



N° d'ordre: 10 / 2001-M / PH

N° SIRC :

**UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENE –USTHB- Alger**

Faculté des Sciences -Physique-

Thèse

Présentée à l'U.S.T.H.B pour l'obtention du grade de

Magister en physique

Option: **Physique théorique**

Par: **YEKKEN Rabia**


Thème

**Etude des collisions avec des forces à
longue portée par la théorie du champ
moyen indépendant du temps**

Soutenue publiquement le: 27 / 06 / 2001, devant le jury composé de:

Mr	M. FELLAH	Professeur (USTHB)	Président
Mme	F.Z. IGHEZOU	Maître de conférences (USTHB)	Examineur
Melle	N.H. ALLAL	Professeur (USTHB)	Examineur
Mr	M. BENTAIBA	Maître de conférences (U/ Blida)	Examineur
Mme	F. MEKIDECHE-CHAFA	Maître de conférences (USTHB)	Dteur de

Thèse



***A mes parents,
à ma sœur Fatiha
et à la mémoire de mon frère
Youcef***

A tous ceux qui me sont proches

Remerciement

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Physique Théorique de la Faculté des Sciences (Physique) de l'USTHB, sous la direction de Madame **F.MEKIDECHE - CHAFA**, Maître de conférences à l'USTHB. Je tiens à la remercier pour la confiance qu'elle m'a témoignée en me confiant ce travail, ainsi que pour l'aide constante et les conseils judicieux qu'elle m'a donnés tout au long de ce travail. Qu'elle trouve, ici, l'expression de ma profonde gratitude.

J'exprime ma reconnaissance et mes plus vifs remerciements à Monsieur **M.FELLAH**, Professeur à l'USTHB et Directeur du Laboratoire de Physique Théorique, pour m'avoir accueillie au sein du laboratoire, et pour l'honneur qu'il me fait en acceptant la présidence du jury de soutenance.

Ma gratitude va également à Mme **F.Z.IGHEZOU**, Maître de conférences à l'USTHB, à Mlle **N.H.ALLAL**, Maître de conférences à l'USTHB, et à Mr **M. BENTAIBA**, Maître de conférences à l'Université de BLIDA qui ont bien voulu participer au jury en acceptant de juger ce travail.

Je tiens également à exprimer ma profonde reconnaissance à mesdames **F.Z.IGHEZOU** et **A.H.HAMICI** ainsi qu'à Messieurs **A.SMIDA**, **A.CHOUCHAOUI**, **M.HACHEMANE** et **A.KERRIS** pour leur soutien et leurs encouragements constants.

Mes remerciements sont aussi adressés à tous mes collègues du laboratoire de Physique Théorique ainsi qu'à tous mes amis pour leur sympathie, leur soutien permanent et leur aide amicale qu'ils m'ont apportée tout au long de ce travail.

Mes plus forts remerciements s'adressent à **mes parents**, ma sœur **Fatiha**, **Mme BOUNEB Saida** directrice du CNFPS, toutes mes sœurs et tous mes frères ainsi que toute ma famille pour leur soutien moral et leurs encouragements permanents.

Sommaire

Introduction	3
Chapitre I: Formalisme général de la théorie du champ moyen indépendant du temps	6
I-1 Introduction.....	7
I-2 Diagonalisation.....	9
I-3 Inversion.....	10
Chapitre II: Application de l'approche TIMF à une interaction à deux corps par l'intermédiaire d'une force coulombienne	20
II-1 Introduction.....	21
II-2 Amplitude de propagation exacte D	23
II-2-1 Développement en ondes partielles.....	25
II-3 Amplitude de propagation approchée \bar{D}	26
II-3-1 Développement en ondes partielles.....	28
II-4 Résultats numériques et discussions.....	34
II-4-1 Comportement des fonctions d'onde.....	35
II-4-2 Comportement du champ moyen.....	36
II-5 Conclusion.....	36

Chapitre III: Application de la méthode TIMF à un problème Coulombien à trois corps: l'atome d'Hélium.....	46
III-1 Introduction.....	47
III-2 Le modèle.....	48
III-3 Résultats numériques et discussions.....	50
III-4 Conclusion.....	54
Conclusion.....	72
Références.....	76

INTRODUCTION

Introduction

Quand on fait de la physique atomique et de la physique nucléaire, on a constamment besoin de mesurer des sections efficaces et on a également besoin de faire des prédictions théoriques de ces mesures.

Pour faire ces prédictions théoriques on se donne comme point de départ un Hamiltonien. La théorie des collisions nous dit que tôt ou tard, on est amené à calculer un propagateur $(E - H)^{-1}$ donc d'inverser l'Hamiltonien [1,2].

Ce problème d'inversion est important. Il est quasiment impossible de le résoudre de façon exacte à cause de la grande dimension de l'espace dans lequel nous travaillons. Si nous prenons par exemple 100 particules, nous allons travailler dans un espace de dimension 300. Des approximations sont donc nécessaires.

Il y a plus d'une soixantaine d'années, un problème analogue s'était posé pour la diagonalisation de l'Hamiltonien et on avait fait appel à l'époque à des approximations notamment l'approximation de Hartree-Fock [3-6] qui utilise le champ moyen. Cette approximation a permis la transformation d'une diagonalisation à N corps à N diagonalisations à un corps.

De la même façon, dans la théorie des collisions, l'équation centrale qui ressemble à l'équation de Schrödinger avec un terme de source associé au flux de voies d'entrée et de sortie a été approximée il y a une vingtaine d'années par des méthodes de champ moyen comme la théorie du champ moyen indépendant du temps [7-13]. On remarque que l'on passe d'une inversion à N corps à N inversions à un corps.

Notre travail a consisté à continuer le développement et le perfectionnement de cette théorie du champ moyen indépendant du temps que nous désignerons par la TIMF.

Bien que, plusieurs travaux ont été consacrés à l'utilisation et la validation de la TIMF pour des forces à courte portée [14-21], moins d'efforts ont été déployés à l'étude des

problèmes de collision avec des force à longue portée [22]. Nous avons dans ce manuscrit étendu l'application de la TIMF à des forces à longue portée [23-25].

Dans une première partie, nous avons rappelé le formalisme de cette théorie ainsi que le procédé itératif menant à la résolution du système d'équations self-consistentes TIMF.

Nous voyons que la TIMF satisfait la condition de réduction de dimension, mais ceci présente un paradoxe: comme approximation d'un problème linéaire, la TIMF est une théorie non linéaire, à cause de la structure de couplage entre les $2N$ inversions réduites. Malgré ce paradoxe, plusieurs tests numériques portant sur la validité de la TIMF ont été satisfaisants.

Dans une seconde phase, nous avons traité à l'aide de cette approche, un problème coulombien soluble à deux corps. La comparaison des résultats exacts et approximatés a montré que l'interaction coulombienne peut facilement être introduite dans le formalisme de la TIMF.

Dans la troisième partie, nous passons de la physique nucléaire à la physique atomique. L'étude du problème coulombien a été étendue au cas d'un système à trois corps celui de l'atome d'Hélium doublement excité [27-31].

Des études récentes [32,33] portant sur les états hautement excités de l'Hélium ont montré que les configurations où les deux électrons occupent le même état présentent certaines propriétés d'instabilité.

Nous voulons à l'aide de la TIMF, essayer d'expliquer ces phénomènes d'instabilité en explorant de manière détaillée le spectre de l'atome d'Hélium et continuer ainsi une étude déjà entamée lors de précédents travaux sur ce même atome [34].

Notons que le potentiel de répulsion interélectronique a été légèrement modifié lors de cette étude. En effet, au lieu de considérer la répulsion physique exacte $V = 1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ (en unités atomiques), nous avons utilisé le potentiel $V = 1/|\vec{r}_1| + |\vec{r}_2|$ [35,36]

Ce choix de potentiel, avantageux numériquement, est justifié comme une interaction effective: Les deux électrons de l'Hélium se placent sur une même orbite à des positions opposées par rapport au noyau [37] et statistiquement, c'est la position la plus retrouvée.

Nous terminerons notre travail par une conclusion générale où nous récapitulerons nos résultats obtenus ainsi que les discussions faites autour de ces calculs. Quelques perspectives seront aussi exposées.

CHAPITRE I

*FORMALISME GENERAL DE LA
THEORIE DU CHAMP MOYEN
INDEPENDANT DU TEMPS*

CHAPITRE I

Formalisme général de la théorie du champ moyen indépendant du temps

I-1 Introduction

Soit H l'Hamiltonien d'un système à N corps,

$$H = T + V = \sum_i t_i + \sum_{j>i} v_{ij}, \quad (\text{I-1})$$

où t_i est l'énergie cinétique individuelle et v_{ij} est le potentiel d'interaction à deux corps.

La connaissance de l'opérateur de Green $G = (E - H)^{-1}$ est un élément clé dans la théorie des collisions. Son calcul s'avère cependant assez ardu lorsque l'énergie totale E du système est réelle et positive [1,2] et aussi lorsque le nombre de particules N est grand ($N \geq 3$).

Ce problème d'inversion est tout aussi intéressant que la diagonalisation à laquelle, traditionnellement, beaucoup de travaux ont été consacrés [3-6].

Pour inverser $(E - H)$ de façon un peu analogue à la diagonalisation de H , Giraud et al [7-13] ont proposé la théorie du champ moyen indépendant du temps, **TIMF**, pour la description des collisions. Cette théorie est principalement basée sur:

- 1– Un principe variationnel pour le calcul de l'amplitude de collision. Ce principe devient très utile lorsque le nombre de particules N du système est grand.
- 2– Une représentation des états de voies par des paquets d'ondes indépendants du temps; ceci facilite en pratique les calculs car nous nous retrouvons avec des fonctions d'onde de carré sommable.

- 3– Une énergie totale complexe $z = E + i\Gamma$, avec E sa partie réelle et Γ sa partie imaginaire finie. Ce choix est adopté dans le but d'avoir un propagateur G borné et éviter ainsi les problèmes de singularités qui peuvent apparaître lorsqu'on travaille sur couche, $\Gamma = 0$.
- 4– Une restriction des fonctions de voies et des fonctions d'essai à des produits de fonctions individuelles (ou à des déterminants de Slater dans le cas d'une antisymétrisation).

L'amplitude de transition entre les voies initiale i et finale f est définie par la relation suivante [3]:

$$T_{if} = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \langle \Psi' | T | \Psi \rangle \quad (\text{I-2})$$

où

$$T = V + V'GV \quad (\text{I-3})$$

et

$$G = (z - H)^{-1} \quad (\text{I-4})$$

avec $|\Psi\rangle$, $|\Psi'\rangle$ qui sont respectivement les fonctions d'onde des voies initiale et finale et V , V' les potentiels de ces mêmes voies respectivement.

Le développement de l'amplitude de transition

$$T_{if} = T^{Born} + D, \quad (\text{I-5})$$

nous mène à l'expression de l'amplitude de propagation

$$D = \langle \Psi' | V'GV | \Psi \rangle, \quad (\text{I-6})$$

ainsi qu'au terme de Born:

$$T^{Born} = \langle \Psi' | V | \Psi \rangle. \quad (\text{I-7})$$

Le calcul de ce dernier terme étant assez simple, nous focalisons particulièrement notre attention sur l'évaluation de l'amplitude de propagation D .

Nous allons montrer qu'une légère modification des équations de Hartree(-Fock) définit une approximation non perturbative des éléments de matrice de $V'GV$, pris entre des états initial Ψ et final Ψ' , où Ψ et Ψ' représentent des ondes ou aussi bien des paquets d'ondes, des voies initiale et finale respectivement.

I-2 Diagonalisation

Comme nous l'avons affirmé précédemment, l'inversion de $(z - H)$ va se faire de manière un peu analogue à la diagonalisation. Revenons donc, brièvement, à un problème de diagonalisation et considérons la fonctionnelle de Rayleigh-Ritz donnée par:

$$F = \langle \Phi' | (H - E) | \Phi \rangle \quad (\text{I-8})$$

où Φ , Φ' sont des fonctions parfaitement flexibles (qui donnent une description plus ou moins complète et conforme à la réalité du système) et E un multiplicateur de Lagrange.

On obtient l'équation de Schrödinger $(H - E)|\Phi\rangle = 0$ par stationnarité de F par rapport à Φ' , à savoir $\partial F / \partial \langle \Phi' | = 0$. Par stationnarité de F par rapport à Φ , soit $\partial F / \partial |\Phi\rangle = 0$, on obtient la condition duale $\langle \Phi' | (H - E) = 0$. Le paramètre de Lagrange E se révèle être une énergie dans le spectre discret de H .

En approximant les fonctions d'essai Φ et Φ' par des produits d'orbitales individuelles:

$$|\Phi\rangle = \prod_i |\varphi_i\rangle \quad (\text{I-9a})$$

$$i = 1, 2, \dots, N$$

$$\langle \Phi' | = \prod_i \langle \varphi'_i |, \quad (\text{I-9b})$$

on obtient le schéma d'approximation de Hartree: L'équation de Schrödinger à N corps est remplacée par N diagonalisations à un corps, couplées:

$$(\eta_i - t_i - U_i) |\varphi_i\rangle = 0. \quad (\text{I-10a})$$

On obtient aussi, bien entendu, les conditions duales,

$$\langle \varphi'_i | (\eta_i - t_i - U_i) = 0. \quad (\text{I-10b})$$

Dans ces deux jeux de conditions de stationnarité, les η_i sont les self-énergies de Hartree et les U_i sont les champs moyens self-consistents,

$$U_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \neq i} \frac{\varphi_j'^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}')}{\langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle} \quad (\text{I-11})$$

où le potentiel v est souvent pris local.

I-3 Inversion

Il est évidemment impossible de calculer l'amplitude de propagation D , **Eq. (I-6)** par inversion directe de $(z - H)$ quand le nombre de particules N du système est grand. Pour calculer D par un principe variationnel, nous considérons la fonctionnelle suivante:

$$J(\Phi, \Phi') = \langle \Psi' | V' | \Phi \rangle + \langle \Phi' | V | \Psi \rangle - \langle \Phi' | (z - H) | \Phi \rangle, \quad (\text{I-12})$$

Notons que le troisième terme de J n'est autre que la fonctionnelle F avec cette fois l'énergie totale z qui est prise complexe.

Calculons les conditions de stationnarité de J par rapport à Φ et Φ' :

$$\frac{\partial J}{\partial |\Phi\rangle} = \langle \Psi' | V' - \langle \Phi' | (z - H) = 0, \quad (\text{I-13a})$$

$$\frac{\partial J}{\partial \langle \Phi' |} = V | \Psi \rangle - (z - H) | \Phi \rangle = 0, \quad (\text{I-13b})$$

et nous arrivons à

$$|\Phi\rangle = GV | \Psi \rangle, \quad (\text{I-14a})$$

$$\langle \Phi' | = \langle \Psi' | V' G. \quad (\text{I-14b})$$

On peut montrer facilement que la valeur stationnaire de J est égale à l'amplitude D , en remplaçant les expressions **(I-14a, b)** de Φ et Φ' dans l'équation de J **(I-12)**.

Remarquons que D peut également être obtenue en prenant la valeur stationnaire d'une autre fonctionnelle J' :

$$J'(\Phi, \Phi') = \frac{\langle \Phi' | V | \Psi \rangle \langle \Psi' | V' | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | (z - H) | \Phi \rangle}, \quad \text{(I-15)}$$

qui présente un intérêt supplémentaire par rapport à J dans la mesure où elle est indépendante des normes et phases des fonctions variationnelles Φ et Φ' .

Imposer des restrictions pratiques sur les fonctions d'essai Φ et Φ' , c'est obtenir à partir de la valeur stationnaire de la fonctionnelle une valeur approchée \bar{D} de l'amplitude D .

On peut légitimement s'attendre à ce que chaque type de restriction aux fonctions d'essai Φ et Φ' induise des formes similaires pour l'approximation déduite de J , **Eq.(I-12)**, et celle déduite de F , **Eq.(I-8)**, puisque ces deux fonctionnelles J et F ne diffèrent que par les termes de source $\langle \Phi' | V | \Psi \rangle$, $\langle \Psi' | V' | \Phi \rangle$. Il n'est donc pas étonnant de trouver, si on restreint les fonctions d'essai à la factorisation décrite par les équations **(I-9a, b)** N inversions à un corps, couplées.

Prenons alors les états de voies initiale et finale Ψ et Ψ' respectivement, ainsi que les fonctions d'essai Φ et Φ' , comme des produits de N orbitales individuelles:

$$|\Psi\rangle = \prod_i |\psi_i\rangle, \quad |\Psi'\rangle = \prod_i |\psi'_i\rangle \quad \text{(I-16)}$$

$$|\Phi\rangle = \prod_i |\phi_i\rangle, \quad |\Phi'\rangle = \prod_i |\phi'_i\rangle. \quad \text{(I-17)}$$

La fonctionnelle J , **Eq.(I-12)** devient dans ce cas:

$$\begin{aligned}
J = & \sum_{i \in a, j \in b} \langle \varphi'_i \varphi'_j | v | \psi_i \psi_j \rangle \frac{\langle \Phi' | \Psi \rangle}{\langle \varphi'_i | \psi_i \rangle \langle \varphi'_j | \psi_j \rangle} \\
& + \sum_{i \in c, j \in d} \langle \psi'_i \psi'_j | v' | \varphi_i \varphi_j \rangle \frac{\langle \Psi' | \Phi \rangle}{\langle \psi'_i | \varphi_i \rangle \langle \psi'_j | \varphi_j \rangle} - z \langle \Phi' | \Phi \rangle \\
& + \sum_i \langle \varphi'_i | t | \varphi_i \rangle \frac{\langle \Phi' | \Phi \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle} + \sum_{i > j} \langle \varphi'_i \varphi'_j | v | \varphi_i \varphi_j \rangle \frac{\langle \Phi' | \Phi \rangle}{\langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle}
\end{aligned} \tag{I-18}$$

avec

$$\langle \Phi' | \Psi \rangle = \prod_i \langle \varphi'_i | \psi_i \rangle, \tag{I-19}$$

$$\langle \Psi' | \Phi \rangle = \prod_i \langle \psi'_i | \varphi_i \rangle, \tag{I-20}$$

et

$$\langle \Phi' | \Phi \rangle = \prod_i \langle \varphi'_i | \varphi_i \rangle. \tag{I-21}$$

Ici nous désignons par a, b, c, d les projectile, cible, éjectile et résiduel, respectivement.

Bien entendu, V correspond à une somme de potentiels restreinte à $i \in a$ et $j \in b$, de même que V' correspond aux restrictions $i \in c$ et $j \in d$.

Les stationnarités de J par rapport à $|\varphi_i\rangle$, à savoir $\partial J / \partial |\varphi_i\rangle = 0$, et par rapport à $\langle \varphi'_i |$, c'est à dire $\partial J / \partial \langle \varphi'_i | = 0$, nous donnerons $2N$ équations à un corps couplées:

$$(\eta_i - t_i - U_i) |\varphi_i\rangle = (\omega_i + S_i) |\psi_i\rangle \tag{I-22a}$$

$$\langle \varphi'_i | (\eta_i - t_i - U_i) = \langle \psi'_i | (\omega'_i + S'_i) \tag{I-22b}$$

où t_i représente l'énergie cinétique individuelle, U_i un potentiel self-consistent et la self-énergie complexe η_i est égale à l'énergie totale z moins les énergies cinétique (second terme) et potentielle (troisième terme) des spectateurs:

$$\eta_i = z - \sum_{j \neq i} \frac{\langle \varphi'_j | t | \varphi_j \rangle}{\langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle} - \sum_{\substack{k > j \\ j \neq i, k \neq i}} \frac{\langle \varphi'_j \varphi'_k | v | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \varphi'_j | \varphi_j \rangle \langle \varphi'_k | \varphi_k \rangle} \quad (\text{I-23})$$

Les coefficients ω_i et ω'_i correspondent eux aussi à des sommes sur des "énergies" de particules spectatrices, qui transcrivent l'influence des voies initiale et finale:

$$\omega_i = \sum_{\substack{j \in a, k \in b \\ j \neq i, k \neq i}} \frac{\langle \varphi'_j \varphi'_k | v | \psi_j \psi_k \rangle}{\langle \varphi'_j | \psi_j \rangle \langle \varphi'_k | \psi_k \rangle}, \quad (\text{I-24})$$

$$\omega'_i = \sum_{\substack{j \in c, k \in d \\ j \neq i, k \neq i}} \frac{\langle \psi'_j \psi'_k | v' | \varphi_j \varphi_k \rangle}{\langle \psi'_j | \varphi_j \rangle \langle \psi'_k | \varphi_k \rangle}, \quad (\text{I-25})$$

Quant aux opérateurs S_i et S'_i , ce sont des champs moyens, comme U_i , avec cependant l'influence des voies. Pour simplifier nous supposons v et v' locaux:

$$S_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \in b} \frac{\varphi_j^*(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}')}{\langle \varphi'_j | \psi_j \rangle}, \quad \text{si } i \in a \quad (\text{I-26})$$

$$S_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \in a} \frac{\varphi_j^*(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}')}{\langle \varphi'_j | \psi_j \rangle}, \quad \text{si } i \in b \quad (\text{I-27})$$

$$S'_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v'(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \in d} \frac{\psi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}')}{\langle \psi'_j | \varphi_j \rangle}, \quad \text{si } i \in c \quad (\text{I-28})$$

$$S'_i(\vec{r}) = \int d\vec{r}' v'(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{j \in c} \frac{\psi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}')}{\langle \psi'_j | \varphi_j \rangle}, \quad \text{si } i \in d \quad (\text{I-29})$$

La solution des équations (I-22a, b) s'écrit:

$$|\varphi_i\rangle = g_i (\omega_i + S_i) |\psi_i\rangle \quad (\text{I-30a})$$

$$\langle \varphi'_i | = \langle \psi'_i | (\omega'_i + S'_i) g_i \quad (\text{I-30b})$$

où $g_i = (\eta_i - h_i)^{-1}$, $h_i = t_i + U_i$. Nous nous retrouvons donc avec l'inverse g_i d'un opérateur à un corps plutôt que celui G d'un opérateur à plusieurs corps.

Nous pouvons affirmer, comme nous l'avons fait pour la diagonalisation, **Eqs.(I-10)**, que les équations variationnelles non linéaires et non homogènes (I-22) sont une généralisation des équations de Hartree, dirigées par les termes de source. Donc il semble tout à fait logique d'essayer de résoudre ces équations à l'aide des mêmes méthodes utilisées dans la résolution des équations de Hartree, qui sont essentiellement des méthodes d'itération.

Il existe une forme simplifiée des équations (I-22), qui permet de calculer l'élément de matrice $\langle \chi' | G | \chi \rangle$ plutôt que $\langle \Psi' | V' G V | \Psi \rangle$. Supposons en effet, que les termes de source dans J (ou J') soient de la forme $\langle \Phi' | \chi \rangle$ et $\langle \chi' | \Phi \rangle$ au lieu de $\langle \Phi' | V | \Psi \rangle$ et $\langle \Psi' | V' | \Phi \rangle$. On vérifie alors que les conditions de stationnarité (I-22) deviennent:

$$(\eta_i - t_i - U_i) |\varphi_i\rangle = |\chi_i\rangle, \quad (\text{I-31a})$$

$$i = 1, 2, \dots, N$$

$$\langle \varphi'_i | (\eta_i - t_i - U_i) = \langle \chi'_i |. \quad (\text{I-31b})$$

Alors que le résultat exact de notre problème linéaire est unique, les études numériques effectuée par l'approximation TIMF ont montré que les équations self-consistentes non linéaires, peuvent engendrer plusieurs solutions. Il faut donc, dans chaque cas de collision, sélectionner la bonne solution physique qui elle seule contribue dans le calcul de l'amplitude de propagation.

Dans cette même optique, nous faisons appel à un théorème asymptotique [15] qui nous permet d'atteindre cette solution quand la partie imaginaire Γ de l'énergie totale est grande: quand $\Gamma \rightarrow \infty$, on prend $|\Phi\rangle \rightarrow |\chi\rangle$.

Il s'agit donc, pour résoudre ces équations variationnelles, de poser au début de notre étude numérique, pour une grande valeur de la partie imaginaire Γ de l'énergie, $|\varphi_i\rangle = |\chi_i\rangle$ et $\langle\varphi'_i| = \langle\chi'_i|$. Lorsque la self-consistence est atteinte, les fonctions d'onde $|\varphi_i\rangle$ et $\langle\varphi'_i|$ obtenues seront utilisées comme de nouvelles fonctions de départ pour une valeur de Γ légèrement réduite, et ainsi de suite jusqu'à atteindre la limite sur couche ($\Gamma = 0$) où l'énergie totale devient réelle $z = E$.

En cas où cette multiplicité de solutions persiste, on utilise divers critères de bon sens: continuité par rapport à des cas où la solution est connue, nature retardée de la solution, etc.

Quand les self-consistences des orbitales individuelles $|\varphi_i\rangle$ et $\langle\varphi'_i|$ sont atteintes et la solution physique est sélectionnée, leur insertion dans la fonctionnelle J (ou J'), nous donnera une approximation \bar{D} de l'amplitude exacte D .

Nous venons de voir que la TIMF satisfait la condition de réduction de dimension et remplace l'inversion de l'opérateur à N corps par N inversions à un corps. Mais ceci présente un paradoxe qui est la non linéarité de la TIMF qui approxime un problème initialement linéaire. Ceci est dû à la structure de couplage entre les $2N$ inversions réduites.

Malgré ce paradoxe, plusieurs tests numériques portant sur la validité de la TIMF dans le cas de $N = 2, 3, 4$ ont été satisfaisants.

Pour illustrer cette validité, nous donnons à titre d'exemple, quelques figures où les parties réelles et imaginaires de l'amplitude de propagation sont tracées pour différents types de collision.

Sur les figures (**Fig.I-1, 2**) [16], nous donnons les parties réelles et imaginaires des amplitudes exacte D et approchée \bar{D} dans le cas d'un premier modèle soluble où l'Hamiltonien du système à deux corps ne contient que l'opérateur énergie cinétique.

Sur les figures (**Fig.I-3, 4**) [16], la même étude a été faite dans le cas d'un second modèle où il a été rajouté dans l'Hamiltonien du premier modèle des potentiels séparables à un corps.

Il apparaît clairement sur ces figures que les amplitudes approchées \bar{D} déduites de la TIMF approximent convenablement l'amplitude de propagation exacte D . La résolution de ce modèle dont les potentiels sont séparables par la TIMF a fournit trois branches de solutions (**Fig.I-3,4**) : les branches S et S' qui sont symétriques, la branche B qui représente une brisure de symétrie et la branche P qui correspond à la restauration de la symétrie brisée.

La brisure de symétrie du problème exact (branche B) que la TIMF provoque, dans le cas du second modèle (**Fig.I-3,4**) semble indiquer la présence d'effets de seuil.

Le bon accord entre l'approximation TIMF et le calcul exact de l'amplitude transparaît aussi dans les figures (**Fig.I-5**) [17, 18] pour un problème à trois corps avec un potentiel séparable et dans la figure (**Fig.I-6**) [18] dans le cas d'un problème à quatre corps avec un potentiel "super-séparable".

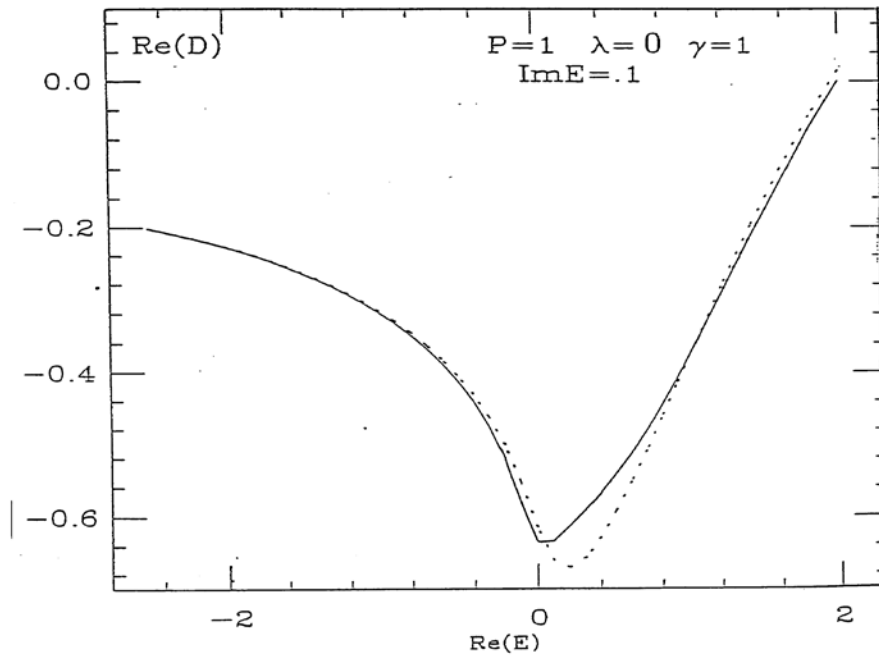


Fig.I-1: Modèle à deux corps (cinétique pur): comparaison des parties réelles des amplitudes exacte D (en traits pleins) et TIMF \bar{D} (en pointillés) légèrement hors couche.

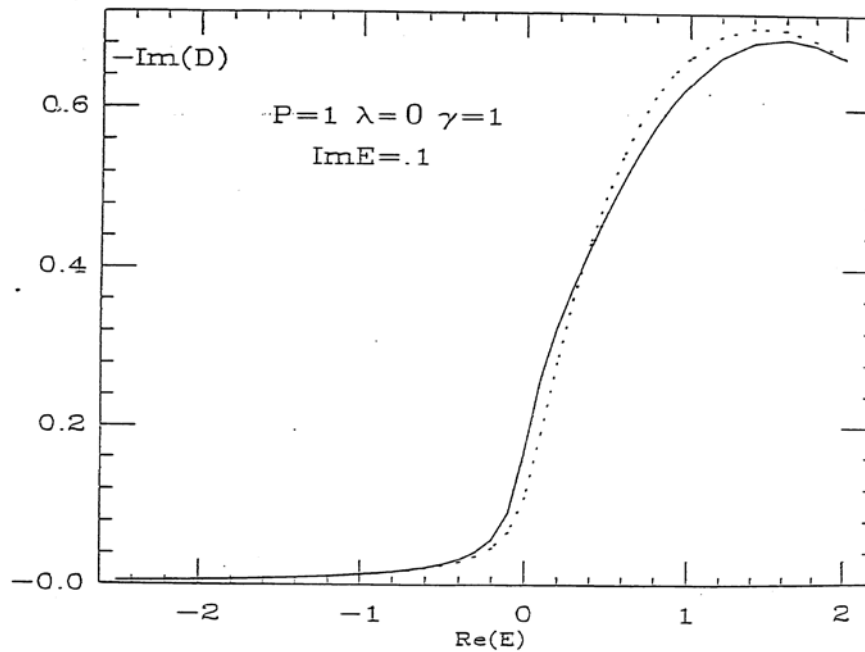


Fig.I-2: Modèle à deux corps (cinétique pur): comparaison des parties imaginaires des amplitudes exacte D (en traits pleins) et TIMF \bar{D} (en pointillés) légèrement hors couche.

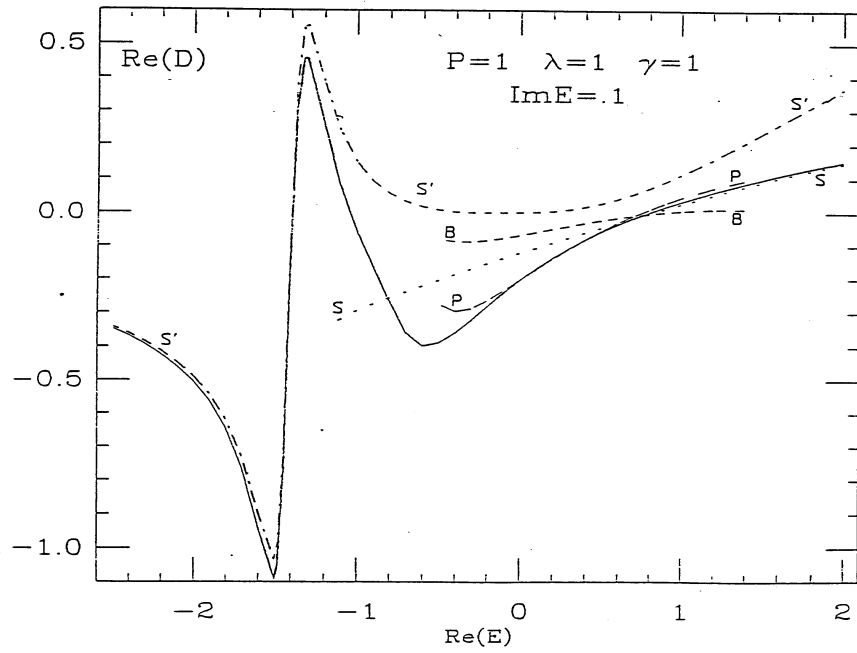


Fig.I-3: Modèle à deux corps avec un potentiel séparable: comparaison des parties réelles des amplitudes exacte D (en traits pleins) et approchée \bar{D} par différentes branches TIMF (en pointillés et tirets), légèrement hors couche.

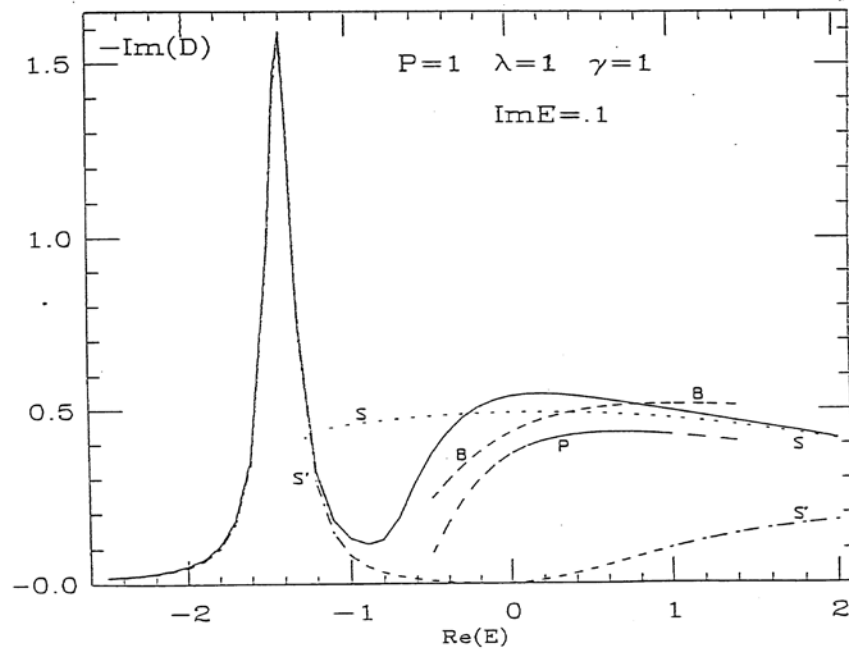


Fig.I-4: Modèle à deux corps avec un potentiel séparable: comparaison des parties imaginaires des amplitudes exacte D (en traits pleins) et approchée \bar{D} par différentes branches TIMF (en pointillés et tirets), légèrement hors couche.

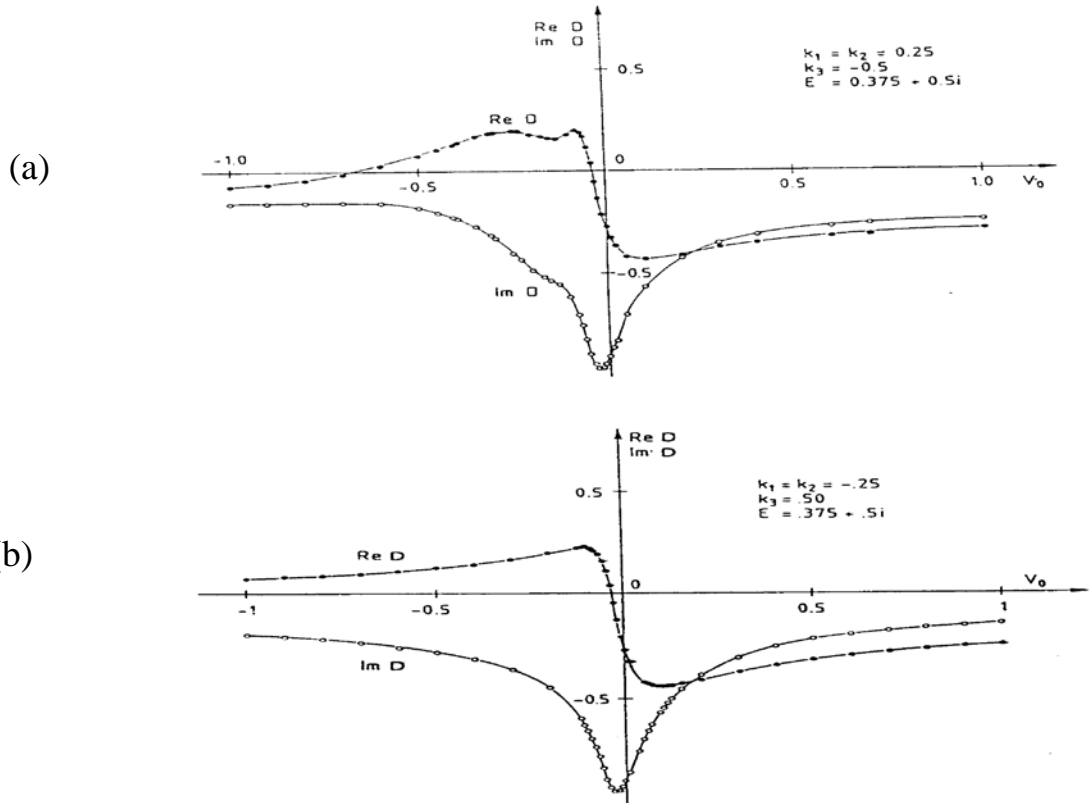


Fig.I-5: Modèle à trois corps avec un potentiel séparable: bon accord entre L'amplitude exacte (a) et l'amplitude approchée par la TIMF (b).

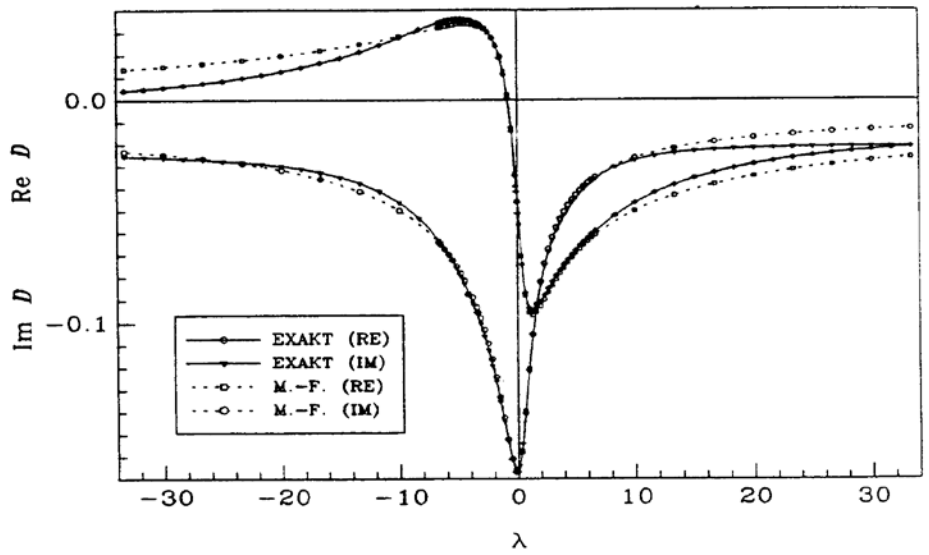


Fig.I-6: Modèle à quatre corps avec un potentiel "super séparable": bon accord entre l'amplitude exacte (en traits pleins) et l'amplitude TIMF (en pointillés).

CHAPITRE II

*APPLICATION DE L'APPROCHE
TIMF A UNE INTERACTION
A DEUX CORPS
PAR L'INTERMEDIAIRE
D'UNE FORCE COULOMBIENNE*

CHAPITRE II

Application de l'approche TIMF à une interaction à deux corps par l'intermédiaire d'une force coulombienne

II-1 Introduction

L'utilisation de la TIMF pour le calcul des amplitudes de collision avec des forces à courte portée a montré la validité de cette approche pour ce type de forces [17-22]

Dans le but de confirmer l'applicabilité de l'approximation TIMF pour des forces à longue portée, nous avons repris l'étude d'une interaction coulombienne à deux corps [23] où nous avons fait varier l'intensité du potentiel, l'énergie du système et la largeur du paquet d'ondes considéré.

Nous présentons, à cet effet, dans ce chapitre, les résultats qui nous permettent de valider cette méthode pour l'étude des collisions dans ce domaine.

Nous avons donc choisi de faire l'étude d'un modèle soluble analytiquement, le cas de l'interaction par l'intermédiaire d'une force coulombienne de deux particules de même masse. L'Hamiltonien de ce système s'écrit

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (\text{II-1})$$

avec \vec{p}_1 et \vec{p}_2 les impulsions des deux particules et

$$v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{\Lambda}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (\text{II-2})$$

le potentiel coulombien d'intensité $\Lambda = Z_1 Z_2 e^2$.

Nous voulons calculer et comparer l'amplitude de propagation exacte D :

$$D = \langle \chi' | G | \chi \rangle , \quad (\text{II-3})$$

et l'amplitude \bar{D} approchée par la TIMF:

$$\bar{D} = \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle}{\langle \Phi' | (z - H) | \Phi \rangle} , \quad (\text{II-4})$$

avec $z = E + i\Gamma$.

En plus des conditions de factorisation des fonctions d'essai

$$|\Phi\rangle = \prod_i |\varphi_i\rangle \quad ; \quad \langle \Phi' | = \prod_i \langle \varphi'_i | \quad (\text{II-5})$$

et des fonctions de voies initiale et finale

$$|\chi\rangle = \prod_i |\chi_i\rangle \quad ; \quad \langle \chi' | = \prod_i \langle \chi'_i | , \quad (\text{II-6})$$

imposons à ces mêmes fonctions de voies d'être égales et réelles

$$\chi = \chi' \quad (\text{II-7})$$

pour traiter un cas diagonal et en déduire rapidement le signe de la partie imaginaire de D .

En effet, en tenant compte de la diagonalité et en considérant l'équation (II-3), nous pouvons écrire l'amplitude exacte D sous la forme suivante:

$$D = \langle \chi | \frac{E - i\Gamma - H}{(E - H)^2 + \Gamma^2} | \chi \rangle \quad (\text{II-8})$$

Nous choisissons de prendre les fonctions de voies ou termes de source χ comme un produit de deux gaussiennes, $\chi = \chi_1 \chi_2$, normalisées et accélérées avec des accélérations opposées.

$$\chi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pi^{-3/4} \beta^{-3/2} \exp\left(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 - \frac{r_1^2}{2\beta^2}\right) \times \pi^{-3/4} \beta^{-3/2} \exp\left(-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2 - \frac{r_2^2}{2\beta^2}\right) \quad (\text{II-9})$$

où β est la largeur du paquet d'onde gaussien. Ce choix est intéressant dans la mesure où l'accélération du projectile dans un sens et de la cible dans le sens inverse nous assure une collision.

II-2 Amplitude de propagation exacte D

Dans ce cas exact, nous travaillons dans le système du centre de masse.

L'Hamiltonien (II-1) s'écrit alors:

$$H = H_{cm} + H_{\rho} \quad (\text{II-10})$$

où

$$H_{cm} = \frac{P_{cm}^2}{2M}, \quad (\text{II-11})$$

et

$$H_{\rho} = \frac{p_{\rho}^2}{2\mu} + \frac{\Lambda}{\rho}. \quad (\text{II-12})$$

\vec{P}_{cm} est l'impulsion du centre de masse

$$\vec{P}_{cm} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 + \vec{p}_2), \quad (\text{II-13})$$

et

$$\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad (\text{II-14})$$

son vecteur position et $M = 2m$ sa masse.

\vec{p}_{ρ} est l'impulsion de la particule relative

$$\vec{p}_{\rho} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2), \quad (\text{II-15})$$

et

$$\vec{\rho} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (\text{II-16})$$

son vecteur position et $\mu = m/2$ sa masse.

La fonction de voie du système peut, elle aussi, se mettre sous la forme du produit

$$\chi = \chi_\rho \chi_{cm} \quad (\text{II-17})$$

où

$$\chi_\rho(\vec{\rho}) = (\pi\beta_\rho^2)^{-3/4} \exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{\rho} - \frac{\rho^2}{2\beta_\rho^2}\right) \quad (\text{II-18})$$

$$\chi_{cm}(\vec{R}) = (\pi\beta_{cm}^2)^{-3/4} \exp\left(-\frac{R^2}{2\beta_{cm}^2}\right) \quad (\text{II-19})$$

avec $\beta_\rho = \beta\sqrt{2}$ et $\beta_{cm} = \beta/\sqrt{2}$.

Comme le mouvement du centre de masse est conservé lors de la collision, il serait intéressant d'utiliser au lieu de l'Hamiltonien total du système, l'Hamiltonien H_ρ , **Eq.(II-12)** de la particule relative.

L'amplitude de propagation diagonale exacte, d'après l'équation **(II-3)**, s'écrira alors:

$$D = \langle \chi_\rho | \psi \rangle \quad (\text{II-20})$$

où $|\psi\rangle$ est la solution de l'équation **(I-14a)**:

$$(z - H_\rho)\psi(\vec{\rho}) = \chi_\rho(\vec{\rho}), \quad (\text{II-21})$$

avec $z = \frac{\hbar^2 k^2}{m} + i\Gamma$.

Cette dernière équation peut se réécrire, en utilisant l'expression **(II-12)** de H_ρ sous la forme suivante:

$$(z + \Delta - \lambda)\psi(\vec{\rho}) = \chi_\rho(\vec{\rho}) \quad (\text{II-22})$$

où $\lambda = \frac{m\Lambda}{\hbar^2}$ et Δ le Laplacien.

Pour simplifier nos calculs, on travaille dans le système réduit, où on pose $\hbar^2/m=1$.

II-2-1 Développement en ondes partielles

Pour travailler dans un espace à une dimension, cette étude exacte est développée en ondes partielles en choisissant \vec{k} le long de l'axe des z et le nombre magnétique utilisé sera pris nul. Les fonctions d'onde $\psi(\vec{\rho})$ et $\chi_\rho(\vec{\rho})$ peuvent alors s'écrire comme:

$$\psi(\vec{\rho}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\rho} \psi_l(\rho) Y_l^0(\hat{\rho}), \quad (\text{II-23})$$

$$\chi_\rho(\vec{\rho}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\rho} \chi_{\rho l}(\rho) Y_l^0(\hat{\rho}) \quad (\text{II-24})$$

avec $\hat{\rho}$ qui représente la partie angulaire.

D'autre part, nous rappelons le développement d'une onde plane en ondes partielles [38]

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) Y_l^0(\hat{r}) \quad (\text{II-25})$$

et comme $\vec{\rho}$, \vec{k} sont pris le long de l'axe des z , $e^{i\vec{k}\cdot\vec{\rho}} = e^{ikz}$, l'équation (II-18) de $\chi_\rho(\vec{\rho})$ devient alors:

$$\chi_\rho(\vec{\rho}) = \sum_{l=0}^{\infty} (\pi\beta_\rho^2)^{-3/4} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(k\rho) \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\beta_\rho^2}\right) Y_l^0(\hat{\rho}) \quad (\text{II-26})$$

En comparant les deux expressions (II-24) et (II-26) de $\chi_\rho(\vec{\rho})$, on déduit la forme de $\chi_{\rho l}(\rho)$:

$$\chi_{\rho l}(\rho) = \rho (\pi\beta_\rho^2)^{-3/4} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(k\rho) \exp\left(-\frac{\rho^2}{2\beta_\rho^2}\right). \quad (\text{II-27})$$

Tenant compte de cette dernière équation et du développement du Laplacien en coordonnées sphériques, l'équation différentielle (II-22) devient:

$$\left(z + \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \frac{\lambda}{\rho} \right) \psi_l(\rho) = \chi_{\rho l}(\rho) \quad (\text{II-28})$$

où $\psi_l(\rho)$ sera la solution de cette équation.

En substituant, dans la relation (II-20) de D , les fonctions d'onde ψ et χ_ρ par leurs développements (II-23) et (II-24) respectivement, nous arrivons à l'expression de l'amplitude de propagation exacte D :

$$D = \sum_l \langle \chi_{\rho l} | \psi_l \rangle = \sum_l \int_0^\infty d\rho \chi_{\rho l}^*(\rho) \psi_l(\rho) \quad (\text{II-29})$$

II-3 Amplitude de propagation approchée \bar{D}

Pour le calcul de l'amplitude \bar{D} à partir de l'équation (II-4), nous faisons appel aux équations variationnelles (I-31a, b)

$$\left(\eta_i + \frac{\Delta}{2} - U_i \right) \varphi_i(\vec{r}) = \chi_i(\vec{r}), \quad (\text{II-30a})$$

$$i = 1, 2$$

$$\left(\eta_i + \frac{\Delta}{2} - U_i \right) \varphi_i^*(\vec{r}) = \chi_i^*(\vec{r}). \quad (\text{II-30b})$$

avec la self-énergie η_i qui s'écrit:

$$\eta_i = z' + n_j^{-1} \int d\vec{r}' \varphi_j^*(\vec{r}') \frac{\Delta}{2} \varphi_j(\vec{r}') \quad (\text{II-31})$$

où z' est l'énergie totale du système. Le champ moyen self-consistent prend la forme:

$$U_i(\vec{r}) = n_j^{-1} \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}'), \quad (\text{II-32})$$

avec $n_j = \langle \varphi_j' | \varphi_j \rangle$ et $j \neq i$

Nous pouvons remarquer que dans η_i , l'énergie totale du système est z' et non pas z comme c'était le cas dans l'étude exacte.

En effet, pour la TIMF, le calcul de l'amplitude \bar{D} se fait dans la représentation de particules individuelles alors que pour l'amplitude exacte D , comme nous l'avons précisé précédemment le calcul se fait dans la représentation du centre de masse.

Dans le cas exact, l'énergie considérée était celle de la particule relative, il s'agit donc dans le cas approché de rajouter à cette énergie relative, l'énergie du centre de masse moyenne

$$\langle T_{cm} \rangle = \frac{3\hbar^2}{4m\beta^2}, \text{ pour pouvoir faire nos calculs avec l'énergie totale du système}$$

$$z' = z + \langle T_{cm} \rangle.$$

Il est utile de constater que l'énergie du centre de masse a été remplacée par sa valeur moyenne [23]. Il est vrai que dans la littérature du problème à petit nombre de corps, cette approche n'est pas toujours bien acceptée. Cependant, nos résultats, à la fin du chapitre, montrent qu'il est tout à fait justifié de procéder à ce remplacement en vue de l'accord obtenu entre les résultats exacts et approchés par la TIMF.

L'un des principes de base de la théorie TIMF est la factorisation des fonctions de voies et d'essai. En plus de cette considération, **Eqs.(II-5, 6)**, imposons à notre modèle certaines symétries supplémentaires:

- 1- $\chi(\vec{r}) = \chi'(\vec{r})$ dans le but de traiter un cas diagonal.
- 2- $\chi_2(\vec{r}) = \chi_1(-\vec{r})$ en tenant compte de la parité d'échange entre les deux particules.
- 3- $\chi_2(\vec{r}) = \chi_1^*(\vec{r})$ en raison de la réversibilité du temps.

et que

$$\varphi_1^*(\vec{r}) = \varphi_2^*(-\vec{r}) = \varphi_2(\vec{r}) = \varphi_1(-\vec{r}). \quad \text{(II-33)}$$

Nous pouvons voir que cette dernière hypothèse est parfaitement compatible avec la self-consistence des équations variationnelles (II-30). En effet, cette symétrie peut être vérifiée dans l'une des solutions variationnelles possibles.

Une insertion des nouvelles symétries, **Eq.(II-33)** dans les définitions de n_i , η_i et U_i nous donne $n_1 = n_2$, $\eta_1 = \eta_2$ et $U_1(\vec{r}) = U_2(\vec{r}) = U_1(-\vec{r})$ en tenant compte de la parité du potentiel coulombien v .

Toutes ces considérations, nous amènent à la réduction du nombre de fonctions inconnues dans les équations variationnelles, **Eqs.(II-30)**, qui passe de quatre à un (φ_1 par exemple). Nos efforts seront donc focalisés à l'étude d'une seule équation:

$$\left(\eta + \frac{\Delta}{2} - U \right) \varphi_1(\vec{r}) = \chi_1(\vec{r}). \quad \text{(II-34)}$$

II-3-1 Développement en ondes partielles

Comme nous avons déjà choisi de le faire dans le cas exact, nous développons là aussi, en ondes partielles la fonction de voie χ_1 :

$$\chi_1(\vec{r}) = \sum_l \frac{1}{r} \chi_l(r) Y_l^0(\hat{r}) \quad \text{(II-35)}$$

avec

$$\chi_l(r) = r (\pi \beta^2)^{-3/4} i^l \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(kr) \exp\left(-\frac{r^2}{2\beta^2}\right), \quad \text{(II-36)}$$

La fonction d'onde individuelle φ_1 :

$$\varphi_1(\vec{r}) = \sum_l \frac{1}{r} \varphi_l(r) Y_l^0(\hat{r}) \quad \text{(II-37)}$$

ainsi que le potentiel moyen U :

$$U(\vec{r}) = \sum_L U_L(r) Y_L^0(\hat{r}) \quad \text{(II-38)}$$

En utilisant les considérations de symétries, **Eq.(II-33)**, nous avons:

$$n = \langle \varphi'_1 | \varphi_1 \rangle = \int d\vec{r} \varphi'_1{}^* (\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) = \int d\vec{r} \varphi_2(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}), \quad (\text{II-39})$$

et comme

$$\varphi_2(\vec{r}) = \varphi_1(-\vec{r}) = \sum_l \frac{1}{r} (-1)^l \varphi_l(r) Y_l^0(\hat{r}) \quad (\text{II-40})$$

avec $(-1)^l$ le facteur de parité des ondes sphériques Y_l^0 tel que:

$$Y_l^0(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_l^0(\theta, \varphi) \quad (\text{II-41})$$

nous obtenons:

$$n = \sum_{l,l'} (-1)^{l'} \int_0^\infty \int_0^{4\pi} \varphi_{l'}(r) \varphi_l(r) Y_{l'}^0(\hat{r}) Y_l^0(\hat{r}) dr d\hat{r}. \quad (\text{II-42})$$

En tenant compte de la relation d'orthonormalisation des harmoniques sphériques

$$\int_0^{4\pi} Y_l^0(\hat{r}) Y_{l'}^0(\hat{r}) d\hat{r} = \delta_{ll'} \quad (\text{II-43})$$

nous arrivons à:

$$n = \sum_l (-1)^l \int_0^\infty dr [\varphi_l(r)]^2. \quad (\text{II-44})$$

En suivant le même raisonnement on a

$$\gamma = \langle \varphi'_1 | \chi_1 \rangle = \sum_l (-1)^l \int_0^\infty dr \varphi_l(r) \chi_l(r) \quad (\text{II-45})$$

et aussi

$$\eta = z' - n^{-1} \langle \varphi'_1 | -\frac{\Delta}{2} | \varphi_1 \rangle$$

ou encore

$$\eta = z' - (2n)^{-1} \sum_l (-1)^l \int_0^\infty dr \varphi_l(r) \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{d^2}{dr^2} \right] \varphi_l(r). \quad (\text{II-46})$$

En outre, comme le potentiel coulombien se développe sous la forme suivante [39]:

$$v(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{\lambda}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi\lambda \sum_{L\mu} \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \frac{1}{2L+1} [Y_L^\mu(\hat{r})]^* Y_L^\mu(\hat{r}'), \quad (\text{II-47})$$

où $r_{<} = \min(r, r')$ et $r_{>} = \max(r, r')$ désignent respectivement la plus petite et la plus grande des deux longueurs r et r' , le champ self-consistent s'écrit:

$$\begin{aligned} U(\vec{r}) &= n^{-1} \langle \varphi_1 | v(\vec{r} - \vec{r}') | \varphi_1 \rangle \\ &= n^{-1} \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_2(\vec{r}') \varphi_1(\vec{r}') \end{aligned} \quad (\text{II-48})$$

En substituant les développements (II- 37), (II- 40) et (II- 47) dans cette dernière expression, on trouve:

$$\begin{aligned} U(\vec{r}) &= 4\pi\lambda n^{-1} (-1)^l \sum_{\substack{l'l' \\ L\mu}} \left\{ \int_0^\infty \left(\frac{1}{2L+1} \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \right) \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') dr' \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^{4\pi} Y_L^\mu(\hat{r}') Y_l^0(\hat{r}') Y_{l'}^0(\hat{r}') d\hat{r}' \right\} [Y_L^\mu(\hat{r})]^* \end{aligned} \quad (\text{II-49})$$

Nous savons que [38]:

$$\int_0^{4\pi} Y_{l_1}^{m_1}(\hat{r}) Y_{l_2}^{m_2}(\hat{r}) Y_{l_3}^{m_3}(\hat{r}) d\hat{r} = \left(\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi} \right)^{1/2} \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{II-50})$$

où $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ est l'expression générale des symboles 3-j et $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \neq 0$

si $l_1 + l_2 + l_3$ est pair

De plus, dans notre cas, $l_1 = L$, $l_2 = l$ et $l_3 = l'$, ce qui correspond à $m_1 = \mu$, $m_2 = 0$ et $m_3 = 0$. Le potentiel moyen $U(\vec{r})$ devient donc:

$$U(\vec{r}) = \sum_L \left\{ \lambda n^{-1} \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \sum_{l'} (-1)^l \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} L & l & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \times \int_0^\infty \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') dr' \right\} Y_L^0(\hat{r}) \quad (\text{II-51})$$

avec $\mu = m_1 = m_2 + m_3 = 0$.

Sachant que si l'on fait varier:

$$r' \text{ de } 0 \rightarrow r \text{ alors } r_{>} > r'$$

ou

$$r' \text{ de } r \rightarrow \infty \text{ alors } r_{>} < r',$$

on obtient:

$$\int_0^\infty \frac{r_{<}^L}{r_{>}^{L+1}} \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') dr' = \frac{1}{r^{L+1}} \int_0^r r'^L \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') dr' + r^L \int_r^\infty \frac{1}{r'^{L+1}} \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') dr'. \quad (\text{II-52})$$

En tenant compte de ce dernier développement et en comparant les deux équations (II- 38) et (II- 51) on déduit l'expression finale de $U_L(r)$:

$$U_L(r) = \lambda n^{-1} \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \sum_{l'} (-1)^l \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} L & l & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{II-53})$$

$$\times \left(\frac{1}{r^{L+1}} \int_0^r dr' r'^L \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') + r^L \int_r^\infty dr' \frac{1}{r'^{L+1}} \varphi_l(r') \varphi_{l'}(r') \right)$$

avec L pair

Dans l'équation variationnelle (II- 34) apparaît le produit $U(\vec{r})\varphi(\vec{r})$. Explicitons ce produit:

$$U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \sum_L \sum_{l'} U_L(r) \varphi_{l'}(r) Y_L^0(\hat{r}) Y_{l'}^0(\hat{r}) \quad (\text{II-54})$$

avec

$$Y_L^0(\hat{r}) Y_{l'}^0(\hat{r}) = \sum_l \sqrt{\frac{(2L+1)(2l+1)(2l'+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & L & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 Y_l^0(\hat{r}) \quad (\text{II-55})$$

où $m_1 = m_2 = m_3 = 0$ et $L+l+l'$ est pair.

Donc

$$U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \sum_{l'} \sum_L \sqrt{\frac{(2L+1)(2l+1)(2l'+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l & L & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 U_L(r) \varphi_{l'}(r) Y_l^0(\hat{r}) \quad (\text{II-56})$$

Posons

$$U_{l'l'}(r) = \sqrt{\frac{(2l+1)(2l'+1)}{4\pi}} \sum_L \sqrt{2L+1} \begin{pmatrix} l & L & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 U_L(r) \quad (\text{II-57})$$

avec $U_{ll'}(r)$ qui représente les potentiels de couplage entre les multipôles $U_L(r)$ et le produit (II-52) devient:

$$U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \sum_{ll'} U_{ll'}(r) \varphi_{l'}(r) Y_l^0(\hat{r}) \quad (\text{II-58})$$

Finalement, l'équation variationnelle (II-34) développée en ondes partielles, s'écrit:

$$\left(\eta + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right) \varphi_l(r) - \sum_{l'} U_{ll'}(r) \varphi_{l'}(r) = \chi_l(r). \quad (\text{II-59})$$

En tenant compte de la définition, Eq.(II-4), de l'amplitude de propagation \bar{D} approchée par la TIMF, des différentes considérations concernant les fonctions de voies et d'essai, des différents développements en ondes partielles ainsi que la résolution de cette dernière équation variationnelle, nous pouvons calculer cette amplitude \bar{D} qui s'écrit:

$$\bar{D} = \gamma^4 n^{-2} (2\eta - z' + \langle v \rangle)^{-1}, \quad (\text{II-60})$$

avec

$$\begin{aligned} \langle v \rangle &= n^{-2} \langle \varphi'_1 \varphi'_2 | v | \varphi_1 \varphi_2 \rangle \\ &= n^{-2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \varphi_1'^*(\vec{r}) \varphi_2'^*(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_1(\vec{r}) \varphi_2(\vec{r}') \\ &= n^{-1} \int d\vec{r} \varphi_1'^*(\vec{r}) U_1(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) \\ &= n^{-1} \int d\vec{r} \varphi_2(\vec{r}) U_1(\vec{r}) \varphi_1(\vec{r}) \end{aligned}$$

ou encore

$$\langle v \rangle = n^{-1} \sum_{ll'} (-1)^l \int_0^\infty dr \varphi_l(r) U_{ll'}(r) \varphi_{l'}(r) \quad (\text{II-61})$$

II- 4 Résultats numériques et discussions

Pour le calcul de l'amplitude de propagation exacte D , **Eq.(II-29)**, il est nécessaire de résoudre tout d'abord l'équation différentielle **(II-28)**. Quant à l'amplitude approximée par la TIMF \bar{D} , **Eq.(II-60)**, son calcul fait appel à la résolution de l'équation variationnelle **(II-59)**.

Ces deux équations différentielles ont été résolues numériquement à l'aide de la méthode des différences finies (à trois points) pour les dérivées secondes.

Nous avons constaté une convergence assez rapide lorsque initialement, on prend une énergie z complexe ($\Gamma = \text{Im } z = 0.4 \text{Re } z = 0.4E$). L'énergie z est ensuite ramenée à sa valeur physique réelle, c'est à dire sur couche ($\Gamma = 0$), en deux ou trois étapes.

Nous présentons dans ce qui suit, certains résultats numériques significatifs. Des résultats supplémentaires en accord avec notre code, existent pour les lecteurs intéressés

Nous montrons dans le tableau, **(Tab.II-1)** quelques résultats assez fondamentaux de notre travail. Nous comparons l'amplitude exacte D , (1^{ère} ligne) avec l'amplitude approchée \bar{D} , (2^{ème} ligne), pour différentes valeurs de l'énergie E et de l'intensité Λ du potentiel coulombien.

Pour plus de précision, nous utilisons les unités nucléaires. La largeur du paquet d'onde individuel est prise $\beta = 1.5$ fm et nos calculs sont faits sur couche $\text{Im } E = \Gamma = 0$.

L'analyse de ces résultats numériques montre que la TIMF reproduit avec une bonne approximation les résultats exacts. En effet, il apparaît un bon accord entre les amplitudes D et \bar{D} , soit entre leurs parties réelles, ou entre leurs parties imaginaires.

Pour mieux illustrer l'accord entre les deux amplitudes, nous avons tracé les parties réelles **(Fig.II-1)** et imaginaires **(Fig.II-2)** des deux amplitudes D et \bar{D} en fonction des différentes valeurs d'énergie E pour une valeur de l'intensité, $\Lambda = 90$ MeV fm. Nous observons un très bon accord entre les parties réelles et pour les parties imaginaires une légère différence transparait.

Dans les figures **(Fig.II-3)** et **(Fig.II-4)**, nous avons reporté, respectivement, les valeurs des parties réelles et imaginaires des deux amplitudes D et \bar{D} en fonction de l'intensité du potentiel Λ et cette fois pour une valeur bien précise de l'énergie E . Là aussi, nous remarquons que les parties exactes et approchées coïncident. Notons cependant, qu'au

delà de $\Lambda = 150 \text{ MeV fm}$, il commence à apparaître une légère différence entre les résultats exacts et TIMF. Il serait utile de pousser ces mêmes calculs pour de grandes valeurs de l'intensité pour voir le comportement de l'approche TIMF.

II-4- 1 Comportement des fonctions d'onde

Nous montrons sur la figure (**Fig.II-5**) les modules des fonctions d'onde exactes ψ_l , en fonction de la position ρ pour différentes valeurs de l . Dans la figure (**Fig.II-6**), ce sont les modules des fonctions d'onde partielles φ_l qui sont donnés en fonction de r et pour les mêmes valeurs l .

Nous avons choisi pour les deux cas exact et TIMF les mêmes paramètres c'est à dire $E=160 \text{ MeV}$, $\Lambda = 90 \text{ MeV fm}$, $\Gamma = 0$ et l allant de 0 à 5.

L'étude de ces courbes montrent qu'il n'y a pas de dominance particulière d'une onde par rapport aux autres et que leurs contributions au calcul des modules de deux fonctions ψ et φ sont de même ordre et donc, il n'est pas possible de favoriser une onde par rapport à l'autre.

Nous relevons une décroissance exponentielle dans les calculs TIMF, (**Fig.II-6**), pour des grandes valeurs de r alors que cette décroissance est inexistante dans le cas exact, (**Fig.II-5**). Ceci est dû au comportement de notre solution qui n'est pas conforme au comportement asymptotique $\exp \{i[k\rho - \Lambda/k \log(2k\rho)]\}$ des solutions exactes à des grandes valeurs de ρ dans le cas d'une diffusion coulombienne. Cependant, des calculs faits précédemment [23], ont montré que cette décroissance exponentielle qui existe dans le cas exact lorsque les calculs sont faits hors couche, a tendance à disparaître lorsqu'on passe sur couche. Dans les calculs faits dans le cas de la TIMF, la persistance de cette décroissance a été observée même sur couche.

Comme l'énergie de propagation à un corps η reste complexe même quand l'énergie totale du système devient réelle la décroissance exponentielle pour des grandes valeurs de r est une propriété de la TIMF. Ceci d'une part, d'autre part, du fait que la partie imaginaire de cette énergie individuelle η est positive la condition de retardation est vérifiée et la limite sur couche est donc régulière.

Pour mettre en évidence la stabilité de la forme de la fonction d'onde variationnelle, nous traçons sur les figures (**Fig.II-7, 8**) le module de la fonction d'onde partielle TIMF pour $l = 0$ en fonction de r pour différentes valeurs de l'énergie E avec une largeur du paquet d'ondes $\beta = 1.5$ fm (**Fig.II-7**) et pour différentes largeurs β avec $E = 160$ MeV, (**Fig.II-8**). Notons que dans les deux figures, les maximums du module de φ_0 sont inversement proportionnels aux valeurs de l'énergie E , et la largeur du paquet d'ondes β .

II-4-2 Comportement du champ moyen

Dans la figure (**Fig.II-9**) les modules du potentiel pour différentes valeurs de l et en fonction de r ont été calculés. Il est frappant de constater que même si la fonction d'onde variationnelle a plusieurs ondes partielles non négligeables, le potentiel du champ moyen est complètement dominé par son monopôle. Ce résultat a été confirmé dans tous les cas que nous avons considérés numériquement. Cette dominance du monopôle peut être utile en physique atomique où dès le départ on ne retient que ce monopôle. En physique nucléaire, par contre ceci ne serait pas très correct, car on doit tenir compte de la déformation du noyau donc du quadripôle.

Nous avons tracé sur couche et avec une intensité $\Lambda = 90$ MeVfm, le module du potentiel pour $l = 0$ en fonction de r pour diverses valeurs de l'énergie E , (**Fig.II-10**), et pour diverses valeurs de la largeur β du paquet d'ondes individuel, (**Fig.II-11**).

Nous relevons dans les deux figures la stabilité de la forme du champ moyen. Notons aussi que le module de U_0 , devient insensible à la valeur de l'énergie au delà de $r = 2,5$ fm

II- 5 Conclusion

Nous avons montré dans ce chapitre qu'un problème coulombien soluble à deux corps, qui se réduit à un corps, peut être approximé par une technique du champ moyen (TIMF) avec deux particules indépendantes .

Les différents résultats obtenus ont montré la parfaite adéquation entre les calculs exacts et ceux approchés par la TIMF [24].

Il est important de souligner que ce bon accord justifie le remplacement de l'énergie T_{cm} du centre de masse par sa valeur moyenne $\langle T_{cm} \rangle$.

Nous avons observé aussi la stabilité de la forme de la fonction d'onde variationnelle et du champ moyen U_0 .

Ce modèle TIMF a mis en évidence des simplifications physiques utiles comme par exemple la dominance du monopôle du champ moyen.

Nous venons de voir que les forces coulombiennes peuvent être introduites dans le formalisme de la TIMF. La solution numérique des équations du champ moyen peut être obtenue. Il n'y a pas de problèmes de singularité ni d'instabilité à contourner. En particulier, la limite sur couche de la TIMF semble être systématiquement régulière.

Ces résultats ont finalement montré que les forces coulombiennes conservent le caractère de bonne approximation que la TIMF avait déjà montré pour des modèles solubles avec des forces à courte portée.

Une extension de cette théorie peut être envisagée pour un problème à trois corps et c'est l'objet de notre prochain chapitre.

Λ (Mev fm)	E (MeV)				
	40	90	160	250	360
10	-13.3 -45.2.i -10.4 -41.9.i	-5.36 -31.1.i -4.67 -29.4.i	-2.39 -23.6.i -2.58 -22.5.i	-0.93 -18.8.i -1.57 -18.1.i	-0.35 -14.7.i -0.94 -15.0.i
20	-19.2 -41.7.i -15.9 -39.3.i	-8.34 -30.1.i -7.42 -28.7.i	-4.25 -23.2.i -4.18 -22.2.i	-2.20 -18.6.i -2.61 -18.0.i	-1.22 -14.6.i -1.66 -14.9.i
30	-23.8 -37.1.i -20.5 -35.6.i	-11.0 -28.6.i -9.99 -27.5.i	-6.01 -22.5.i -5.73 -21.6.i	-3.42 -18.3.i -3.63 -17.7.i	-2.06 -14.5.i -2.38 -14.8.i
40	-27.0 -32.0.i -24.0 -31.1.i	-13.3 -26.7.i -12.3 -25.9.i	-7.63 -21.6.i -7.20 -21.0.i	-4.57 -17.8.i -4.62 -17.4.i	-2.88 -14.2.i -3.07 -14.6.i
50	-29.0 -26.7.i -26.3 -26.2.i	-15.2 -24.6.i -14.3 -24.0.i	-9.07 -20.6.i -8.56 -20.1.i	-5.65 -17.2.i -5.56 -16.9.i	-3.66 -13.9.i -3.70 -14.3.i
60	-29.6 -21.4.i -27.4 -21.3.i	-16.6 -22.4.i -16.0 -22.0.i	-10.3 -19.4.i -9.80 -19.2.i	-6.63 -16.6.i -6.46 -16.4.i	-4.39 -13.5.i -4.41 -14.0.i
70	-29.1 -16.6.i -27.4 -16.8.i	-17.6 -20.1.i -17.2 -19.7.i	-11.4 -18.1.i -10.9 -18.1.i	-7.51 -15.8.i -7.29 -15.8.i	-5.07 -13.1.i -5.03 -13.7.i
80	-27.7 -12.7.i -26.6 -12.8.i	-18.2 -17.9.i -18.1 -17.4.i	-12.2 -16.7.i -11.8 -16.9.i	-8.28 -15.0.i -8.05 -15.2.i	-5.69 -12.6.i -5.62 -13.3.i
90	-25.8 -9.70.i -25.1 -9.46.i	-18.6 -15.8.i -18.6 -15.2.i	-12.8 -15.4.i -12.6 -15.6.i	-8.94 -14.2.i -8.73 -14.4.i	-6.25 -12.0.i -6.17 -12.9.i
100	-24.0 -7.53.i -23.4 -6.83.i	-18.6 -13.8.i -18.7 -13.0.i	-13.3 -14.0.i -13.2 -14.4.i	-9.49 -13.3.i -9.34 -13.7.i	-6.75 -11.5.i -6.68 -12.4.i
150	-14.2 -1.08.i -15.4 -0.88.i	-16.3 -6.34.i -16.2 -4.92.i	-13.5 -8.17.i -14.0 -8.23.i	-10.7 -8.95.i -11.1 -9.63.i	-8.26 -8.45.i -8.54 -9.77.i

Tab.II-1: Comparaison entre les amplitudes exactes D (1^{ère} ligne) et \bar{D} (2^{ème} ligne) en (GeV^{-1}) sur couche, pour différentes intensités Λ du potentiel et différentes énergies E à une largeur du paquet d'onde $\beta=1.5$ fm

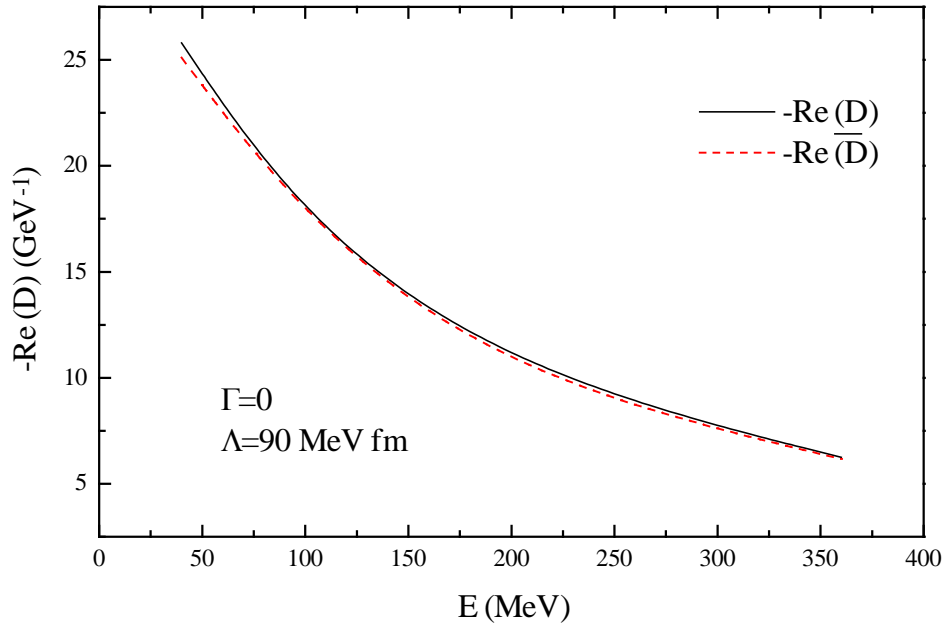


Fig.II-1: Comparaison entre les parties réelles des amplitudes exacte D (en traits pleins) et TIMF \bar{D} (en pointillés) en fonction de l'énergie E

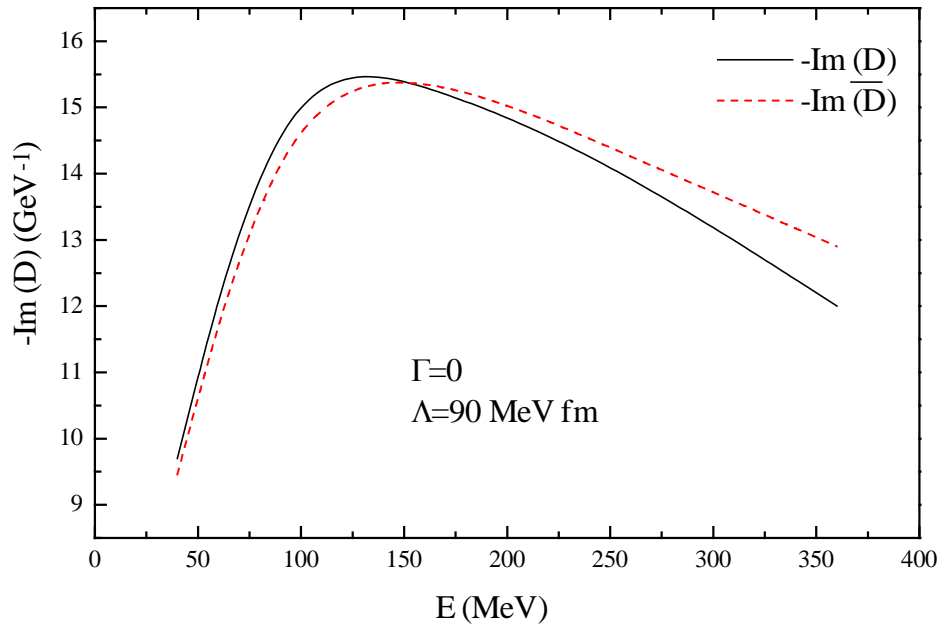


Fig.II-2: Comparaison entre les parties imaginaires des amplitudes exacte D (en traits pleins) et TIMF \bar{D} (en pointillés) en fonction de l'énergie E

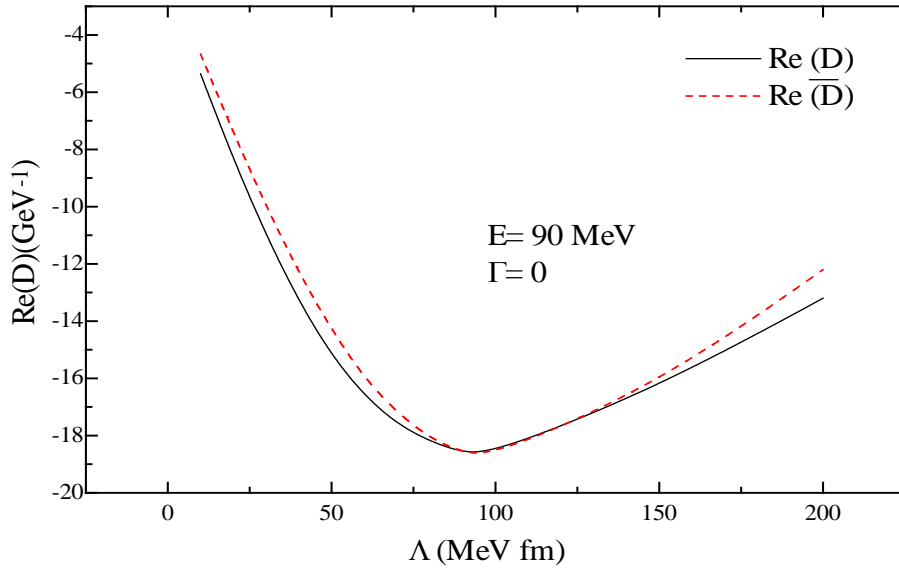


Fig.II-3: Comparaison entre les parties réelles des amplitudes exacte D (en traits pleins) et TIMF \bar{D} (en pointillés) en fonction de l'intensité Λ

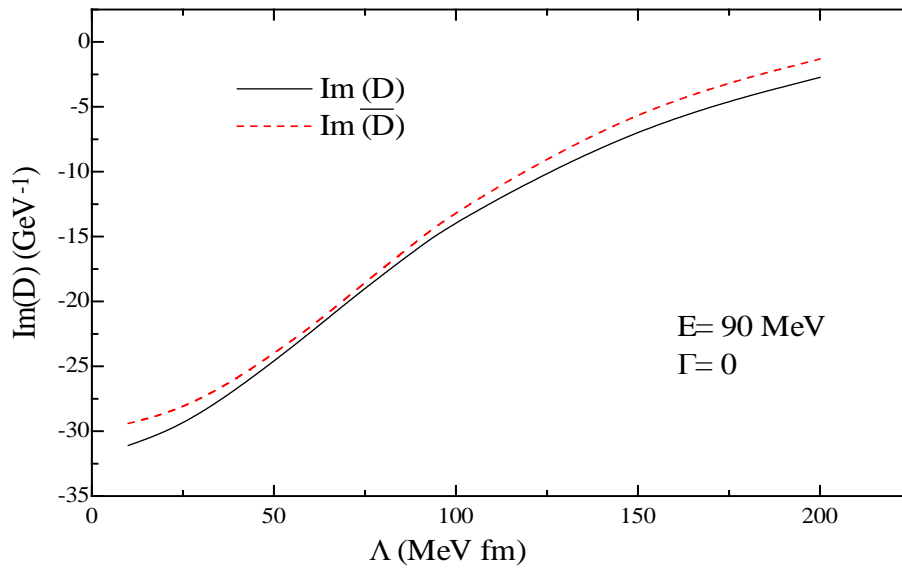


Fig.II-4: Comparaison entre les parties imaginaires des amplitudes exacte D (en traits pleins) et TIMF \bar{D} (en pointillés) en fonction de l'intensité Λ

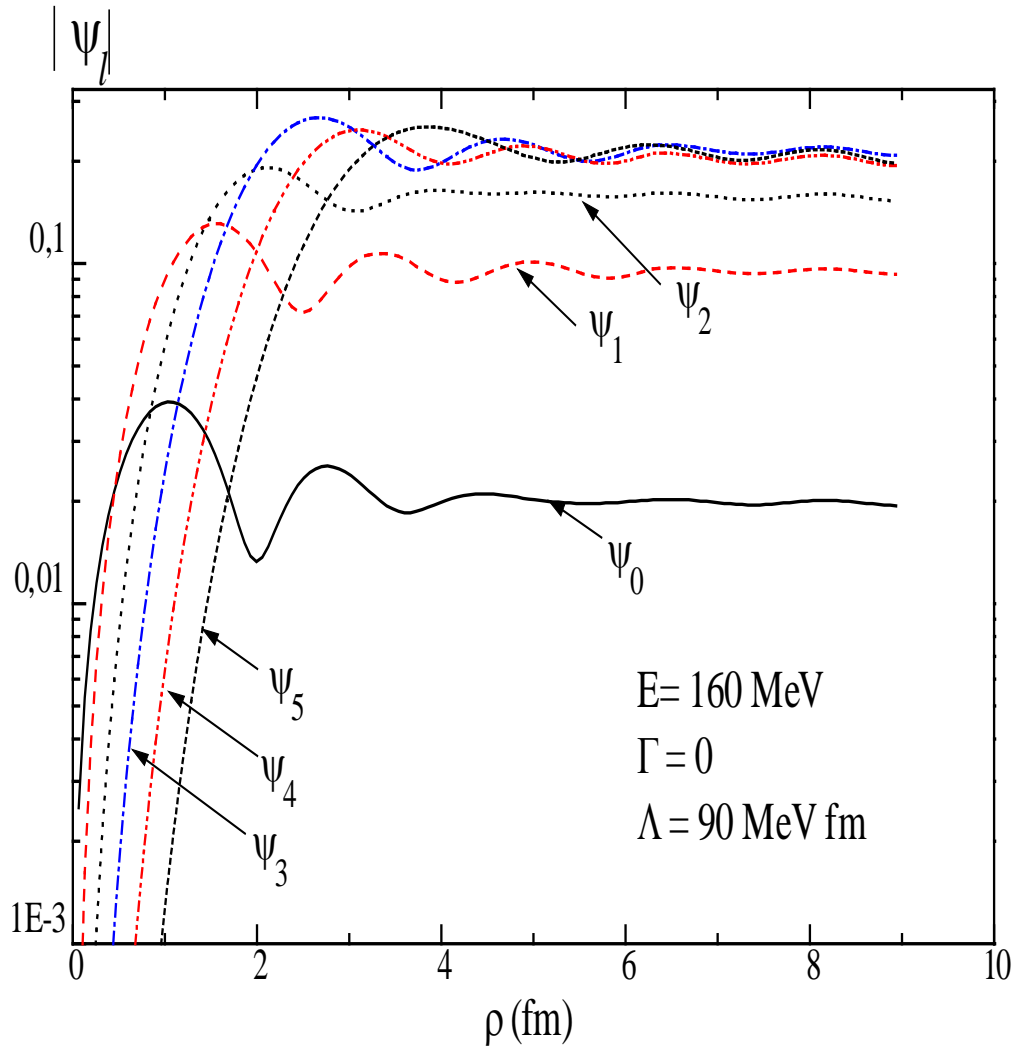


Fig.II-5: Ondes partielles exactes $|\psi_l|$ pour différentes valeurs de l ($l = 0-5$).

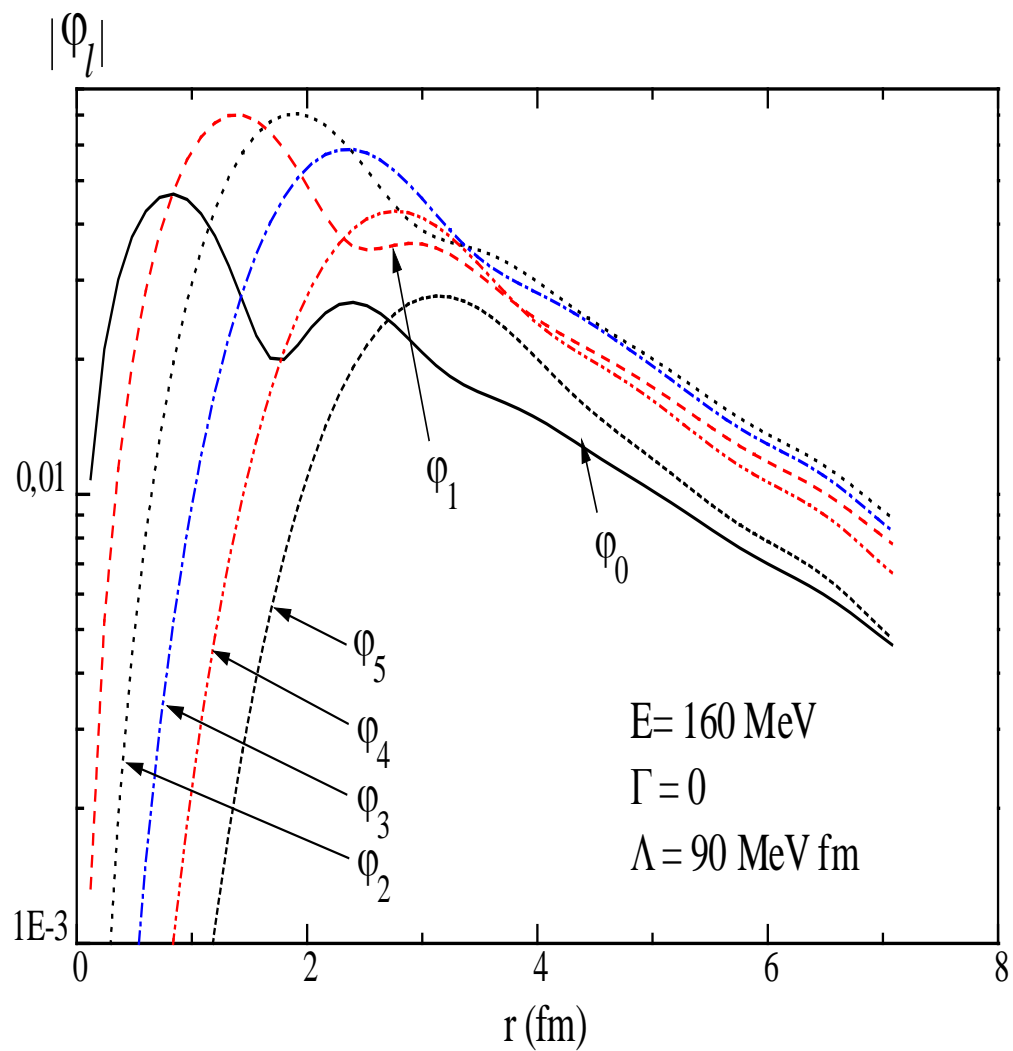


Fig.II-6: Ondes partielles TIMF $|\varphi_l|$ pour différentes valeurs de l ($l=0-5$).

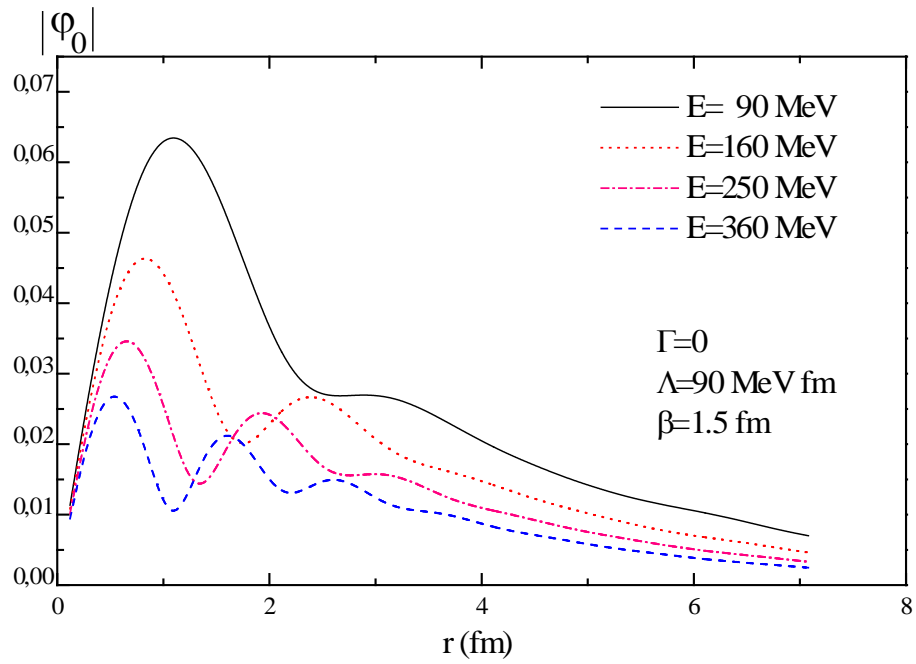


Fig.II-7: Stabilité de la forme de $|\varphi_0|$ pour $E= 90, 160, 250$ et 360 MeV

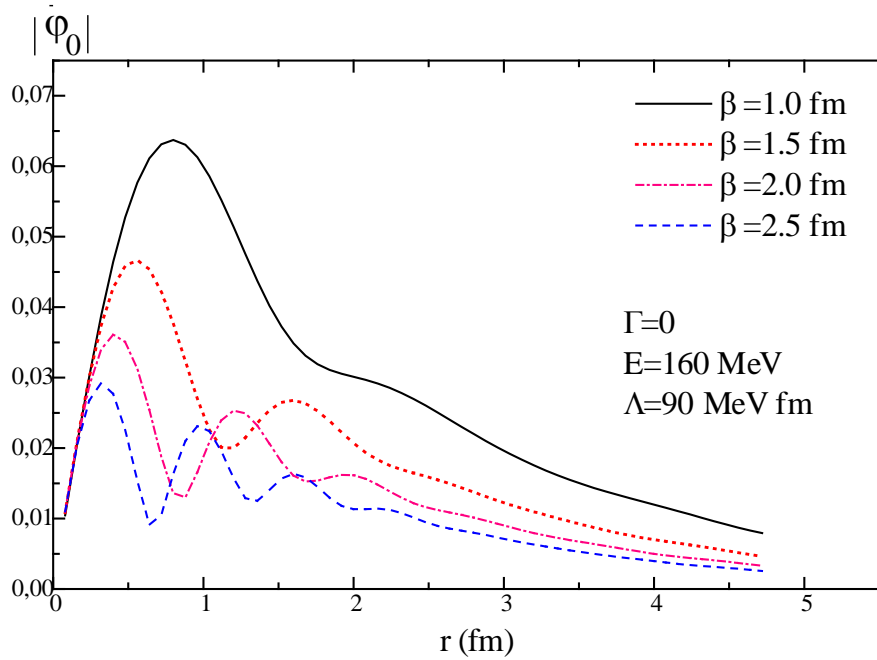


Fig.II-8: Stabilité de la forme de $|\varphi_0|$ pour $\beta = 1, 1.5, 2$ et 2.5 fm

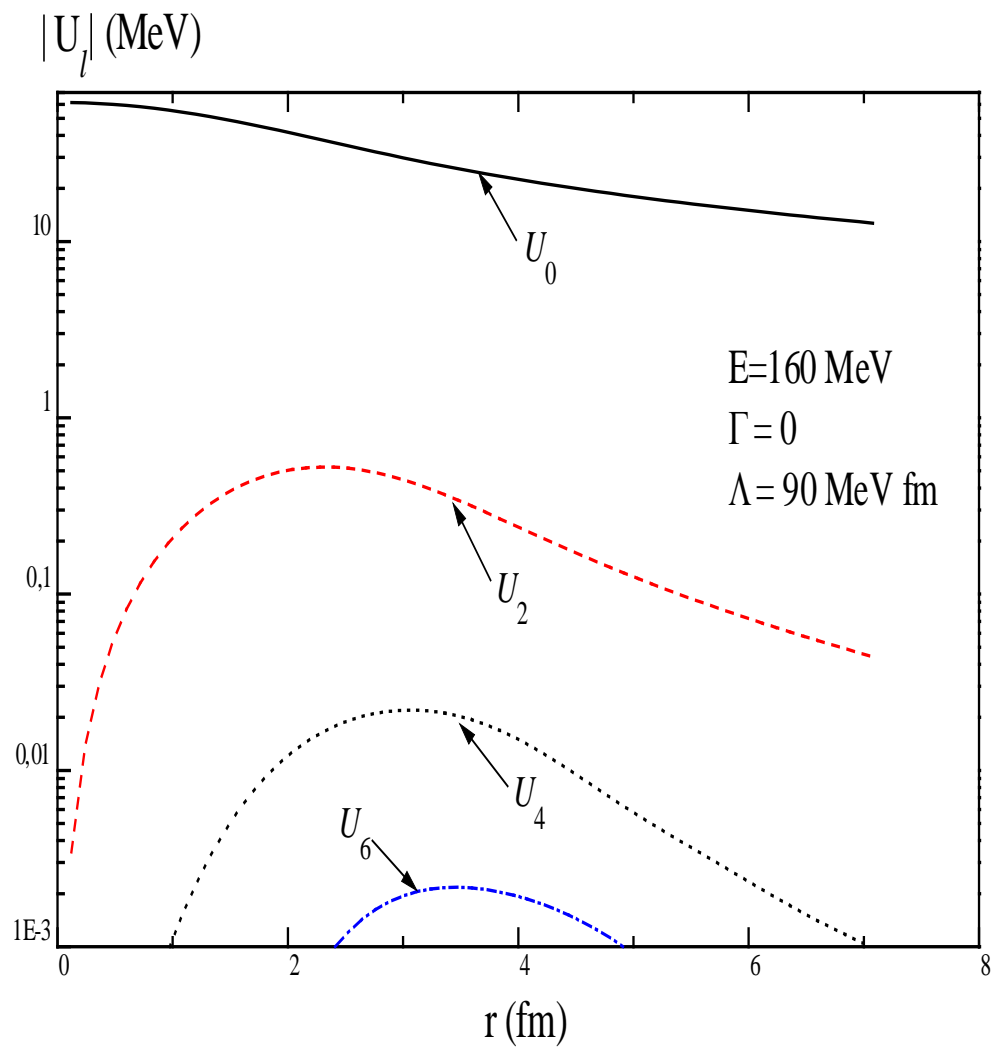


Fig.II-9: Multipôles du potentiel moyen $|U_l|$ pour différentes valeurs de l

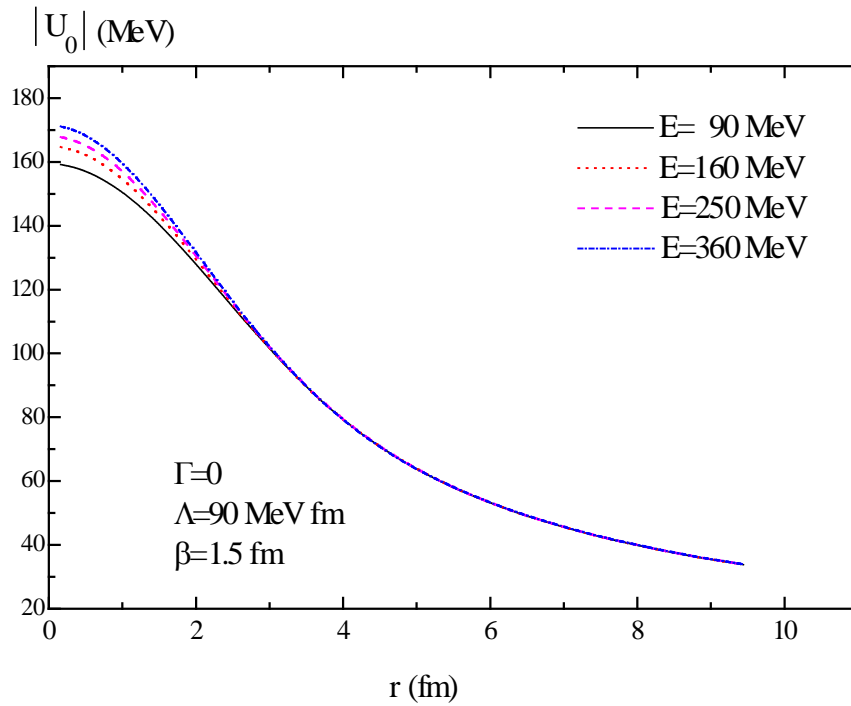


Fig.II-10: Stabilité de la forme de $|U_0|$ quand $E=90, 160, 250$ et 360 MeV

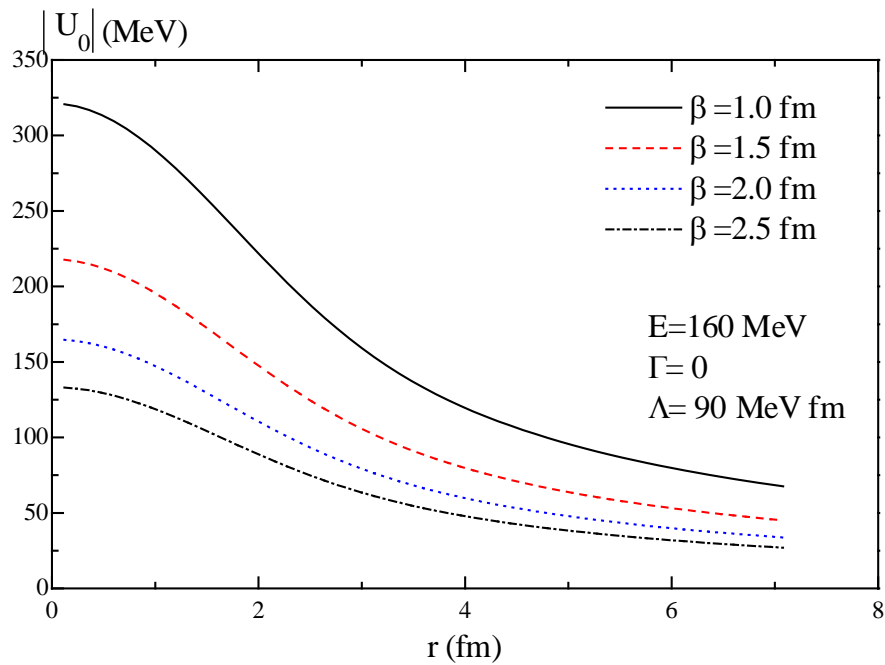


Fig.II-11: Stabilité de la forme de $|U_0|$ pour $\beta=1, 1.5, 2,$ et 2.5 fm

CHAPITRE III

*APPLICATION DE LA METHODE
TIMF A UN PROBLEME
COULOMBIEN A TROIS CORPS:
L'ATOME D'HELIUM*

CHAPITRE III

Application de la méthode TIMF à un problème coulombien à trois corps: l'atome d'Hélium

III-1 Introduction

Nous passons maintenant de la physique nucléaire à la physique atomique, motivés par plusieurs travaux théoriques consacrés à l'atome d'Hélium [27-30] et par des études expérimentales sur le Baryum [31], dont les propriétés atomiques pour les états de Rydberg ($n \gg 1$) fortement excités se rapprochent de celles de l'Hélium. Nous voulons vérifier, à l'aide de l'approximation TIMF, certaines prédictions théoriques et observations expérimentales plus ou moins cohérentes concernant le calcul du temps de vie d'états de Rydberg pour l'atome d'Hélium.

Un atome à deux électrons excités constitue un système quantique à trois corps (l'ion doublement chargé et les deux électrons) assez simple, mais fondamentalement très riche en propriétés observables et potentiellement calculables.

L'atome d'Hélium, composé d'un noyau He^{++} et de deux électrons couplés par la force de Coulomb, conduit en mécanique classique à des équations dynamiques à variables non séparables ne possédant pas de solutions analytiques simples. En mécanique quantique, l'opérateur Hamiltonien n'est pas séparable non plus. Cependant, certaines approximations permettent de décrire à l'aide de méthodes simples, les systèmes atomiques à plusieurs électrons.

Des études récentes [32,33] portant sur les états hautement excités de l'Hélium neutre ont montré que les configurations où les deux électrons occupent le même état présentent certaines propriétés d'instabilité.

Nous voulons, à l'aide de la TIMF étudier de plus près ces phénomènes d'instabilité en explorant de manière détaillée le spectre de l'atome d'Hélium et continuer ainsi une étude déjà entamée lors de précédents travaux sur ce même atome [23].

III-2 Le modèle

L'Hamiltonien non relativiste qui régit ce système coulombien à trois corps s'écrit en unités atomiques ($\hbar = e = m_e = 1$)

$$H = H_0 + V = h_1 + h_2 + V = \left(\frac{p_1^2}{2} + u_1 \right) + \left(\frac{p_2^2}{2} + u_2 \right) + V \quad (\text{III-1})$$

Il est composé de l'Hamiltonien de deux particules indépendantes dans un potentiel coulombien $u_i = -\frac{2}{r_i}$, $i=1, 2$ plus la répulsion interélectronique représentée par $V = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$.

Notons que dans notre étude, nous considérons un modèle semi-réaliste: le potentiel V sera légèrement modifié et sera pris comme [35,36]:

$$V = \frac{1}{|\vec{r}_1| + |\vec{r}_2|} \quad (\text{III-2})$$

Ce modèle, tout en conservant les propriétés physiques les plus importantes, permet d'éviter les complications des calculs générés par le développement du terme $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ en multipôles qui induit des divergences du point de vue numérique et qui coûte en temps machine et mémoire.

Ce choix de V est justifié statistiquement par la présence dominante des deux électrons sur une même orbite avec des paquets d'ondes identiques et dans des positions opposées par rapport au noyau [37]

Le calcul de l'amplitude exacte D

$$D = \langle \chi' | (z - H)^{-1} | \chi \rangle \quad (\text{III-3})$$

étant difficile à obtenir dans notre cas, nous calculons plutôt l'amplitude de propagation approchée \bar{D} par la TIMF:

$$\bar{D} = \frac{\langle \chi' | \Phi \rangle \langle \Phi' | \chi \rangle}{\langle \Phi' | (z - H) | \Phi \rangle}, \quad (\text{III-4})$$

On utilise les mêmes restrictions que celles adoptées dans le chapitre précédent à savoir les factorisations des fonctions de voies initiale et finale:

$$|\chi\rangle = \prod_i |\chi_i\rangle \quad ; \quad \langle \chi' | = \prod_i \langle \chi'_i |, \quad (\text{III-5})$$

et des fonctions d'essai:

$$|\Phi\rangle = \prod_i |\varphi_i\rangle \quad ; \quad \langle \Phi' | = \prod_i \langle \varphi'_i |. \quad (\text{III-6})$$

Nous considérons là aussi un cas diagonal et réel:

$$\chi = \chi'. \quad (\text{III-7})$$

Reprenons les expressions des fonctions de voies des deux particules:

$$|\Phi\rangle = G |\chi\rangle \quad \text{et} \quad \langle \Phi' | = \langle \chi' | G \quad (\text{III-8})$$

avec $G = (z - H)^{-1}$. Remarquons que, Comme nous considérons un cas diagonal, nous arrivons à:

$$|\Phi\rangle = (z - H)^{-1} |\chi\rangle \quad \text{et} \quad \langle \Phi' | = (z^* - H)^{-1} |\chi\rangle \quad (\text{III-9})$$

l'opérateur H étant hermitique et χ réel, nous avons:

$$\Phi'(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{III-10})$$

De ce fait, le produit scalaire $\langle \Phi' | \Phi \rangle$ se réduit à un produit euclidien $(\Phi | \Phi)$ et nous constatons que la résolution de nos quatre équations variationnelles TIMF déduites du chapitre I, **Eqs.(I-31)** se réduit à celle de deux équations correspondantes à φ_1 et φ_2 :

$$(\eta_i - h_i - U_i) |\varphi_i\rangle = |\chi_i\rangle, \quad i = 1, 2 \quad (\text{III-11})$$

où h_i est l'Hamiltonien à un corps, η_i est l'énergie self-consistante:

$$\eta_i = z - \frac{(\varphi_j | h_j | \varphi_j)}{(\varphi_j | \varphi_j)}, \quad (\text{III-12})$$

et U_i est le champ moyen:

$$U_i = \frac{(\varphi_j | v | \varphi_j)}{(\varphi_j | \varphi_j)} \quad (\text{III-13})$$

avec $j \neq i$.

Les termes de source sont choisis comme des paquets d'ondes radiaux:

$$\chi_l(r_i) = r_i (\pi \beta^2)^{-3/4} \sqrt{4\pi(2l+1)} j_l(k_i r_i) \exp\left(-\frac{(r_i - r_0)^2}{2\beta^2}\right), \quad (\text{III-14})$$

où $i=1,2$, β est la largeur du paquet d'ondes, j_l est la fonction sphérique de Bessel, k_1 et k_2 les moments d'accélération et r_0 paramétrise le maximum de chaque paquet d'ondes.

III-3 Résultats numériques et discussions

Avant d'entamer la présentation et la discussion de nos résultats numériques, nous donnons un bref aperçu sur le spectre de l'Hélium schématisé sur la figure (**Fig III-1**).

Pour arriver au spectre de l'Hélium, nous rappelons tout d'abord le spectre d'un Hamiltonien à un corps $h = \frac{p^2}{2} - \frac{2}{r}$ (en u.a) dans le cas des ondes s, puis nous donnons le spectre d'un Hamiltonien à deux corps à particules indépendantes, $H = h_1 + h_2$. Nous pouvons constater que pour ce deuxième spectre, tous les états liés de h deviendront des seuils de continus à un corps. Les pôles du type (1sns) se situent au dessous du premier seuil.

En rajoutant à cet Hamiltonien à deux corps la répulsion interélectronique, nous obtenons le spectre de l'Hélium. Nous constatons que la prise en compte de cette répulsion entraîne un décalage des pôles.

En effet, des calculs faits en diagonalisant cet Hamiltonien [40] ont montré que ce dernier présente un état fondamental d'Hartree à l'énergie $E_0 = -3.22$ et un premier état excité à l'énergie $E_1 = -2.2$ en unités atomiques.

Notons que nous avons plusieurs configurations de Rydberg du type $1sns$ avant le 1^{er} seuil, $2sns$ avant le deuxième seuil,....et $nsms$ avant le seuil de continu à deux corps, tels que n et m très grands.

L'étude de la stabilité de la symétrie des fonctions d'essai est l'un des points essentiels de ce chapitre. Initialement, nous prenons la fonction de voie χ symétrique c'est à dire $\chi_1 = \chi_2$, nous nous attendons à retrouver à la fin de nos calculs numériques la même symétrie pour la fonction Φ à savoir $\varphi_1 = \varphi_2$.

Pour cela, nous introduisons un très petit décalage numérique entre k_2 et k_1 à savoir $k_2 = k_1(1 + 10^{-4})$. Si à la fin des calculs de la fonction Φ , à travers la résolution des équations variationnelles TIMF, nous trouvons $\varphi_2 \approx \varphi_1(1 + 10^{-4})$ alors nous dirons que la symétrie est conservée. Dans le cas contraire, $\varphi_2 \neq \varphi_1$, nous dirons qu'il y a brisure de symétrie.

Pour nos calculs numériques, nous avons considéré des ondes $s(l = 0)$ avec la largeur du paquet d'ondes $\beta = 2$ et r_0 qui paramétrise le maximum du paquet d'ondes est pris égal à 5 en unités atomiques. Notons qu'avec ces valeurs, nous nous retrouvons avec une fonction de voie χ qui contient en grande partie de l'état $(3s)^2$.

Sur les différents tableaux que nous donnons, (**Tab.III-1,2,3,4**), nous présentons les résultats, en unités atomiques, obtenus pour les self-énergies η_1 et η_2 , les énergies moyennes de chaque particule:

$$\varepsilon_i = \frac{(\varphi_i | (h_i + U_i) | \varphi_i)}{(\varphi_i | \varphi_i)}, \quad i = 1, 2 \quad \text{(III-15)}$$

et l'énergie \bar{e} :

$$\bar{e} = \frac{(\Phi | H | \Phi)}{(\Phi | \Phi)} \quad (\text{III-16})$$

dont la partie imaginaire permet, d'après Goldberger et Watson [41] de calculer le temps de vie des états de Rydberg.

Nous donnons aussi sur ces mêmes tableaux les valeurs des amplitudes de propagation TIMF \bar{D} calculées pour diverses énergies du spectre de l'Hélium.

L'analyse des résultats des deux self-énergies η_i et énergies moyennes ε_i , montre que pour des états situés en dessous du 1^{er} seuil, (E=-1.32), (Tab.III-1), et juste avant le seuil du double continu, (E=0), (Tab.III-4), la symétrie n'est pas conservée c'est à dire qu'on trouve $\eta_1 \neq \eta_2$ et $\varepsilon_1 \neq \varepsilon_2$. Pour les autres domaines d'énergies, (Tab.III-2,3,4), où E est compris entre -1.3 et -0.05, on constate par contre que la symétrie est vérifiée.

Remarquons que pour E=-1.3, E=-1 et E=-0.75 (Tab.III-2), les parties imaginaires de \bar{e} sont très petites ce qui indique que l'on se trouve très près d'une résonance [41].

Nous pouvons noter que certains de nos résultats récapitulés dans ces quatre tableaux ont été obtenus légèrement hors couche ($\Gamma \neq 0$). Il est vrai qu'en travaillant sur couche ($\Gamma = 0$), nous nous rapprochons le plus possible du problème physique réel. Cependant, nos différentes tentatives pour aller sur couche se sont avérées vaines. Nous nous sommes heurtés à d'énormes problèmes numériques: nous avons observé des refus de convergence, particulièrement lorsque l'on se trouve près des seuils ou de certains pôles.

Afin d'éviter ces problèmes numériques, nous avons préféré nous éloigner un peu de l'axe réel en considérant une valeur non nulle, mais toujours assez faible, de la partie imaginaire Γ de l'énergie. Nous avons constaté qu'il subsiste néanmoins des problèmes. En s'éloignant, un peu plus, avec un Γ de plus en plus grand, il n'y a plus de refus de convergence mais toutes les solutions sont quasiment trouvées symétriques, ce qui est moins intéressant pour la physique du problème.

Nous pensons que des moyens de calculs plus performants nous permettront sûrement d'atteindre cette limite physique réelle. Cependant, nous estimons que la TIMF reste une bonne approximation car notre approche ne viole à aucun moment l'une de ses propriétés

importantes qui est la condition de retardation de la solution recherchée à savoir $\text{Im } \eta > 0$ et $\text{Im } \bar{D} < 0$.

Pour mieux visualiser notre affirmation concernant la brisure de symétrie des self-énergies à des énergies proches du seuil de double ionisation $E=0$ (u.a) (**Tab.III-4**) nous avons tracé sur la figure (**Fig.III-2**) les parties réelles et imaginaires de η_1 et η_2 en fonction des différentes valeurs de E et sur couche.

Sur les figures (**Fig.III-3-12**) nous donnons, en unités atomiques, des valeurs particulières de E , les parties réelles et imaginaires des orbitales TIMF φ_i en fonction de la position r ainsi que les parties réelles et imaginaires des champs moyens U_i toujours en fonction de la position.

Parmi les nombreux résultats que nous avons obtenus, nous avons choisi de présenter ces figures. Notre choix a été surtout dicté par les valeurs intéressantes de E qui sont les énergies d'état particulières dans le spectre. Nous avons pris par exemple l'état fondamental d'Hartree d'énergie $E=-3.22$. Cet état représente un pôle. L'énergie $E=-2.2$ est celle du 1^{er} état excité et l'énergie $E=-1.35$ représente l'énergie d'un état de Rydberg car cet état est très proche du 1^{er} seuil du continu à un corps. Nous avons particulièrement sélectionné les énergies d'états situés avant les seuils de continu à un corps ou à deux corps car c'est là où la physique est la plus intéressante vu l'accumulation d'états de Rydberg à un électron ou deux électrons qui apparaît juste au voisinage d'un seuil.

Les figures (**Fig.III-3, 4**) ont été tracées, respectivement, pour les énergies de deux pôles $E=-3.22$ et $E=-2.2$. Nous remarquons qu'avec une fonction de voie χ prise initialement symétrique nous obtenons une brisure de symétrie des orbitales individuelles, $\varphi_1 = -\varphi_2$, (**Fig. III-3a, 4a**), alors que la symétrie reste bien conservée pour les champs moyens individuels (**Fig. III-3b, 4b**). Cette symétrie du champ moyen était prévisible à partir du résultat des orbitales φ_i car dans l'expression de U_i apparaît le carré de l'orbitale φ_i .

L'énergie $E=-1.5$ avec laquelle ont été calculés les résultats donnés sur les figures (**Fig.III-5a, b**) correspond à un pôle là aussi. Notons cependant que cette énergie se rapproche

un peu plus du seuil du continu à un corps. Nous constatons en regardant ces figures, que nous avons toujours une brisure de symétrie des orbitales, $\varphi_1 \neq \varphi_2$, mais cette fois une différence apparaît entre U_1 et U_2 .

En choisissant une énergie, $E=-1.35$, très proche du 1^{er} seuil du continu à un corps, nous voyons sur les figures (**Fig.III-6**) les brisures de symétries des orbitales et des champs moyens individuels. Une brisure de symétrie est aussi constatée à l'énergie $E=-0.75$ (**Fig.III-7**) située entre le 1^{er} seuil et le 2^{eme} seuil. En s'éloignant des différents seuils des continus à un corps, nous constatons que la symétrie entre les orbitales φ_i et donc entre les champs moyens U_i est rétablie. Cette affirmation se vérifie sur les figures (**Fig.III-8-10**) pour les énergies $E=-0.45$, -0.36 et -0.25 respectivement.

En explorant le domaine d'énergie $-0.09 \leq E \leq 0$ où se trouvent les états de Rydberg à deux corps, nous avons trouvé plusieurs types de solutions TIMF: En se plaçant hors couche, la symétrie était parfaitement conservée (**Tab.III-4**) alors qu'en tendant sur couche avec $\Gamma = \text{Im } z = 0$ nous observons une brisure de symétrie totale. Nous donnons, à titre d'exemple, les figures (**Fig.III-11, 12**) où nous remarquons que φ_1 est différent de φ_2 ainsi U_1 qui est différent de U_2 .

L'analyse de ces dernières figures montre la décroissance exponentielle de l'orbitale correspondant à l'état lié (courbes en traits pleins) et des oscillations amorties de celle qui correspond à l'état dans le continu à un corps (courbes en pointillés). Ceci a l'air de correspondre tout à fait au phénomène bien connu de l'autoionisation: l'un des deux électrons est éjecté vers le continu, tandis que l'autre se désexcite vers un état lié plus profond.

III-4 Conclusion

Les nombreux résultats [25,26] que nous avons obtenus en explorant d'une manière détaillée le spectre de l'atome d'Hélium nous permettent d'affirmer qu'à l'approche d'un seuil de continu à un corps, l'approximation TIMF fait apparaître une brisure systématique de la symétrie de la solution variationnelle φ_i , $i=1,2$ particulièrement lorsqu'on travaille sur couche. Cette brisure surgit aussi au niveau des pôles.

Nous avons trouvé plusieurs types de solutions TIMF. En effet, nous avons obtenu avec un χ pris initialement symétrique aussi bien des solutions symétriques qu'antisymétriques tantôt sur couche et tantôt hors couche.

Nous avons constaté, à travers nos calculs, que si $\eta_1 \neq \eta_2$ alors nous pouvons déduire immédiatement qu'il y a brisure de symétrie. Par contre, si nous observons une égalité entre les self-énergies, $\eta_1 = \eta_2$, ceci n'entraîne pas automatiquement une conservation de la symétrie des orbitales φ_i .

Nous avons aussi expliqué pourquoi tous nos résultats n'ont pas été trouvés sur couche et ce en raison des problèmes numériques que nous avons rencontrés comme le refus de convergence.

Pour l'estimation des durées de vie des états de Rydberg, la TIMF nous permet de faire ces calculs mais, les résultats obtenus restent plus ou moins éloignés des résultats expérimentaux. Nous avons trouvé au moins un facteur dix entre eux.

Nous pouvons affirmer que la TIMF, à travers les résultats que nous avons obtenus pour l'étude de l'atome d'Hélium, a permis de calculer des propriétés microscopiques intéressantes des états di-excités du spectre de l'Hélium. Nous avons montré que cette méthode variationnelle peut servir de détecteur de pôles et de seuils de continus à un corps ou à deux corps. effet, des brisures de symétries des orbitales individuelles apparaissent systématiquement au niveau des pôles et au voisinage immédiat de ces seuils, particulièrement lorsqu'on travaille sur couche. Cette approche a aussi mis en évidence un phénomène très intéressant qui est celui de l'autoionisation. En effet nos calculs le montrent à travers la décroissance exponentielle d'une orbitale correspondant à un état lié et les oscillations amorties de l'autre orbitale qui correspond à un état dans le continu.

Dans une précédente étude [40] il a été montré que les orbitales individuelles TIMF sont aussi les orbitales d'Hartree des états liés correspondants

Pouvoir rattacher la TIMF à la théorie d'Hartree qui est une théorie qui a déjà fait ses preuves depuis de longues années est un bon signe quant à la validité des conclusions obtenues à partir de cette approche TIMF.

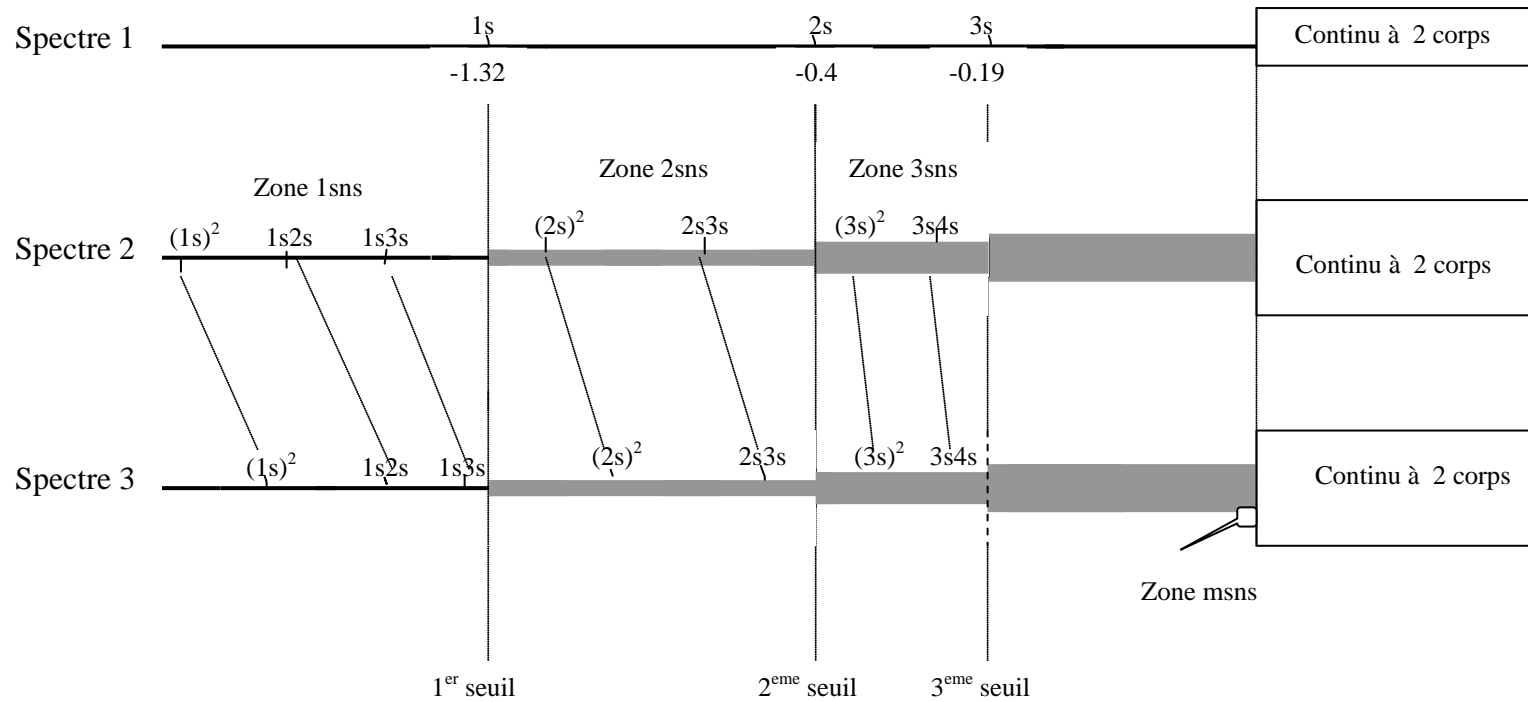


Fig.III-1: Spectre énergétique des états d'Hartree de l'atome d'Hélium

Spectre 1: Spectre de l'Hamiltonien à un corps

Spectre 2: Spectre de l'Hamiltonien à deux corps sans la répulsion e-e

Spectre 3: Spectre de l'Hamiltonien à deux corps avec la répulsion e-e

	$\Gamma=\text{Im}z$	η_1	η_2	ε_1	ε_2	\bar{e}	\bar{D}
-3.22	0.01	-2.8164 + .0105i	-2.8163 + .0105i	-.2711 - .0005i	-.2711 - .0005i	-.6748 - .0010i	-1.2120 - .0048i
-2.2	0.01	-1.5424 + .0301i	-1.5425 + .0301i	-.5118 - .0173i	-.5119 - .0172i	-1.1694 - .0373i	-2.1466 - .0209i
-1.7	0.01	-.6148 + .0245i	-1.2969 + .0051i	-.2574 + .0050i	-.9395 - .0144i	-1.3426 - .0094i	-3.0049 - .0842i
-1.5	0.001	-.2835 + .0291i	-1.0988 + .0106i	-.2463 - .0039i	-1.0617 + .0358i	-1.4629 + .0352i	-.9712 - .2230i
-1.4	0.01	-.5000 + .0262i	-1.0083 + .0092i	-.2445 - 0.0014i	-.7527 + .0340i	-1.1444 + .0348i	-2.2403 - .0878i
-1.35	0.00	-.6523 + .0401i	-.9423 + .0127i	-.2676 + .0087i	-.5576 + .0361i	-.9653 + .0488i	-2.6162 - .0030i
-1.32	0.01	-.2550 + .5655i	-1.0100 + .1162i	-.1075 - .1374i	-.8625 + .5443i	-1.1725 + .4380i	-2.9751 - 1.2291i

Tab.III-1: Propriétés (en u.a) des états d'Hartree situés entre l'état fondamental $(1s)^2$

E=Rez	Γ =Imz	η_1	η_2	ε_1	ε_2	\bar{e}	\bar{D}
-1.3	0.01	- .8108 + .0046i	- .8078 + .0046i	- .3575 + .0046i	- .3546 + .0045i	- .8467 + .0100i	-2.9411 - .0649i
-1	0.01	- .6059 + .0090i	- .6059 + .0090i	- .2761 + .0007i	- .2761 + .0007i	- .6702 + .0017i	-6.1159 - .1855i
-0.75	0.001	- .3500 + .0011i	- .3500 + .0011i	- .2863 - .0001i	- .2863 - .0001i	- .6863 - .0002i	27.0081 - .4241i
-0.55	0.05	- .1077 + 0.1446i	-0.1062 + 0.1415i	-0.2928 - 0.0666i	-0.2914 - 0.0697i	-0.7352 - 0.1612i	+5.0449 - 10.911i
-0.5	0.05	-0.0801 + .1506i	- .0798 + .1504i	- .2271 - .0672i	- .2267 - .0675i	- .6470 - .1678i	+5.4454 - 11.573i
-0.45	0.05	- .0520 + .1474i	- .0518 + .0569i	- .2080 - .0569i	- .2077 - .0569i	- .6060 - .1542i	6.4047 - 9.6520i
-0.4	0.003	- .0401 + .1106i	- .0406 + .1102i	- .1787 - .0603i	- .1792 - .0606i	- .5386 - .1678i	+9.0222 - 7.4902i

Tab.III-2: Propriétés (en u.a) des états d’Hartree situés e

$E = \text{Re } z$	$\Gamma = \text{Im } z$	η_1	η_2	ε_1	ε_2	\bar{e}	\bar{D}
-0.36	0.00	- .0226 + .0911i	- .0227 + .0912i	- .1609 - .0504i	- .1610 - .0503i	- .4983 - .1414i	+8.9517 -5.3659i
-0.29	0.00	+ .1628 + .4053i	+ .1646 + .4041i	- .3661 - .2238i	- .3642 - .2251i	- .8188 - .4792i	+3.1919 -5.5351i
-0.25	0.00	+ .0394 + .0393i	+ .0395 + .0393i	- .1028 - .0234i	- .1028 - .0234i	- .3922 - .6227i	+6.2300 -1.1767i
-0.20	0.15	+ .2077 + .4293i	+ .2079 + .4309i	- .3221 - .2563i	- .3219 - .2548i	- .7299 - .5356i	+3.4050 -4.9134i
-0.19	0.15	+ .2132 + .4320i	+ .2116 + .4319i	- .3160 - .2580i	- .3176 - .2580i	- .7192 - .5399i	+3.4261 -4.8479i
-0.15	0.1	+ .2420 + .4169i	+ .2378 + .4140i	- .3056 - .2915i	- .3098 - .2944i	- .6976 - .6084i	+3.8239 -4.6740i
-0.12	0.09	- .2530 + .4120i	+ .2587 + .4135i	+ .2971 - .3025i	- .2914 - .3009i	- .6701 - .6245i	+3.9312 -4.4921i
-0.11	0.06	+ .2618 + .4039i	+ .2626 + .3971i	- .2927 - .3165i	- .2919 - .3234i	- .6645 - .6604i	+4.1393 -4.4626i

Tab.III-3: Propriétés (en u.a) des états d'Hartree situés entre le 2^{ème} seuil 2s ($E = -0.4$ u.a) et 1

$E=\text{Re } z$	$\Gamma =\text{Im } z$	η_1	η_2	ε_1	ε_2	\bar{e}	\bar{D}
-0.09	0.1	+ .2718 + .4212i	+ .2667 + .4199i	- .2748 - .3004i	- .2799 - .3017i	- .6366 - .6216i	+3.9044 -4.2882i
-0.07	0.1	+ .2768 + .4224i	+ .2816+ .4237i	- .2699 - .3052i	- .2651 - .3039i	- .6167 - .6276i	+3.9268-4.1632i
-0.05	0.1	+ .2917 + .4225i	+ .2874 + .4252i	- .2558 - .3076i	- .2601 - .3049i	- .5976 - .6301i	+3.9469 -4.0400i
-0.03	0.002	+ .2762+ .1350i	- .2627 +1.2151i	+ .2735 - 1.2151i	- .2653 - .1376i	- .0326 - 1.3300i	+4.7333 -4.2676i
-0.02	0.00	- .2759 + .7891i	+ .3156 + .1173i	- .2675 - .1400i	+ .3240 - .8118i	- .0116 - .9291i	+4.4927 -3.9443i
-0.015	0.00	+ .3220 + .1207i	- .2380 + .7768i	+ .2918 - .7970i	- .2682 - .1408i	- .0452 - .9177i	+4.5605 -3.8291i
-0.01	0.00	+ .3504 + .1373i	- .1092 + .6772i	+ .1823 - .6880i	- .2773 - .1482i	- .1091 - .8254i	+4.5605 -3.9090i
-0.005	0.00	+ .3419 + .1320i	- .1422 + .7043i	+ .2100 -. 7175i	- .2742 - .1453i	- .1369 - .8496i	+4.5605-3.8536i
-0.00	0.00	+ .3526 + .1387i	- .1018 + .6688i	+ .1763 - .6791i	- .2780 - .1490i	- .1762 - .8179i	+4.5639-3.8228i

Tab.III-4: Propriétés (en u.a) des états situés juste avant le seuil de double ionisation (continu à 2 corps)

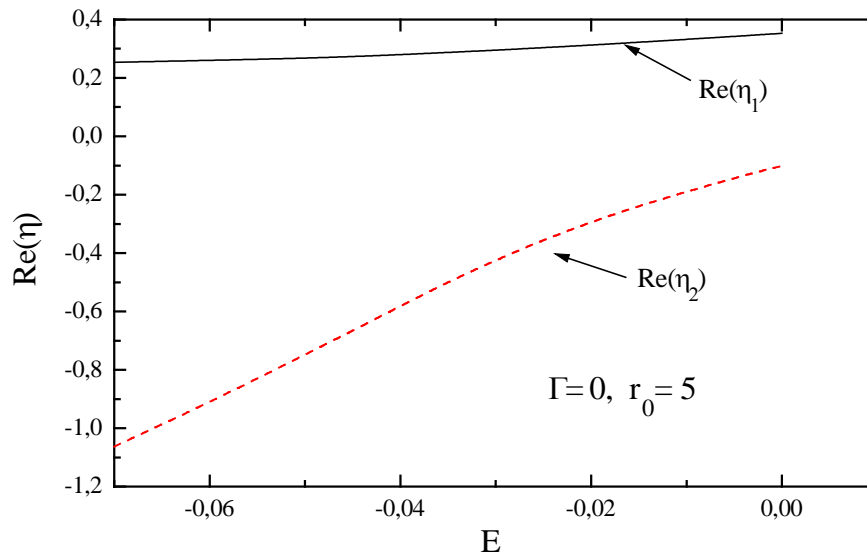


Fig.III-2a : Les parties réelles des self-énergies TIMF non symétriques et sur couche

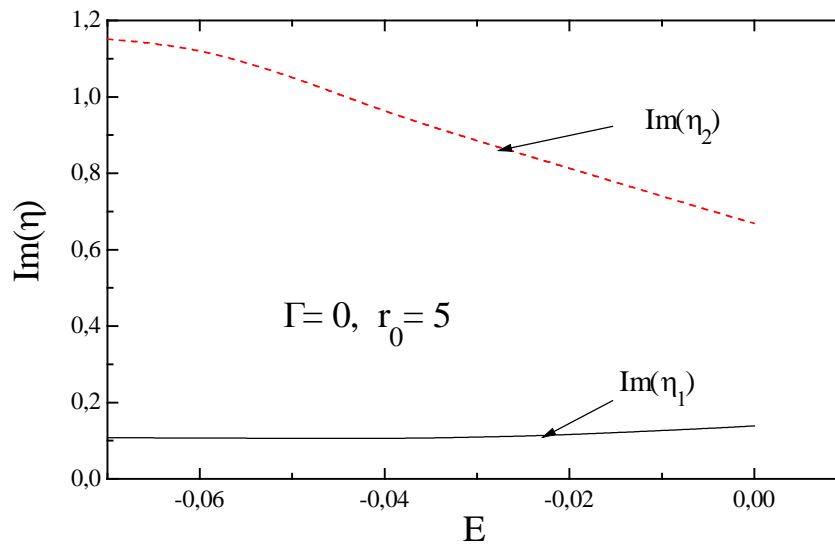
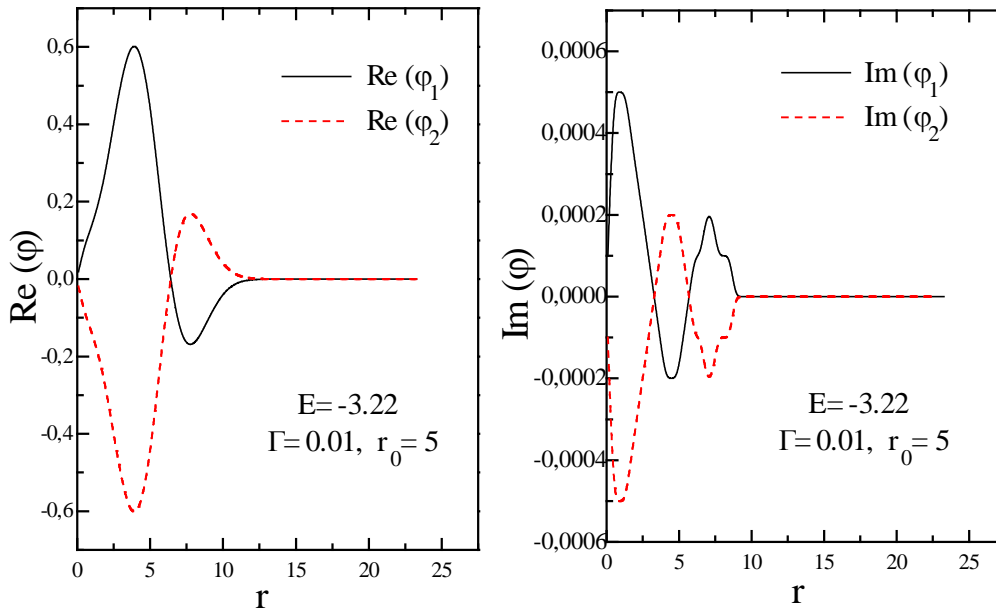


Fig.III-2b : Les parties imaginaires des self-énergies TIMF non symétriques et sur couche



FigIII-3a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétriques à l'énergie de l'état fondamental d'Hartree $(1s)^2$.

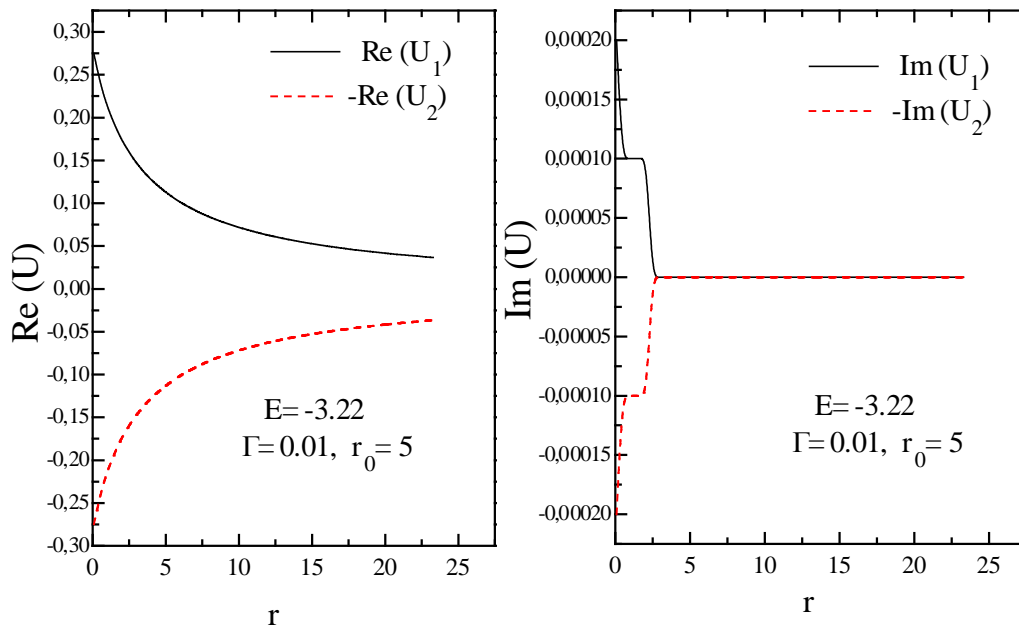


Fig.III-3b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens symétriques des deux électrons à l'énergie de l'état fondamental d'Hartree $(1s)^2$.

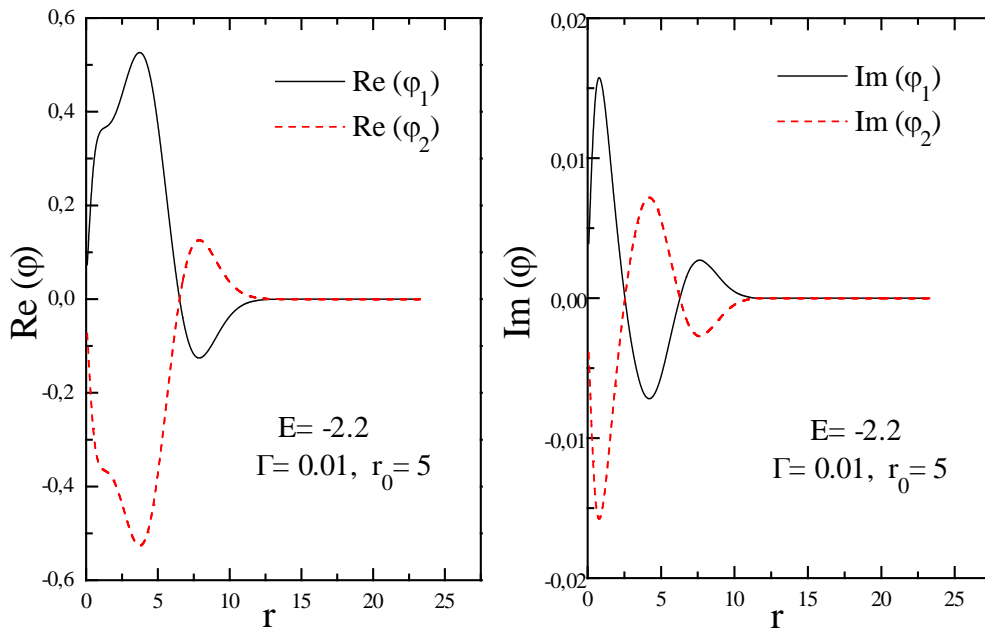


Fig.III-4a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétrique à l'énergie de 1^{er} état excité d'Hartree 1s2s.

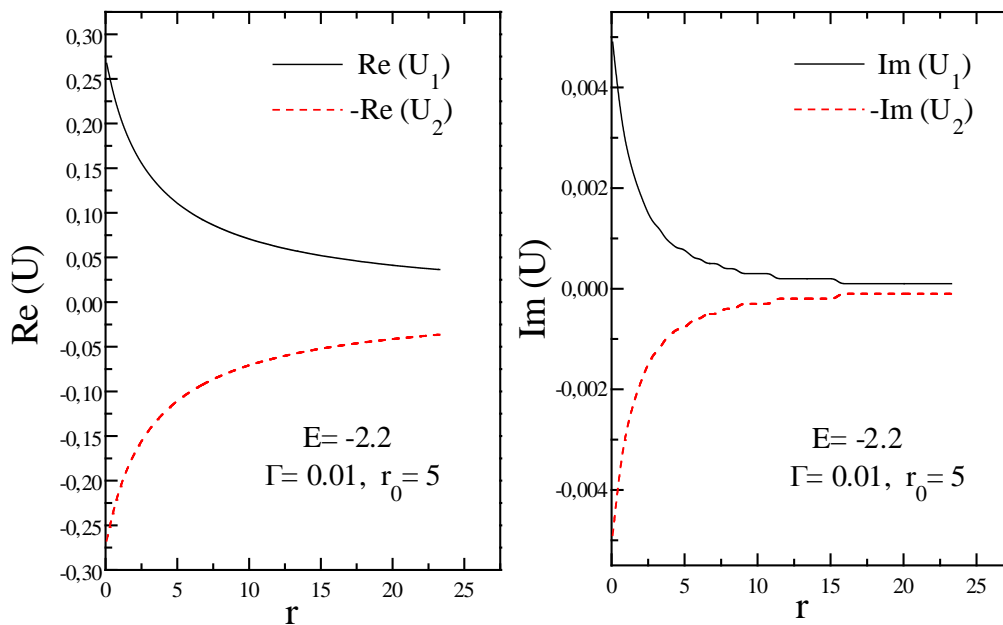


Fig.III-4b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens symétriques des deux électrons à l'énergie de 1^{er} état excité d'Hartree 1s2s.

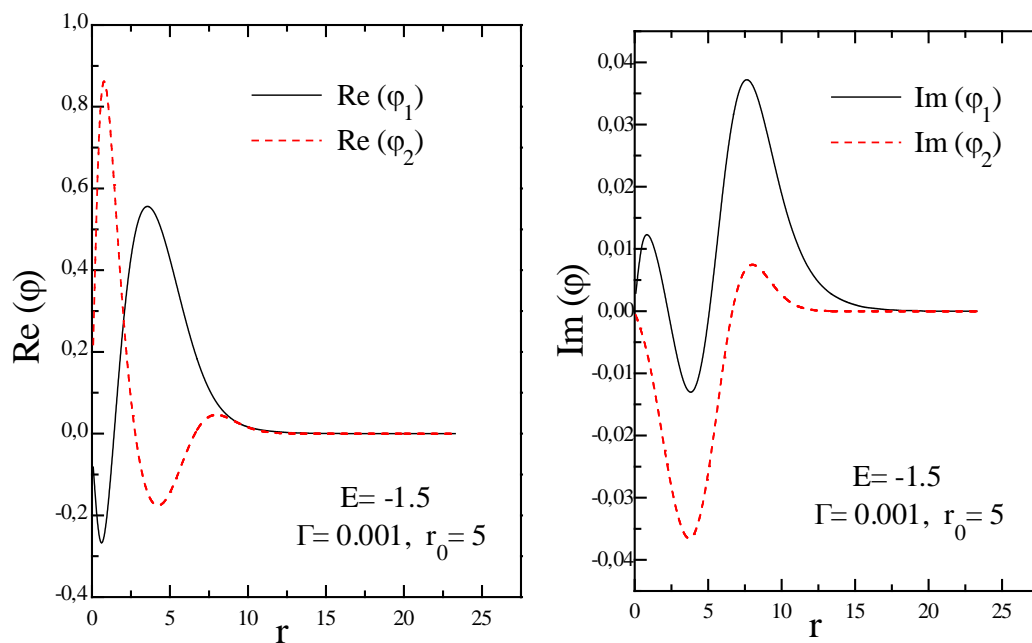


Fig.III-5a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétriques à l'énergie d'Hartree $E = -1.5$ u.a.

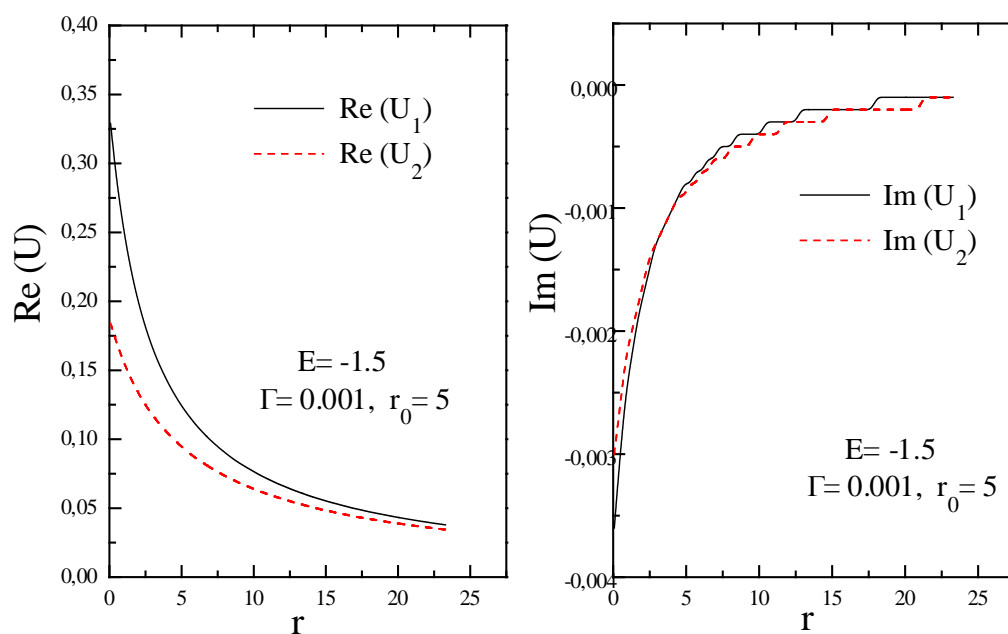


Fig.III-5b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens non symétriques des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E = -1.5$ u.a.

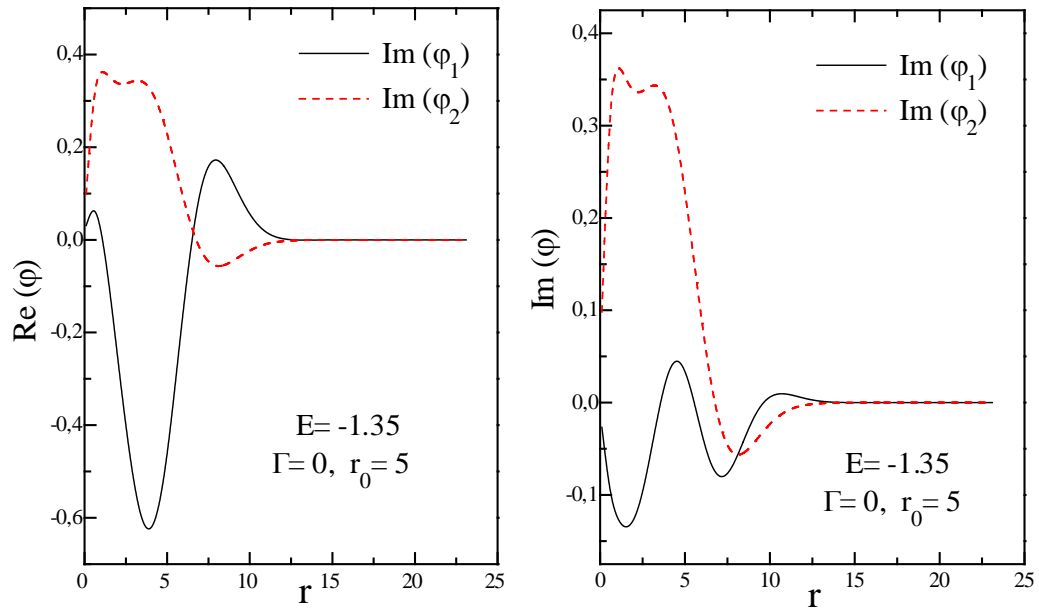


Fig.III-6a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétriques et sur couche à l'énergie d'Hartree $E = -1.35$ u.a.

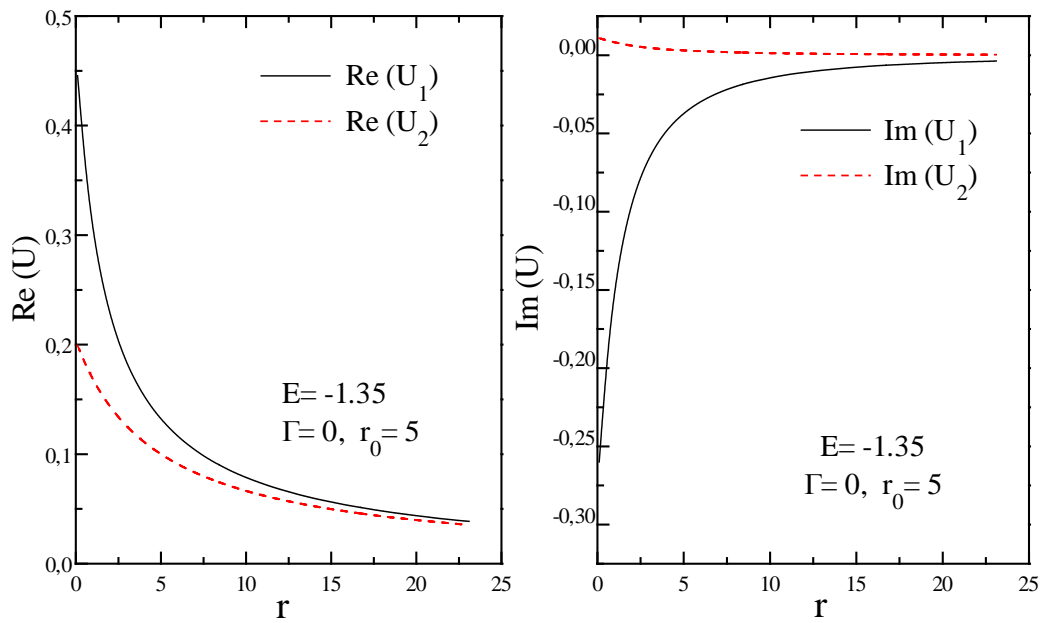


Fig.III-6b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens non symétriques et sur couche des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E = -1.35$ u.a

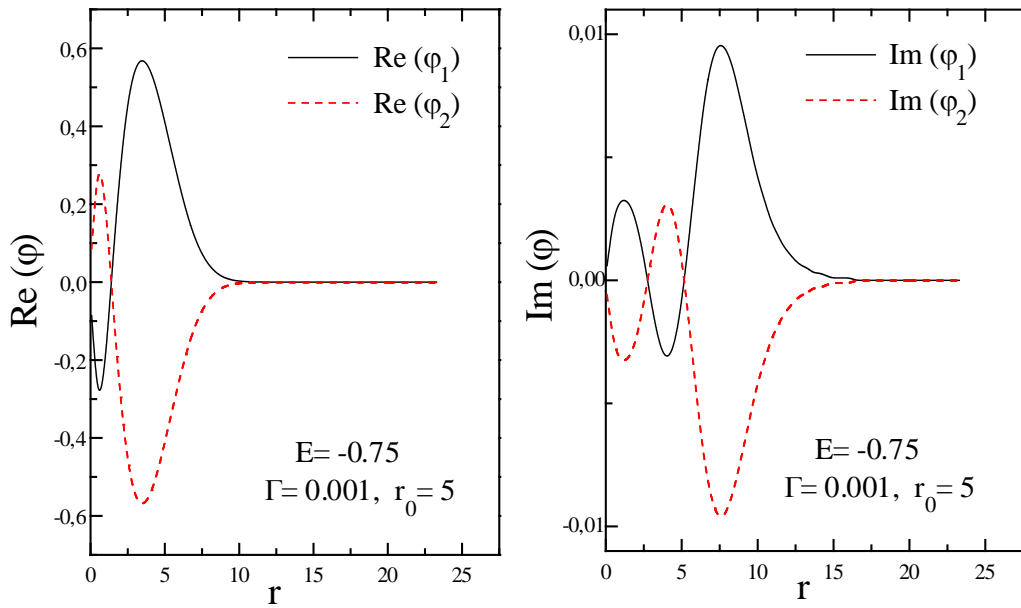


Fig.III-7a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétriques à l'énergie d'Hartree $E=-0.75$ u.a.

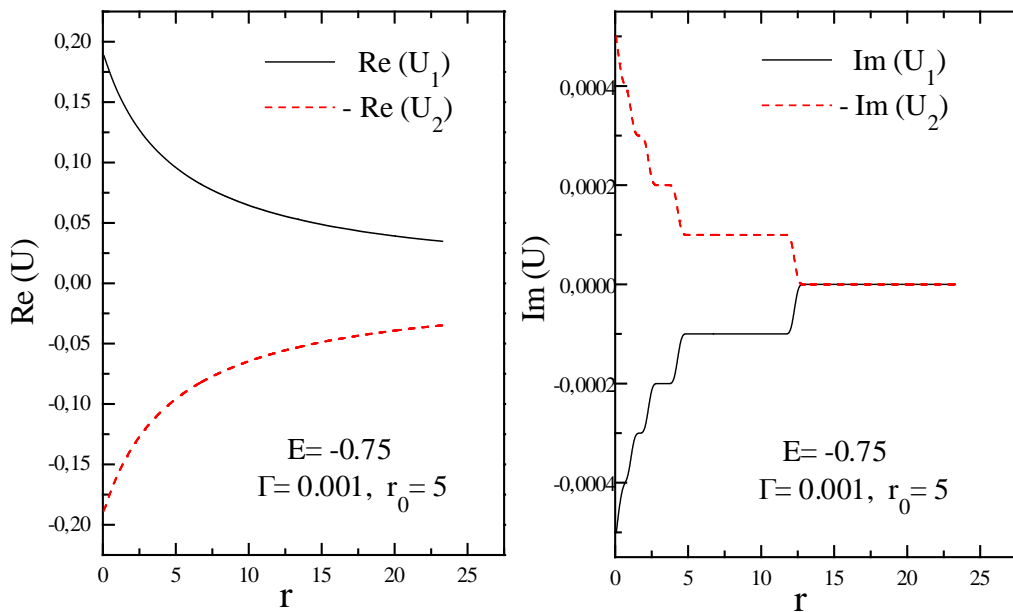


Fig.III-7b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens symétriques des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E=-0.75$ u.a .

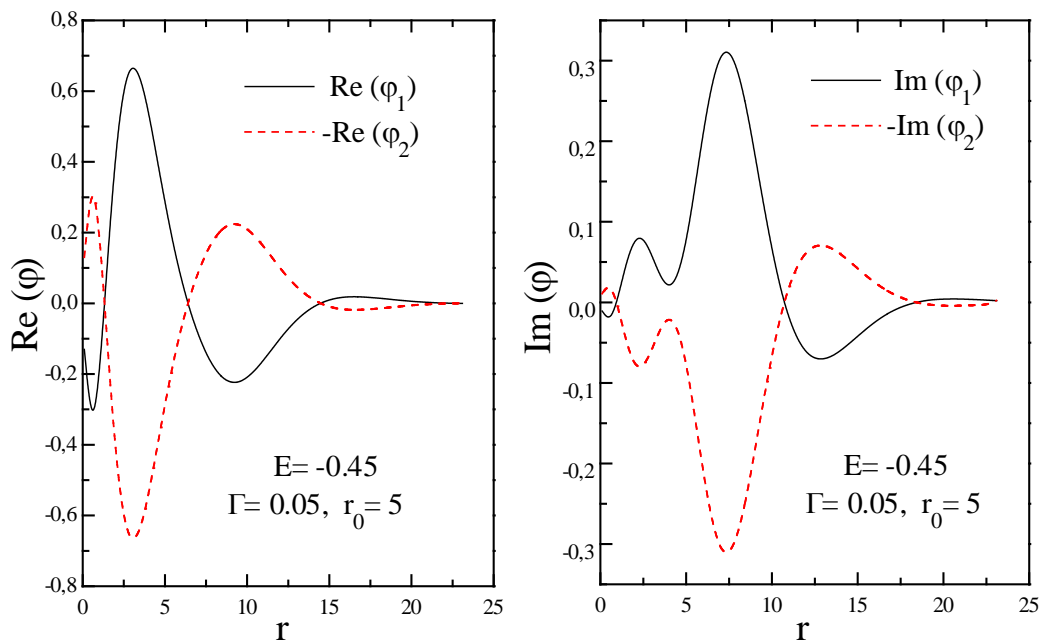


Fig.III-8a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF symétriques à l'énergie d'Hartree $E = -0.45$ u.a.

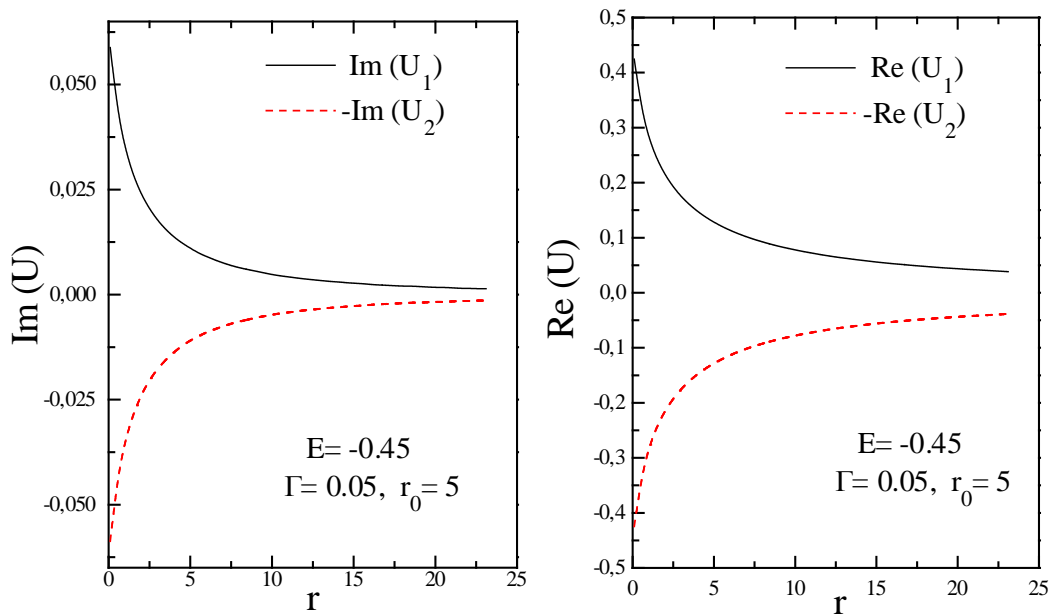


Fig.III-8b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens symétriques des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E = -0.45$ u.a.

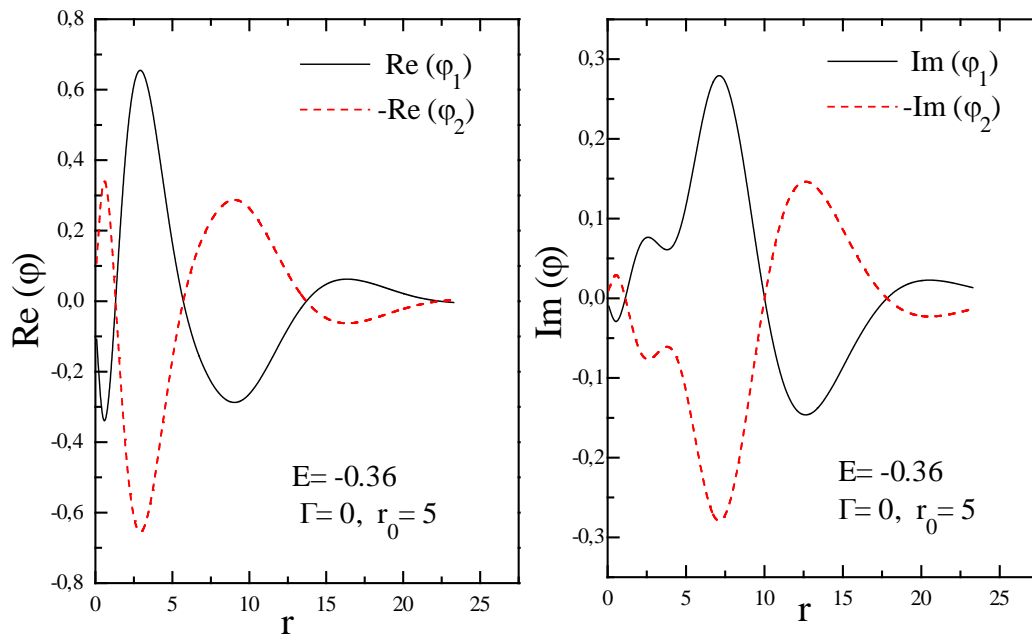


Fig.III-9a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF symétriques et sur couche à l'énergie d'Hartree $E=-0.36$ u.a.

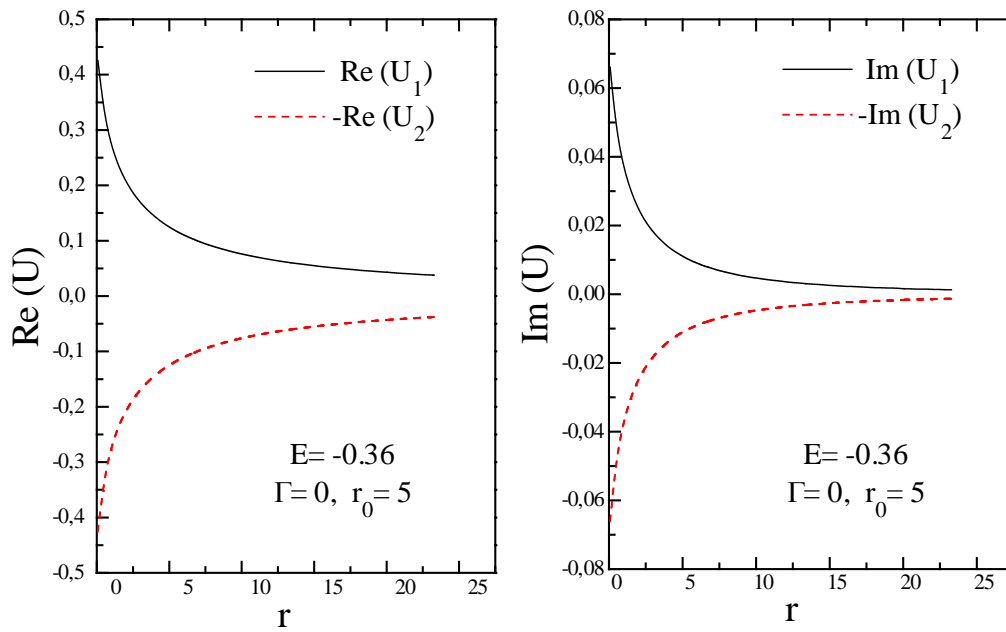


Fig.III-9b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens symétriques des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E=-0.36$ u.a .

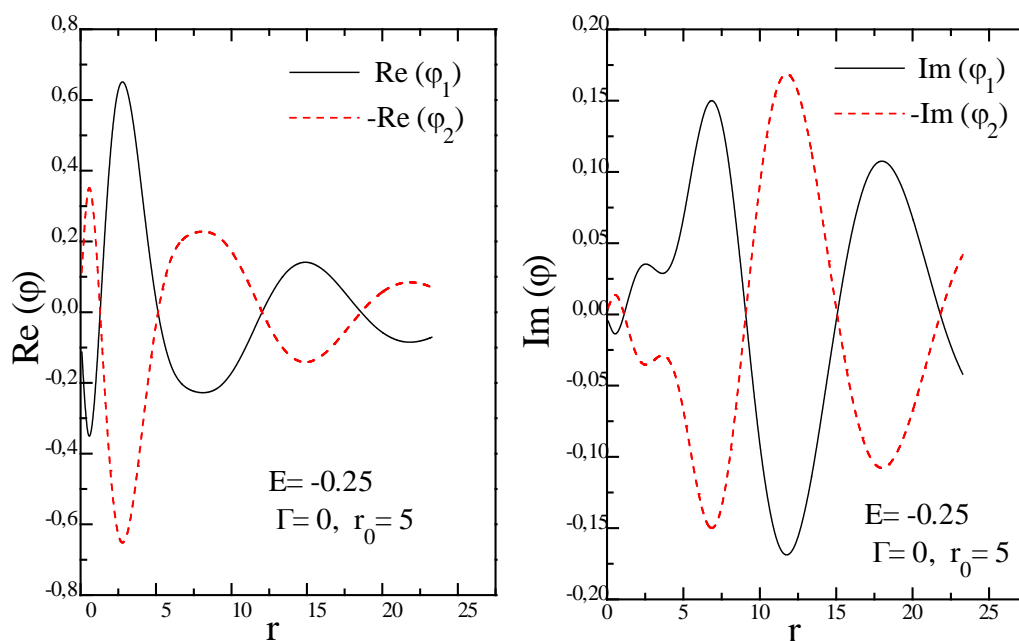


Fig.III-10a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF symétriques et sur couche à l'énergie d'Hartree $E = -0.25$ u.a.

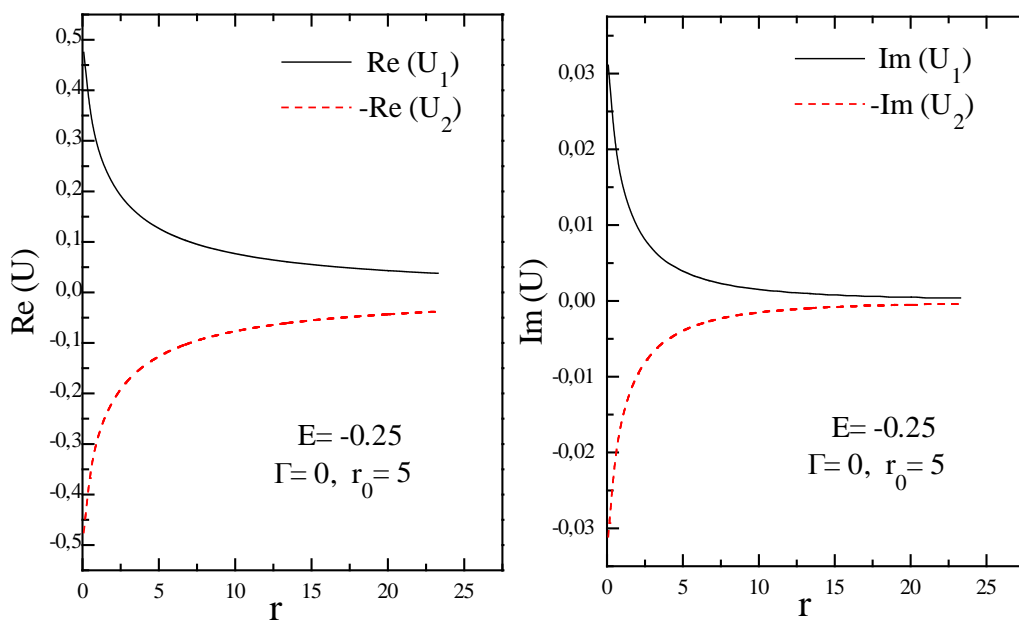


Fig.III-10b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens symétriques et sur couche des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E = -0.25$ u.a .

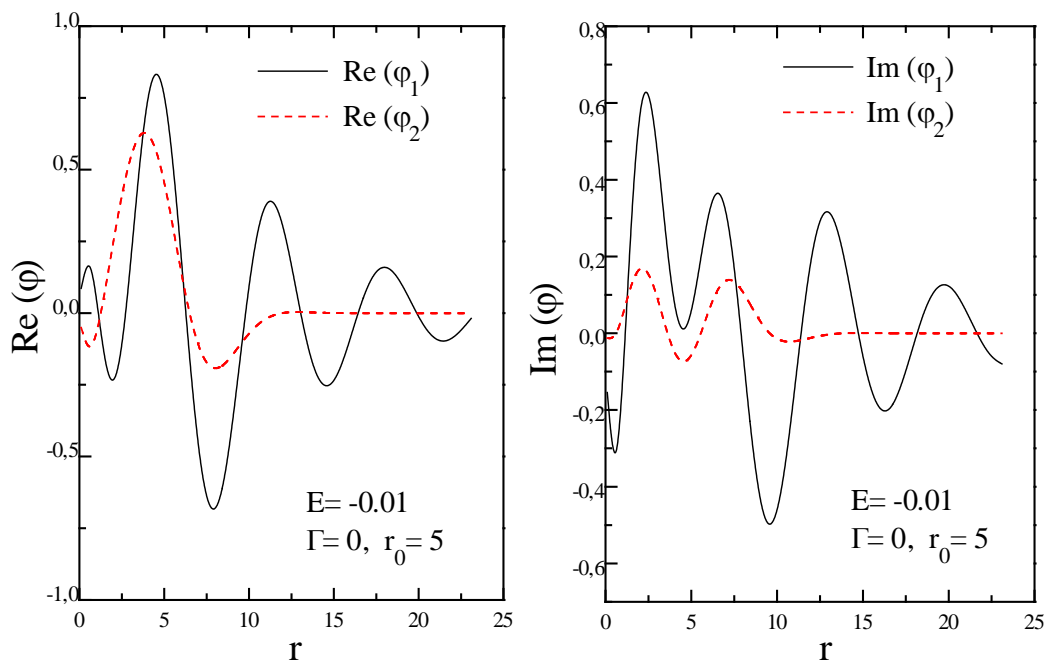


Fig.III-11a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétriques et sur couche à l'énergie d'Hartree $E = -0.01$ u.a.

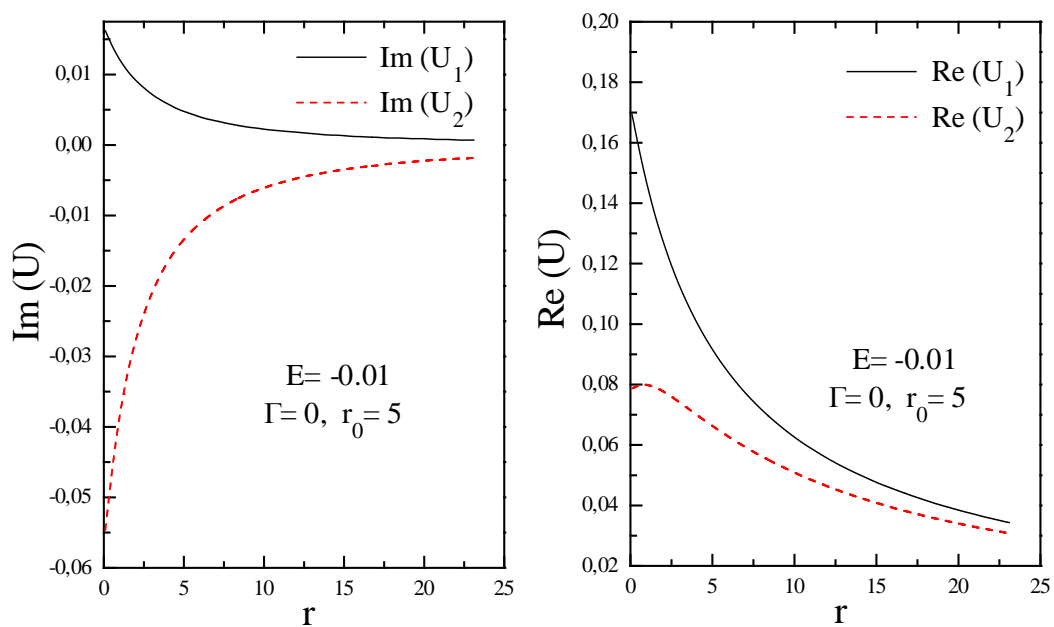


Fig.III-11b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens non symétriques et sur couche des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E = -0.01$ u.a

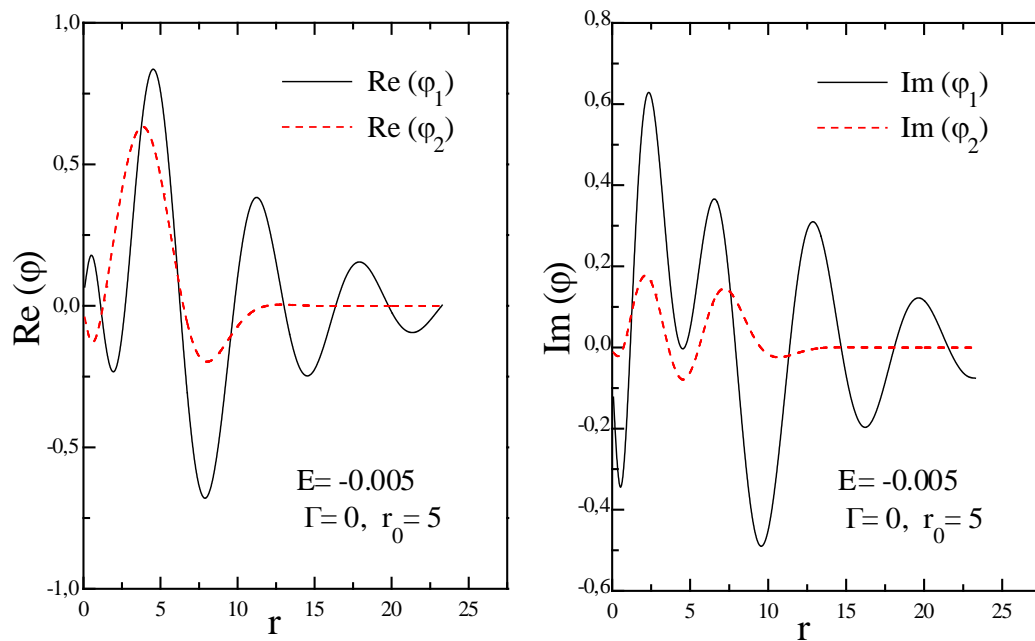


Fig.III-12a : Les parties réelles et imaginaires des deux orbitales TIMF non symétriques et sur couche à l'énergie d'Hartree $E=-0.005$ u.a.

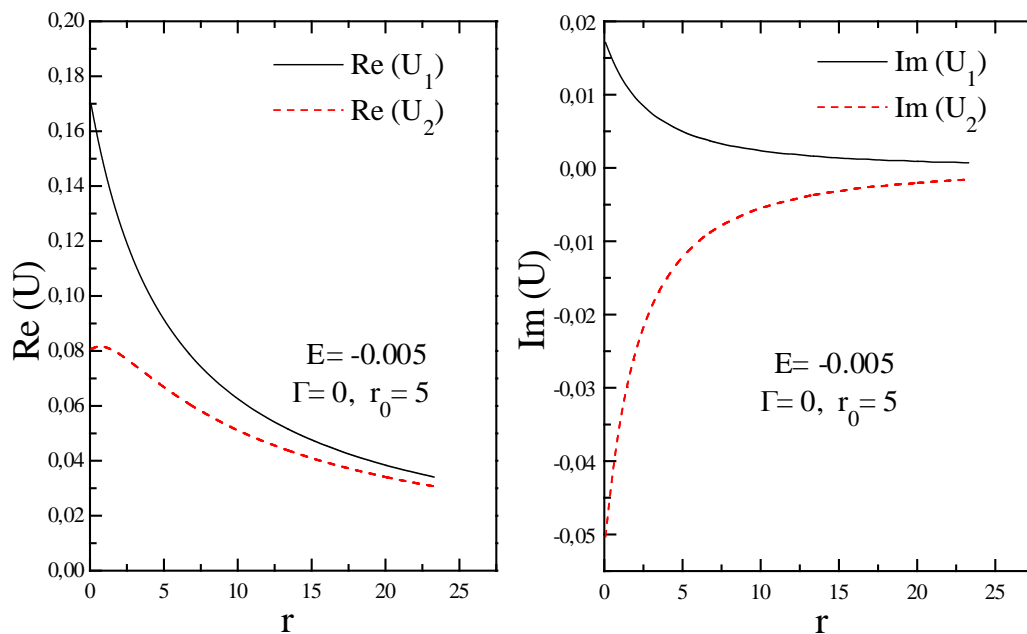


Fig.III-12b : Les parties réelles et imaginaires des champs moyens non symétriques et sur couche des deux électrons à l'énergie d'Hartree $E=-0.005$ u.a .

CONCLUSION

Conclusion

Ce travail que nous avons développé a porté sur l'utilisation de la théorie du champ moyen indépendant du temps (TIMF) pour l'étude de problèmes de collision avec des forces à longue portée.

Cette théorie est fondamentalement basée sur un principe variationnel, une énergie du système complexe, des factorisations des fonctions de voies et d'essai et une représentation des états de voies par des paquets d'ondes indépendants du temps.

Cette approche TIMF satisfait, tout comme la théorie d'Hartree, à la condition de réduction de dimension et remplace l'inversion de l'opérateur à N corps par N inversions à un corps mais un paradoxe apparaît : La TIMF qui est une théorie non linéaire approxime un problème initialement linéaire. Cette non linéarité est due à la structure de couplage des 2N inversions réduites. Malgré ce paradoxe, plusieurs tests numériques ont cependant montré la validité de cette approche.

Toujours dans le but de confirmer cette validité et d'étendre le champ d'application de la TIMF, nous l'avons appliquée à l'étude de deux modèles coulombiens. L'un est un problème soluble à deux corps et l'autre est un système à trois corps représenté par l'atome d'Hélium (l'ion doublement chargé et ses deux électrons).

De manière générale, la résolution numérique des équations variationnelles déduites à l'aide de la TIMF permet de calculer les orbitales individuelles et donc les amplitudes de propagation. A la fin de notre calcul, nous trouvons plusieurs solutions et il s'agit à chaque fois de choisir la bonne solution physique c'est à dire la plus stable numériquement et qui vérifie surtout les conditions imposées par notre approche tel que le critère de retardation de la solution.

L'étude de notre premier modèle coulombien soluble à deux corps nous a permis de faire un calcul analytique et une analyse comparative entre les résultats que nous avons obtenus par la TIMF et ceux que nous avons calculé par la méthode exacte.

Nous avons remarqué que la TIMF reproduit très fidèlement les résultats exacts et ce pour une large gamme d'énergies et pour différentes intensités du potentiel.

Nous avons mis en évidence la stabilité de la forme des orbitales individuelles variationnelles ainsi que celle du champ moyen pour diverses valeurs de l'énergie et largeurs du paquet d'ondes choisi.

Nous avons aussi montré que nos calculs vérifient l'une des propriétés importantes de la TIMF qui est la décroissance exponentielle des orbitales individuelles pour des grandes valeurs de la position. Cette décroissance est due aux self-énergies individuelles qui restent complexes même quand l'énergie totale du système devient réelle.

Ce modèle TIMF a permis la mise en évidence des simplifications physiques utiles comme par exemple la dominance du monopôle du champ moyen et de l'insensibilité de ce dernier à la variation de l'énergie au delà d'une certaine valeur de la position.

Dans le second modèle semi-réaliste que nous avons considéré, nous avons constaté, à partir de nos différents résultats, que la TIMF permet de calculer des propriétés microscopiques intéressantes des états di-excités du spectre de l'Hélium.

Nous avons montré que cette méthode variationnelle peut servir de détecteur de pôles et de seuils de continus à un corps ou à deux corps. En effet, des brisures de symétries des orbitales individuelles apparaissent systématiquement au voisinage immédiat de ces pôles et seuils et particulièrement lorsqu'on travaille sur couche.

Cette approche TIMF montre aussi un phénomène très intéressant qui est celui de l'autoionisation. Nos calculs le visualisent à travers la décroissance exponentielle d'une orbitale correspondant à un état lié et les oscillations amorties de l'autre orbitale qui correspond à un état dans le continu.

Nous avons aussi expliqué pourquoi tous nos résultats n'ont pas été trouvés sur couche et ce en raison des problèmes numériques que nous avons rencontrés comme le refus de convergence.

Nous pensons que des moyens de calcul plus performants nous permettront sûrement d'atteindre cette limite physique réelle. Cependant, nous estimons que la TIMF reste une bonne approximation car notre approche ne viole à aucun moment l'une de ses propriétés importantes qui est la condition de retardation de la solution recherchée.

Nous estimons que pouvoir rattacher notre approche variationnelle à la théorie d'Hartree qui est une théorie qui a déjà fait ses preuves depuis de longues années est un bon signe quant à la validité des conclusions obtenues à partir de cette approche TIMF.

Nous pouvons conclure en disant, que cette théorie du champ moyen indépendant du temps se présente comme un bon outil pour la description des problèmes de collision assez complexes.

Il serait très intéressant d'affiner cette théorie en tenant compte, dans son formalisme, des corrélations que nous avons négligées jusqu'à présent et de faire un choix plus réaliste des fonctions de voies pour le calcul numérique..

Pour cela, il faudra disposer de moyens de calcul plus performants qui permettront à travers les résultats obtenus d'étendre un peu plus le champ d'application de la TIMF et pouvoir aussi l'introduire pour la résolution des équations de Faddeev qui restent un problème très ardu et qui représentent un des sujets d'actualité.

Références

- [1] W.Tobocman: Phys.Rev C9, 2466 (1974), 12, 741 (1975)
- [2] D.J.Kouri, F.S.Levin: Nucl.Phys A253, 398 (1975)
- [3] A.K.Messiah: Mécanique Quantique T2, (North-Holland, Amsterdam) (1962)
- [4] B.H.Wildenthal, J.B.McGrory, T.T.S.Kuo: Phys.Rev. C4, 1266 (1971)
- [5] B.H.Wildenthal, J.B.McGrory, E.C.Halbert: Phys.Rev. C4, 1708 (1971)
- [6] J.B.McGrory, B.H.Wildenthal: Phys.Rev. C7, 974 (1973)
- [7] P.Ring, P.Schuck: The Nuclear Many-Body Problem, Springer-Verlag, Berlin (1980)
- [8] B.G. Giraud, M.A. Nagarajan: J.Phys. G 4, 1739 (1978)
- [9] B.G. Giraud, M.A. Nagarajan: J.Physique (paris).41, 477 (1980)
- [10] M.A. Nagarajan, B.G. Giraud: Phys.Rev. C 27, 232 (1983)
- [11] B.G. Giraud, M.A. Nagarajan: Phys.Rev. C 28, 1918 (1983)
- [12] B.G.Giraud, M.A. Nagarajan, I.J. Thompson: Ann.of Phys. 152, 475(1984)
- [13] B.G. Giraud: Nucl.Phys A428, 285 (1984)
- [14] P.Amiot, B.G.Giraud, M.A.Nagarajan: Phys.Rev.C29, 2374 (1984)
- [15] B.G. Giraud, M.A. Nagarajan, A. Weiguny: Phys. Rev. C35, 55 (1987)
- [16] F. Mekideche, B.G. Giraud: J.Math.Phys 34, 29 (1993)
- [17] Y. Abe, B.G. Giraud: Nucl.Phys. A 440, 311 (1985)
- [18] B.G. Giraud: Recent Progress in Many-Body Theories, Y. Avishai, New York, (1990)
- [19] B.G.Giraud: Physica D 19, 112 (1986)
- [20] B.G.Giraud, S.Kessal, L.C.Liu: Phys.Rev. C 35, 1252 (1987)
- [21] S.Kessal, B.G.Giraud: Phys.Rev. C35, 1252 (1987)
- [22] B.G.Giraud, S.Kessal, A.Weiguny: J.Math. 34, 29 (1993)
- [23] F.Mekideche, Thèse d'état, USTHB (1994)
- [24] R.Yekken, F.Mekideche: Conférence Nationale sur les Sciences des Matériaux et leurs Applications (CNSMA), Oran, Algérie (1999)

- [25] R.Yekken, F.Mekideche: Premier Séminaire National de Physique Nucléaire et ses Applications, Constantine, (SNPNA),Algérie (2000)
- [26] R.Yekken, F.Mekideche: Congrès National de la Physique et ses Applications (CNPA), Alger, Algérie (2000)
- [27] J.Macek: J.Phys.B1, 831(1968)
- [28] O.Sinanoglu, D.R.Herrick: J.Chem.Phys.62, 886 (1975)
- [29] J.M.Feagin, J.S.Briggs: Phys.Rev.Lett.57, 984 (1986)
- [30] E.de Prunelé: Phys.Rev A45, 2757 (1992).
- [31] U.Eichmann, V.Lange, W.Sandner: Phys.Rev.Lett.64, 274 (1990)
- [32] K.Richter, D.Wintgen: J.Phys.B23, L197 (1990), B24, L565 (1991)
- [33] G.S.Ezra, K.Richter, G.Tanner, D.Wintgen: J.Phys.B24, L413 (1991)
- [34] B.G.Giraud, Y.Hahn, F.Mekideche, J.Pascale: Z.Phys. D27, 295 (1993).
- [35] A.Temkin, Y.Hahn: Phys.Rev.A9, 708 (1974)
- [36] R.Peterkop, L.Rabik: J.Phys. B5, 1823 (1972)
- [37] E.de Prunelé: Phys.Rev.A44, 90 (1991)
- [38] C.Cohen.Tannoudji, B.Diu, F.Laloe: Mécanique Quantique T2, Dunod, Paris, (1986)
- [39] A.Nikiforov, V.Ouvarov: Fonctions Spéciales de la Physique Mathématique, Editions Mir.Moscou (1983)
- [40] B.G.Giraud: Prog. Of Theor. Physics, 88, 1147 (1992).
- [41].M.L.Goldberger, K.M.Watson: Collision Theory, Chap. 8, New York, Wiley (1964).