كنتيجة, المقاطع الفعالة لإثارة ذرة الهيدروجين في حالة تصادمها مع البروتون لوحظ تطورها بوضوح في المجال الطاقوي الذي يهمنا.

الكلمات المفتاحية: المبدأ التغيري لشوينجر, طريقة L^2 , طريقة الحالات التقريبية.