

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/06//2021



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

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Reguig Ikram

Intitulé

**Les effets quantiques dans le cas des ions K^+
évoluant dans un gaz neutre K aux basses
énergies**

Soutenu le 24 / 06 /2021 devant le jury composé de:

Dr. Kalli Siham	Université M'sila	Président
Dr. Bouchelaghem Fouzia	Université M'sila	Rapporteur
Dr. Redouane Salah Essma	Université M'sila	Examineur

Année universitaire : 2020/2021

Dédicace

Avec L'expression de ma reconnaissance, je dédie ce modeste travail à

- ✚ L'homme mon précieux offre du Dieu , qui doit ma vie réussite et tout mon respect: mon cher **père**.*
- ✚ La femme qui souffert sans me laisser souffrir, qui n'a jamais dit non à mes exigences et qui n'a épargné aucune effort pour me rendre heureuse : mon adorable **mère**.*
- ✚ Mes chères sœurs mes frères et mon marrie ; qui n'ont pas cessée de me conseille, encourager et soutenir tout au long de mes études que dieu le protège et leurs offre la chance et le bonheur.*
- ✚ Tous mes enseignants du primaire jusqu'à l'université.*
- ✚ Tous mes collèges de promotion 2020-2021 sans aucune exception.*

Remerciements

*Je tiens à remercier **ALLAH** qui m' a donné la force de faire ce modeste travail.*

*Je tiens à remercier mon encadreur Madame **F. Bouchlaghem** qui m' a orientée et m' a conseillée afin d' accomplir ce travail.*

*Je dois beaucoup à Madame **E. Redouane Salah** d' avoir acceptée de faire partie du ce jury, qu' elle trouve ici notre profond respect.*

*Mes sincères remerciements s' adressent aussi à Madame **S. Kalli** d' avoir honorée et acceptée de présider ce jury.*

Je remercie tous les professeurs de départements de physique.

Table des matières

Table des matières	1
Liste des tableaux	3
Table des figures	4
Introduction	5
1 Notion Général	7
1.1 Notion Général sur la collision binaire	7
1.2 La symétrie moléculaire	8
1.3 Théorie des collisions quantiques	9
1.3.1 La fonction stationnaire asymptotique	10
1.3.2 L'expansion onde partielle	12
1.3.3 Notion de section efficace	16
1.4 Section efficace de transfert de charge	18
1.4.1 Collision à basse énergie : Régime Langevin	20
1.5 Approximation semi-classique	21
2 système $K^+ - K$	23
2.1 Construction du potentiel	23
2.1.1 Distance intermédiaires	23
2.1.2 Courtes distances	24
2.1.3 Grandes distances	24
2.2 Potentiel du dimère $K^+(4s) + K(4s)$	25

2.2.1	Résultats	25
2.3	Calcul du déphasage	25
3	Sections efficaces	31
3.1	Section efficace élastique	31
3.2	Section de transfert de charge	32
A	symétries moléculaires	36
B	Unité atomique	38
C	Le moment cinétique et les harmoniques sphériques	40
	Conclusion	42
	Bibliographie	43

Liste des tableaux

2.1	Quelques points de l'énergie potentielle $V(r)$ de $K^+(4s)+K(4s)$ en fonction de la distance r , les valeurs sont de $r = 2.0a_0$ à $r = 50a_0$	26
2.2	Polarisabilités dipôle, quadripôle et octupole pour le système $K^+(4s)+K(4s)$ 26	
2.3	Paramètres du potentiel d'interaction du dimère $K(4s)^+ + K(4s)$ en (u.a.). .	27
2.4	Paramètres du coupure semi-classique $l = l_{sc}$, pour quelques énergies.	28
3.1	Section efficace élastique en (u.a.) en fonction de l'énergie.	33
3.2	Section efficace de transfert de charge en (u.a.) en fonction de l'énergie. . .	35
B.1	Conversion des unités atomiques SI en unités Gaussian.	39

Table des figures

1-1	Système des coordonnées pour le système ion - atome.	9
1-2	Diffusion d'une onde incidente par un potentiel $V(r)$	12
2-1	Représentation des courbe d'énergie potentielles de K^+-K	27
2-2	Déphasage η_l de l'état <i>ungerade</i> $^2\Sigma_g^+$ à l'énergie $E = 10^{-6}$ u.a.	29
2-3	Déphasage η_l de l'état <i>ungerade</i> $^2\Sigma_u^+$ à l'énergie $E = 10^{-6}$ u.a.	30
3-1	Sections efficaces $\sigma_{el}(E)$ pour les états g et u concernant K^+ ions dispersés	32
3-2	Sections efficaces totale $\sigma_{el}(E)$ pour les états g et u concernant K^+ ions dispersés dans K atomes.	33
3-3	Section efficace de transfert de charge à la forme logarithme pour les cas K^+-K	35

Introduction

le comportement des ions dans les gaz est un domaine d'intérêt persistant. les modèles de la haut atmosphère, la chimie interstellaire, les lasers et de nombreux autres domaines de physique et de physique chimique nécessitent des informations quantitatives concernant l'interaction de gaz neutre ionique atomique au moléculaire sur une large plage de température et / ou l'énergie de collision. En raison de la grande importance de la physique du plasma (cercles naturels , application industrielles) ont été considérablement développées sur les lois de la physique moderne.

Le terme plasma a été lancé pour la première fois en 1923 par Langmuir et Tonks [1], pour désigner un gaz lumineux contenant des électrons et plusieurs types d'ions et certains atomes modérés, Dans la nature, le plasma est le quatrième état de la matière que nous obtenons lorsque la température des états solide, liquide et gazeux augmente, cet état n'apparaît qu'à des températures très élevées. En fait, le plasma représente l'état le plus courant dans l'univers, car l'état ionique de la matière représente 99% de la matière totale dans l'univers. Un exemple de ceci est les étoiles [2].

L'intérêt présenté par cette science a suscité de nombreux travaux théoriques et expérimentaux qui ont permis d'approfondir notre connaissance sur un plan à la fois fondamental et appliqué. Cet effort a pour effet l'introduction progressive de ces techniques dans l'industrie où on distingue trois familles de plasmas :

- Plasma chaud de haute énergie, correspondants à des températures supérieures de 10^6 K, (l'objectif était de produire de l'énergie électrique de la fusion contrôlée),
- Plasma thermique caractérisé par des températures de fonctionnement supérieur de 3000 K (utilisation des décharges d'arc pour la soudure, la découpe, la projection de matière, la dépollution,...),

- Plasma de basses énergies (ou plasma froid) où les ions et les neutres restent à des températures inférieures de 1000 K, alors que les électrons sont à des températures élevées, (application au traitement de surface, à la génération d’ozone, à la chimie assistée par plasma,..). [3].

Ce travail présente le calcul de potentiel d’interaction du dimère $K^+ - K$ et le calcul de la section efficace élastique et la section efficace de transfert de charge. Ce mémoire est composé en trois chapitres, dans le premier chapitre nous exposerons les notions générales sur la collision binaire et la théorie des collisions quantique .

Le deuxième chapitre présente du potentiel pour déterminer les déphasages $\eta_l(E)$ en fonction de l’énergie E dans l’équation d’onde de Shrödinger et du moment cinétique angulaire l . le troisieme chapitre calcule de la section efficace et transfert de charge et la section efficace élastique .

Chapitre 1

Notion Général

1.1 Notion Général sur la collision binaire

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



soit dans des états excités (collisions inélastiques)



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



soit J^+ et I (échange d'électron)



soit des structures plus complexes [4]

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

1.2 La symétrie moléculaire

En précisant la structure électronique générale à deux noyaux des molécules, on utilise la notation similaire à ce que nous sommes habitués à la physique atomique, à savoir, $^{2s+j}L_j$. Laissez-nous définir l'axe- z la ligne AB joignant les noyaux à la figure 1-1 et ignorer les spins des électrons pour un moment. Si L est le moment cinétique orbital total des électrons, le résultat d'agir de l'opérateur L_z sur la fonction d'onde Φ est

$$L_z\Phi = M_L\Phi, \quad (1.5)$$

$$= \pm\Lambda\Phi. \quad (1.6)$$

où $M_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ et $\Lambda = |M_L| = 0, 1, 2, \dots$ ce nombre Λ est important lorsque nous discuterons de la dépendance de la fonction d'onde azimutale. Il apparait sous la forme de $(e^{\pm i\Lambda\phi})$ dans la fonction d'onde analogue au nombre quantique m , dans la fonction d'onde d'hydrogène. Nous avons ensuite attribué des lettres à chaque valeur de Λ , à savoir

$$\Lambda = 0 \rightarrow \Sigma$$

$$\Lambda = 1 \rightarrow \Pi$$

$$\Lambda = 2 \rightarrow \Delta$$

$$\Lambda = 3 \rightarrow \Phi.$$

L'hamiltonien du système est invariant par réflexion dans les plans contenant AB ou l'axe z . Supposons que nous ayons un opérateur A_y qui change pour y à $-y$ dans la fonction d'onde et de rappel que $L_z = -i(x\partial_y - y\partial_x)$, nous avons

$$A_y L_z = -L_z A_y. \quad (1.7)$$

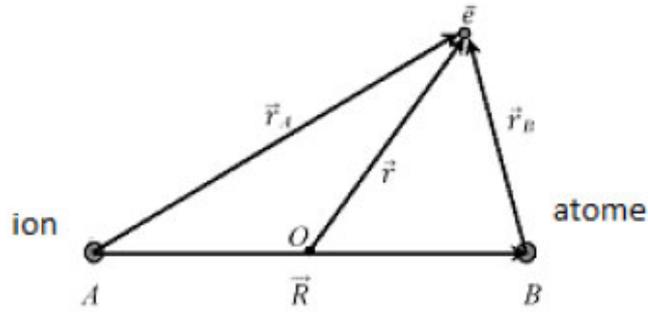


FIG. 1-1 – Système des coordonnées pour le système ion - atome.

Cela signifie que pour $\Lambda \neq 0$, la valeur propre Λ sera changé à $-\Lambda$. Ces états où $\Lambda \neq 0$ sont doublement dégénérés, car ils sont la solution de la même énergie [5].

Pour les états $\Lambda = 0$, états propres simultanées de H , L_z et A_y peut être construis. Puisque les valeurs propres de A_y sont ± 1 , Nous avons ensuite spécifié l'état Σ à Σ^+ pour un état dans lequel la fonction d'onde est laissée inchangé dans une réflexion pensée au plan constant AB et Σ^- pour le cas contraire.

Si les noyaux sont les mêmes, alors nous imposons une symétrie autour de point O dans la figure 1-1. C'est exactement ce que nous avons fait dans la dernière section. Si la fonction d'onde est reste inchangé autour de ce point dans le retournement de \vec{r} à $-\vec{r}$, s'appelle l'état *gerade* et nous l'écrire comme Σ_g , si c'est le cas inverse c.a.d pour le retournement \vec{r} à $-\vec{r}$ imposent un signe moins devant la fonction d'onde, alors il s'appelait l'état *ungerade* et nous l'écrire comme Σ_u .

En résumé, il y a quatre états pour la molécule diatomique (homo-nucléaire). Σ_g^+ , Σ_g^- , Σ_u^+ et Σ_u^- , les sections suivantes seront attentives aux états Σ_g^+ et Σ_u^+ car ils sont principalement à la collision de transfert de charge entre les atomes et ions.

1.3 Théorie des collisions quantiques

Nous passons maintenant au problème de deux corps de diffusion en aucun potentiel. Nous écrivons un potentiel général à $V(r)$, qui ne dépend que de la distance r entre les

deux noyaux.

1.3.1 La fonction stationnaire asymptotique

Dans le cadre du laboratoire, si les vecteurs de position de deux noyaux avec la masse m_a et m_b sont notés respectivement \vec{r}_a et \vec{r}_b , l'hamiltonien a donné en unité atomique par [3]

$$H = -\frac{1}{2m_a}\nabla_{r_a}^2 - \frac{1}{2m_b}\nabla_{r_b}^2 + V(\vec{r}_a - \vec{r}_b). \quad (1.8)$$

Nous pouvons tout réécrire dans le cadre de centre de masse

$$\vec{r} = \vec{r}_a - \vec{r}_b, \quad (1.9)$$

$$\vec{\mathbf{R}} = \frac{m_a\vec{r}_a + m_b\vec{r}_b}{m_a + m_b}, \quad (1.10)$$

$$M = m_a + m_b, \quad (1.11)$$

$$\mu = \frac{m_a m_b}{m_a + m_b}. \quad (1.12)$$

L'équation de Shrödinger s'écrit

$$\left\{ -\frac{1}{2M}\Delta_R - \frac{1}{2\mu}\Delta_r + V(\mathbf{r}) \right\} \Phi(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{R}}) = E_{\text{tot}}\Phi(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{R}}), \quad (1.13)$$

où Δ_R et Δ_r sont respectivement les opérateurs de Laplace mettant en jeu, respectivement, les composantes des vecteurs $\vec{\mathbf{R}}$, $\vec{\mathbf{r}}$, $M = m_a + m_b$, $\mu = m_a m_b / m_a + m_b$ est la masse réduite totale du système de deux corps, E_{tot} est l'énergie totale de système. Il est judicieux de séparer la fonction d'onde Φ en un produit comme

$$\Phi(\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{r}}) = \phi(\vec{\mathbf{R}})\psi(\vec{\mathbf{r}}). \quad (1.14)$$

La fonction d'onde $\phi(\vec{R})$ devrait décrire le mouvement de centre de masse. Plus précisément, elle décrit le mouvement libre d'une particule de masse M . par contre, $\psi(\vec{\mathbf{r}})$ devrait décrire le mouvement relatif des deux particules. En d'autre termes, elle décrit le mouvement d'une seule particule de masse μ dans le potentiel $V(r)$. Nous obtenons de ce

fait facilement

$$-\frac{1}{2M}\Delta_R\phi(\vec{\mathbf{R}}) = E_{\text{CM}}\phi(\vec{\mathbf{R}}), \quad (1.15)$$

$$\left\{-\frac{1}{2\mu}\Delta_r + V(\mathbf{r})\right\}\psi(\vec{\mathbf{r}}) = E\psi(\vec{\mathbf{r}}), \quad (1.16)$$

$$E_{\text{tot}} = E + E_{\text{CM}}. \quad (1.17)$$

Nous allons poursuivre notre analyse dans le cadre de-centre-de masse. Nous pouvons voir que le problème se réduit au problème de la diffusion à une dimension pour la séparation relative r . Ce n'est que maintenant que la masse est remplacée par la masse réduite, μ , à longue distance r , $V(\mathbf{r})$ devrait asymptotiquement tendent vers zéro et nous avons

$$E = \frac{k^2}{2\mu}(\text{u.a.}), \quad (1.18)$$

k étant le nombre d'onde de la définition en unités SI pour \vec{p}/\hbar où \vec{p} est le vecteur de mouvement linéaire, nous écrivons le potentiel à l'échelle

$$U(r) = 2\mu V(\mathbf{r}). \quad (1.19)$$

L'équation de Shrödinger devienne

$$(\Delta_r + k^2 - U(r))\psi(\vec{\mathbf{r}}) = 0. \quad (1.20)$$

Pour les grandes distances $r \rightarrow \infty$, le potentiel est supposé tend vers zéro plus rapidement que le potentiel coulombien $\sim \frac{1}{r}$ [6]. Dans ce cas, la fonction d'onde, que nous dénotons ψ_k , est choisi ayant la forme asymptotique

$$\psi_k(\mathbf{r}) \sim \psi_{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \psi_{\text{diff}}(\mathbf{r}). \quad (1.21)$$

Comme le montre la figure 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.

On suppose maintenant que l'incidence se fait le long de l'axe des z . L'état stationnaire

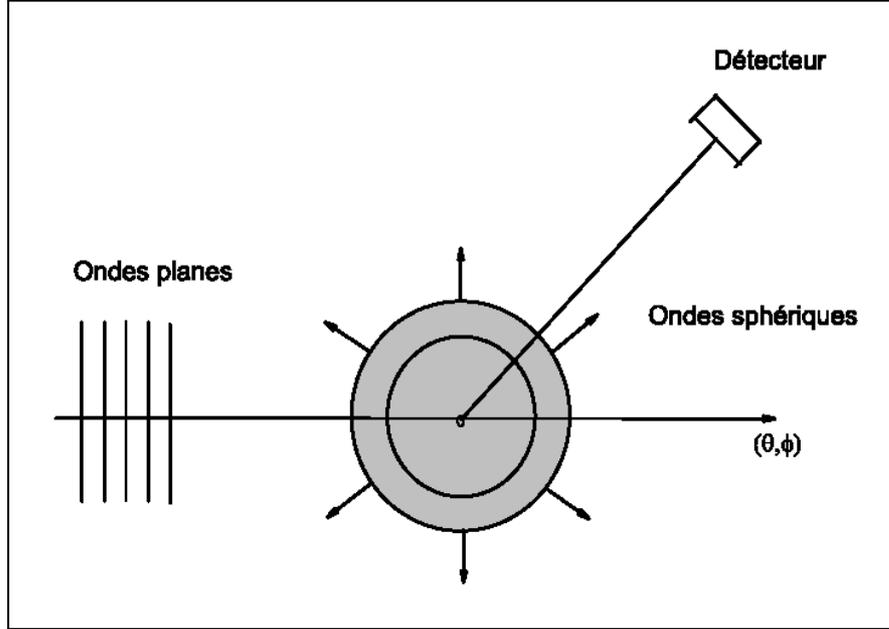


FIG. 1-2 – Diffusion d’une onde incidente par un potentiel $V(r)$.

de diffusion $\psi_k(\mathbf{r})$ est par définition la solution de l’équation (1.21) dont le comportement asymptotique est pris de la forme

$$\psi(k, \vec{\mathbf{r}}) \underset{r \rightarrow \infty}{=} N(k) \left[e^{ikz} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (1.22)$$

où $N(k)$ est la constante de normalisation, $f(k, \theta, \phi)$ est l’amplitude de diffusion dépendant des angles polaires et azimutal, (θ, ϕ) .

1.3.2 L’expansion onde partielle

Nous allons maintenant résumé brièvement la méthode d’extension partielle, nous avons écrit l’équation de Shrödinger (1.20) à l’aide des coordonnées sphériques. L’opérateur Hamiltonien (non compris le terme k^2) est donné par

$$H = -\frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(\mathbf{r}). \quad (1.23)$$

La partie angulaire dépend peut être réécrite en terme de fonctionnement de moment

angulaire, L . On peut écrire maintenant

$$H = -\frac{1}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2} \right) + V(\mathbf{r}). \quad (1.24)$$

alors on essaye d'écrire la fonction d'onde (1.20) à l'expansion des harmoniques sphériques, c. a. d,

$$\psi(k, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}(k) \mathfrak{R}_{lm}(k, r) Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (1.25)$$

où $\mathfrak{R}_{lm}(r)$ satisfait l'équation radial

$$-\frac{1}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \mathfrak{R}_l(k, r) + V(\mathbf{r}) \mathfrak{R}_l(k, r) = E \mathfrak{R}_l(k, r) \quad (1.26)$$

Nous laissons tomber l'indice m , car il n'y a aucune dépendance m dans l'hamiltonien, nous écrivons suivant l'approche standard

$$u_l(k, r) = r \mathfrak{R}_l(k, r), \quad (1.27)$$

et d'obtenir l'équation (1.20) sous la forme

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right) u_l(k, r) = 0. \quad (1.28)$$

On peut examiner la région où r est très grand de sorte que nous pouvons ignorer le terme de potentiel, $U(r)$. Notre équation radiale devient

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l(k, r) = 0. \quad (1.29)$$

La solution générale est

$$u(k, r) \rightarrow kr \left[C_l^{(1)}(k) j_l(kr) + C_l^{(2)}(k) n_l(kr) \right], \quad (1.30)$$

où $j_l(kr)$ et $n_l(kr)$ sont respectivement des fonctions sphériques de Bessel et Neumann.

Regardant la forme asymptotique d'équations sphériques de Bessel et Neumann

$$j_l(x) \rightarrow \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{1}{2}l\pi\right), \quad (1.31)$$

$$n_l(x) \rightarrow -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{1}{2}l\pi\right), \quad (1.32)$$

on peut écrire

$$u_l(k, r) \rightarrow N_l(k) \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \eta_l(k)\right), \quad (1.33)$$

où $\eta_l(k)$ est un angle appelé déphasage de l'onde partielle d'onde l , avec

$$N_l(k) = \sqrt{\left[C_l^{(1)}(k)\right]^2 + \left[C_l^{(2)}(k)\right]^2} \quad (1.34)$$

et

$$\tan \eta_l(k) = -\frac{C_l^{(2)}(k)}{C_l^{(1)}(k)}. \quad (1.35)$$

Nous retournons à notre fonction d'onde asymptotique dans la section précédente. Encore, nous avons dans les grandes distances de r ,

$$\psi(k, \vec{\mathbf{r}}) = N(k) \left[e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (1.36)$$

et nous prenons l'expansion du terme exponentielle en écrivant

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \quad (1.37)$$

où $P_l(\cos \theta)$ est les polynômes de Legendre. avec la définition des harmoniques sphériques donnée dans l'Annexe **B**, nous avons

$$P_l(\cos \theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,0}(\theta, \phi). \quad (1.38)$$

Maintenant on substitue ces expressions dans l'équation (1.36), en utilisant le formulaire

asymptotique de la fonction sphérique de Bessel et d'obtenir

$$\begin{aligned}
\psi(k, \vec{\mathbf{r}}) &\rightarrow N(k) \left(\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr} P_l(\cos\theta) + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right), \\
&\rightarrow N(k) \left(\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,0}(\theta, \phi) \right. \\
&\quad \left. + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right). \tag{1.39}
\end{aligned}$$

En comparant cette équation avec

$$\psi(k, \vec{\mathbf{r}}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}(k) \mathfrak{R}_{lm}(k, r) Y_{l,m}(\theta, \phi). \tag{1.40}$$

En utilisant le facteur réel $\mathfrak{R}_{lm}(k, r) = r^{-1} u_l(k, r)$ pour les grandes distances et l'équation (1.33), nous avons

$$\psi(k, \vec{\mathbf{r}}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}(k) N(k) \frac{e^{i(kr-l\pi/2+\eta_l)} - e^{-i(kr-l\pi/2+\eta_l)}}{2ir} Y_{l,m}(\theta, \phi). \tag{1.41}$$

Par la comparaison des coefficients de l'onde incidente (de terme e^{ikr}) de l'équation (1.39) et l'équation (1.41), on obtient

$$c_{lm}(k) = (2l+1) \frac{N(k)}{kN_l(k)} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} i^l e^{i\eta_l} \eta_{m,0}. \tag{1.42}$$

En faisant correspondre l'onde sortante (des termes e^{ikr}) nous arrivons à

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\eta_l(k)} - 1) P_l(\cos\theta). \tag{1.43}$$

La fonction d'onde totale peut être écrite maintenant dans la forme suivante

$$\begin{aligned}
\psi(k, \vec{\mathbf{r}}) &\rightarrow N(k) \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \\
&\rightarrow N(k) \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\eta_l(k)} - 1) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right). \tag{1.44}
\end{aligned}$$

Ce formulaire sera utile dans la section suivante, lorsque nous essayons de calculer la section efficace totale.

1.3.3 Notion de section efficace

Nous suivons maintenant l'argument avancé par Griffith [7] pour déterminer la section efficace de diffusion. La quantité $f_k(k, \theta, \phi)$ est généralement appelée l'amplitude de diffusion pour une raison donnée. Nous avons une petite surface $d\sigma$ que les particules incidentes frappent pendant le temps dt et à la vitesse v et la probabilité que cet événement va se produire, a donné par

$$dP = |\psi_{\text{incidente}}|^2 dV = |N(k)|^2 (vdt) d\sigma. \quad (1.45)$$

Ces particules vont subir de diffusion et plus tard, ils seront émerger de l'angle solide correspondant $d\Omega$ à la même probabilité que maintenant il peut aussi être écrit comme

$$dP = |\psi_{\text{incidente}}|^2 dV = \frac{|N(k)|^2 |f_k(k, \theta, \phi)|^2}{r^2} (vdt) r^2 d\Omega. \quad (1.46)$$

En égalent les deux probabilités, qu'il suit

$$d\sigma = |f(k, \theta, \phi)|^2 d\Omega. \quad (1.47)$$

Donc la section efficace totale a donné par

$$\sigma_{\text{tot}} = \int |f(k, \theta, \phi)|^2 d\Omega. \quad (1.48)$$

Nous pouvons utiliser l'équation (1.43) et essayer de calculer la section efficace totale. L'intégrale que nous devons évaluer est

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{tot}} &= \int |f(k, \theta, \phi)|^2 d\Omega, \\
&= \int \left| \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\eta_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta) \right|^2 d\Omega, \\
&= 2\pi \int_{\theta=0}^{\theta=2\pi} \frac{1}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty} (2l+1) (2l'+1) e^{i(\eta_l(k) - \eta_{l'}(k))} \\
&\quad \times \sin \eta_l(k) \sin \eta_{l'}(k) P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \sin \theta d\theta.
\end{aligned} \tag{1.49}$$

Nous utilisons l'orthogonalité des polynômes de Legendre

$$\int_{\cos \theta = -1}^{\cos \theta = 1} P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) d\cos \theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}. \tag{1.50}$$

$\delta_{ll'}$ étant le symbole de Kronecker, en faisant de l'intégration à l'intérieur de la sommation, nous arrivons à l'expression bien connue

$$\sigma_{\text{tot}}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l(k) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(k), \tag{1.51}$$

où

$$\sigma_l(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l(k) \tag{1.52}$$

est la section efficace de diffusion des voie de diffusion pour chaque l . La section totale est simplement la somme de la contribution indépendante de chaque voie de diffusion.

Dans l'arrangement initial A est incidente sur l'atome ($B + \bar{e}$) et cette radiale $[\psi_g(r) + \psi_u(r)]/2$, où $\psi_{g,u}(r)$ correspond les ondes des états $\Sigma_{g,u}^+$. Les amplitudes de diffusion qui représente la section élastique est [8]

$$f_d(\theta) = \frac{1}{2} [f_g(\theta) + f_u(\theta)] \tag{1.53}$$

où l'amplitude de diffusion $f_g(\theta)$, $f_u(\theta)$ sont

$$f_{g,u}(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{1}{2ik} (e^{2im_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta). \tag{1.54}$$

La section efficace élastique totale correspondante est [9]

$$\sigma_{\text{el}}(k) = \frac{1}{2} [\sigma_{\text{el}}^g + \sigma_{\text{el}}^u] \quad (1.55)$$

où

$$\sigma_{\text{el}}^{g,u} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l^{g,u}. \quad (1.56)$$

1.4 Section efficace de transfert de charge

Nous nous tournons maintenant notre attention à la collision de transfert de charge. Rappelons que la réaction peut être écrite comme



Nous tenons le label A et B pour les garder distincts. À partir de notre discussion sur les orbitales moléculaires dans la section précédente, nous supposons qu'il n'existe que deux solutions à l'équation de Shrödinger du système (appelé d'approximation de deux états [10]). D'après la figure 1-1, on définit la fonction d'onde d'essai de la combinaison linéaire de $\psi_{1s}(r_A)$ et $\psi_{1s}(r_B)$ [3]. La fonction d'onde qui demeure inchangée sous la réflexion, est appelé état "*gerade*" ce qui est donné par

$$\Phi_g(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(r_A) + \psi_{1s}(r_B)), \quad (1.58)$$

L'onde qui change de signe dans une réflexion est appelé état "*ungerade*" ce qui est donné par

$$\Phi_u(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{1s}(r_A) - \psi_{1s}(r_B)). \quad (1.59)$$

la fonction d'onde $\Psi_g(r)$ correspondante le potentiel de l'état Σ_g^+ et $\Psi_u(r)$ correspondante le potentiel de l'état Σ_u^+ .

Après nous ayons à résoudre les problèmes de diffusion des deux états, nous arrivons à la forme asymptotique similaire à ce que nous avons vu avant, mais maintenant nous les avons écrit en termes de produit tensoriel des ondes dispersés "*gerade*" et "*ungerade*"

et les deux états électronique attachés $\psi(r_A)$ et $\psi(r_B)$ donnée dans les équations (1.58), (1.59)

$$\begin{aligned}\Phi_g(r) &\rightarrow \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} + f_g(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi(r_A) + \psi(r_B) \} \\ \Phi_u(r) &\rightarrow \left(e^{i\vec{k}\vec{r}} + f_u(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi(r_A) - \psi(r_B) \}.\end{aligned}\quad (1.60)$$

Si l'électron est attaché au noyau A d'abord (ou à l'arrivée d'ondes purement $\psi(r_A)$), la fonction d'onde $\psi(r)$, que nous avons à construire à partir de l'équation (1.60) est

$$\begin{aligned}\psi(r) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_g(r) + \Phi_u(r)), \\ &\rightarrow \frac{1}{2} \psi(r_A) e^{i\vec{k}\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{2} \{ (f_g(k, \theta) + f_u(k, \theta)) \psi(r_A) + \\ &\quad (f_g(k, \theta) - f_u(k, \theta)) \psi(r_B) \}\end{aligned}\quad (1.61)$$

L'amplitude de diffusion de transfert de charge est se lit en face de terme $\psi(r_B)$ parce que c'est quand l'électron est fixe au noyau B après la collision. Nous allons maintenant examiner l'amplitude de diffusion de transfert de charge.

$$\begin{aligned}g(k, \theta) &= \frac{1}{2} [f_g(k, \theta) - f_u(k, \theta)] \\ &= \frac{1}{4ik^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\eta_{l,g}(k)} - e^{2i\eta_{l,u}(k)}) \\ &= \frac{1}{4ik^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\eta_{l,g}(k)} - e^{2i\eta_{l,u}(k)}) \left(\frac{e^{-i(\eta_{l,g}(k)+\eta_{l,u}(k))}}{e^{-i(\eta_{l,g}(k)+\eta_{l,u}(k))}} \right) \\ &\quad \frac{1}{4ik^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{(e^{i(\eta_{l,g}(k)-\eta_{l,u}(k))} - e^{-i(\eta_{l,g}(k)-\eta_{l,u}(k))})}{e^{-i(\eta_{l,g}(k)+\eta_{l,u}(k))}} \\ &\quad \frac{1}{2k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \sin(\eta_{l,g}(k) - \eta_{l,u}(k)) e^{i(\eta_{l,g}(k)+\eta_{l,u}(k))}.\end{aligned}\quad (1.62)$$

On peut alors calculer la section de transfert de charge de la même manière que nous l'avons fait dans les équations (1.49), (1.50), le résultat est [30]

$$\sigma_{\text{ch}} = \int |g(k, \theta)|^2 d\Omega = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2(\eta_{l,g}(k) - \eta_{l,u}(k)). \quad (1.63)$$

1.4.1 Collision à basse énergie : Régime Langevin

Pour calculer la section de transfert de charge en utilisant l'équation (1.63), il est essentiel de comprendre le comportement de $\sin^2(\eta_{l,g}(k) - \eta_{l,u}(k))$ à différentes énergie de collision. Mott et massy [10] suggèrent qu'il existe une valeur l_{\max} tel que la quantité $\sin^2(\eta_{l,g}(k) - \eta_{l,u}(k))$ oscille rapidement entre 0 et 1 pour $l < l_{\max}$. Dans cette région il est raisonnable de remplacer $\sin^2(\eta_{l,g}(k) - \eta_{l,u}(k))$ simplement par 1/2. Dans la région où l'énergie de collision est suffisamment faible, on peut ignore la contribution de $l > l_{\max}$, disormais la section efficace de transfert de charge est donné par

$$\sigma_{ch} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_{\max}} (2l+1) \frac{1}{2} = \frac{\pi}{2k^2} (l_{\max} + 1)^2 \quad (1.64)$$

maintenant, le moment angulaire maximum peut être donnée par le moment angulaire classique avec le paramètre d'impacte b_0 , nous avons

$$l_{\max} + 1 \simeq l_{\max} \simeq \mu v_i b_0 \quad (1.65)$$

Rapplons que $k = \sqrt{2\mu E}$, nous avons

$$\sigma_{ch} = \frac{1}{2} \pi b_0^2 = \frac{\sigma_{\text{Langevin}}}{2} \quad (1.66)$$

En comparant avec le résultat classique de (1.22), la probabilité de transfert de charge, p_c , est 1/2. Ceci est un résultat attendu pour atome identique ou presque identique et l'ion, l'électron ne peut pas les distinguer et il ya 50% chances de choisir d'être délimité à l'un des deux sites.

la section efficace varie approximativement comme la formule classique de Langevin pour un potentiel de polarisation [9]

$$\sigma_{\text{Langevin}} = \pi E^{-\frac{1}{2}} (\alpha)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.67)$$

Si l'énergie de collision est grande, la section efficace de transfert de charge est donné par

$$\sigma_{ch} = (a \ln E - b)^2.$$

1.5 Approximation semi-classique

La résolution numérique de l'équation d'onde radiale (1.28) conduit au calcul quantique des déphasages élastiques de diffusion $\eta_l(k)$. Ceci est généralement fait en imposant aux fonctions d'onde radiales le comportement asymptotique (1.33). Le calcul peut néanmoins être simplifié en admettant que, pour les grandes valeurs du moment cinétique orbital l , le mouvement peut être traité d'une manière semi-classique [11].

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 [12]

$$\eta_l \approx -\frac{\mu}{\hbar^2} \int_{r_0}^{\infty} \frac{V(r)}{\sqrt{k^2 - (l + \frac{1}{2})^2 / r^2}} dr \quad (1.68)$$

avec $r > r_0 \simeq l/k$ est la région du mouvement classiquement accessible.

Le potentiel d'interaction entre deux corps varie pour les grandes distances internucléaire R comme $V(r) \sim -C_n/r^n$, avec $n > 2$ et C_n étant des constantes. On obtient approximativement [11]

$$\eta_l(k) \approx \frac{\mu C_n k^{n-2}}{2\hbar^2 l^{n-1}} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}) \Gamma(\frac{n-1}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})} \quad (1.69)$$

où Γ est la fonction usuelle d'Euler [13], appelée habituellement fonction de gamma. Cette expression peut être notamment réécrite sous la forme

$$\eta_l(k) \approx \frac{\mu C_n k^{n-2}}{\hbar^2 (2l+1)^{n-1}} f(n). \quad (1.70)$$

dans laquelle la fonction $f(n)$ est définie par

$$f(n) = \begin{cases} \frac{(n-3)(n-5)\dots 1}{(n-2)(n-4)\dots 2} \frac{\pi}{2}, & n > 2 \text{ et paire} \\ \frac{(n-3)(n-5)\dots 2}{(n-2)(n-4)\dots 3}, & n > 3 \text{ et impaire} \end{cases} \quad (1.71)$$

avec $f(2) = \frac{\pi}{2}$ et $f(3) = 1$.

Chapitre 2

systeme K^+ - K

Dans cette section, nous détaillons la construction des courbes d'énergies potentielles par lesquelles les ions K^+ [$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^0$] interagissent avec les atomes K [$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$] dans les états *gerade* et *ungerade*. Cette construction sera surtout basée sur des points d'énergie potentielle déterminée théoriquement très récemment. Du plus, le but de ce travail est de calculer quantiquement les déphasages élastiques en fonction de l'énergie de collision. Ensuite nous utilisons les déphasages obtenus pour calculer les sections efficaces élastiques et les sections efficaces de transfert de charge.

2.1 Construction du potentiel

Pour connaître le potentiel d'interaction exact $V(R)$ entre deux espèces atomiques, la tâche est presque impossible. Au lieu de cela, les modèles mathématiques qui imitent ce potentiel de manière raisonnable fournissent de bons outils pour tester les théories de collision cinétiques via les mesures des sections efficaces. Ainsi, les potentiels ion-atome doivent être connus dans les régions longues, intermédiaires et courtes pour les calculs nécessaires.

2.1.1 Distance intermédiaires

Les deux potentiels ion-atome doivent être connus dans les régions longue, intermédiaire et courte pour les calculs nécessaires. Nous avons donc adopté les points de données

dans l'intervalle $2 \leq R \leq 50$ produits par Magnier *et al* [17], données gerade et ungerade, les ensembles sont encore plus commodément étendus, pour $R \leq 2$. on utilise la forme (2.1)

2.1.2 Courtes distances

Le potentiel ion-atome à courte stance peut être exprimé par la relation de Born-Meyer

$$V_{CD}(r) = \alpha \exp(-\beta r) \quad (2.1)$$

ou α et β sont des parametre constants et r est la distance internucléaire .

2.1.3 Grandes distances

le ptenteil l'interaction à longne distance peut être écrit comme la somme de deux parties.

$$V_{LD}(r) = V_{\text{dis}}(r) \pm V_{\text{ech}}(r) \quad (2.2)$$

ou les signes $(-)$ et $(+)$ sont utilisés respectivement par les potenteils g et u . les terme de dispersion sont

$$V_{\text{dis}}(r) = - \left[\frac{C_4}{r^4} + \frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} \right] \quad (2.3)$$

où les coefficients constants $C_4 = \alpha_d/2, C_6 = \alpha_q/2, C_8 = \alpha_o/2$ sont appelés coefficients dispersion, $\alpha_d, \alpha_q, \alpha_o$ sont les polarisabilités dipôle, quadrupôle et octopôle de l'atome neutre [21], le terme de Tony C Scott *et al* est prend la forme

$$V_{\text{ech}}(r) = \frac{A_{n,s}^2}{4} \left(\frac{4}{e} \right)^{\frac{1}{\nu}} \left(\frac{r}{2} \right)^{2\gamma+1} \exp(-r\nu) \quad (2.4)$$

où $A_{n,s} = 0,81460, \nu = 0,630$ et $\gamma = (1/\nu - 1)$ [22]

2.2 Potentiel du dimère $\text{K}^+(4s)+\text{K}(4s)$

L'interaction d'un atome de lithium $\text{K}(4s)$ avec un ion $\text{K}^+(4s)$ dans un état fondamental s'effectue le long de l'un de deux états moléculaires possible ${}^2\Sigma_g^+$ et ${}^2\Sigma_u^+$.

L'état ${}^2\Sigma_g^+$: pour construire la courbe d'énergie potentielle, nous avons utilisé des valeurs *ab initio de* [17] entre $r = 2.0a_0$ et $r = 50.0a_0$. Pour les petites distances $r < 2.0a_0$, Equation (2.1) est utilisé, par contre pour $r > 50.0a_0$, le développement (2.2) est utilisé. Ce potentiel présente un puits de profondeur $D_e = 6687 \text{ cm}^{-1}$ correspondant à une position d'équilibre $r_e = 4.47 \text{ \AA}$.

L'état ${}^2\Sigma_u^+$: Ce potentiel est construits dans l'intervalle $2.0a_0 \leq r \leq 50.0a_0$ par des données *ab initio* fournir par [17]. Nous avons obtenu une profondeur de 86.50 cm^{-1} et une distance d'équilibre 11.74 \AA . Ces valeurs sont très proches des résultats répertoriés dans le tableau 2.3

2.2.1 Résultats

Les courbes d'énergie potentielles ainsi construites sont représentées sur la figure 2-1. Le tableau 2.1 donne également pour quelques valeurs de r le potentiel $V(r)$ relatif à l'interaction $\text{K}^+(4s)+\text{K}(4s)$ pour les deux états moléculaires.

Les paramètres de polarisabilités $\alpha_d, \alpha_q, \alpha_o$, que nous avons adoptés dans nos calculs, sont listés dans le tableau 2.2 comparés avec d'autres valeurs de littérature. Le lissage numérique génère pour chaque état les paramètres constants A et B qui apparaissent dans la forme de courtes distances (2.1). Les valeurs calculées de ces constantes sont rapportées dans le tableau 2.3.

2.3 Calcule du déphasage

Ayant déterminé convenablement le potentiel interatomique $V(r)$, il est maintenant possible de résoudre numériquement l'équation radial de Schrödinger (1.54). En utilisant l'algorithme de Numerove [28], le Code fortran que nous avons élaboré permet de déterminer les déphasages $\eta_l(E)$ pour chaque énergie E et moment cinétique orbital l . Ces

Distance r (u.a.)	Energie E (u.a.)	
	$^2\Sigma_g^+$	$^2\Sigma_u^+$
5	0.264×10^{-1}	0.103
6	-0.856×10^{-1}	0.708×10^{-1}
7	-0.244×10^{-1}	0.666×10^{-1}
8	-0.300×10^{-1}	0.525×10^{-1}
9	-0.299×10^{-1}	0.887×10^{-1}
10	-0.271×10^{-1}	0.206×10^{-1}
11	-0.232×10^{-1}	0.147×10^{-1}
12	-0.190×10^{-1}	0.985×10^{-2}
13	-0.151×10^{-1}	0.647×10^{-2}
14	-0.116×10^{-1}	0.407×10^{-2}
15	-0.879×10^{-2}	0.241×10^{-2}
16	-0.651×10^{-2}	0.129×10^{-2}
17	-0.477×10^{-2}	0.568×10^{-3}
18	-0.326×10^{-2}	0.477×10^{-4}
19	-0.253×10^{-2}	-0.156×10^{-3}
20	-0.186×10^{-2}	-0.305×10^{-3}
21	-0.138×10^{-2}	-0.376×10^{-3}
22	-0.104×10^{-2}	-0.398×10^{-3}
23	-0.798×10^{-3}	-0.392×10^{-3}
24	-0.624×10^{-3}	-0.369×10^{-3}
25	-0.497×10^{-3}	-0.339×10^{-3}
26	-0.404×10^{-3}	-0.306×10^{-3}
27	-0.333×10^{-3}	-0.273×10^{-3}

TAB. 2.1 – Quelques points de l'énergie potentielle $V(r)$ de $K^+(4s)+K(4s)$ en fonction de la distance r , les valeurs sont de $r = 2.0a_0$ à $r = 50a_0$.

$K^+(4s) + K(4s)$ (u.a.)		
Polarizabilités (u.a.)	théorie	refs
α_d	287.6	Ce travail [18]
	289.1	[19]
	289.3	[20]
α_q	4.730×10^3	Ce travail [21]
	4.597×10^3	[23]
	4.983×10^3	[24]
α_o	16.5×10^4	Ce travail [21]
	15.02×10^4	[23]
	17.73×10^4	[24]

TAB. 2.2 – Polarisabilites dipôle, quadripôle et octupole pour le système $K^+(4s)+K(4s)$

Etats moléculaire	r_e	D_e	A	B	refs
$^2\Sigma_g^+$	8.46	0.304×10^{-1}	538	1.98	Ce travail
	8.38	0.295×10^{-1}			[25]
	8.31	0.304×10^{-1}			[26, 27]
$^2\Sigma_u^+$	22.20	0.394×10^{-3}	1.10	0.475	Ce travail
	22.39	0.373×10^{-3}			[25]

TAB. 2.3 – Paramètres du potentiel d’interaction du dimère $K(4s)^+ + K(4s)en$ (u.a.).

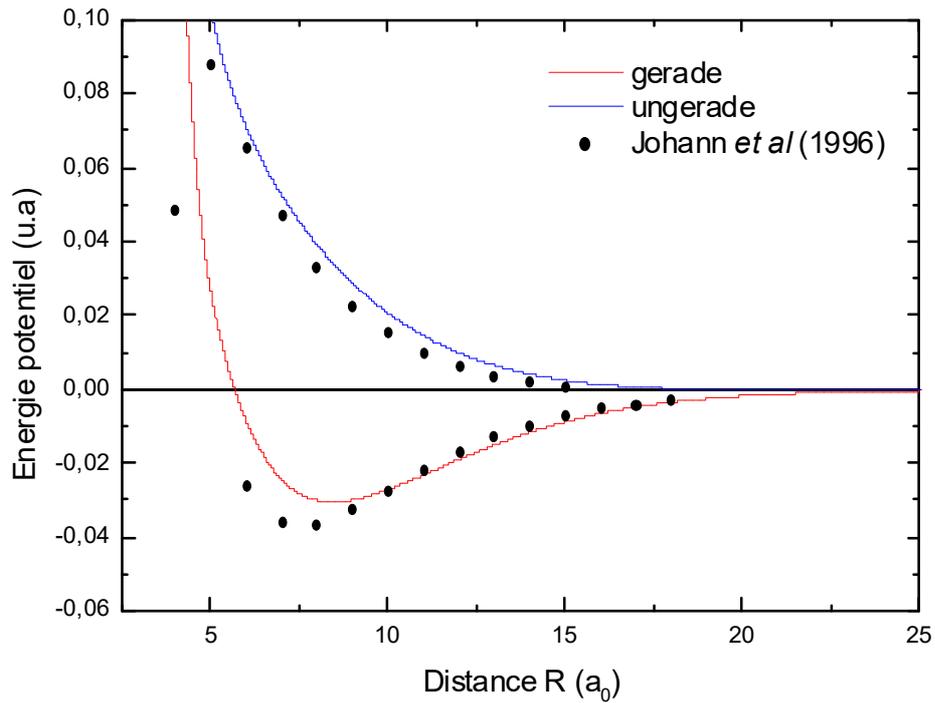


FIG. 2-1 – Représentation des courbe d’énergie potentielles de K^+-K .

Energie E (u.a.)	L_{sc}
10^{-6}	57
10^{-5}	124
10^{-4}	265
10^{-3}	569

TAB. 2.4 – Paramètres du coupure semi-classique $l = l_{sc}$, pour quelques énergies.

déphasages sont nécessaire, comme il va être vu au prochain chapitre, à la détermination des propriétés hydrodynamiques d'un ion K^+ dans leur propre gaz K et leur comportement avec la température.

En pratique, le calculs de $\eta_l(E)$ est fait pour toutes les énergies comprise entre $E_{\min} = 10^{-16}$ et $E_{\max} = 10^{-2}$, avec la valeur maximal du moment cinétique orbital $l_{\max} = 1000$. Les calculs seront effectués quantiquement à une certaine valeur $l = l_{sc}$, au delà de laquelle le programme est forcé d'utiliser le déphasage semi-classique approximative donné par (3.1). Pour notre cas, $\eta_l(E)$ prend la forme

$$\eta_l(E) \simeq \frac{\mu\pi C_4 k^2}{8\hbar^2 l^3}. \quad (2.5)$$

On rappelle que cette équation est valable pour des l grands.

Les figures 2-2, 2-3 illustrent le cas de déphasage η_l à l'énergie $E = 10^{-6}$ de deux états moléculaires $^2\Sigma_g^+$ et $^2\Sigma_u^+$ pour la molécules ions K_2^+ nous montrons les déphasages numériques (module π) par les états *gerade* et *ungerade* en fonction de l et nous les comparons aux changements approximatifs de déphasages semi-classiques. Dans les deux cas, le rapprochement est pour $l > 50$. Nous donnons dans le tableau 2.4 les valeurs de L_{sc} pour différentes énergies.

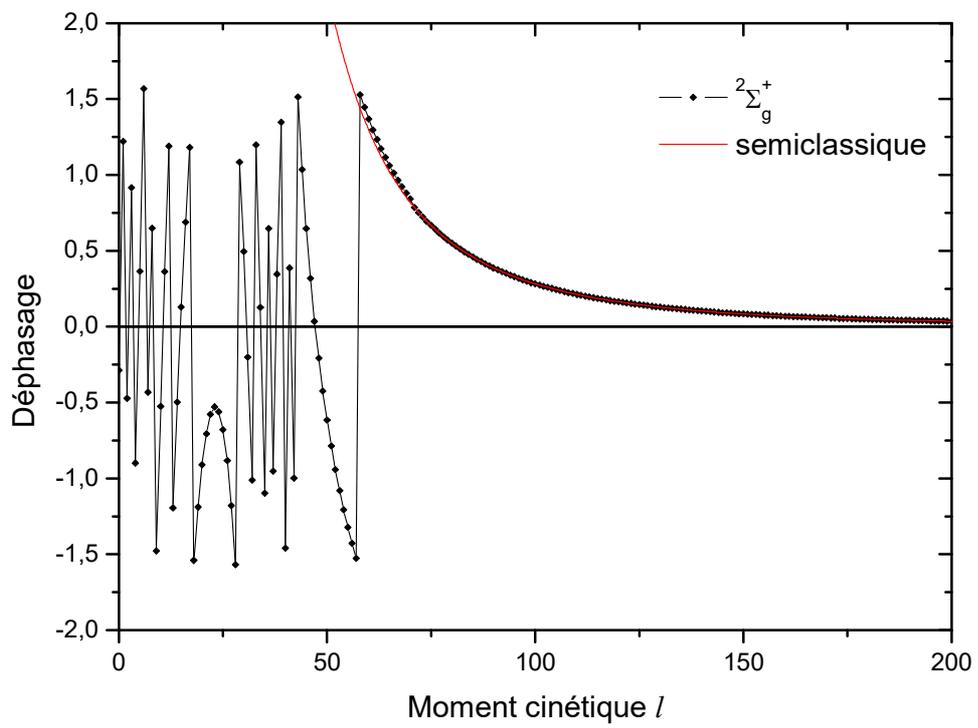


FIG. 2-2 – Déphasage η_l de l'état *ungerade* ${}^2\Sigma_g^+$ à l'énergie $E = 10^{-6}$ u.a.

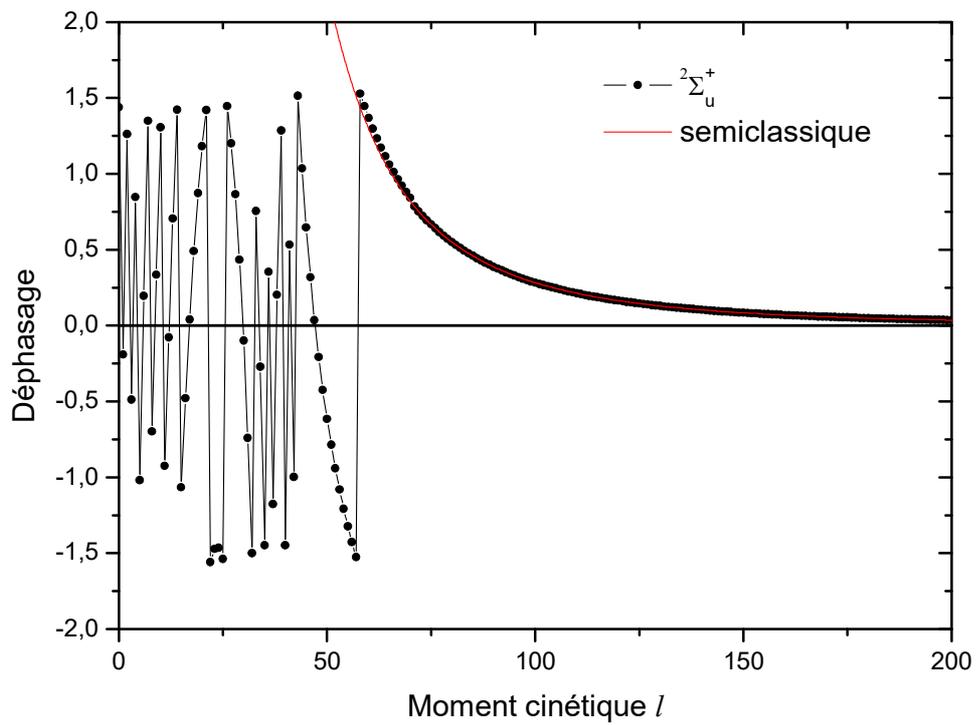


FIG. 2-3 – Déphasage η_l de l'état *ungerade* ${}^2\Sigma_u^+$ à l'énergie $E = 10^{-6}$ u.a.

Chapitre 3

Sections efficaces

3.1 Section efficace élastique

La détermination des déphasages conduit au calcul de diverses sections efficaces nécessaires à l'étude des propriétés thermophysiques. De ce fait, en utilisant les sections efficaces élastiques des états *gerade* et *ungerade* donnée par la relation (3.1) [29] relative au collision $K^+(4s) + K(4s)$.

$$\sigma_{el}^{g,u} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l^{g,u}. \quad (3.1)$$

En outre, pour calculer la section efficace totale élastique, il est important de savoir que depuis la collision de l'ion K^+ avec K peut se produire probablement via l'état *gerade* et *ungerade*, la section moyenne totale est

$$\sigma_{el}^{tot} = 1/2 [\sigma_{el}^g + \sigma_{el}^u] \quad (3.2)$$

[9] ont démontré dans leur travail sur les collisions de Sodium, Na^+ ion avec Na neutre que la section élastique totale peut être approchée par la relation semi-classique

$$\sigma_{el} = \pi (\mu \alpha_d^2)^{1/3} (1 + \pi^2/16) E^{-1/3} \quad (3.3)$$

Cette expression est appliquée avec succès aux collisions entre les neutres et ions neutres. Pour le système K^+ , cette équation aboutit au résultat numérique à l' u.a.

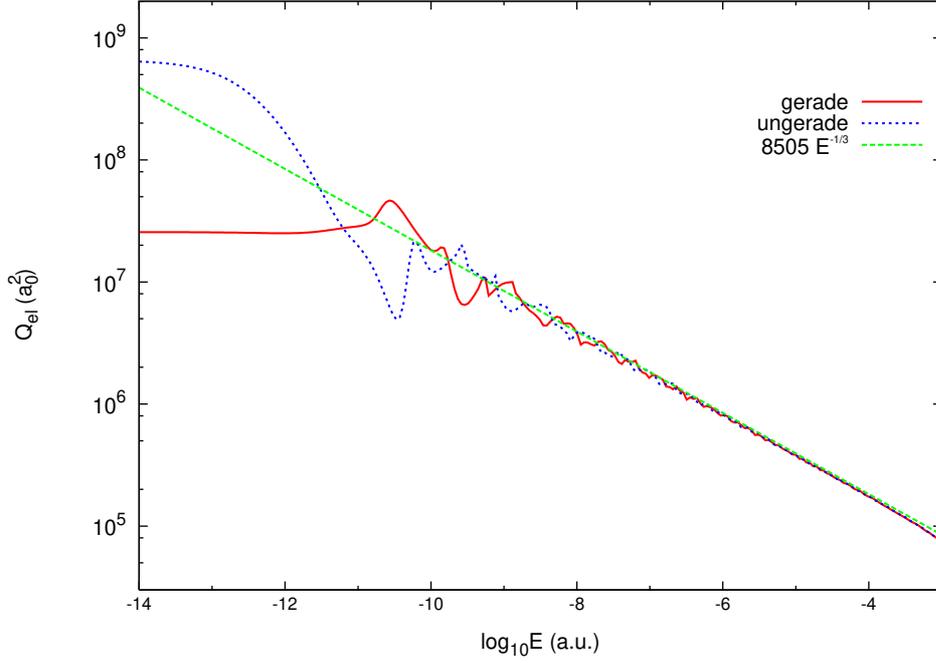


FIG. 3-1 – Sections efficaces $\sigma_{el}(E)$ pour les états g et u concernant K^+ ions dispersés

$$\sigma_{el} = 8505E^{-1/3} \quad (3.4)$$

Nos données des sections efficaces variant avec l'énergie pour les deux états ${}^2\Sigma_g^+$ et ${}^2\Sigma_u^+$ de système $K^+ - K$ sont présentées dans les figures 3-1, 3-2, le fit par l'expression $\sigma(E) = C_{el}E^{-1/3}$ est aussi présenté avec $C_{el} = 8.505 \times 10^3$. Des valeurs numériques de la section efficace totale sont illustrées dans le tableau 3.1. Les figures montrent des oscillations dues à une symétrie de potentiel, Aberth et Lorents ont mis en évidence : [4]

- a) des oscillations dues à la symétrie de masses et liées à l'indiscernabilité des particules ;
- b) une perturbation liée à l'intersection des niveaux d'énergies ;
- c) une perturbation liée à l'existence d'un puits de potentiel (effet «arc-en-ciel»).

3.2 Section de transfert de charge

Pour le transfert de charge, les collisions du type $A^+ + A$, durant lesquelles s'effectue un transfert de charge de l'ion vers l'atome ou la molécule, ont des sections efficaces

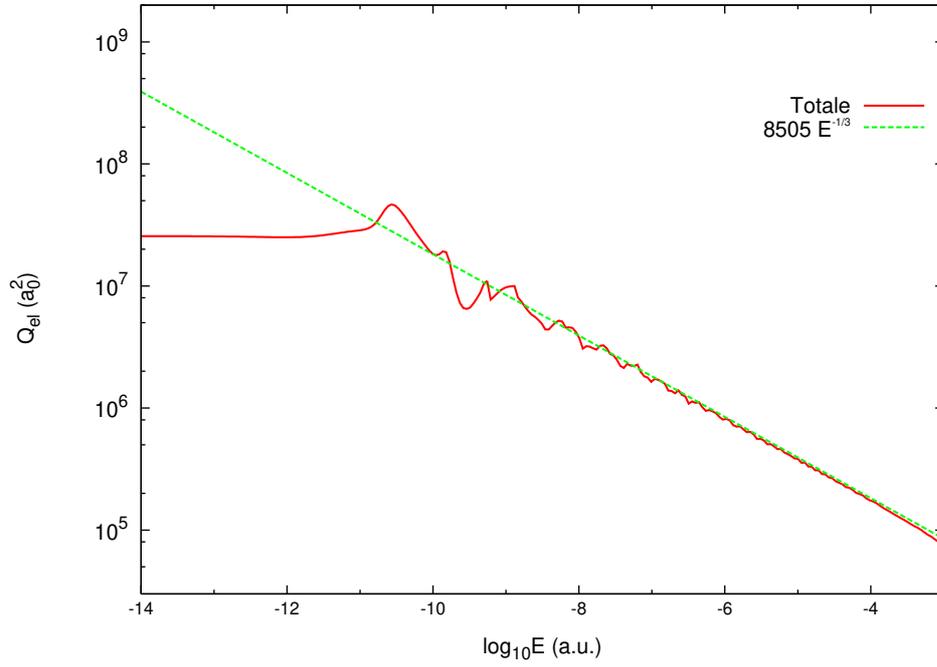


FIG. 3-2 – Sections efficaces totale $\sigma_{el}(E)$ pour les états g et u concernant K^+ ions dispersés dans K atomes.

Sections efficaces totale σ_{el}	
Energie E (u.a.)	$K^+ + K$
1.031×10^{-14}	2.56×10^7
1.10×10^{-13}	2.54×10^7
1.063×10^{-12}	2.50×10^7
1.023×10^{-11}	2.86×10^7
1.096×10^{-10}	1.78×10^7
1.015×10^{-8}	3.71×10^6
1.047×10^{-6}	814603
1.080×10^{-4}	171120

TAB. 3.1 – Section efficace élastique en (u.a.) en fonction de l'énergie.

beaucoup plus élevées que celles d'une collision élastique. La section efficace de transfert de charge revient à dévier la particule (ici l'ion) de $(\pi - \theta)$ avec θ l'angle de déviation de l'ion dans une collision élastique. Dans ce cas, la section efficace de transfert de charge donnée par la relation

$$\sigma_{ch} = \pi/\kappa^2 \sum (2l + 1) \sin^2 (\eta_{l,g}(\kappa) - \eta_{l,g}(\kappa)) \quad (3.5)$$

Les calculs seront faits dans le domaine de basses énergies, relativement à la molécule d'ions de Potassuime. La figure 3-3 montre les variations de section efficace de transfert de charge $\sigma_{ch}(E)$ comprise entre 10^{-14} et 10^{-3} u.a., les courbes obtenues mettent en évidence des oscillations liées à l'échange d'un électron entre les particules incidentes et cible, aux hautes énergies, l'influence de la section efficace est déterminée par la décroissance exponentielle de la différence entre les potentiels ${}^2\Sigma_g^+$ et ${}^2\Sigma_u^+$. L'influence de la force attractive à grandes distances tendance à annuler et la section efficace est déterminée par la décroissance exponentielle de la distance entre les potentiels ${}^2\Sigma_g^+$ et ${}^2\Sigma_u^+$. La section efficace de transfert de charge varie en [12, 30]

$$\sigma_{ch} = (\alpha \ln E - b)^2 \quad (3.6)$$

avec $a = 5.90$, $b = 1.15$ et E exprimée en eV. sont des constantes dépendant du système de collision. Les résultats de la section efficace de transfert de charge sont listées dans le tableau 3.2 pour quelques valeurs de l'énergies.

Section efficace de transfert de charge σ_{ch}	
Energie E (u.a.)	$\text{K}^+ + \text{K}$
1.031×10^{-14}	1.025×10^8
1.105×10^{-13}	8.240×10^7
1.063×10^{-12}	2.906×10^7
1.023×10^{-11}	1.363×10^7
1.096×10^{-10}	6.360×10^6
1.015×10^{-8}	677195.226
8.122×10^{-16}	13729.479
1.080×10^{-4}	4047.769

TAB. 3.2 – Section efficace de transfert de charge en (u.a.) en fonction de l'énergie.

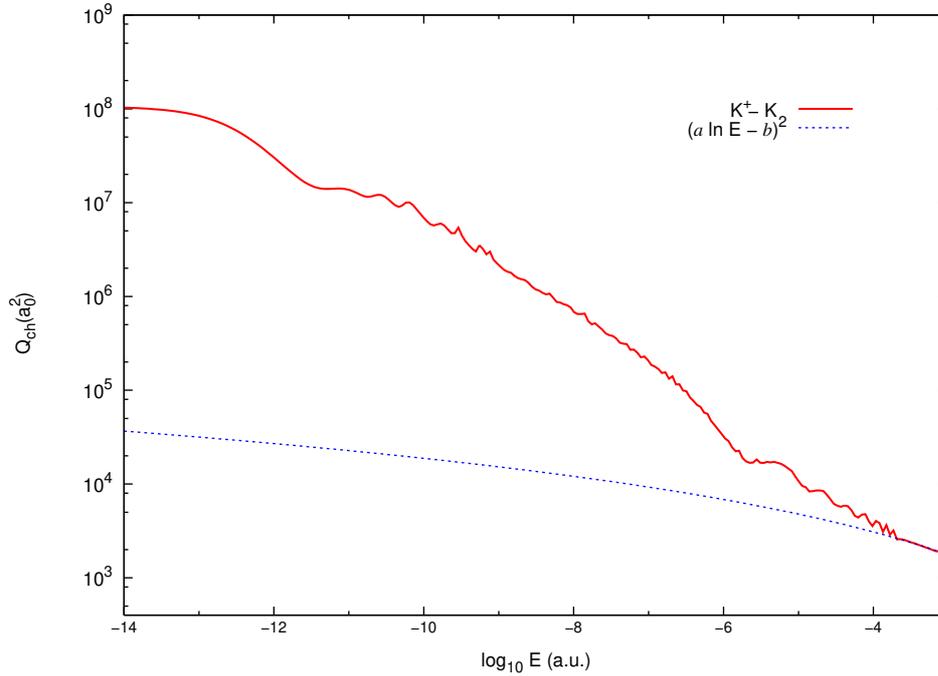


FIG. 3-3 – Section efficace de transfert de charge à la forme logarithme pour les cas $\text{K}^+ - \text{K}$.

Annexe A

symétries moléculaires

soient L le moment cinétique électronique total et S le spin électronique totale d'un système diatomique . le moment cinétique total de la molécule est dans ce cas la somme vectorielle $J = L + S$. Pour une molécule *mononucléaire* ou *hétéronucléaire* , son état quantique électronique est représenté par [5, 31]

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

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

$$M_L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$$

$$\Lambda = |M_L| = 0, 1, 2, \dots, |L|$$

$$\uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow$$

$$\Sigma \quad \Pi \quad \Delta$$

et S représente la valeur du spin électronique total où $(2S + 1)$ est une grandeur appelée multiplicité de l'électronique , 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 ,,etc sont utilisées pour les états excités de même multiplicité que l'état fondamental dans l'onde énergies décroissantes , Les états de multiplicité différente de celle de l'état fondamental sont désigne par des lettres minuscules a,b,c ,,etc ; toujours dans le sens des énergies décroissantes.

Annexe B

Unité atomique

Les unités atomiques de normalisation tendent vers 1, la charge e , la masse d'électron m_e , la constante de Planck \hbar , le rayon de Bohr a_0 et l'énergie d' Hartree (deux fois la grandeur de l'énergie hydrogène de l'état fondamental, $2 \times 13,6 \text{ eV}$ ou $4,359 \times 10^{-18} \text{ J}$), ^1H . Ce qui équivaut à la mise en

$$\begin{aligned} e &= 1 \\ m_e &= 1 \\ a_0 &= \frac{\hbar}{m_e c \alpha} (\text{SI}) = \frac{1}{c \alpha} = 1 \\ H &= \frac{m_e (e^2 / 4\pi\epsilon_0)^2}{\hbar} (\text{SI}) = m_e (\alpha c)^2 (\text{SI}) = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} = 1 \end{aligned}$$

La constante de structure fine, α est $e^2 / 4\pi\epsilon_0 \hbar c = 1 / (137,036...)$. Il est sans dimension et la plus fondamentale constante dans la physique atomique indépendante des unités. De l'équation ci-dessus, nous pouvons définir $c = 1/\alpha$. Dans les unités SI, $c = 1/\sqrt{\mu_0\epsilon_0}$. Puis

$$\mu_0 = \frac{1}{c^2 \epsilon_0} = 4\pi\alpha^2$$

Noter que nous avons utilisé la conversion des unités atomiques déjà. maintenant, nous arrivons résumer la conversion d'unités SI pour les unités atomiques-Gaussian dans le tableau B.1 parfois, nous aimerons garder une certaine quantité autour malgré le fait qu'ils

Contité à être remplacé	remplacé par
e	1
m_e	1
\hbar	1
c	$\frac{1}{\alpha}$
$4\pi\epsilon_0$	1
μ_0	$4\pi\alpha^2$

TAB. B.1 – Conversion des unités atomiques SI en unités Gaussian.

sont, en unités Gaussienne-atomique, égal à 1. Par exemple, nous écrivons le potentiel de polarisation à

$$U_r = -\frac{\alpha(\text{polarisabilité})e^2}{2r^4},$$

au lieu de

$$U_r = -\frac{\alpha(\text{polarisabilité})}{2r^4}$$

just pour garder le mesurage des e évidente

Une fois que nous avons fini de commutation de la quantité donnée dans le tableau B.1, chaque quantité doit être convenablement exprimées en unités atomiques. Polarisabilité atomique est une quantité pertinente pour notre discussion de collision froide. Il est outil de résumer rapidement la conversion entre les unités atomiques et les unités **SI**. Unités atomique pour polarisabilité est exprimée dans l'unité de a_0^3 . pour reconvertir en unités **SI**, utiliser l'expression

$$\alpha(\text{polarisabilité en SI}) = \alpha(\text{polarisabilité en u.a.}) \times 1,647 \times 10^{-41} \text{ C}^2 \text{ m/N}.$$

Annexe C

Le moment cinétique et les harmoniques sphériques

L'opération de moment cinétique orbital est définie comme

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (\text{C.1})$$

où \vec{r} est l'opération de position et \vec{p} est l'opérateur de moment linéaire. Avec $\vec{p} = -i\hbar\nabla_r$, il peut être facilement démontré que, dans le système de coordonnées sphériques,

$$\begin{aligned} \vec{L}^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

où θ et ϕ sont définies de manière habituelle. Nous pouvons également vérifier les règles de commutation entre différent moment cinétique,

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k \quad (\text{C.3})$$

où ϵ_{ijk} est le tenseur de Levi-Civita.

Lorsque vont spécifier la fonction d'onde en trois dimensions, il est utile de définir les

harmoniques sphériques, $Y_{l,m}(\theta, \phi)$, par les suivants

$$L^2 Y_{l,m}(\theta, \phi) = l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (\text{C.4})$$

$$L_z Y_{l,m}(\theta, \phi) = m Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (\text{C.5})$$

où l est le moment angulaire orbital et m est le moment magnétique. L'expression générale pour les harmoniques sphériques sont

$$Y_{l,m}(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta), \quad (\text{C.6})$$

où $\epsilon = (-1)^m$ pour $m \geq 0$ et $\epsilon = 1$ pour $m \leq 0$ et $P_l^m(x)$ est la fonction de Legendre associée, définie par

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx}\right)^{|m|} P_l(x), \quad (\text{C.7})$$

et $P_l(x)$ sont les polynômes de Legendre définies par

$$xP_l(x) = \frac{1}{(2l+1)} [(l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x)] \quad (\text{C.8})$$

avec $P_0(x) = 1$ et $P_1(x) = x$.

Conclusion

Notre travail est porté sur l'étude quantique des collisions entre les atome et les ions où a été développé le cas de la collision des ions alcalins dans leurs gaz. Après un bref exposé de la théorie quantique des collisions, nous avons, dans une première étape, construit les courbes d'énergies potentielles dans les états $^2\Sigma_g^+$ et Σ_u^+ qui sont liée à la polarisabilité α_d de l'atome neutre. Ces potentiels sont utilisés 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 thermophysiques spectroscopiques. Nous avons aussi traité les variations des sections efficaces élastiques et les sections de transfert de charge à basse énergie dans le cas quantique et semi classique.

Bibliographie

- [1] W, Mustafa, *Introduction au physique des plasmas*, (Dar al-Fikr al-Ma'asar 2007).
- [2] Z. Ben Ata Allah, "L'application de l'approximation à deux termes pour calculer les coefficients de transition pour les électrons soumis à un champ électrique et magnétique uniforme d'un gaz faiblement ionisé". Université Kasdi Merbah de Ouargla (2012).
- [3] F. Bouchelaghem. These, Mouvement des ions dans des gaz monoatomiques. Cas du lithium ${}^6\text{Li}$ et ${}^7\text{Li}$. Université Badji Mokhtar, Annaba (2014).
- [4] Dr. M. Allab et J. Baudon, Le journal de physique, tome **29**, 111(1968).
- [5] B.H. Bransden and C.J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*, (Longman, London, 1986).
- [6] R. Côté. *Ultra-cold collision of Identical Atoms*. Phd dissertation, Massachusetts Institute of Technology, Departement of physics, February 1995. Full entry at <http://dspace.mit.edu/handle/1721.1/32632>.
- [7] D. Griffiths. Introduction to quantum mechanics. Prentice hall, (1995).
- [8] B. H. Bransden and M. R. C. McDowell, *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions* (Clarendon Press, Oxford, 1992).
- [9] R. Côté and Dalgarno, Physical Review A, **62**, 012709 (2000).
- [10] N.F. Mott and H.S.W. Massey, The Theory of Atomic Collisions, (Oxford University Press, Oxford, 1987).
- [11] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory, (Pergamon Press, Oxford, 1981).

- [12] A. Dalgano, M. R. C. McDowell, and A. Williams. *Philos. Trans. R; Soc. London, Ser. A* **250**, 411, (1958).
- [13] M. Abramowitz and I.A. Stegun (Editors), *Handbook of Mathematical Functions*, (DoverPublic., Inc., New York, 1972).
- [14] D. Blokhintsev, *Principes de mécanique quantique*, (traduction française, Edition Mir, Moscou, 1981).
- [15] G. Hunter and M. Kuriyan, *At. Data Nucl. Data Tables* **25**, 287(1980).
- [16] F. Masnou-Seeuvs and A. Salin, *J. Phys. B* **2**, 1274 (1969).
- [17] S. Magnier, M. Aubert-Frécon, *J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* **78** 217—225(2003).
- [18] E. A. Reinsch and W. Meyer, *Phys. Rev. A* **14**, 915 (1976).
- [19] J. Mitroy, M.S. Safronova, and C.W. Clark, *J. Phys. B* **43**, 202001 (2010).
- [20] B. N. Sternheimer, *Phys. Rev.* **183**, 112 (1969).
- [21] S.H. Patil and K.T. Tang, *Chem. Phys. Lett.* **295**, 152 (1998).
- [22] T.C. Scott et al., *J. Phys. B* **37**, 4451 (2004).
- [23] J.M. Standard and P.R. Certain, *J. Chem. Phys.* **83**, 3002 (1985).
- [24] G. Sergey et al. *J. Chem. Phys.* **119**, 844 (2003).
- [25] P Skupin, M Musiał and A. Kucharski. *J. Phys. Chem. A* **121**, 1480-1486 (2017).
- [26] M. Broyer et al, *J, Chem.Phys. Lett.* **99**, 206-212(1983).
- [27] S. Leutwyler, M. Hofmann, H.P. Harri and E. Schumacher, *Chem Phys Lett* **77** (1981), 257.
- [28] B. Nume rov, *Publ. Observ. Cent ral Astrophys. Russ.* **2**, 188 (1 933)
- [29] F. Bouchelaghem and M. Bouledroua, *J. Phys. Chem. Chem. Phys*, Vol **16**, 1875—1882 (2013).
- [30] E.W. McDaniel, *Collision Phenomena in Ionized Gases*, 1sted. ~Wiley, New York, 1964!.
- [31] 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 cross sections depends on the energy of potassium ion atoms diffusing in their parent gas. The quantum phase shift calculation is done within the framework of the *gerade* potential energy curve and the *ungerade* potential energy curve, by which from K^+ approaches $K(4s)$, leads to the calculation of the charge transfer and the elastic cross sections.

The calculations are based on interatomic potentials constructed from recent data. The results obtained for the potential parameters generally agree well with the published values.

Résumé

Ce travail est porté sur le calcul de la mécanique quantique des sections efficaces dépend de l'énergie d'atomes de potassium ion diffusant dans leur gaz de parent. Le calcul quantique de déphasage se fait dans le cadre de la courbe d'énergie potentiel *gerade* et la courbe d'énergie potentielle *ungerade*, par lequel de K^+ s'approche de $K(4s)$, mène au calcul du transfert de charge et les sections efficaces élastiques.

Les calculs reposent sur des potentiels interatomiques construits à partir des données récentes. Les résultats obtenus des paramètres de potentiel s'accordent généralement bien avec les valeurs publiées

الملخص

يتناول هذا العمل حساب المقاطع الفعالة باستعمال ميكانيك الكم لأيون ذرة البوتاسيوم الذي ينتشر في غاز البوتاسيوم ، الحساب الكمي لفرق الطور المتصل بالمنحنى الطاقوي *gerade* والمنحنى الطاقوي *ungerade* الناتج عن تقارب ايون K^+ الى الذرة $K(4s)$ ادى الى حساب المقطع الفعلي لتبادل الشحنة والمرن .

تستند الحسابات إلى الكمونات الذرية التي تم إنشاؤها من البيانات الحديثة. تتوافق النتائج التي تم الحصول عليها مع القيم المنشورة.

