

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : Ph/TH/10/2020.



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: ABDELHAFID Cheyma et BEN CHARIF Chaima

Intitulé

Propriétés de transport dans les collisions
ion - atome

Soutenu le 22 /09 /2020 devant le jury composé de:

MEDJDEL Soheyb	Université	M'sila	Président
BOUCHELAGHEM Fouzia	Université	M'sila	Rapporteur
NEHAOUA Samra	Université	M'sila	Examineur

Année universitaire : 2019/2020

Dédicace

Nous dédions ce modeste travail aux plus chers:

Mères et Pères pour leurs dévouements, leurs amours leurs sacrifices et leurs encouragements.

Nous prions le bon dieu de les bénir, de veiller sur eux, en espérant qu'ils seront toujours fiers de nous.

Notre profonde affectation et tendresse.

A nos frères et à nos sœurs.

A toute la famille. Ils vont trouver ici l'expression de nos sentiments de respect et de reconnaissance pour le soutien qu'ils n'ont cessé de nous porter.

A tous nos enseignants du primaire jusqu'à l'université.

A tous nos collègues de promotion 2019-2020 sans aucune exception.

Remerciements

*Nous tenons à remercier **ALLAH** qui nous a donné la force de faire ce modeste travail.*

*Nous tenons à remercier notre encadreur Madame **F. Bouchlaghem** qui nous a orientées et nous a conseillées afin d'accomplir ce travail.*

*Nous devons beaucoup à Monsieur **S. Medjedel** de nous avoir honoré et accepté de présider le jury de soutenance de notre mémoire. Nous le remercions très sincèrement.*

*Nos sincères remerciements s'adressent aussi à Madame **S. Nehaoua** d'avoir accepté de faire partie du jury. Qu'il trouve ici notre profond respect*

Nous remercions aussi tous les professeurs de départements de physique.

Nous ne pouvons pas aussi oublier nos amis et nos collègues en lointain et proche, ainsi tous ceux qui ont participé de lointain ou de près et qui nous ont aidés à l'élaboration de ce mémoire.

Sommaire

Introduction	1
Introduction générale.....	2
1. Théorie des collisions binaires.....	3
<i>1.1 Problème à deux corps</i>	<i>3</i>
1.1.1 Notion de section efficace	6
1.1.2 Ondes partielles.....	8
<i>1.2 Déphasage</i>	<i>9</i>
<i>1.3 Approximation semi-classique.....</i>	<i>10</i>
2. Cas des systèmes $\text{Li}^+ - \text{He}$, $\text{K}^+ - \text{He}$, $\text{Na}^+ - \text{He}$	12
2.1 <i>Construction du potentiel</i>	<i>12</i>
2.1.1 Courte distances	13
2.1.2 Grandes distances.....	13
2.1.3 Distances intermédiaires	14
2.2 Résultats et discussion:	14
2.3 <i>Calcul du déphasage</i>	<i>20</i>
2.4 <i>Section efficace</i>	<i>22</i>
3. Propriétés thermophysiques.....	23
3.1 <i>Diffusion</i>	<i>23</i>
3.2 <i>Mobilité réduite</i>	<i>24</i>
3.1 <i>Résultats et discussion.....</i>	<i>24</i>
Conclusion.....	28
Annexe A Symétries moléculaires.....	30
Annexe B	31
Equation de Boltzmann	31

Introduction

Introduction générale

Ces dernières décennies plusieurs travaux théoriques et expérimentaux se sont consacrés aux mesures des propriétés thermo-physiques des ions alcalins M^+ en collision avec atomes de gaz rares. Cette étude est importante dans de nombreux domaines de la chimie, biochimie et de la physique des plasmas.

Dans ce sens nous avons traité le potentiel d'interaction et les propriétés thermo-physiques entre les alcalins ions (Li^+ , K^+ , Na^+) et le Hélium He dans l'état moléculaire fondamental $X^1\Sigma$.

Pour aller à ce but, nous avons utilisés le programme Fortran capable de générer les paramètres de transport pour l'interaction ion-atome. Ceci doit conduire à la possibilité du calcul ces coefficients de transport, telle que la diffusion et la mobilité réduite.

Ce mémoire est exposé en trois chapitres, dans le premier chapitre nous exposerons très brièvement les notions générales sur la collision ion-atome en tenant compte l'étude théorique réalisée par [1].

Le deuxième chapitre présente les méthodes que nous avons utilisées dans la construction des courbes d'énergies potentielles des différents systèmes $Li^+ - He$, $K^+ - He$ et $Na^+ - He$. Ensuite, ces potentiels d'interaction seront utilisés dans la résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour déterminer les déphasages $\eta_l(E)$ en fonction de l'énergie E et du moment cinétique angulaire.

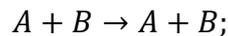
En outre, nous traitons les sections efficaces élastiques et leur variation avec l'énergie.

Nous avons évalué dans le troisième chapitre les propriétés thermo-physiques des systèmes $Li^+ - He$, $K^+ - He$ et $Na^+ - He$. Le modèle de Chapman-Enskog [2] sera utilisé pour le calcul des coefficients de diffusion et mobilité en fonction de la température T , ce modèle devient progressivement important comme outil de simulation dans la physique des plasmas.

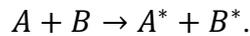
Chapitre 1

1. Théorie des collisions binaires

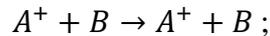
Lorsque deux particules A et B entrent en collision, on peut considérer qu'il se forme, pendant le temps très court que dure la collision, un édifice complexe « quasi moléculaire » (AB) qui se détruit pour redonner les particules initiales A et B , soit dans leurs états initiaux (collisions élastiques)



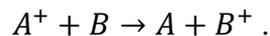
soit dans des états excités (collisions inélastiques)



Si A est un ion (A^+), B un atome neutre, on peut avoir, dans certaines conditions que l'on déterminera, formation d'un état « quasi moléculaire » (AB^+). Suivant la voie (channel) que suit (AB^+), il peut se détruire en redonnant soit A^+ et B (collision élastique)



soit B^+ et A (échange d'électron)



soit des structures plus complexes [3].

Nous nous intéressons dans ce chapitre aux collisions purement élastiques de type ion-atome.

1.1 Problème à deux corps

Le mouvement de deux particules en interaction peut être réduit en mécanique quantique, comme en mécanique classique à celui d'une seule particule fictive. Soit la collision d'une particule de masse m_1 à la position \mathbf{R}_1 avec une autre particule de masse m_2 à la position \mathbf{R}_2 . Le schéma de principe d'une telle collision est donné sur la **Fig 1-1**.

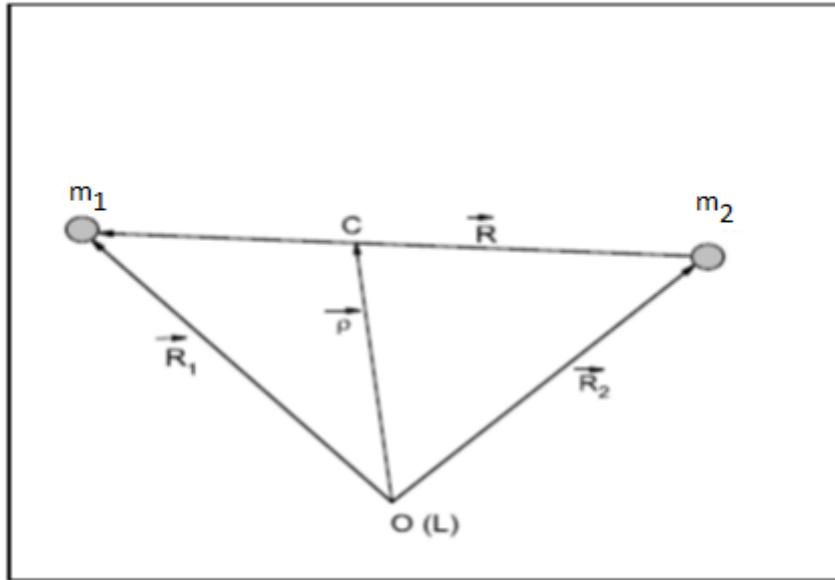


FIG 1-1 Collision ion-atome dans le système du laboratoire.

On suppose que ces particules sont sans structures internes et que leurs mouvements sont non relativistes. Dans ce cas, pour un système de deux particules en collision d'énergie totale E_{tot} , l'équation de Schrödinger s'écrit

$$H\phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = E_{tot} \phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \quad (1.1)$$

où $\phi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ est la fonction d'onde générale du système de deux particules et H est son hamiltonien défini par l'expression

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_2 + V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \quad (1.2)$$

Δ_1 et Δ_2 étant les opérateurs de Laplace et $V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ l'énergie potentielle d'interaction des deux particules.

Supposons en outre que l'interaction dépend seulement du vecteur de position relative

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2 \quad (1.3)$$

Le vecteur position $\boldsymbol{\rho}$ du centre de masse (C) est ainsi défini par

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{m_1 \mathbf{R}_1 + m_2 \mathbf{R}_2}{m_1 + m_2} \quad (1.4)$$

L'hamiltonien (1.2) de ce système devient donc après quelques transformations mathématiques

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R + V(\mathbf{R}), \quad (1.5)$$

où Δ_ρ et Δ_R sont les opérateurs de Laplace mettant en jeu, respectivement, les composantes des vecteurs $\boldsymbol{\rho}$ et \mathbf{R} , $M = m_1 + m_2$ est la masse totale du système et $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, la masse réduite du système des deux particules. L'évolution du système est par conséquent décrite par l'équation de Shrödinger

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_R + V(R) \right\} \phi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) = E_{tot} \phi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}). \quad (1.6)$$

Il est judicieux de séparer la fonction d'onde ϕ en un produit comme

$$\phi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\rho}) = \varphi(\boldsymbol{\rho}) \psi(\mathbf{R}) \quad (1.7)$$

La fonction d'onde $\varphi(\boldsymbol{\rho})$ devrait décrire le mouvement du centre de masse. Plus précisément, elle décrit le mouvement libre d'une particule de masse M . Par contre, $\psi(\mathbf{R})$ devrait décrire le mouvement relatif des deux particules. En d'autres termes, elle décrit le mouvement d'une seule particule de masse μ dans le potentiel $V(\mathbf{R})$.

Nous obtenons de ce fait facilement

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_\rho \varphi(\boldsymbol{\rho}) = \epsilon \varphi(\boldsymbol{\rho}) \quad (1.8)$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{\mu}\Delta_R + V(\mathbf{R}) \right\} \psi(\mathbf{R}) = E \psi(\mathbf{R}) \quad (1.9)$$

ϵ est l'énergie cinétique de la particule libre de masse M . Nous nous intéressons aux solutions de l'équation (1.9) associées à la particule réduite d'énergie positive E . Ainsi, l'équation de Schrödinger (1.9) du mouvement d'une particule dans un potentiel $V(R)$ s'écrit

$$\left\{ \Delta_R + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(\mathbf{R}) \right\} \psi(\mathbf{R}) = 0. \quad (1.10)$$

k étant le vecteur d'onde de module

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}. \quad (1.11)$$

Pour $R \rightarrow \infty$, le potentiel est supposé tendant vers zéro plus rapidement que le potentiel coulombien $\sim 1/R$. Dans ce cas, la fonction d'onde, que nous dénotons ψ_k est choisie ayant la forme asymptotique

$$\psi_k(\mathbf{R}) \sim \psi_{inc}(\mathbf{R}) + \psi_{diff}(\mathbf{R}). \quad (1.12)$$

Comme le montre **Fig.1-2**, ψ_{inc} représente la fonction d'onde des particules incidentes; elle a une forme plane. Par contre, ψ_{diff} représente la fonction d'onde des particules diffusées; elle a une forme sphérique.

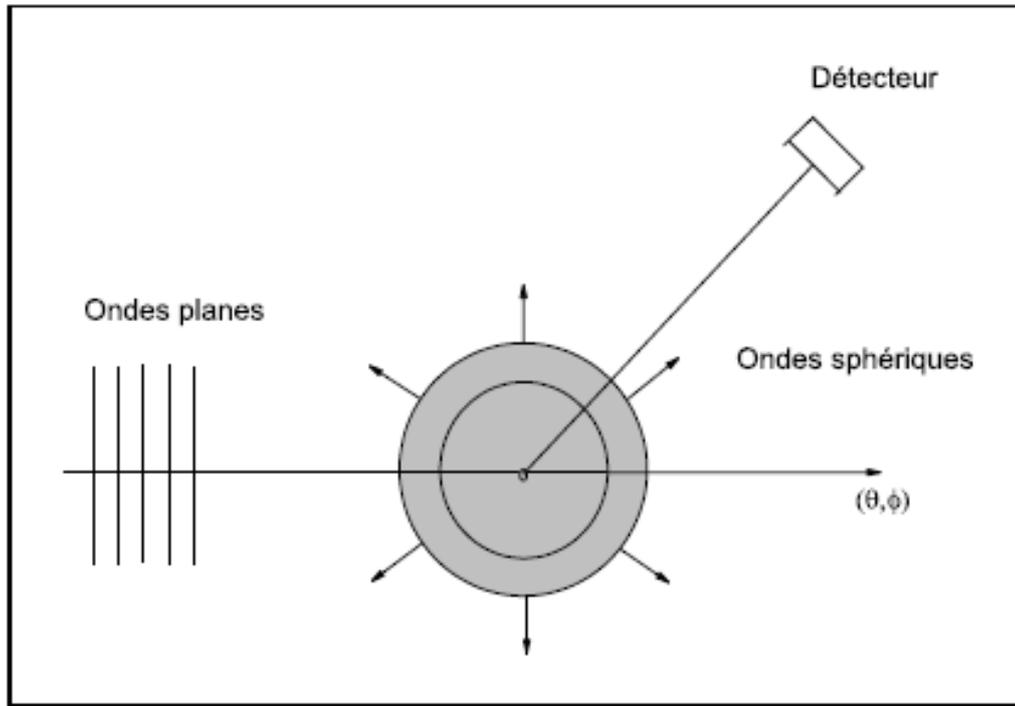


FIG 1- 2 Diffusion d'une onde incidente par un potentiel $V(\mathbf{R})$.

On suppose maintenant que l'incidence se fait le long de l'axe des z . L'état stationnaire de diffusion $\psi_k(\mathbf{R})$ est par définition la solution de l'équation (1.10) dont le comportement asymptotique est pris de la forme

$$\psi_k(\mathbf{R})_{R \rightarrow \infty} = N(k) \left[\exp(ikz) + f_k(\theta, \phi) \frac{\exp(ikR)}{R} \right] \quad (1.13)$$

où $N(k)$ est la constante de normalisation, $f_k(\theta, \phi)$ est l'amplitude de diffusion dépendante des angles polaire et azimutal (θ, ϕ) .

1.1.1 Notion de section efficace

La distribution angulaire des particules diffusées par l'interaction avec d'autres particules ou par un centre diffuseur est décrite en termes de section efficace de diffusion. Pour évaluer la section efficace de diffusion, il est judicieux de calculer les contributions de l'onde incidente et de l'onde diffusée aux courants de probabilité dans un état stationnaire de diffusion. En mécanique quantique [4, 5], la densité de flux est définie par la relation

$$J = \left(\frac{\hbar}{2\mu i} \right) (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (1.14)$$

Soient les flux incident J_{inc} et sortant J_{out} . En considérant les fonctions d'onde correspondantes et apparaissant dans l'équation (1.13) on obtient

$$J_{inc} = \frac{\hbar N^2(k)}{\mu} k \quad (1.15)$$

et

$$J_{out} = \frac{\hbar N^2(k)}{\mu} \left\{ \frac{k}{R^2} |f_k(\theta, \phi)|^2 e_R + \frac{1}{R^3} I_m \left[f_k^*(\theta, \phi) \left(\frac{\partial f}{\partial \theta} \right) \right] e_\theta + \frac{1}{R^3 \sin \theta} I_m \left[f_k^*(\theta, \phi) \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right) e_\phi \right] \right\}. \quad (1.16)$$

Où e_R, e_θ et e_ϕ les vecteurs unitaires dans les coordonnées sphériques et $I_m [\dots]$ représente la partie imaginaire de la grandeur se trouvant entre les crochets. On remarque que le flux sortant J_{out} a un comportement purement radial. Lorsque $R \rightarrow \infty$; d'où le comportement asymptotique

$$J_{out} \sim \frac{\hbar N^2(k)}{\mu R^2} k |f_k(\theta, \phi)|^2 e_R. \quad (1.17)$$

Par ailleurs, le nombre de particules qui frappent par unité de temps l'ouverture utile d'un détecteur est proportionnelle au flux du vecteur J_{out} sortant à travers la surface

$$dS = R^2 d\Omega; \quad (1.18)$$

sous l'angle solide $d\Omega$ où le vecteur de surface $dS = R^2 d\Omega e_R$ et l'élément d'angle solide = $2\pi \sin \theta d\theta$. De ce fait, la section efficace différentielle est selon la définition donnée ci-dessus [4]

$$d\sigma = \frac{J_{out} \times dS}{J_{inc}}; \quad (1.19)$$

$$= \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \equiv I(\Omega) d\Omega. \quad (1.20)$$

On obtient aisément

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k(\theta, \phi)|^2 = I(\Omega). \quad (1.21)$$

D'où la section efficace élastique totale

$$\sigma_{tot} = \int I(\Omega) d\Omega \quad (1.22)$$

$$= \int |f_k(\theta, \phi)|^2 d\Omega \quad (1.23)$$

1.1.2 Ondes partielles

Dans cette section nous considérons la diffusion d'une particule de masse μ par un potentiel central $V(R)$ et une symétrie sphérique. Dans ce cas en utilisant l'expression connue de l'opérateur de Laplace Δ en coordonnées sphériques [5], l'équation d'onde (1.9) devient

$$\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial \psi_k(\mathbf{R})}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi_k(R) + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(R)] \psi_k(R) = 0 \quad (1.24)$$

Introduisons dans cette équation l'opérateur du moment cinétique orbital carré L^2 , il vient [5]

$$\left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial \psi_k(\mathbf{R})}{\partial R} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 R^2} \psi_k(\mathbf{R}) \right] + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(\mathbf{R})] \psi_k(\mathbf{R}) = 0; \quad (1.25)$$

avec

$$L^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (1.26)$$

En théorie quantique des moments cinétiques, on montre que L^2 et L_z commutent, Ces opérateurs ont donc les mêmes fonctions propres [5]

$$\mathbf{L}^2 \gamma_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1) \hbar^2 \gamma_{lm}(\theta, \phi); \quad (1.27)$$

$$L_z \gamma_{lm}(\theta, \phi) = m \hbar \gamma_{lm}(\theta, \phi). \quad (1.28)$$

Appelées harmoniques sphériques. Les entiers l et m sont appelés nombres quantiques orbital et magnétique, respectivement, où

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1.29)$$

$$-l \leq m \leq +l. \quad (1.30)$$

Lors du mouvement dans un potentiel central, c'est-à-dire un potentiel ne dépendant que de $R = |\mathbf{R}|$, ou encore $V(\mathbf{R}) = V(R)$, le moment cinétique orbital est conservé et l'hamiltonien peut s'écrire comme

$$H = - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(R). \quad (1.31)$$

L'équation d'onde (1.25) devient

$$\left[\frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 R^2} + k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) \right) \right] \psi_k(\mathbf{R}) = 0. \quad (1.32)$$

Il est de coutume de développer la fonction d'onde $\psi_k(\mathbf{R})$ du système en collision en une série d'ondes partielles

$$\psi_k(\mathbf{R}) = \sum_l \sum_m C_{lm}(k) \frac{u_l(R)}{kR} y_{lm}(\theta, \phi) \quad (1.33)$$

avec $C_{lm}(k)$ étant des constantes et $u_l(R)$ des fonctions purement radiales. Si on tient compte de l'équation (1.27), la substitution de cette forme dans Eq. (1.31) conduit sans peine à

$$\frac{d^2 u_l(R)}{dR^2} + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] u_l(R) = 0. \quad (1.34)$$

C'est l'équation d'onde radiale qui doit décrire convenablement le phénomène de diffusion élastique d'une particule de masse μ par un potentiel central $V(R)$.

1.2 Déphasage

Le déphasage est une source fiable d'informations sur le potentiel $V(R)$ et, plus généralement, le processus de collision, ainsi il est important dans la détermination des sections efficaces différentielles et totales. Donc une meilleure compréhension de cette grandeur physique est très nécessaire.

Comme nous l'avons vu ci-dessus que l'étude de la collision de deux particules entrant en collision et s'interagissant avec un potentiel symétrique central $V(R)$ se réduit à résoudre l'équation d'onde radiale

$$\frac{d^2 u_l(R)}{dR^2} + \left[k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(R) - \frac{l(l+1)}{R^2} \right] u_l(R) = 0. \quad (1.35)$$

En mécanique quantique, la solution asymptotique de cette équation (1.35) est choisie de la forme

$$u_l(R) \sim a_l \sin \left(kR - \frac{l\pi}{2} + \eta_l \right). \quad (1.36)$$

Où η_l est un angle appelé déphasage de l'onde partielle d'ordre l . Ce déphasage constitue la seule différence entre les comportements asymptotiques des fonctions d'onde. En considérant le développement de l'onde plane en fonction des polynômes de Legendre figurant dans Eq. (1.13) [5] et en se servant du développement suivant

$$\begin{aligned} \exp(ikz) &= \exp(ikR \cos \theta) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kR) P_l(\cos \theta). \end{aligned} \quad (1.37)$$

Nous pouvons écrire la forme asymptotique ψ_k sous la forme d'une série de polynômes de Legendre

$$\psi_k(\mathbf{R}, \theta)_{R \rightarrow \infty} = N(k) \left[\exp(ikz) + f_k(\theta, \phi) \frac{\exp(ikR)}{R} \right]. \quad (1.38)$$

il est simple de montrer par identification avec Eq. (1.36) que l'amplitude de diffusion $f_k(\theta, \phi)$ peut être écrite en fonction des déphasages comme

$$f_k(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - e^{-2i\eta_l}) P_l(\cos \theta). \quad (1.39)$$

On note ici que $f_k(\theta, \phi)$ est indépendant de l'angle azimutal ϕ . Maintenant, par remplacement de cette expression de l'amplitude de diffusion dans celle de la section efficace totale, déduite de (1.23)

$$\sigma_{tot} = \int I(\Omega) d\Omega \quad (1.40)$$

$$= 2\pi \int_0^\pi |f_k(\theta)|^2 \sin\theta d\theta, \quad (1.41)$$

il est facile d'obtenir

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l, \quad (1.42)$$

$$\equiv \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l, \quad (1.43)$$

$$\sigma_l = (2l+1) \sin^2 \eta_l. \quad (1.44)$$

Où on a fait usage des propriétés d'orthogonalité des fonctions de Legendre [6]

$$\int_0^\pi P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \quad (1.45)$$

$\delta_{ll'}$ étant le symbole de Kronecker. Par conséquent, la détermination des déphasages peut conduire au calcul de quelques valeurs mesurables, telle que la section efficace intégrée de collision, σ_l est la section efficace partielle. Celle-ci représente la contribution à la diffusion du moment cinétique orbital

1.3 Approximation semi-classique

D'après ce qu'il a été vu ci-dessus, le calcul quantique des déphasages élastiques de diffusion est dû à la résolution numérique de l'équation d'onde radiale (1.35). On montre, en mécanique quantique, que la solution de cette équation est choisie de telle sorte qu'elle aura le comportement asymptotique (1.36). Ce calcul peut être simplifié en admettant que, pour les

grandes valeurs du moment cinétique orbital l , le mouvement peut être traité d'une manière semi-classique être simplifié en admettant que, pour les grandes valeurs du moment cinétique orbital l , le mouvement peut être traité d'une manière semi-classique [5].

En effet, dans le cas où le potentiel $V(R)$ décroît plus rapidement que le potentiel coulombien, on montre que les déphasages sont dans l'approximation semi-classique donnés par [4,7]

$$\eta_l(k) \approx -\frac{\mu}{\hbar^2} \int_{R_0}^{\infty} \frac{V(R)}{\sqrt{k^2 - \left(l + \frac{1}{2}\right)^2 / R^2}} dR. \quad (1.43)$$

Où R_0 est le point de retour classique.

Chapitre 2

2. Cas des systèmes $\text{Li}^+ - \text{He}$, $\text{K}^+ - \text{He}$, $\text{Na}^+ - \text{He}$

Dans ce chapitre, nous avons appliqué l'étude précédente aux collisions des ions alcalins avec le gaz atomique d'hélium dans leurs états fondamentaux. Les termes électroniques des systèmes diatomiques, décrits avec détails dans l'Annexe A, sont représentés par la notation $^{2S+1}\Lambda_{\text{gu}}^{(\pm)}$. Dans notre cas, l'interaction entre les ions alcalins-atome se fait le long d'un seul état moléculaire possible $X^1\Sigma$.

2.1 Construction du potentiel

Nous nous concentrons sur la construction des potentiels d'interaction nécessaires pour intégrer l'équation d'onde radiale (1.35). Cette construction sera surtout basée sur des points d'énergies potentielles déterminés théoriquement récemment basés sur des calculs dite *ab initio*. Une partie de ce travail sera dédiée au calcul des déphasages $\eta_l(E)$ en fonction de l'énergie de collision E , les déphasages obtenus sont utilisés pour calculer les différentes sections efficaces de ces systèmes. Le potentiel d'interaction $V(R)$ entre l'atome et l'ion est généralement construit dans trois domaines de distances :

- **Distances intermédiaires:** pour lesquelles $R_s \leq R \leq R_l$ avec R_s et R_l étant les distances internucléaires du premier et du dernier point de potentiel connus de la région intermédiaire;
- **Courtes distances:** qui correspond aux valeurs de la distance internucléaire R pour lesquelles $0 \leq R \leq R_s$;
- **Grandes distances:** qui correspond aux valeurs $R_l \leq R \leq \infty$.

Nous utilisons les unités suivantes dans nos calculs lequel

$$\hbar = e = a_0 = m_e = 1$$

et

$$1 a_0 = 0.529 177 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$1E_h = \begin{cases} 219\,474.636\,313 \text{ cm}^{-1} \\ 3.157\,746\,5 \times 10^5 \text{ K} \\ 27.211\,383\,4 \text{ eV}, \end{cases}$$

et les unités spectroscopiques, dans lequel

$$1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ cm}$$

$$1 \text{ cm}^{-1} = \begin{cases} 1.986\,445\,44 \times 10^{-23} \text{ J} \\ 1.438\,775\,2 \text{ K} \\ 4.556\,335 \times 10^{-6} E_h, \end{cases}$$

avec a_0 étant le rayon de Bohr et E_h l'énergie de Hartree ($1E_h = 1 \text{ hartree}$)

2.1.1 Courte distances

Dans le domaine de courtes distances R , le recouvrement des nuages électroniques, ainsi que la répulsion électrostatique entre les noyaux atomiques et les noyaux ioniques, génèrent un potentiel d'interaction répulsif. Ce potentiel a une forme exponentielle qui s'écrit

$$V(R) = A \exp(-\alpha R) \quad (2.1)$$

où A et α sont deux paramètres constants. Ce type de potentiel est connu sous le nom de potentiel de Born-Mayer.

Nos calculs nous donne les valeurs de A et α pour les états moléculaires fondamentales des trois systèmes

- $A = 38.446$ et $\alpha = 4.137$ pour $\text{Li}^+ - \text{He}$;
- $A = 19.456$ et $\alpha = 1.711$ pour $\text{K}^+ - \text{He}$;
- $A = 19.082$ et $\alpha = 1.943$ pour $\text{Na}^+ - \text{He}$.

2.1.2 Grandes distances

Pour les grandes valeurs de R , la courbe d'énergie est généralement appelée une courbe de potentiel attractive, ce potentiel peut s'écrire sous la forme asymptotique

$$V(R) \sim -\frac{D_4}{R^4} - \frac{D_6}{R^6} - \frac{D_8}{R^8}. \quad (2.2)$$

Où

$$D_4 = C_4 = \frac{\alpha_d}{2};$$

$$D_6 = \frac{\alpha_q}{2} + C_6;$$

$$D_8 = \frac{\alpha_o}{2} + C_8.$$

C_n , avec $n = 4, 6$ ou 8 , sont appelés coefficients de dispersion [8], $\alpha_d = 1.383$, $\alpha_q = 2.443$, $\alpha_o = 10.614$ sont les polarisations dipôle, quadripôle, octupôle de l'atome neutre d'Hélium, ces constants sont listés dans le tableau 2-1.

Systèmes	C_6	C_8	D_6	D_8
$\text{Li}^+ - \text{He}$	0.296	2.044	1.517	7.351
$\text{K}^+ - \text{He}$	5.835	72.05	7.056	77.357
$\text{Na}^+ - \text{He}$	1.424	13.17	2.645	18.477

TAB 2- 1 Coefficients de dispersion en (u.a.) des systèmes $\text{Li}^+ - \text{He}$, $\text{K}^+ - \text{He}$ et $\text{Na}^+ - \text{He}$.

2.1.3 Distances intermédiaires

Dans cette région, nous avons utilisé des données disponibles dans la littérature:

Système $\text{Li}^+ - \text{He}$: pour ce système nous avons utilisé 27 valeurs d'énergie de Catlow *et al* [9] de $R = 0.025 a_0$ à $R = 2.5 a_0$ et 17 valeurs de $R = 2.75 a_0$ à $R = 20 a_0$ de Behmenburg *et al* [10].

Système $\text{K}^+ - \text{He}$: pour ce système nous avons utilisé 32 valeurs d'énergie de Røegeen *et al* [11] où $1.5 a_0 \leq R \leq 15 a_0$.

Système $\text{Na}^+ - \text{He}$: Nous avons utilisé ici 34 valeurs d'énergie de Ahmadi *et al* [12] pour $1.0 a_0 \leq R \leq 10 a_0$.

2.2 Résultats et discussion:

Les courbes d'énergies potentielles ainsi construites sont représentées sur les Figures 2-2, 2-3 et 2-4. Le Tableau 2-2 donne également pour quelques valeurs de R le potentiel $V(R)$ relatif aux interactions $\text{Li} - \text{He}$, $\text{K}^+ - \text{He}$ et $\text{Na}^+ - \text{He}$. Notre potentiel présente une profondeur du puits D_e à la position d'équilibre R_e . Ces données spectroscopiques sont présentées dans le Tableau 2-3

comparées avec d'autres résultats disponible dans la littérature, Un très bon accord entre nos résultats et les autres.

Li ⁺ - He		K ⁺ - He		Na ⁺ - He	
Distance R	Energie E	Distance R	Energie E	Distance R	Energie E
0.25	13.667331	1.50	1.49405960	1.0	2.73311320
0.5	4.7943986	1.75	0.96838292	1.25	1.63450000
0.75	2.331407	2.0	0.62148396	1.5	0.92807039
1.0	1.211805	2.25	0.38882416	1.75	0.51160672
1.25	0.632821	2.5	0.23721661	2.0	0.27744150
1.5	0.327374	2.75	0.14138206	2.5	0.07724984
1.75	0.166478	3.0	0.08229821	3.0	0.1857179
2.0	0.082306	3.25	0.04664614	3.2	0.00953707
2.25	0.038786	3.5	0.02558292	3.4	0.00428250
2.5	0.01604	3.75	0.01340105	3.6	0.00131772
3.0	1.6E-4	4.0	0.00651685	3.8	-2.7925E-4
3.25	-0.001983	4.25	0.00274421	4.0	-0.00107290
3.5	-0.002678	4.5	7.6049E-4	4.1	-0.00128225
3.75	-0.002730	4.75	-2.1916E-4	4.2	-0.00140704
4.0	-0.002450	5.0	-6.5135E-4	4.3	-0.00146992
4.5	-0.001775	5.25	-7.9813E-4	4.4	-0.00148748
5.0	-0.001219	5.5	-8.0184E-4	4.5	-0.00147278
5.5	-8.37E-4	5.75	-7.4147E-4	4.6	-0.00143572
6.0	-5.82E-4	6.0	-6.5855E-4	4.7	-0.00138352
6.5	-4.16E-4	6.25	-5.7264E-4	4.8	-0.00132178
7.0	-3.05E-4	6.5	-4.9288E-4	4.9	-0.00125462
7.5	-2.29E-4	6.75	-4.2249E-4	5.0	-0.00118511
8.0	-1.75E-4	7.0	-3.6235E-4	5.2	-0.00104666
9.0	-1.081E-4	7.25	-3.1144E-4	5.4	-9.1682E-4
10.0	-7.04E-5	7.5	-2.6864E-4	5.6	-7.9992E-4
15.0	-1.375E-5	7.75	-2.3269E-4	5.8	-6.9712E-4
		8.0	-2.0247E-4	6.0	-6.0808E-4
		8.5	-1.5529E-4	6.5	-4.3651E-4
		9.0	-1.21209E-4	7.0	-3.1968E-4
		10.0	-7.7194E-5	7.5	-2.3918E-4
		12.0	-3.5934E-4	8.0	-1.8254E-4
		15.0	-1.4314E-5	8.5	-1.418E-4
				9.0	-1.1187E-4
				10.0	-7.25E-5

TAB 2- 2 Energie potentielle $V(R)$ en fonction de la distance R en (u.a.).

```

C-----POTENTIAL INITIALIZATION-----
C
  DUM = VPOT(IPOT, TWOMU, NPTS, C4, C6, C8, 0.0D0)
  RSTEP = (RMAX-RINIT)/DFLOAT(NRSTEP)
  REQU = 0.0D0
  VMIN = 0.0D0
C
  DO JR = 1, NRSTEP+1
    RSEP(JR) = RINIT + DFLOAT(JR)*RSTEP
    RX      = RSEP(JR)
    FPOT    = VPOT(IPOT, TWOMU, NPTS, C4, C6, C8, RX)/TWOMU
    FVR(JR) = -VPOT(IPOT, TWOMU, NPTS, C4, C6, C8, RX)

    IF (FPOT .LT. VMIN) THEN
      REQU = RX
      VMIN = FPOT
    END IF

    WRITE(IPEC,*) RX,      FPOT      ! in atomic units
    ! WRITE(IPEC,*) RSEP(JR), FVR(JR) ! in atomic units
    ! WRITE(IPEC,*) RX*BOHR, FPOT*HARTREE ! in Ang. and cm-1
  END DO

  WRITE(*,40) REQU,      VMIN      ! in a.u. (a0 and Eh)
  WRITE(*,40) REQU*BOHR, VMIN*HARTREE ! in Ang. and cm-1
  WRITE(*,40) REQU*BOHR, VMIN/AK     ! in Ang. and K
C

```

FIG 2- 1 Programme pour calculer le potentiel d'interaction.

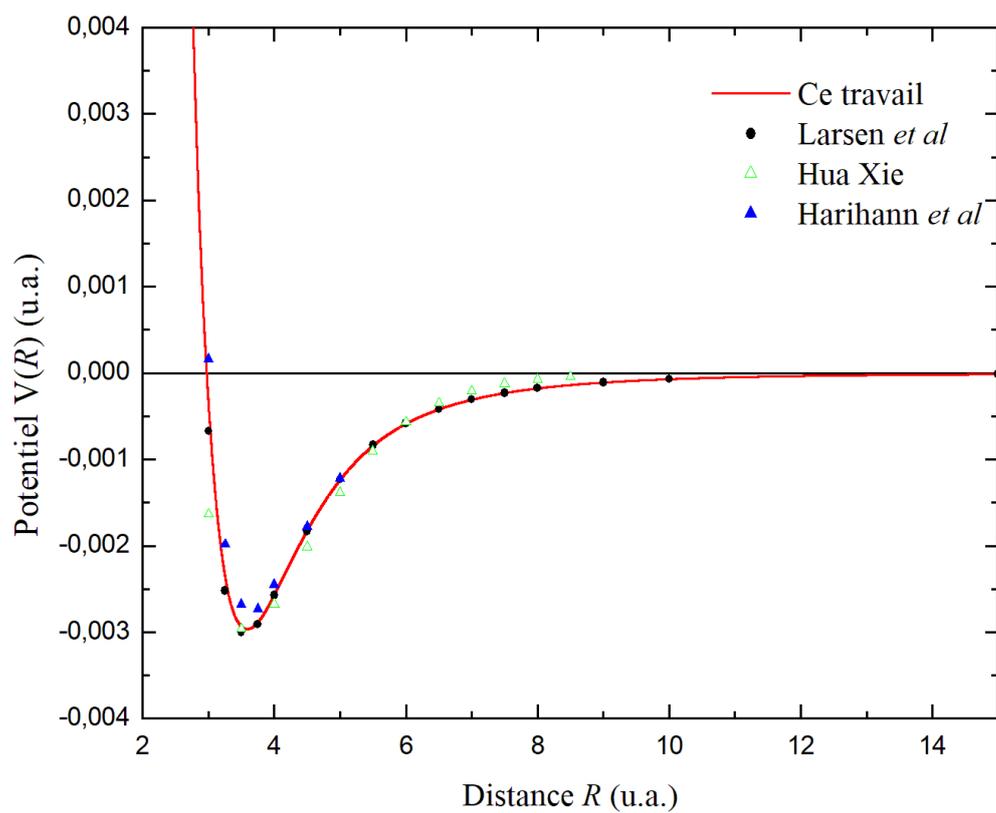


FIG 2-2 Courbes d'énergie potentielle de $\text{Li}^+ - \text{He}$ comparée au données publiée par larsen *et al* [13], Rui-Hua Xie [14] et Hariharan *et al* [15].

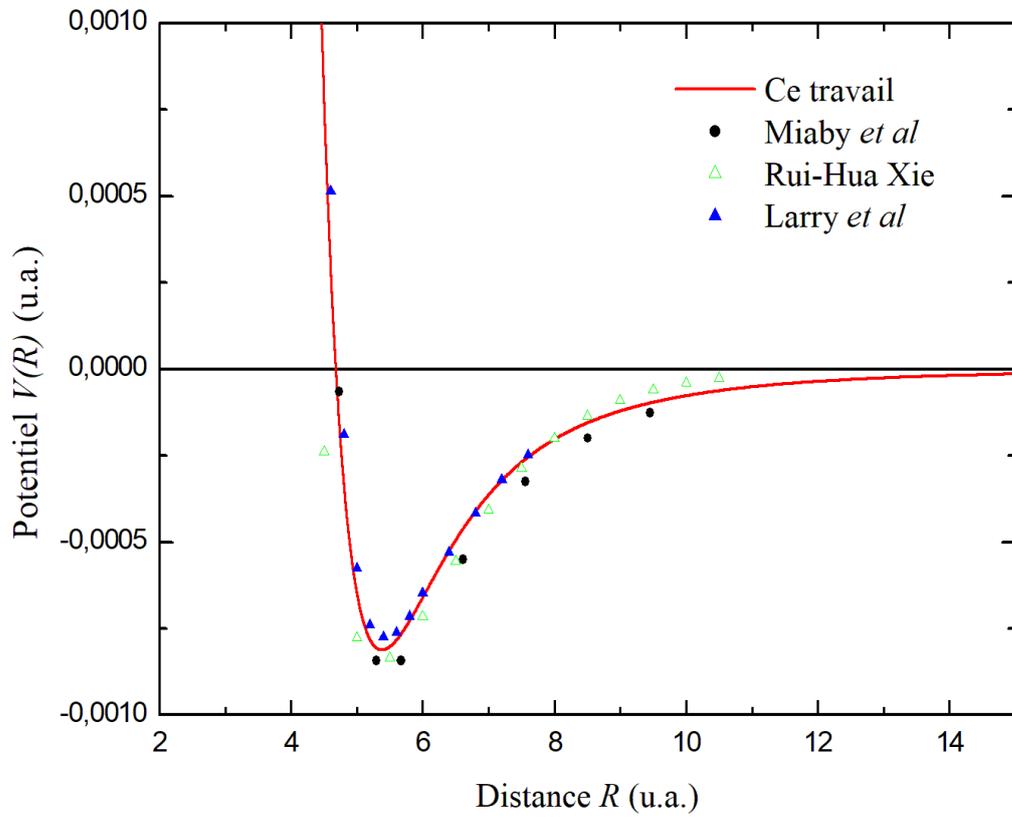


FIG 2- 3 Courbes d'énergie potentielle de $K^+ - He$ comparée au données publiée par Rui-Hua Xie [14], Miaby *et al* [16], et Larry *et al* [17].

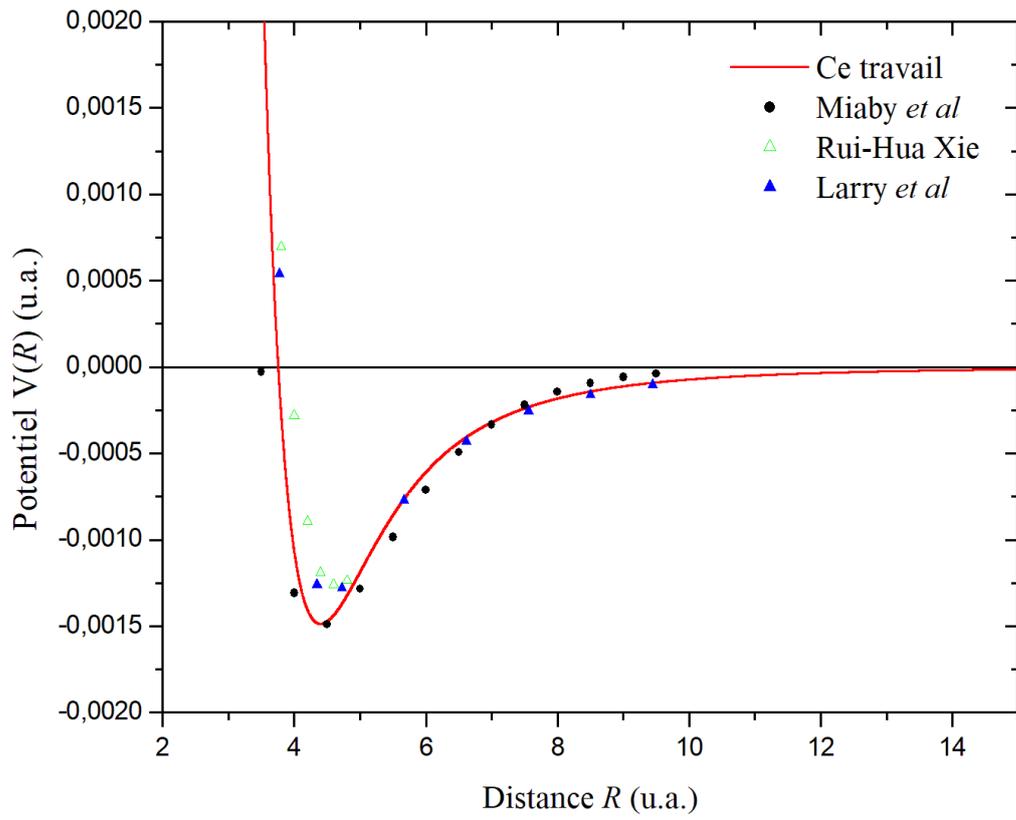


FIG 2- 4 Courbes d'énergie potentielle de $\text{Na}^+ - \text{He}$ comparée aux données publiée par Rui-Hua Xie [14], Miaby *et al* [16], et Larry *et al* [17].

Systèmes	R_e	$-D_e(10^{-3})$	R_e (exp)	$-D_e (10^{-3})$	Ref
Li ⁺ - He	3.59	2.96			Ce travail
	3.64	2.70			[8]
	3.54	3.01			[13]
			3.65	2.70 ^{exp}	[17]
	3.57	2.86			[18]
K ⁺ - He			3.68	2.64 ^{exp}	[19]
	5.37	0.81			Ce travail
	5.49	0.74			[8]
	5.50	0.67			[17]
Na ⁺ - He			5.41	0.84 ^{exp}	[19]
	4.40	1.48			Ce travail
	4.55	1.30			[8]
			5.41	0.84 ^{exp}	[17]
	4.14	1.41			[18]
		4.53	1.29 ^{exp}	[19]	

TAB 2-3 Paramètres spectroscopiques R_e et D_e (calculés et expérimentaux) des potentiels d'interactions en (u.a.).

2.3 Calcul du déphasage

Ayant déterminé convenablement le potentiel interatomique $V(R)$, il est maintenant possible de résoudre numériquement l'équation radiale de Schrödinger Eq (1.35). En utilisant l'algorithme du Numerov [20], le code Fortran que nous avons élaboré permet de déterminer les déphasages $\eta_l(E)$ pour chaque énergie E et moment cinétique orbital l .

En pratique, le calcul de $\eta_l(E)$ est fait pour toutes les énergies comprises entre $E_{min} = 10^{-5}$ et $E_{max} = 10^{-1}$ u.a, avec la valeur maximale du moment cinétique orbital $l_{max}=1000$. Les calculs sont effectués quantiquement jusqu'à une certaine valeur de $l = l_{sc}$ au-delà de laquelle le programme est forcé d'utiliser le déphasage semi classique, c'est-à-dire que R_0 le point de retour classique est dans la région asymptotique, de sorte que $V(R) \sim -C_4 / 2R^4$, dans ce cas le déphasage est donné par l'expression simple [21]

$$\eta_l(E) = \frac{\pi\mu^2 C_4 E}{4\hbar^4 l^3}. \quad (2.3)$$

Sur la Figure 2-5, nous montrons le déphasage numériques pour l'état fondamental comme fonctions de l pour une collision énergie de 10^{-3} u.a., et nous le comparons au changement approximatif de déphasage semi-classique. Dans ce cas, le rapprochement est pour $l = 32$.

```

C      wave function-----
C
      VLIM = (1.D0*PI/4.D0)*(TWOMU/2.0D0)*DABS(C4)*(XK**2)
      LMSC = IDNINT(VLIM**(1.D0/3.D0)) + 3

      IF (L .GE. LMSC) GOTO 180
      PHASE(L) = ETA
      WRITE(IPHS,*) L, PHASE(L)
      IF (L .EQ. LMAX) GOTO 190
      END DO
C
180   DO J = LMSC, LMAX
      CALL GRASYMPF(TWOMU, J, XK, C4, C6, C8, ETA)
      PHASE(J) = ETA
      WRITE(IPHS,*) J, PHASE(J)
      END DO

```

FIG 2-5 Programme pour calculer le déphasage.

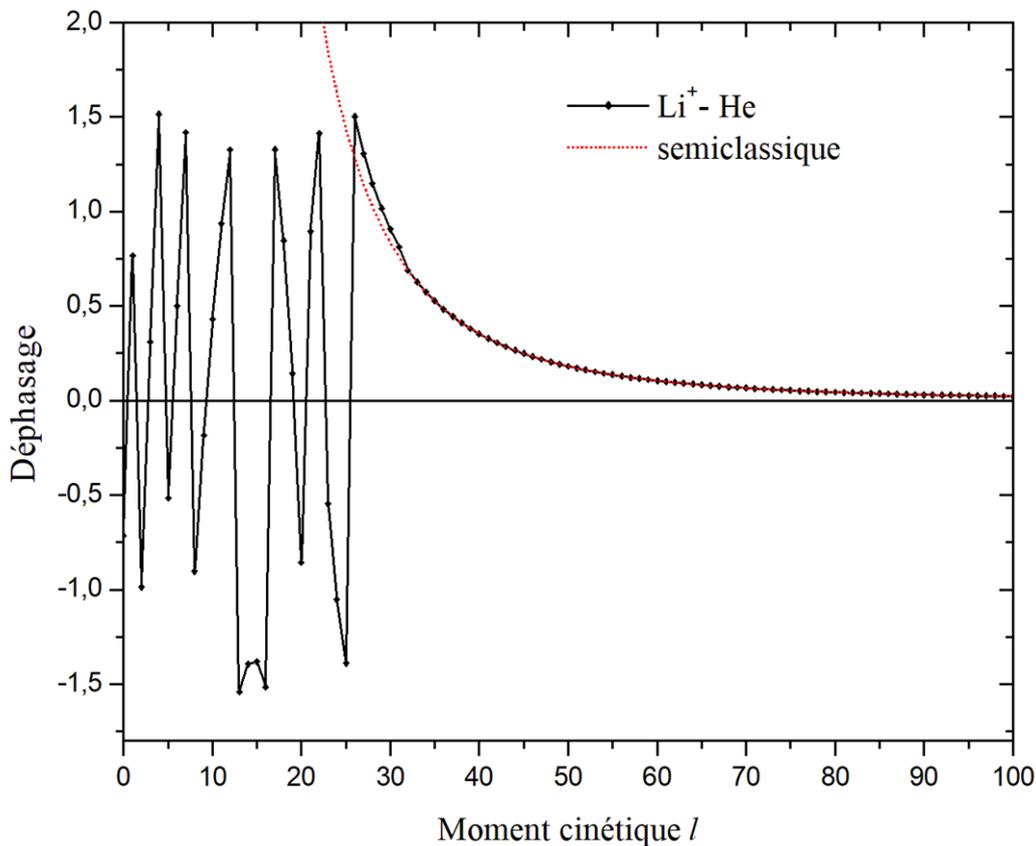


FIG 2-6 Déphasages η_l en fonction du moment cinétique orbital l à une énergie $E = 10^{-3}$ en (u. a.) pour l'état fondamental.

2.4 Section efficace

Le calcul de déphasage conduit au calcul de diverses sections efficaces nécessaires à l'étude des propriétés thermophysiques. Nous présentons dans le tableau 2-4 la variation avec l'énergie E des sections efficaces totales $\sigma_{tot}(E)$ relatives à l'équation (1.42).

Energie E	$\sigma_{tot}(E)$		
	Li ⁺ - He	K ⁺ - He	Na ⁺ - He
10^{-5}	6018.48	6871.84	7892.68
10^{-4}	2454.51	3029.93	3188.62
10^{-3}	1293.61	1369.92	1288.29
10^{-2}	580.60	562.11	703.64
10^{-1}	296.02	288.66	257.10

TAB 2-4 Sections efficaces élastiques totales en fonction de l'énergie des systèmes Li⁺ - He, K⁺ - He et Na⁺ - He. Toutes les données sont en (u. a.).

Chapitre 3

3. Propriétés thermophysiques

Dans ce dernier Chapitre, nous allons analyser théoriquement les propriétés thermophysiques des trois systèmes considérés, et ceci en utilisant le modèle de Chapman Enskog [2, 22] basé sur la résolution de l'équation de Boltzmann Annexe **B**. Dans ce cadre du modèle nous essayerons de déterminer le comportement des coefficients de transport (diffusion, mobilité) en fonction de la température T .

3.1 Diffusion

Le coefficient de diffusion D est déterminé avec le modèle Chapman – Enskog pour les systèmes binaires qui considère des ions de faible densité de densité n_{ion} diffusant dans un gaz neutre de densité n

$$D(T) = \frac{3}{8(n_{ion} + n)} \left(\frac{\pi k_{\beta} T}{2\mu} \right)^{1/2} \frac{1}{\Omega^{(p,q)}}. \quad (3.1)$$

k_{β} est la constante de Boltzman, T est la température absolue en kelvin. Généralement, $n_{ion} \ll n$; dans ce cas, il vient

$$D(T) = \frac{3}{8n} \left(\frac{\pi k_{\beta} T}{2\mu} \right)^{1/2} \frac{1}{\Omega^{(p,q)}}. \quad (3.2)$$

où $\Omega^{(p,q)}$ appelées *intégrales de collision* [2, 22, 23]. Ces intégrales manifestent explicitement la dynamique des collisions atomiques et/ou moléculaires et, par conséquent, la loi des forces intermoléculaires.

Si $p = 1, q = 1$ on obtient $\Omega^{(1,1)}$ qui est l'intégrale de collision de diffusion qui peut être déduit de la formule plus générale

$$\Omega^{(1,1)}(T) = \frac{1}{2(k_{\beta} T)^3} \int_0^{\infty} E^2 \sigma_D(E) \exp\left(-\frac{E}{k_{\beta} T}\right) dE \quad (3.3)$$

σ_D est la section efficace quantique de diffusion définie par la sommation sur le moment angulaire orbital l comme [24, 25]

$$\sigma_D = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2(\eta_{l+1} - \eta_l) \quad (3.4)$$

Où $k = \sqrt{2\mu E}$ est le nombre d'onde. Pour les calculs à une pression p donnée, il est de coutume d'utiliser la loi bien connu des gaz parfaits $p = nk_B T$.

3.2 Mobilité réduite

La mobilité réduite K_0 caractérise le déplacement du nuage d'ions sous l'action du champ électrique faible qui due aux interactions attractives entre l'ion et l'atome du système considéré.

La mobilité réduite se calcule comme [26]

$$K_0 = \frac{p}{760} \frac{273.15}{T} K; \quad (3.5)$$

où K est la mobilité ionique liée la diffusion par la relation d'Einstein [25, 26]

$$K = \frac{eD}{k_B T} \quad (3.6)$$

avec e est la charge des ions. Le calcul de la mobilité réduite se fait à la pression du gaz $p = 1033.4$ Pa à température $T = 10K$ jusqu'à $T = 1000K$.

3.1 Résultats et discussion

Dans la figure 3-1, nous montrons le programme utilisé pour calculer le coefficient de diffusion et la mobilité réduite. Les résultats de diffusion en fonction de la température dans un intervalle allant de 100 à 1000K pour tous les cas traités dans ce travail sont listés dans le tableau 3-1, le calcul de ce coefficient se fait à la densité de Loschmidt $n_0 = 2.69 \times 10^{25} m^{-3}$ et à la pression standard $p_0 = 101.325$ kPa, nous voyons qu'il existe une nette variation dans la diffusion des ions dans le gaz d'hélium en raison des propriétés différentes de chaque ion, c'est ce que montre la figure 3-2. En outre les résultats du coefficient de diffusion pour une pression constante $p = p_0$ de dimère $Na^+ - He$ sont présentés dans le même tableau et comparés avec celles obtenues par Red'ko [27]. Nos résultats concorde bien avec les résultats de Red'ko.

```

Diffusion-----
PRESS = 1033.4D0      ! Pressure in Pa
PRESS = 330.6D0      ! Pressure in Pa

DO I = 1, NEN
  DCON = 1.D0/(2.0D0*AKT**3)
  FDSIM(I) = DCON*(ENG(I)**2)*DXS(I)*DEXP(-ENG(I)/AKT)
  IF (TP .EQ. TSPE) WRITE(JDI,*) ENG(I), FDSIM(I)
END DO

CALL PLINT(FDSIM, ENG, NEN, A, B, OMGA11)

DN = (3.D0/8.D0)*DSQRT(PI*AKT/TWOMU)/OMGA11

DIFFN = DN/(AD*TM)           ! DIFFN = n.D (in S.I. system)
DNCONST = DIFFN/SD          ! D : diff. coeff. for n (density)

DPCONST = DIFFN*AB*TP/PRESS ! D : diff. coeff. for p (press.)
WRITE(JDR,20) TP, OMGA11, DNCONST, DPCONST

Mobility-----
BKM = EC*DIFFN/PRESS        ! Regular mobility
AKO = (PRESS/TR)*TA*BKM/(760.D0*TP) ! Reduced mobility
WRITE(JMB,24) TP, BKM, AKO   ! in units S.I.

```

FIG 3-1 Programme pour calculer le coefficient de diffusion et la mobilité réduite.

T (K)	Diffusion D ($10^{-4}.m^2.S^{-1}$)				
	Ce travail ($n = n_0$)			Na ⁺ ($p = 101.325$ kPa)	
	Li ⁺	K ⁺	Na ⁺	Ce travail	[27]
100	0.174	0.159	0.157	0.05	0.85
200	0.364	0.355	0.352	0.25	1.70
300	0.588	0.554	0.580	0.63	0.62
400	0.846	0.741	0.819	1.20	1.13
500	1.128	0.914	1.060	1.94	1.82
600	1.428	1.077	1.295	2.84	2.68
700	1.739	1.229	1.524	3.90	3.66
800	2.058	1.374	1.745	5.11	4.69
900	2.379	1.512	1.959	6.45	5.95
1000	2.702	1.644	2.165	7.92	7.20

TAB 3-1 Coefficients de diffusion $D(T)$ des alcalins ions – He.

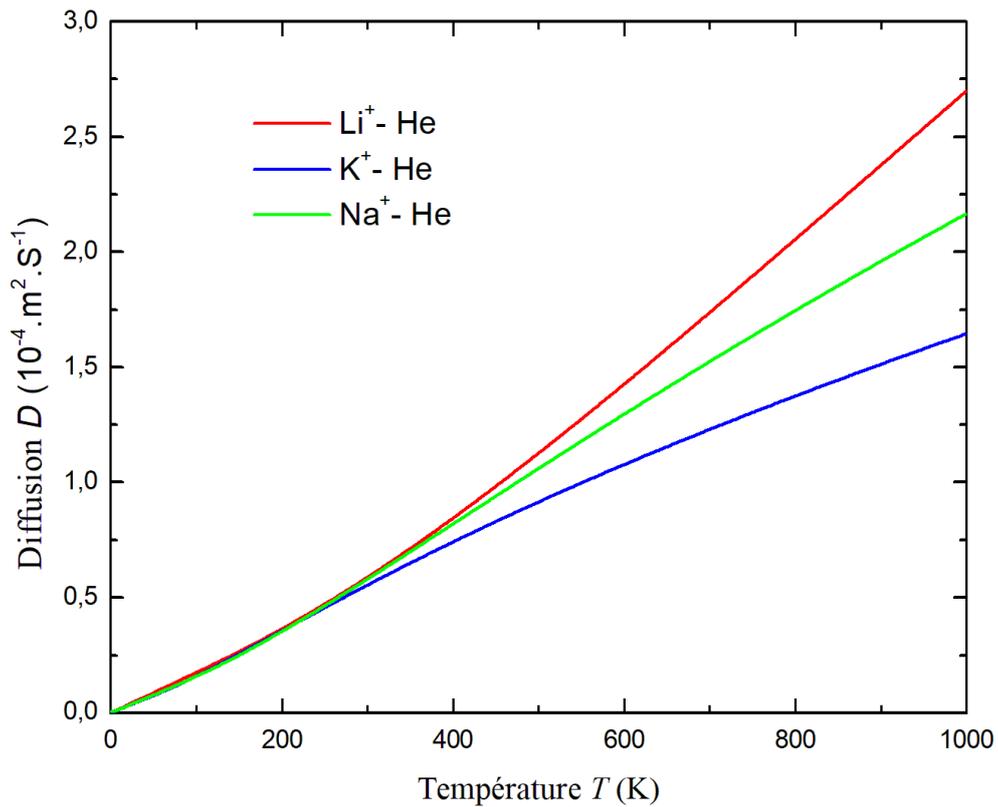


FIG 3-2 Variation du coefficient de diffusion $D(T)$ avec la température pour les dimères $\text{Li}^+ - \text{He}$, $\text{K}^+ - \text{He}$ et $\text{Na}^+ - \text{He}$.

Dans ce domaine de température $1\text{K} \leq T \leq 1000\text{K}$, nous avons utilisé le coefficient de diffusion calculé précédemment pour déterminer la mobilité réduite des systèmes $\text{Li}^+ - \text{He}$, $\text{K}^+ - \text{He}$ et $\text{Na}^+ - \text{He}$. La figure 3-2 illustre les variations de K_0 avec la température, nous voyons dans cette figure qu'à basses températures les mobilités réduites ont tendance à des valeurs **20.09**, **17.40** et **17.73** ($\text{cm}^2/\text{v.s}$) par respectivement. Ils gardent à peu près constant ces valeurs jusqu'à ce que la température atteigne $T \sim 100$ K, au-delà duquel K_0 commence son augmentation. Les valeurs de la mobilité réduite pour différentes températures et pressions sont présentées dans le tableau 3-2. Nos résultats sont en bon d'accord avec celle de la littérature.

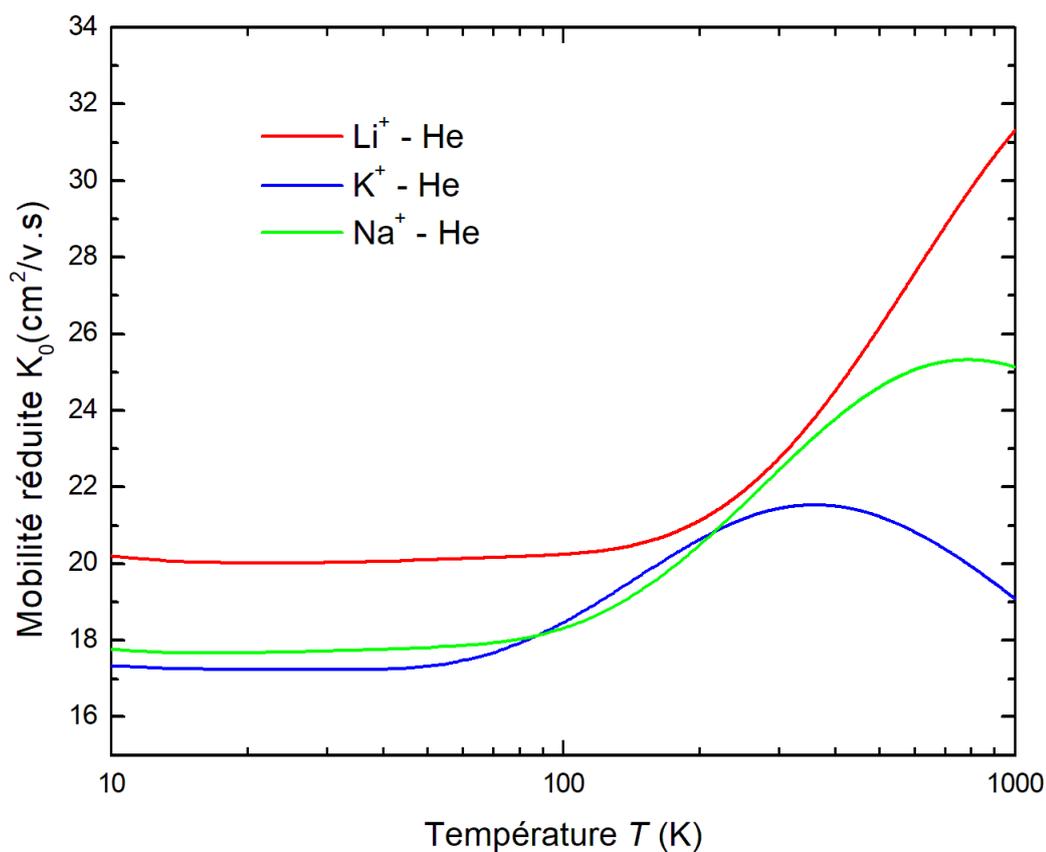


FIG 3-3 La mobilité réduite K_0 , les courbes présentent les systèmes Li^+ - He, K^+ - He et Na^+ - He.

Li^+	$p = 1033.4\text{Pa}$		$p = 330.6\text{Pa}$		
	T(K)	K_0	T(K)	K_0	Ref
	77.5	20.21	295	22.69	Ce travail
		20.27		22.90	[28]
K^+	$p = 1033.4\text{Pa}$		$p = 413.3\text{Pa}$		
	T(K)	K_0	T(K)	K_0	
	76.8	17.84	294	21.41	Ce travail
		17.84		21.31	[23]
Na^+	$p = 20.0\text{Pa}$				
	T(K)	K_0			
	303	22.49			Ce travail
		22.59			[29]

Tab 3-2 Variation de la mobilité réduite K_0 avec la température T et la pression p .

Conclusion

Conclusion

Notre travail a porté sur l'étude quantique des collisions atomiques où a été développé le cas de la collision entre les ions alcalins et l'atome d'hélium. Après un bref exposé de la théorie quantique des collisions, nous avons, dans une première étape, construit les courbes d'énergies potentielles le long de laquelle deux particules fondamentaux s'approchent. Ce potentiel a été utilisé pour résoudre numériquement l'équation d'onde radiale et, par suite, déterminer numériquement, pour toute énergie E et tout moment cinétique orbital l , les déphasages qui permettent d'exprimer les diverses sections efficaces thermo-physiques spectroscopiques.

Dans une seconde étape, nous avons utilisé ces déphasages pour déterminer les propriétés thermophysiques des trois systèmes considérés, tels que le coefficient de diffusion $D(T)$ et la mobilité K_0 en utilisant le modèle de Chapman-Enskog. Enfin, nous avons établi la loi de variation de ces coefficients de transports avec la température. L'accord avec des résultats obtenus de la littérature est démontré.

Annexe A

Symétries moléculaires

Soient \mathbf{L} le moment cinétique électronique total et \mathbf{S} le spin électronique total d'un système diatomique. Le moment cinétique total de la molécule est dans ce cas la somme vectorielle $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Pour une molécule *mononucléaire* ou *hétéronucléaire*, son état quantique électronique est généralement représenté par [7, 29]

$${}^{2S+1}\Lambda_{g,u}^{(\pm)} \quad (\text{A.1})$$

Dans cette notation, Λ est le module de la projection M_L de \mathbf{L} sur l'axe joignant les deux noyaux. On affecte à chaque valeur de Λ une lettre grecque majuscule comme suit

$$M_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm L$$
$$\Lambda = |M_L| = 0, 1, 2, \dots |L|$$
$$\begin{array}{ccc} \updownarrow & \updownarrow & \updownarrow \\ \Sigma & \Pi & \Delta \end{array}$$

et S représente la valeur du spin électronique total où $(2S + 1)$ est une grandeur appelée multiplicité de l'état moléculaire. Le signe '+' est attribué à l'état de la molécule si sa fonction d'onde électronique ne change pas de signe par réflexion par rapport au plan passant par les deux noyaux. Si l'inverse se produit, on lui attribue un signe '-'.

Les états électroniques des molécules diatomiques sont désignés par des lettres majuscules : X est réservé à l'état fondamental cependant; A, B, C, \dots etc sont utilisées pour les états excités de même multiplicité que l'état fondamental dans l'ordre des énergies décroissantes. Les états de multiplicité différente de celle de l'état fondamental sont désignés par des lettres minuscules a, b, c, \dots etc; toujours dans le sens des énergies décroissantes [7, 29].

Annexe B

Equation de Boltzmann

Les processus de transport dans un gaz quelconque sont basés sur l'équation de transport de Boltzmann. Cette annexe expose d'une manière concise ce qui doit être connu sur cette équation.

Les propriétés d'un gaz dilué sont complétement décrites par la fonction de distribution $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ dans l'espace de phase des coordonnées et des vitesses. Pour un mélange de gaz monoatomique se trouvant dans un état hors équilibre, ou chaque atome de l' i ème espèce est objet d'une force externe \mathbf{F}_i le nombre total d'atomes dn_i , dans le volume élémentaire $d\mathbf{r}_i, d\mathbf{v}_i$ est par définition

$$dn_i = f_i(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{v}_i \quad (\text{B.1})$$

De plus, si nous supposons que seules les collisions binaires peuvent avoir lieu dans le gaz, la fonction de distribution $f_i(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$ est, selon le théorème de Liouville [22], solution de l'équation intégro-différentielle

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \nabla_{\mathbf{r}_i} f_i + \mathbf{F}_i \nabla_{\mathbf{p}_i} f_i = 2\pi \sum_j \iint v_{ij} (f'_i f'_j - f_i f_j) b db d\mathbf{p}_j; \quad (\text{B.2})$$

Appelée équation de Boltzmann. Dans cette équation $\mathbf{p}_i = m_i \mathbf{v}_i$ est l'impulsion de l' i ème atome, avec m_i étant sa masse, b est le paramètre d'impact et

$$v_{ij} = v_{ji} = \left| \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} - \frac{\mathbf{p}_j}{m_j} \right|. \quad (\text{B.3})$$

Les fonctions de distribution après collision sont dénotées $f'_i(t, \mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i)$ les intégrales qui apparaissent dans le membre de droite de l'équation (B.2) portent le nom d'intégrales de collision.

Cette équation (B.2) constitue la base de discussion des propriétés de transport des gaz dilués. Plus de discussion détaillées et élaborées de cette équation sont exposées dans des livres spécialisés, des tels que dans les deux références [23] et [29].

Bibliographies

- [1] B. H. Bransden, M. R. C. McDowell, *Charge Exchange and the theory of ion-Atom Collision*, Clarendon press, Oxford (1992).
- [2] S. Chapman and T. G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1952).
- [3] D. Allab, M. Barat et J. Baudon, *J. de phys*, Tome **29**, 111 (1968).
- [4] F. Mott and H.S.W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, (Oxford University Press, Oxford, 1965).
- [5] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics. Non-relativistic Theory*, (Programon Press, Oxford, 1981).
- [6] M. Abramowitz and I.A. Stegun, editors, *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover Publications, Inc., New York, 1972).
- [7] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, (Longman, London, 1983).
- [8] A. D. Koutselos, E. A. Mason, and L. A. Viehland, *J. Chem. Phys.* **93**, 7125-7136 (1990).
- [9] Catlow, M R C. McDowell, J J Kaufman. L M Sachs et E S Chang, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **3**, 833, (1970).
- [10] Behmenburg, W., Makonnen, A., Kaiser, A., Rebentrost, F., Staemmler, V., Jungen, M., Peach, G., Devdariani, A., Tserkovnyi, S., Zagrebin, A., Czuchaj, E.: *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 3891 (1996)
- [11] I Røeggen, H R Skullerud et M T Elford, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 1913(1996).
- [12] G. R. Ahmadi, J. Almlöf, and I. Roeggen, *Chem. Phys.* **199**, 33(1995).
- [13] P-H. Larsen, H R Skullerud, T H Løvaas et Th Stefánsson, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **21**, 2519-38(1988).
- [14] Rui-Hua Xie and Jiangbin Gong, *J. Phys. Rev. Lett.* **95**, 263202 (2005).
- [15] P.C. Hariharan et V. Staimmler, *J. Chem. Phys* **15**, 409 (1976).
- [16] Miyabi Hiyama, Shinkoh Nanbu and Suehiro Iwata, *J. Chem. Phys. Lett.* **192**, 443-450(1992).
- [17] Larry A. Viehland, *J. Chem. phys.* **85**, 291-305(1984).
- [18] R. Ahlrichs, H. J. Bohm, S. Brode, K. T. Tang and J. P. Toennies, *J. Chem. Phys.* **88**, 6290(1988).
- [19] C. J. Lee, M. D. Havey, and R. P. Meyer, *J. Phys. Rev. A* **43**, 77 (1991).

- [20] B. Numerov, Publ. Observ. Central Astrophys. Russ. **2**, 188(1933).
- [21] R. Côté and A. Dalgarno, J. Phys. Rev. A: At., Mol., Opt. Phys. **62**, 012709(2000).
- [22] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtis, and R.B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, (Wiley and Son, Inc., New York, 1964).
- [23] M.R. Flannery, *In Atomic, Molecular, and Optical Physics Handbook*, Ed. G.W.F. Drake, (AIP Press, Woodbury, New York, 1996).
- [24] A. Dalgarno, M. R. C. McDowell and A. Williams, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A, **250**, 411(1958).
- [25] N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions*, (Oxford University Press, Oxford, 1965).
- [26] E. A. Mason and E.W. McDaniel, *Transport Properties of Ions in Gases*, (Wiley and Sons, Inc., New York, 1988).
- [27] T.P. Red'ko, Sov. Phys.-Tech. Phys. **28**, 1065 (1983).
- [28] G. Herzberg, *Molecular Spectra and Molecular Structure*, Vol. I : *Spectra of Diatomic Molecules*, (D. van Nostrand Co., Princeton, 1963).
- [29] L.E. Reichl, *A Modern Course in Statistical Physics*, (University of Texas Press, Austin, 1984).

Abstract

This work focused on the quantum mechanical calculation of the thermophysical properties of alkaline ions diffusing in a monatomic gas of Helium in the low temperature domain using the Chapman-Enskog model.

The calculations are based on interatomic potentials constructed from recent data. The results obtained for transport parameters such as diffusion coefficients and mobility generally agree well with published values.

Résumé

Ce travail porté sur le calcul de la mécanique quantique des propriétés thermophysiques des alcalins ions diffusant dans un gaz monoatomique d'Hélium dans le domaine des basses températures par le modèle de Chapman-Enskog.

Les calculs reposent sur des potentiels interatomiques construits à partir des données récentes. Les résultats obtenus des paramètres de transport tels que les coefficients de diffusion et la mobilité s'accordent généralement bien avec les valeurs publiées.

ملخص

ركز هذا العمل على الحساب الميكانيكي الكمي للخصائص الفيزيائية الحرارية للأيونات القلوية المنتشرة في غاز أحادي من الهيليوم في مجال درجة الحرارة المنخفضة باستخدام نموذج Chapman-Enskog. تستند الحسابات إلى الكمونات الذرية التي تم إنشاؤها من البيانات الحديثة. النتائج التي تم الحصول عليها لمعاملات النقل مثل معاملات الانتشار والتنقل تتوافق بشكل عام مع القيم المنشورة.