



National Library of Canada
Collections Development Branch

Canadian Theses on
Microfiche Service

Bibliothèque nationale du Canada
Direction du développement des collections

Service des thèses canadiennes
sur microfiche

NOTICE

The quality of this microfiche is heavily dependent upon the quality of the original thesis submitted for microfilming. Every effort has been made to ensure the highest quality of reproduction possible.

If pages are missing, contact the university which granted the degree.

Some pages may have indistinct print especially if the original pages were typed with a poor typewriter ribbon or if the university sent us a poor photocopy.

Previously copyrighted materials (journal articles, published tests, etc.) are not filmed.

Reproduction in full or in part of this film is governed by the Canadian Copyright Act, R.S.C. 1970, c. C-30. Please read the authorization forms which accompany this thesis.

**THIS DISSERTATION
HAS BEEN MICROFILMED
EXACTLY AS RECEIVED**

AVIS

La qualité de cette microfiche dépend grandement de la qualité de la thèse soumise au microfilmage. Nous avons tout fait pour assurer une qualité supérieure de reproduction.

S'il manque des pages, veuillez communiquer avec l'université qui a conféré le grade.

La qualité d'impression de certaines pages peut laisser à désirer, surtout si les pages originales ont été dactylographiées à l'aide d'un ruban usé ou si l'université nous a fait parvenir une photocopie de mauvaise qualité.

Les documents qui font déjà l'objet d'un droit d'auteur (articles de revue, examens publiés, etc.) ne sont pas microfilmés.

La reproduction, même partielle, de ce microfilm est soumise à la Loi canadienne sur le droit d'auteur, SRC 1970, c. C-30. Veuillez prendre connaissance des formules d'autorisation qui accompagnent cette thèse.

**LA THÈSE A ÉTÉ
MICROFILMÉE TELLE QUE
NOUS L'AVONS REÇUE**

COLLISIONS ATOMIQUES SIMPLES AUX ENERGIES INTERMEDIAIRES :

QUELQUES SECTIONS EFFICACES TOTALES DE CAPTURE σ_{21}

par

André GUILBAUD

Thèse présentée à l'Ecole des études supérieures
de l'Université d'Ottawa en vue de l'obtention
du Ph. D en Physique

Université d'Ottawa

Ottawa, Canada

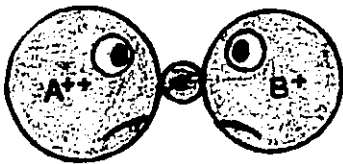
1978

© A. Guilbaud, Ottawa, Canada, 1978

Toute découverte de la science pure est subversive en puissance; toute science doit parfois être traitée comme un ennemi possible. Oui, même la science.

Aldous HUXLEY

Le Meilleur Des Mondes.



Collisions de Capture

FOREWORD

Each chapter of this thesis, written in French, is preceded by an English summary which states the main points developed in the chapter.

In addition, the introduction and the conclusion are written in both languages.

ABSTRACT

Measurements of the σ_{21} cross sections for N^{++} , Ne^{++} and Ar^{++} ions in targets of noble gases have been made with an absolute accuracy of 10 % in the energy range between 50 keV and 200 keV. This good accuracy was attainable because of our experimental facility which has a good geometry and high resolution, and in addition a correction for the target thickness was made.

These measurements in the intermediate energy region are useful; because of a lack of suitable theoretical models to explain the experiments this region was largely ignored by experimentalists. As our experimental apparatus restricted us to this region we performed the experiments for the capture cross section which are large because this is the energy region of the adiabatic maximum.

To analyse our data, we use the two state model with non-crossing. In the form given by Rapp and Francis, it is only able to account for the energy variation of the cross sections in all targets when the states of the product ions which have unsuitable atomic structure are excluded. However the magnitude of the cross sections from the theory is smaller than the experiments, the discrepancy being worse for the heavier targets.

A good fit is obtained in the magnitude of the theoretical cross sections by adequately scaling down the input parameters by factors which depend on the radial quantum number of the transferred electron in order to compensate for the inadequacy of the 1s electron orbital.

With this improved model, we have deduced some interesting quantities of the collision process and predicted the parameters of composite cross sections.

TABLE DES MATIERES

	Page
FOREWORD	i
ABSTRACT	ii
TABLE DES MATIERES	iii
LISTE DES TABLEAUX	viii
LISTE DES FIGURES	ix
REMERCIEMENTS	xii
INTRODUCTION	1
INTRODUCTION	5
CHAPITRE 1 FACILITES EXPERIMENTALES	8
1.1 VUE GENERALE DU DISPOSITIF EXPERIMENTAL	9
1.2 COMPOSANTS DU DISPOSITIF EXPERIMENTAL	11
1.2.1 L'accélérateur	11
1.2.2 Eléments à effet magnétique	13
1.2.3 Chambre des collisions et fentes	14
1.2.4 Analyseur électrostatique	15
1.2.5 Détecteur et électronique	17
1.2.6 Système de pompage	18
1.3 CARACTERISTIQUES DU SYSTEME	19

	Page
CHAPITRE 2 TECHNIQUES EXPERIMENTALES ET TRAITEMENT MATHEMATIQUE	22
2.1 TECHNIQUES EXPERIMENTALES	23
2.1.1 Mesures préliminaires	23
2.1.2 Mesures proprement dites	27
2.1.3 Détection des métastables	28
2.2 TRAITEMENT MATHEMATIQUE DES DONNEES EXPERIMENTALES	29
2.2.1 Corrections pour la vérification de la condition de cible mince	29
2.2.2 Programme du calcul de la section efficace totale	32
CHAPITRE 3 RESULTATS EXPERIMENTAUX ET COMPARAISON AVEC DES MESURES ANTERIEURES	35
3.1 PRESENTATION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX	36
3.2 ANALYSE SUCCINCTE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX	37
3.2.1 Sections efficaces totales de l'azote	38
3.2.1.1 Cible de néon	38
3.2.1.2 Cible d'argon	39
3.2.1.3 Cible de krypton	41
3.2.1.4 Cible de xénon	42
3.2.2 Sections efficaces totales du néon	44
3.2.2.1 Cible d'hélium	44
3.2.2.2 Cible de néon	45
3.2.2.3 Cible d'argon	47
3.2.2.4 Cible de krypton	48
3.2.2.5 Cible de xénon	50

	Page
3.2.3 Sections efficaces totales de l'argon	51
3.2.3.1 Cible de néon	51
3.2.3.2 Cible d'argon	53
3.2.3.3 Cible de krypton	54
3.2.4 Remarques	56
3.2.5 Métastables	56
3.3 ETUDES POSSIBLES	57
 CHAPITRE 4 FORMALISME GENERAL POUR L'ETUDE DES COLLISIONS	 59
4.1 GENERALITES D'INTRODUCTION	60
4.1.1 Différentes zones énergétiques pour l'étude des collisions	 60
4.1.2 Approximation essentielle de la zone énergétique intermédiaire	 61
4.2 THEORIE GENERALE	63
4.2.1 Formalisme fondé sur l'approximation de Born-Oppenheimer	 63
4.2.2 Méthode de variation pour l'obtention des équations couplées dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact	 65
4.2.2.1 Equations couplées des amplitudes de probabilité électroniques	 67
4.2.2.2 Equation du mouvement nucléaire	69
4.2.3 Expression de la section efficace totale	69
4.3 TRANSFORMATIONS DES FONCTIONS D'ONDE	72

	Page
4.4 ADIABATISME OU DIABATISME	74
4.5 COMMENTAIRES	77
CHAPITRE 5 LE MODELE A DEUX ETATS QUANTIQUES	78
5.1 PRELIMINAIRES : IDEES GENERALES DU MODELE	79
5.2 REVUE DES PRINCIPAUX RESULTATS DU CAS RESONNANT	80
5.3 CAS ASYMETRIQUE	83
5.3.1 Considérations de symétrie	83
5.3.2 Développement mathématique	84
5.3.3 Hermiticité du système	87
5.3.4 Expression de la probabilité de capture	88
5.4 EXPRESSION DU DEFAUT ENERGETIQUE MOYEN	89
5.5 EXPRESSIONS POUR PROGRAMMER LA SECTION EFFICACE TOTALE	90
CHAPITRE 6 RESULTATS NUMERIQUES DU MODELE A DEUX ETATS QUANTIQUES	93
6.1 DISCUSSION DE L'EQUATION DE LA PROBABILITE DE CAPTURE	94
6.2 QUELQUES DETAILS SUR LE PROGRAMME POUR CALCULER σ_{21}	95
6.3 CHOIX DES ETATS	96
6.4 RESULTATS NUMERIQUES DU MODELE DE RF	97
6.5 MODIFICATIONS " EMPIRIQUES "	99
6.6 ANALYSE DES NOUVEAUX RESULTATS NUMERIQUES	101
6.6.1 Sections efficaces totales simples	102
6.6.2 Sections efficaces totales composées	109

	Page
6.7 VARIATIONS DE \underline{a} ET DE \bar{E}	117
6.7.1 Evaluation de la distance \underline{a}	117
6.7.2 Evolution de la correction \bar{E}	119
6.8 INFLUENCE DU FACTEUR DE TRANSLATION	120
6.9 CALCUL DES DEUX PARAMETRES I_c ET Q_c DES SECTIONS EFFICACES EXPERIMENTALES COMPOSEES	122
CONCLUSION	129
CONCLUSION	132
REFERENCES	135
APPENDICE : PROGRAMMES	140

LISTE DES TABLEAUX

Tableau	Page
3.1 Sections efficaces totales de l'azote avec cible de néon	39
3.2 Sections efficaces totales de l'azote avec cible d'argon	39
3.3 Sections efficaces totales de l'azote avec cible de krypton	42
3.4 Sections efficaces totales de l'azote avec cible de xénon	42
3.5 Sections efficaces totales du néon avec cible d'hélium	45
3.6 Sections efficaces totales du néon avec cible de néon	45
3.7 Sections efficaces totales du néon avec cible d'argon	48
3.8 Sections efficaces totales du néon avec cible de krypton	48
3.9 Sections efficaces totales du néon avec cible de xénon	51
3.10 Sections efficaces totales de l'argon avec cible de néon	51
3.11 Sections efficaces totales de l'argon avec cible d'argon	54
3.12 Sections efficaces totales de l'argon avec cible de krypton	54
6.1 Informations extraites du programme pour calculer σ_{21}	118
6.2 Valeurs de I_c et Q_c des sections efficaces totales composées	123
6.3 Valeurs de I_c et Q_c pour des états discrets définis à la section 6.3	123

LISTE DES FIGURES

Figure	Page
1.1 Schéma synoptique du dispositif expérimental	10
1.2 Description des plans	16
1.3 Channeltron comme compteur	17
1.4 Schéma synoptique pour le comptage normalisé	18
1.5 Droite caractéristique de l'aimant	21
2.1 Schéma synoptique du montage pour la détermination des ions	23
2.2 Spectrogramme	24
2.3 Profil angulaire	25
2.4 Profil énergétique	26
2.5 Coupe longitudinale de la cible	29
2.6 Droite du taux de comptage en fonction de la pression du gaz de la cible	32
3.1 Sections efficaces de l'azote avec cible de néon	38
3.2 Sections efficaces de l'azote avec cible d'argon	40
3.3 Sections efficaces de l'azote avec cible de krypton	41
3.4 Sections efficaces de l'azote avec cible de xénon	43
3.5 Sections efficaces du néon avec cible d'hélium	44
3.6 Sections efficaces du néon avec cible de néon	46
3.7 Sections efficaces du néon avec cible d'argon	47
3.8 Sections efficaces du néon avec cible de krypton	49
3.9 Sections efficaces du néon avec cible de xénon	50

Figure	Page
3.10 ² Sections efficaces de l'argon avec cible de néon	52
3.11 Sections efficaces de l'argon avec cible d'argon	53
3.12 Sections efficaces de l'argon avec cible de krypton	55
6.1 Détermination du défaut énergétique du modèle de RF : \bar{W}	97
6.2 Section efficace totale simple : σ_{21} de l'azote avec cible de néon	103
6.3 Section efficace totale simple : σ_{21} du néon avec cible d'hélium	104
6.4 Section efficace totale simple : σ_{21} du néon avec cible de néon	105
6.5 Section efficace totale simple : σ_{21} de l'argon avec cible de néon	106
6.6 Section efficace totale simple : σ_{21} de l'argon avec cible d'argon	107
6.7 Section efficace totale simple : σ_{21} de l'argon avec cible de krypton	108
6.8 Section efficace totale composée : σ_{21} de l'azote avec cible d'argon	110
6.9 Section efficace totale composée : σ_{21} de l'azote avec cible de krypton	111
6.10 Section efficace totale composée : σ_{21} de l'azote avec cible de xénon	112
6.11 Section efficace totale composée : σ_{21} du néon avec cible d'argon	113

Figure	Page
6.12 Section efficace totale composée : σ_{21} du néon avec cible de krypton	114
6.13 Section efficace totale composée : σ_{21} du néon avec cible de xénon	115
6.14 Vitesse v à partir de laquelle le facteur de translation doit être pris en considération	121
6.15 Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $N^{++} \rightarrow Ar$	125
6.16 Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $Ne^{++} \rightarrow Ar$	125
6.17 Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $N^{++} \rightarrow Kr$	126
6.18 Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $Ne^{++} \rightarrow Kr$	126
6.19 Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $N^{++} \rightarrow Xe$	127
6.20 Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $Ne^{++} \rightarrow Xe$	127

REMERCIEMENTS

Au terme d'un séjour fructueux et agréable à l'Université d'Ottawa, cette thèse me donne l'occasion d'exprimer mes vifs remerciements

au CONSEIL DES ARTS DU CANADA qui m'a gratifié d'une bourse pour mener à bien ces recherches,

au Directeur du Département de Physique, le Docteur Gilles Lamarche pour son accueil chaleureux à mon arrivée et sa prévenance tout au cours de ces années,

à mon Directeur de recherche, le Docteur Brian Hird pour son aide complaisante et son constant dévouement,

au Personnel enseignant pour ses cours intéressants d'un bon niveau et son obligeance,

au Chef des ateliers, Monsieur Nelson Goodchild, à ses employés pour leurs conseils avisés et leurs services adéquats et rapides,

à Monsieur Daniel Guilbaud pour ses questions pertinentes et ses discussions enrichissantes,

à Mademoiselle Francine Trottier pour son active participation à la mise en forme finale du texte,

et à CEUX qui m'ont aidé sous quelle que forme que ce soit.

Que tous voient dans la finalité de ces recherches l'expression de ma profonde gratitude.

INTRODUCTION
O-O-O-O-O-O-

Les collisions atomiques suscitent de plus en plus d'intérêt grâce aux progrès technologiques qui permettent l'étude de systèmes complexes dans des conditions variées. Les propriétés déduites ressortissent à quelques branches de la physique et de la chimie. Citons entre autre : la détermination des paramètres contrôlant le comportement global des gaz et des plasmas, les mécanismes de formation et de dissociation des molécules, l'étude de la structure électronique et, en fusion, l' " échauffement " par faisceaux d'atomes.

Au début, la théorie guidait l'expérimentation qui ne se situait qu'au niveau des collisions entre systèmes simples, comme le bombardement d'atomes d'hydrogène par des protons. Au fil des années, le processus s'inversa sous l'abondance des données expérimentales et l'absence de théories plus générales. Actuellement, l'utilisation d'accélérateurs à ions lourds et d'ordinateurs de grande capacité stimulent de très actives recherches, tant expérimentales que théoriques, dans le domaine des collisions entre systèmes complexes. Ainsi, par exemple, aux hautes énergies l'étude de la formation et de la stabilité des quasi-atomes ou molécules super-lourds produits s'avère possible (Reinhardt et Greiner, 1977).

Nous discuterons des collisions qui, bien que n'ayant pas la portée fondamentale de celles présentées par Reinhardt et Greiner, sont pourvues d'intérêt car de nombreux points restent à éclaircir entre la théorie et l'expérimentation. Ces collisions seront de type réarrangement, c'est-à-dire que les éléments avant et après la collision ne sont pas identiques. Parmi ces collisions de réarrangement inélastiques, nous avons choisi d'étudier

le mécanisme de capture d'électrons, cas où l'ion incident change de charge électrique. Pour ces collisions la procédure expérimentale est relativement aisée et déjà bien des résultats ont été obtenus aux basses énergies.

Dans notre zone énergétique - quelques dizaines à quelques centaines de kiloélectronvolts - peu de résultats ont été publiés bien qu'il soit simple d'obtenir les faisceaux et les gaz pour la cible, et que cette zone corresponde en général au maximum adiabatique qui laisse présager des sections efficaces totales de valeurs importantes. Cette gamme des énergies fut fixée par les facilités expérimentales dont le but premier était de mesurer des sections efficaces différentielles nécessitant une bonne géométrie et des éléments d'analyse à résolution élevée. Ces éléments sont un aimant sélecteur de 90° et un analyseur électrostatique à focalisation simple de $m/2$ placés respectivement avant et après la cible. Ceci nous a permis de faire des mesures d'une précision relative d'environ 10 %.

Deux cas sont à considérer pour ce type de collisions. Le premier est la perte d'électrons pour l'ion incident. D'une manière schématique, nous le représentons comme suit :



A ces réactions convient le modèle de Firsov (1959), complété par Schmid et Garcia (1977), qui s'appuie sur l'idée d'un ensemble d'états finals des électrons actifs statistiquement probables et appartenant au continu. Ce modèle illustre l' "échauffement" des couches électroniques lors de leur recouvrement au cours de la collision. C'est le transfert d'une partie de l'énergie cinétique de déplacement des réactants en énergie d'excitation des électrons.

Le deuxième cas est celui avec gain d'électrons pour l'ion incident dont la réaction est :



A ce cas correspond le modèle des deux états quantiques développé par Landau, Zener et Stuckelberg (1932) et sous un autre formalisme par Gurnee et Magee (1957), Rapp et Francis (1962). Ici l'état final des électrons actifs est parfaitement défini : c'est un état lié. La théorie de LZS suppose que la transition électronique se produit pour un rayon d'interaction tel que l'état initial et l'état final sont presque dégénérés tandis que celle de GM-RF considère la transition entre deux états dont la dégénérescence n'est plus nécessaire.

Les mesures décrites dans cette thèse se rapportent à ce deuxième cas : détermination de la section efficace totale de capture de l'azote, du néon et de l'argon pour différentes cibles de gaz rares. Cette section efficace s'appelle σ_{21} où le premier et le deuxième indice représentent respectivement les états d'ionisation initial et final de l'ion A.

Dans la première partie nous parlerons d'expérimentation. Dans le chapitre 1 nous donnerons un aperçu de l'appareillage et les caractéristiques principales de chaque élément. Ensuite l'appareil sera considéré comme une unité pour en connaître les performances. Dans le chapitre 2 nous exposerons les techniques de mesure ainsi que l'analyse mathématique à partir de laquelle les données expérimentales sont traitées par ordinateur. Dans le chapitre 3 nous présenterons les résultats expérimentaux sous forme de tableaux et de courbes. Ceci permet une vue d'ensemble explicite et aide à l'analyse.

La deuxième partie sera consacrée à l'aspect théorique des collisions. Nous poserons les bases fondamentales du formalisme de la théorie générale et nous les exprimerons sous forme mathématique dans le chapitre 4. Un cas particulier de cette théorie générale sera analysé au chapitre 5. C'est le modèle dit des deux états quantiques de RF présenté sous une forme facile

à programmer par Lee et Hasted (1965). Finalement dans le chapitre 6 ce modèle sera modifié d'une manière plus ou moins empirique pour tenir compte des approximations faites au cours de son développement.

INTRODUCTION

Atomic collisions are of continuing interest because of the progress in techniques which make possible studies of complex systems in various conditions. The resulting data belong to several branches of physics and chemistry. Among them can be quoted : the determination of parameters which control the bulk behaviour of gases and plasmas, the mechanisms which rule the formation and dissociation of molecules, the study of the electronic structure and, in fusion, the " injection heating " with atom beams.

Early theories encouraged experiments which were at the level of collisions between simple systems, e.g. electron stripping of hydrogen atoms by protons. As the field has evolved, the situation has reversed itself and we now find that there are plenty of experimental data and a lack of more general theories. At present heavy ion accelerators and large computers are being used for experimental as well as theoretical researches in the field of heavy ion collisions. Thus, for instance, at high energies there is great interest to study both theoretically and experimentally the formation and stability of the super heavy quasi-atoms or molecules formed during collisions (Reinhardt & Greiner, 1977).

We will discuss collisions which, though they have not the fundamental significance of those presented by Reinhardt & Greiner, are nevertheless of interest because numerous details remain to be clarified between experiment and theory. These collisions are of rearrangement i.e. the parent and daughter constituents are not identical. Among these collisions we have chosen to study the electron transfer process where the charge of the incident ion changes. Experiments are relatively simple and considerable experimental data exist at low energies. Our energy region corresponds generally to that for the predicted

adiabatic maximum and therefore to large cross sections; but in spite of this and of the ready availability of both beams and targets few data exist.

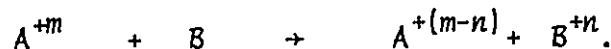
The energy range - some tens to hundreds of keV - was fixed by the apparatus first designed to measure differential cross sections. The well defined geometry as well as the good resolution of the double focussing 90° magnet and of the 25 cm radius single focussing $\pi/2$ electrostatic analyser enabled us to make measurements with an absolute accuracy of about 10 %.

Two cases have to be considered for this type of collisions. The first case is the stripping of external electrons from the incident ion. The reaction is :



The Firsov's model (1959) first described this reaction. It was extended by Schmid & Garcia (1977) and is based on the idea of an ensemble of statistical final stripped electron states which belong to the continuum. This model assumes the heating up of the outside electronic shells as they overlap in the course of the collision. It corresponds to the change of part of the kinetic energy into electron excitation energy.

The second case is that with capture of electrons by the incident ion whose reaction is :



For this case the two state model developed by Landau, Zener & Stueckelberg (1932) and under another formalism by Gurnee & Magee (1957), Rapp & Francis (1962) is adequate. Here the final state of the captured electrons is well defined : a bound state. The LZS theory assumes that the transition takes place at an interaction radius where the initial and final states are near degeneracy whilst the GM-RF theory considers the transition between two states but does not require the near degeneracy approximation.

The measurements described in this thesis belong to this second case : the determination of the total cross sections of capture for nitrogen, neon and argon in different noble gas targets. The capture cross section is called σ_{21} . The first and second indices stand respectively for the initial and final ionization states of the ion A.

In the first part we discuss the experimental technique. In chapter 1 the general view of the setting up of the apparatus is given and the main features of each device follow. In chapter 2 the techniques to identify the beam and to make the measurements themselves are provided together with the mathematical analysis of the procedure from which the bulk of the data is computed. In chapter 3 the final experimental results are displayed in both tables and graphs. This provides a clear understanding and helps to extract information.

The second part will be devoted to the theoretical aspect of the collision. We lay the main foundations of the formalism of the general theory and express them with mathematical tools in chapter 4. A particular case of this general theory is described in chapter 5. This is the two state model developed by RF put in a form which was possible to programme by Lee & Hasted (1965). Finally, in chapter 6 the model is modified in an empirical way in order to take account of some of the approximations which were made in its formulation.

CHAPITRE 1

0-0-9-0-0-

FACILITES EXPERIMENTALES

The experimental apparatus is composed of an ion source followed by an accelerator. The beam is directed vertically and horizontally by the first steerer magnet. The quadrupole doublet maintains a good shape to the beam up to the analysing magnet. This 90° magnet whose radius is 66 cm with double focussing gives a beam whose energy resolution is better than .4 %. Its image plane is also the first slit of the entrance collimator of the gas chamber. This first slit is in the median plane of a second steerer whose aim is to orientate the beam in order that it passes through the second slit of the collimator and thus corrects its misalignment. Then comes the collision chamber which contains the gas which is the target. The pressure is maintained constant such that the incident ion undergoes no more than one collision to satisfy the thin target condition. The outgoing collimator gives access to the single focussing electrostatic analyser whose resolution is selected such that it is possible to measure directly the total cross sections. The dimensions of the object and image slits determine this resolution. The ions with the correct electrical charge and energy go into the detector which is a channeltron whose pulses are counted individually by an amplifier and scaler system. The vacuum system gives a beam line pressure of about 3×10^{-7} Torr which is quite sufficient to neglect charge recombination before the target.

L'ensemble expérimental, présenté d'une manière exhaustive par Hird et Suk (1976) et Suk (1977), n'a subi depuis lors, que deux modifications. La première est la réduction de la ligne entre la chambre des collisions et l'aimant sélecteur afin de diminuer l'échange de charges avant la cible. La deuxième est la diminution de la longueur de la chambre des collisions permettant ainsi une meilleure plage de pression du gaz tout en respectant la condition de cible mince.

1.1 VUE GENERALE DU DISPOSITIF EXPERIMENTAL

Cet ensemble (figure 1.1) se compose d'une source ionique de type RF suivie d'un accélérateur, puis d'une ligne au centre de laquelle se trouve le faisceau que dirige verticalement et horizontalement le premier guide 1, et où règne un vide de l'ordre de 3×10^{-7} Torr. La lentille quadrupolaire 2 assure la focalisation du faisceau jusqu'à l'aimant sélecteur. Cet aimant de 90° et de 66 cm de rayon à focalisation double garantit un faisceau de particules dont l'énergie est résolue à mieux de .4 %. Son plan image n'est autre que la première fente du collimateur d'entrée de la chambre des collisions. Cette fente se trouve dans le plan médian d'un second guide magnétique 3 dont le but est d'orienter le faisceau pour qu'il passe au travers de la deuxième fente du collimateur et ainsi corriger son non-alignement. Puis vient la chambre des collisions contenant le gaz qui constitue la cible. La pression est maintenue à un niveau constant tel que l'ion incident interagisse en moyenne une fois pour satisfaire à la condition de cible mince. Le collimateur de sortie donne accès à l'analyseur électrostatique de $\pi/2$ à focalisation

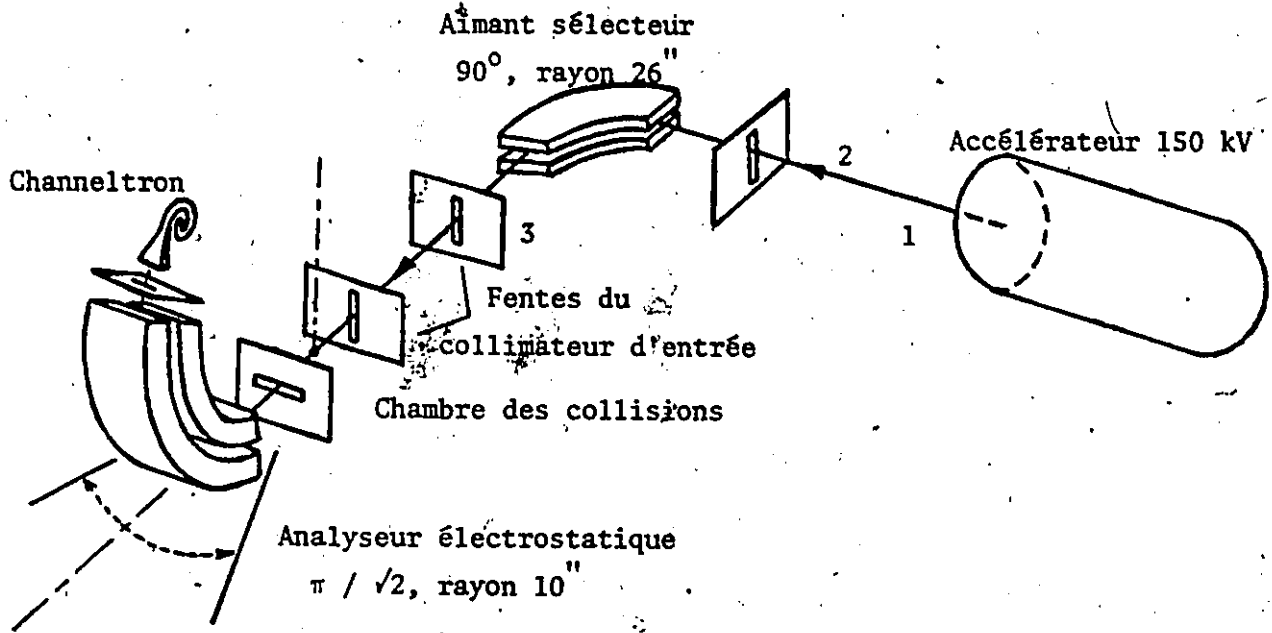


FIG. 1.1 SCHEMA SYNOPTIQUE DU DISPOSITIF EXPERIMENTAL

- 1, 3 guides magnétiques
- 2 lentille quadrupolaire

simple dont la résolution excellente est diminuée intentionnellement de sorte qu'il est possible de faire directement la mesure de la section efficace totale de réarrangement. Les dimensions des fentes objet et image de l'analyseur fixent cette résolution. Les ions répondant aux exigences de charge et d'énergie atteignent le détecteur constitué d'un channeltron dont les impulsions sont comptées. L'équipement électronique en assure le traitement et l'affichage.

1.2 COMPOSANTS DU DISPOSITIF EXPERIMENTAL

1.2.1 L'accélérateur

Cet accélérateur est le modèle 150-1H de la compagnie Texas Nuclear Corporation of Austin* dont le but premier était la production de neutrons. Son utilisation pour la production d'ions d'éléments gazeux courants ne nécessita que le remplacement de la vanne au palladium - perméable à l'hydrogène et au deutérium lorsqu'elle est chauffée - par une vanne thermo-mécanique modèle 341 de chez Ortec. Les organes essentiels sont une alimentation haute tension, une source ionique et un pupitre de contrôle.

L'alimentation conventionnelle est à tubes électroniques dont la tension de sortie peut varier continûment de 0 à 150 kilovolts. Elle est connectée à l'aide d'une série de résistances aux électrodes d'accélération à l'exception des deux premières de sorte que le faisceau voit un gradient de potentiel uniforme.

* Texas Nuclear Corporation Model 150-1H Neutron Generator, Operation Manual.

Dans l'accélérateur les ions sont formés, puis extraits de la chambre d'ionisation par un champ électrostatique, accélérés puis dirigés parallèlement par un champ électromagnétique pour former le faisceau. L'organe qui produit ces ions est la source ionique. L'ionisation des atomes de gaz se fait par collisions avec des électrons. Pour assurer une ionisation continue - la pression étant faible - une énergie sous forme d'une radio-fréquence est utilisée pour exciter les ions et entretenir l'arc en accroissant le libre parcours moyen. Pour transférer cette énergie, un couplage inductif avec la chambre est créé au moyen de quelques spires autour du tube de pyrex constituant cette chambre. Pour limiter la puissance nécessaire, un solénoïde, par son champ magnétique axial, imprime un mouvement de spirale et ainsi accroît considérablement la production des ions. A cause de l'utilisation d'une puissance RF, cette source est appelée source radio-fréquence. C'est ce type que nous utilisons manufacturé par Radiation Counter Laboratories.

Quant au pupitre de contrôle, il permet d'effectuer tous les ajustements possibles à l'aide de commandes électriques. Ainsi la tension d'anode, celle de la lentille de focalisation, le courant dans le solénoïde, le débit du gaz et la tension d'accélération peuvent être réglés en fonction des besoins pour s'assurer les meilleures conditions de fonctionnement.

En tant que premier élément de la ligne, l'accélérateur par ses performances détermine la qualité du faisceau et par suite celle des mesures expérimentales. La constance de l'énergie et la stabilité de l'intensité du faisceau sont primordiales. Elles ont été sensiblement améliorées par l'adjonction d'un stabilisateur de tension 110 V. Néanmoins la faible intensité du faisceau au-dessous de 25 kV ne nous permettait pas de faire des mesures satisfaisantes. De ceci vient la limite inférieure de la gamme

des énergies des mesures.

1.2.2 Eléments à effet magnétique

.....

Pour orienter et maintenir le faisceau dans la direction choisie, deux guides magnétiques sont employés. Un guide est formé de quatre solénoïdes à noyau plat de fer doux. Les noyaux sont vissés entre-eux de telle sorte qu'ils entourent la ligne sur une longueur de 12.5 cm. Les deux champs magnétiques horizontal et vertical créés impriment respectivement une déflexion verticale et horizontale aux ions du faisceau.

Pour assurer une bonne focalisation du faisceau légèrement divergent produit par l'accélérateur un quadrupole* est intercalé entre l'accélérateur et l'aimant sélecteur. Ce quadrupole est constitué d'un doublet de longueur effective 23.1 cm, d'espace intermédiaire 8.9 cm; l'ouverture est de 5.08 cm. Il focalise le faisceau dans les plans horizontal et vertical. Dans le plan horizontal, l'image se trouve dans le plan de la fente objet de l'aimant tandis que dans le plan vertical l'image est près du centre de l'aimant ce qui correspond à la transmission maximale. Ainsi il est possible d'obtenir un fin pinceau d'ions.

Le faisceau est analysé par l'aimant sélecteur de 90° . Cet aimant focalise tant dans le plan radial que vertical du fait de l'inclinaison des faces d'entrée et de sortie par rapport à l'axe de la ligne. L'objet et l'image sont situés à une distance égale à deux fois le rayon de l'aimant du centre des faces extrêmes de l'aimant. Construit par High Voltage Engineering** cet aimant est pourvu d'un filtre de Purcell qui a pour fonction

* High Voltage Engineering Quadrupole Doublet, Two Inch Aperture / ED-1086 M.

** " " " Analysing Magnets, 90 FARN 5M 10/68.

l'homogénéisation du champ magnétique entre les pièces polaires. De plus, pour diminuer les effets de saturation aux extrémités des pôles, ceux-ci sont arrondis épousant la forme préconisée par Rogouski. Analysant les différents ions en provenance de l'accélérateur, il n'est autre qu'un spectrographe.

1.2.3 Chambre des collisions et fentes

.....

La chambre des collisions est formée d'un accordéon cylindrique terminé par deux flasques. Ceci permet de faire tourner les deux collimateurs l'un par rapport à l'autre dans le plan horizontal. Ainsi l'alignement peut être fait avec précision. Les deux collimateurs sont constitués de tubes de laiton aux extrémités desquels sont fixés des supports en céramique usinable portant deux demi-disques métalliques formant une fente. La mesure du courant sur chaque portion de la fente est ainsi possible. De gros trous le long des tubes permettent d'obtenir une pression beaucoup plus faible que celle de la chambre entre les deux fentes du collimateur.

Les fentes du collimateur d'entrée sont verticales de dimensions $.22 \times 2.4$ mm et espacées de 228 mm ce qui définit la direction incidente à 3.3 minutes d'arc dans le plan horizontal. La deuxième fente agit comme fente d'entrée de la chambre des collisions qui est pompée par différence. La fente du collimateur de sortie est horizontale et sur celle-ci une partie du faisceau qui traverse la chambre est recueillie. Ce courant sert à la normalisation du taux de comptage du détecteur (section 1.2.5).

La pression de la chambre est maintenue constante par l'emploi d'une vanne thermo-mécanique. Nous utilisons la plage de pression allant de 10^{-4} à 10^{-3} Torr. La pression est mesurée à l'aide d'un manomètre à capacité,

Baratron de type 170 de chez MKS Instruments, conçu pour la mesure de basses pressions avec une précision et une facilité qui n'étaient possibles auparavant qu'à des pressions plus élevées. Ce manomètre est connecté à la chambre par un tube de 6.3 mm de diamètre et de faible longueur loin de toute zone d'écoulement. De plus son isolation thermique est assurée par une couverture en polystyrène.

1.2.4 Analyseur électrostatique

.....

La combinaison judicieuse d'une analyse magnétique suivie d'une analyse électrostatique permet de bien déterminer les ions qui atteignent le détecteur. Considérant son effet sur le mouvement des ions, le champ électrostatique radial en r^{-1} ressemble à un champ magnétique. Hughes et Rojansky (1929) ont démontré que ce champ donne une bonne focalisation et une bonne résolution pour un angle de $127^{\circ} 17'$; cet angle joue le même rôle pour ce type de champ que la déviation angulaire de 180° pour un champ magnétique. Pratiquement, le problème de la détermination de la position pour la meilleure focalisation et le meilleur degré de résolution entre les différentes vitesses se fait par intégration numérique des équations de l'orbite.

Notre analyseur entièrement conçu et réalisé au département, produit un champ cylindrique bien défini dans la région entre les électrodes et dont le rayon central est $r_0 = 25.4$ cm; l'espace entre les électrodes est $\delta r = 1.25$ cm. Ainsi la tension à y appliquer est-elle un dixième de la tension d'accélération des ions (charge électrique $q = 1$). Cette valeur de la tension U est simplement obtenue en égalant la force électrique et la force centrifuge pour la distance r_0 :

$$U = 2 E \cdot \text{Log}(r_1 / r_2) / q \quad (1.1)$$

où E est l'énergie de l'ion incident de charge électrique q et r_1 et r_2 sont respectivement les rayons des électrodes externe et interne. Dans notre cas, la différence $\delta r = r_1 - r_2$ est petite devant r_0 , donc nous pouvons exprimer la différence de potentiel sous la forme :

$$U(\text{volts}) = E(\text{eV}) / 10 q \quad (1.2)$$

Cette haute tension produite par deux alimentations de 10 kV, donne la limite supérieure de la gamme des énergies de nos mesures.

L'angle de déflexion entre le point objet et image a moins de $\pi/2$ du fait que les ions ont à parcourir environ 2.5 cm de la distance totale entre objet et image en dehors du champ électrostatique. Dans le plan de diffusion qui est perpendiculaire au plan radial - plan de déflexion - (figure 1.2) aucun effet de focalisation n'existe si ce n'est une très

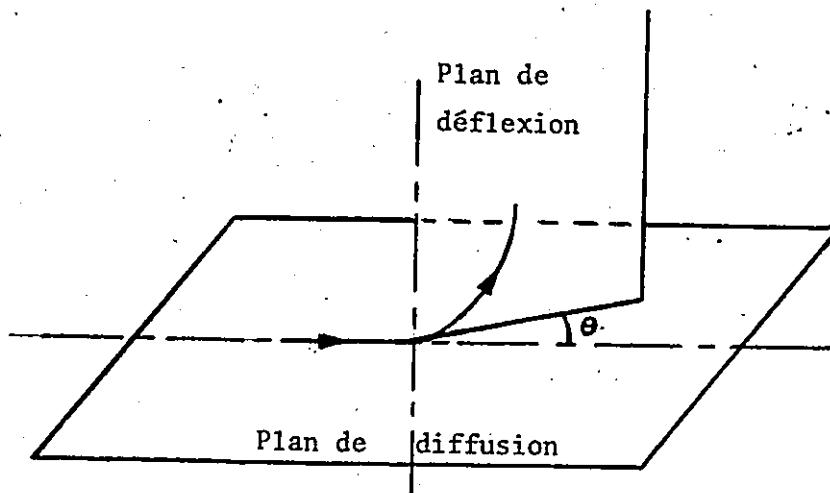


Fig. 1.2
DESCRIPTION DES PLANS

légère perturbation due aux effets de bord du champ électrostatique. Pour limiter au mieux ces effets un écran court-circuite les lignes de champ à chaque extrémité des électrodes.

1.2.5 Détecteur et électronique

Le détecteur de particules est un channeltron, petit tube de verre recourbé dont l'intérieur est recouvert d'un matériau à haute résistance et à fort pouvoir émissif secondaire. Lorsqu'une différence de potentiel est appliquée entre les deux extrémités du tube, le channeltron peut être comparé à une succession de dynodes d'un photo-multiplicateur conventionnel. Ce type de multiplicateur sans fenêtre est particulièrement apte à compter les ions venant frapper sa surface intérieure (figure 1.3). Celui que nous utilisons

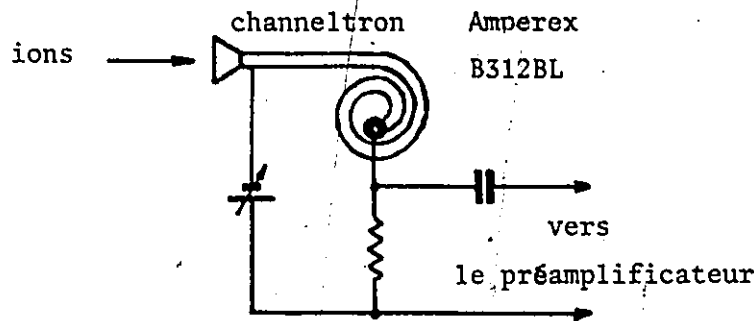


Fig. 1.3 CHANNELTRON COMME COMPTEUR

a un cône d'entrée permettant une meilleure collection des ions sortant de la fente image de l'analyseur électrostatique. Son gain électronique élevé et l'étroitesse de la distribution des amplitudes des impulsions de courant recueillies à la sortie donnent la possibilité de le connecter après intégration à un préamplificateur à collecteur commun. Ce type de préamplificateur possède une forte impédance d'entrée et une faible impédance de sortie. Le signal obtenu est amplifié, transmis à un analyseur monocanal puis à un compteur commandé par l'information en provenance de la fente du collimateur de sortie de la chambre des collisions (figure 1.4). Cette information a subi

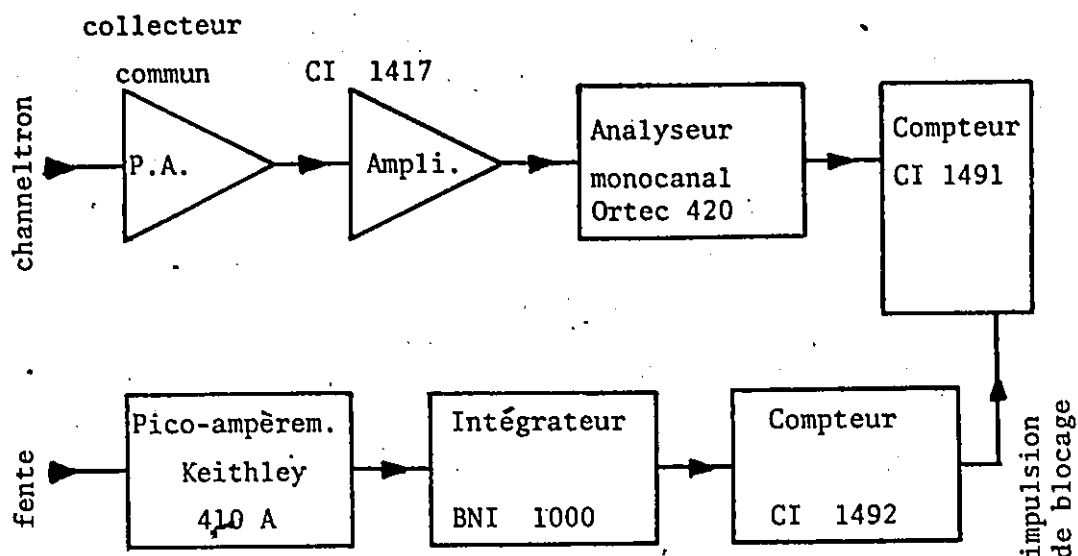


Fig. 1.4 SCHEMA SYNOPTIQUE POUR LE COMPTAGE NORMALISE

le traitement suivant : le courant produit par l'impact des ions est amplifié par un pico-ampèremètre, intégré et transmis à un compteur à affichage prédéterminé. Quand la valeur est atteinte, une impulsion de blocage arrête le comptage des impulsions en provenance du détecteur. Ainsi nous opérons une normalisation du nombre d'impulsions comptées en fonction du nombre de particules ayant atteint la fente arrière de la chambre.

1.2.6 Système de pompage

Le système de pompage est constitué de quatre pompes à diffusion connectées à une pompe rotative. Ces quatre pompes de 7 cm de diamètre sont liées à la ligne par les adaptateurs Dependex et l'huile de diffusion est de chez Santovac. La première pompe est près de l'accélérateur, la deuxième et

la troisième aux extrémités de l'aimant sélecteur et la quatrième sous le caisson de l'analyseur électrostatique. La première vient du NRC tandis que les trois autres sont de chez Heraeus. Les pressions au niveau de la première et de la troisième pompe sont mesurées à l'aide de jauges à vide à cathode froide tandis que celles au niveau de la deuxième et de la quatrième pompe sont évaluées à l'aide de jauges à ionisation. Refroidies à l'eau et en plus à l'azote liquide pour deux d'entre-elles (1, 3), ces pompes maintiennent un bon vide dans l'ensemble du dispositif : 3×10^{-7} Torr. Du fait de la faible longueur de la ligne après l'aimant sélecteur, cette pression est suffisamment basse pour assurer un taux de recombinaison négligeable et donc de faire abstraction des ions parasites.

1.3 CARACTERISTIQUES DU SYSTEME

Avant le début des différentes séries de mesures, l'appareil considéré dans son ensemble a été testé afin d'en connaître les performances.

Le détecteur et l'électronique ont été l'objet d'investigations (Hird, Suk et Guilbaud, 1976). Elles ont montré que le gain en courant du channeltron varie considérablement avec le point d'impact des ions à l'intérieur du tube. Ainsi la grande variation de la hauteur des impulsions requiert l'utilisation d'un appareillage électronique ayant un niveau de discrimination aussi bas que possible. Par contre, l'efficacité de détection est indépendante du point d'impact, ce qui suggère qu'au moins un électron émis par le premier impact de l'ion avec la surface est multiplié pour finalement donner une impulsion détectable. Le " temps mort " de l'équipement électronique de comptage ne nous permettait pas de dépasser 6×10^3 impulsions à la seconde.

sinon une certaine fraction de l'information reçue est ignorée.

Pour pouvoir déterminer facilement et précisément la valeur à placer sur le cadran indiquant le courant d'aimantation pour un ion à une énergie donnée, la courbe caractéristique de l'aimant sélecteur fut tracée. Cette courbe est une droite car le point de fonctionnement est tel que le fer des pôles est loin d'être saturé. De plus l'hystérésis s'est avérée négligeable si nous prenons soin de toujours tourner le cadran dans le même sens pour l'affichage d'une valeur. Pour une géométrie donnée, la rigidité magnétique est égale à :

$$(\text{masse} * \text{énergie} / \text{charge électrique au carré})^{\frac{1}{2}}$$

Ceci signifie que tous les ions ayant la même rigidité passeront au travers de la fente image de l'aimant pour la même valeur de l'induction magnétique qui est proportionnelle au courant d'aimantation. Cette droite fut obtenue à partir de mesures faites avec des ions de charge électrique unité, qui peuvent être produits en faisceaux de forte intensité et à partir de la connaissance de la valeur approximative de l'induction magnétique. Par la suite, il s'est avéré que tous les points expérimentaux pour des ions donnés s'alignaient sur cette droite. La figure 1.5 donne un exemple d'une telle série de points expérimentaux qui sont majoritairement ceux de l'ion N^{++} pour différentes énergies. L'abscisse du repère représente une quantité proportionnelle au carré du courant d'aimantation I (valeur lue sur le cadran de l'alimentation de l'aimant). L'ordonnée est le produit de la tension V_{esa} appliquée aux électrodes de l'analyseur électrostatique par la masse atomique M de l'ion que divise le carré du degré d'ionisation i de l'ion :

$$a I^2 + b = M(\text{u.m.a.}) * V_{\text{esa}} (\text{kV}) / i^2$$

avec la pente $a = 5$ et l'ordonnée à l'origine $b = 2$.

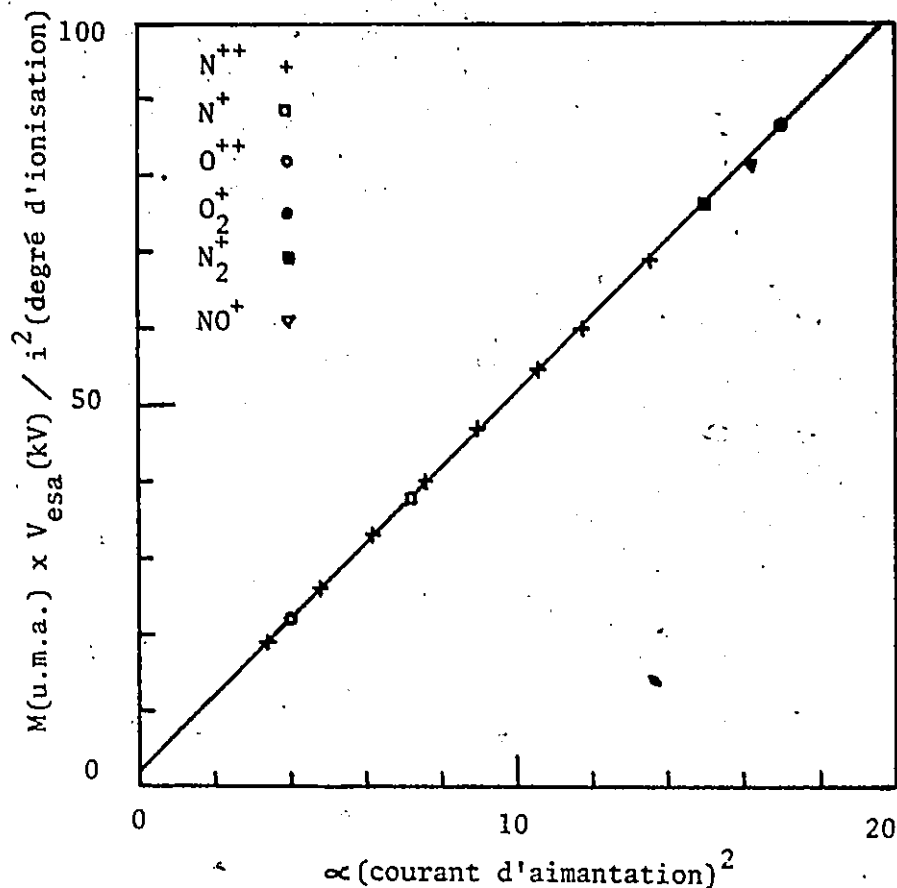


Fig. 1.5 DROITE CARACTERISTIQUE DE L'AIMANT

● Ensuite des essais pour connaître la résolution du système furent entrepris. Des mesures avec un faisceau d'argon Ar^+ de 127 keV et un jeu de fentes plus petites que celles en place pour les mesures de σ_{21} donnèrent une résolution de 8×10^{-4} . Avec des fentes légèrement plus petites, une résolution de 10^{-4} aurait pu être obtenue. Cette valeur est adéquate pour faire la mesure de sections efficaces différentielles ($\Delta E = 10 \text{ eV}$ à $E = 100 \text{ keV}$). Pour la mesure de σ_{21} la résolution fut diminuée intentionnellement pour matérialiser l'intégration sur E de la section efficace différentielle :

$$d^2\sigma / d\Omega dE$$

où Ω est l'angle solide et E est l'énergie.

CHAPITRE 2

o-o-o-o-o-

TECHNIQUES EXPERIMENTALES ET TRAITEMENT MATHEMATIQUE

After obtaining a beam current through the whole system, which involved careful adjustment of the many variables in the system, preliminary tests were made to identify the beam by varying the 90° magnet current which acts as a mass spectrometer. Then the collimators were aligned by drawing the angular profile determined by mechanical rotation of the electrostatic analyser.

Finally the evaluation of the deflection voltages to be applied on the electrodes of the electrostatic analyser were obtained by plotting the voltage profiles and taking the values at the center of these flat-topped distributions.

The procedure to obtain a cross section at one energy was as follows. First were measured successively the doubly charged and singly charged ions in the channeltron for the same beam charge through the target. At least ten measurements of this ratio were made under steady conditions. If fluctuations occurred the ratio was rejected. This series of measurements was repeated for several different gas pressures in the range 10^{-4} to 10^{-3} Torr, starting and ending with a low pressure to detect any significant change in the background pressure. Secondly, the target thickness corrections were made at each pressure for multiple collisions. A graph of the counting ratio against pressure was drawn to check linearity of the method. A weighted least squares fit to the pressure dependence of the ratio was performed using the individual fluctuations among the ten or more counting-rate ratios at each pressure and also the statistical fluctuations when the number of counts is small. The slope of this graph is used to compute the cross section.

2.1 TECHNIQUES EXPERIMENTALES

2.1.1 Mesures préliminaires

Ayant obtenu un courant sur la fente de sortie de la chambre des collisions - que nous appellerons désormais la fente C pour des commodités d'expression - il est important de s'assurer que ces ions sont ceux du faisceau désiré. Pour ce faire nous utilisons le montage de la figure 2.1. Le courant

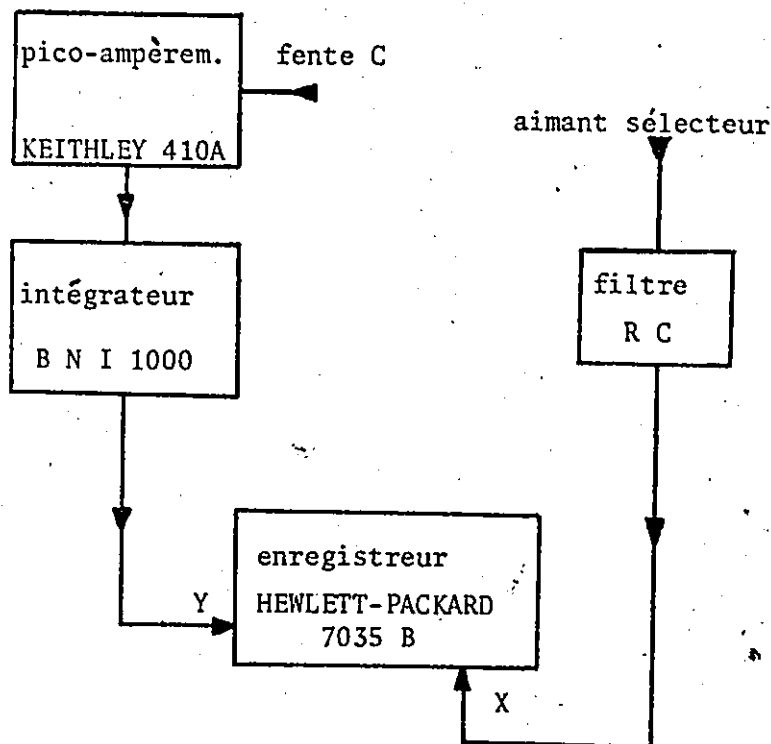
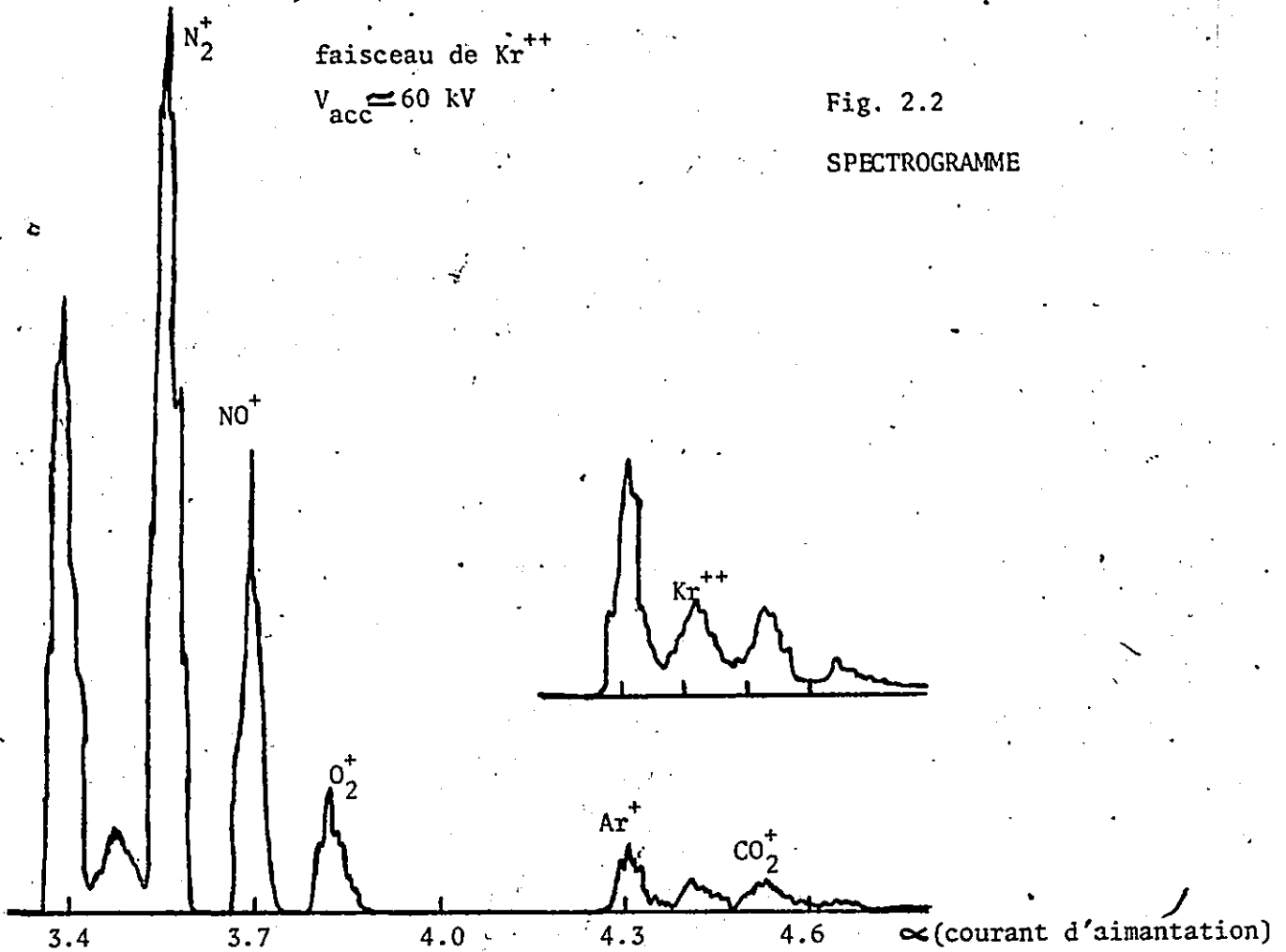


Fig. 2.1

SCHEMA SYNOPTIQUE DU MONTAGE
POUR LA DETERMINATION DES IONS

de la fente C est transmis au pico-ampèremètre et amplifié. Après intégration ce courant commande l'entrée verticale Y de l'enregistreur. La tension aux bornes du bobinage de l'aimant sélecteur est envoyée à l'entrée horizontale X de l'enregistreur au travers d'un filtre passe-bas RC. La variation du courant d'aimantation modifie le champ magnétique de l'aimant et tour à tour

les différents ions défilent sur la fente C. Ceci n'est autre qu'une spectrographie dont un exemple est donné sur la figure 2.2. Avec la courbe



caractéristique de l'aimant présentée à la section 1.3, il est facile d'identifier les masses et les charges électriques des différents ions connaissant les valeurs du courant d'aimantation pour lesquelles les pics de courant sur la fente C se produisent.

Après identification du faisceau, le courant de la fente C est rendu

optimum. De légers ajustements des champs magnétiques du guide 3 permettent d'obtenir la détection d'ions par le channeltron. Nous fixons la tension appliquée aux électrodes de l'analyseur électrostatique de telle sorte que le point de fonctionnement soit au plus près du milieu du plateau du profil énergétique dont nous parlerons ci-dessous. Puis nous traçons le profil angulaire, figure 2.3. Pour chaque valeur de l'angle de rotation de l'analyseur

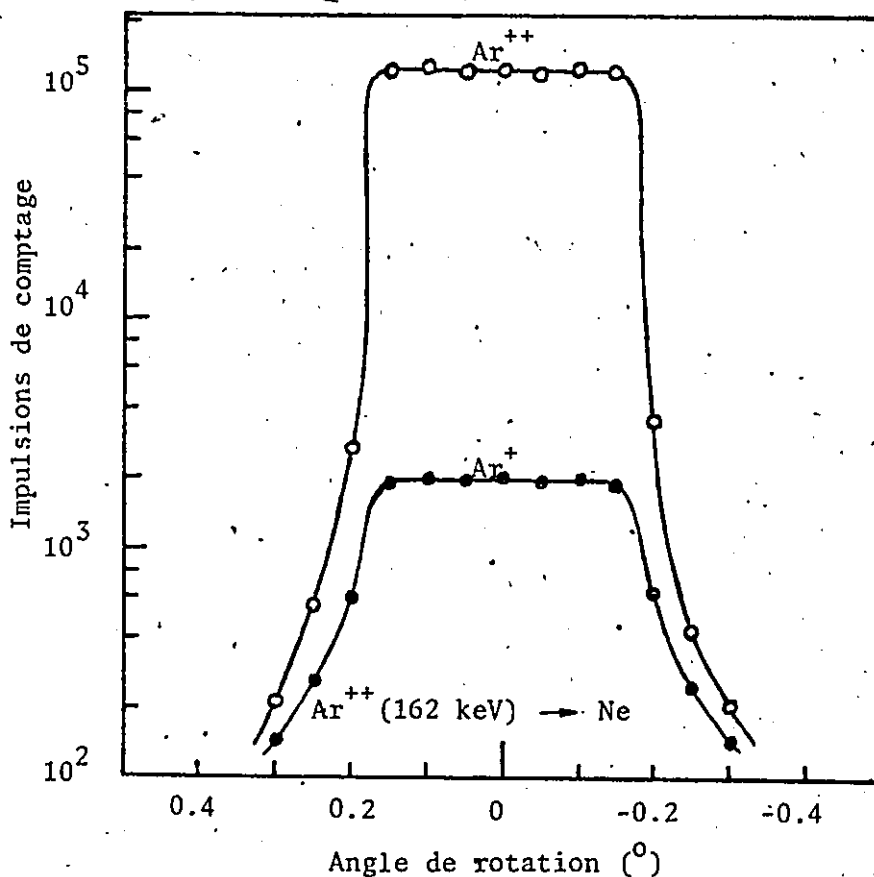


Fig. 2.3
PROFIL ANGULAIRE

électrostatique autour de l'axe vertical du centre de la chambre des collisions les ions détectés sont comptés pour une charge prédéterminée frappant la fente C. L'alignement des deux collimateurs est obtenu par rotation dans le sens adéquat de la moitié de l'angle auquel correspond le milieu de ce profil.

Cette opération est effectuée lorsque nous pensons que les deux collimateurs peuvent avoir bougé l'un par rapport à l'autre comme par exemple lors de l'ouverture du dispositif rendue nécessaire pour des raisons diverses ou bien à la suite d'un arrêt prolongé.

Maintenant il est possible de déterminer l'énergie du faisceau. Une méthode similaire à celle utilisée pour l'alignement des collimateurs est employée. Pour chaque valeur de la tension de déflexion appliquée aux électrodes de l'analyseur électrostatique, les ions atteignant le channeltron sont comptés pour une charge électrique donnée sur la fente C. La figure 2.4 illustre

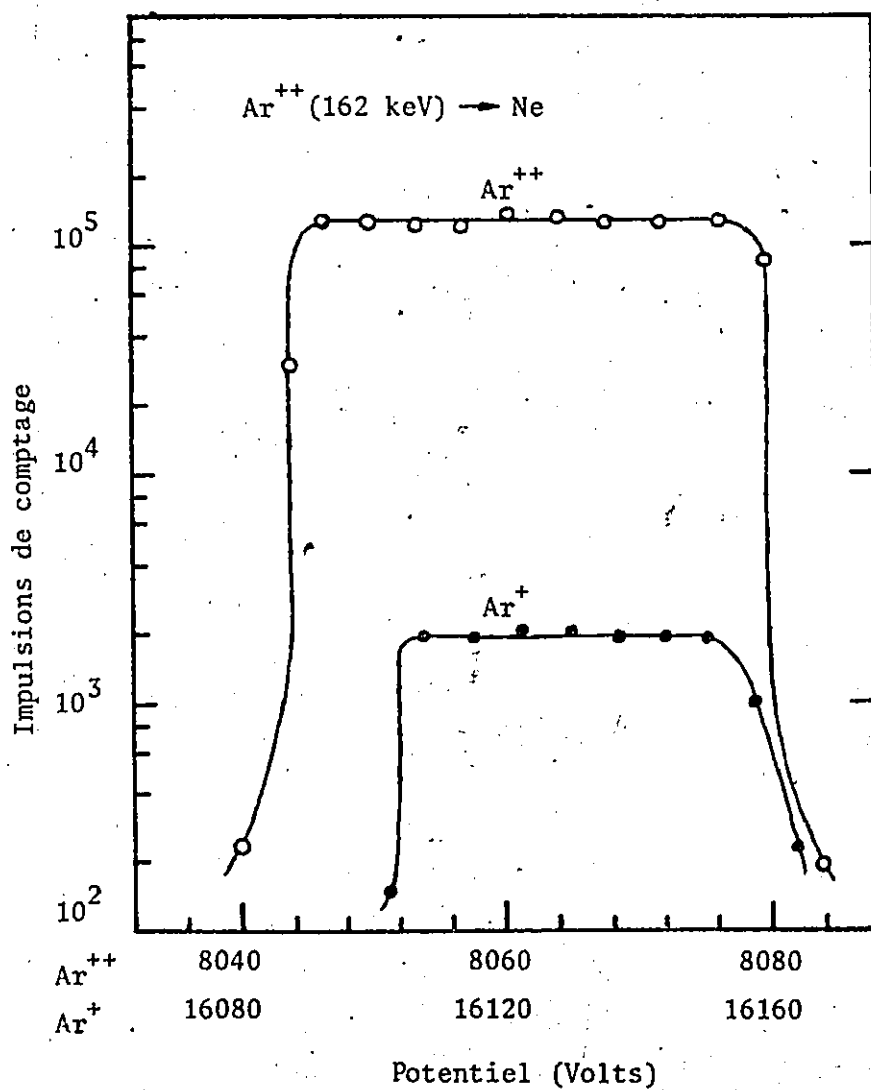


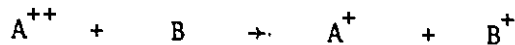
Fig. 2.4

PROFIL ENERGETIQUE

les deux profils requis, celui pour les ions A^{++} et celui pour les ions A^+ .
Remarquons que ces profils ainsi que le profil angulaire présentent un plateau.
Ces plateaux sont les intégrations nécessaires pour la détermination de
la section efficace totale.

2.1.2 Mesures proprement dites

La section efficace totale de capture de l'ion A^{++} de la réaction



est définie par la relation :

$$A^+ = A^{++} * \sigma_{21} * L * n \quad (2.1)$$

en supposant que l'échange n'a lieu qu'au cours d'une seule collision.

Le symbole A^{++} est le nombre d'ions ayant la charge initiale qui traversent la cible. Quant à A^+ , c'est le nombre d'ions ayant la charge électrique finale qui sont créés dans la cible dont la longueur effective est L et où règne un gaz dont la densité atomique est n . De ceci il appert que les mesures expérimentales consistent à déterminer la variation du rapport A^+ / A^{++} en fonction de n . Cette densité est liée à la pression du gaz de la cible, supposé parfait, par la relation suivante :

$$n = P / (c T) \quad (2.2)$$

avec P la pression et $c = 1.0351 \times 10^{-19}$ (Torr * cm³ * K⁻¹ * atomes⁻¹).

Les ions A^{++} et A^+ sont comptés alternativement une dizaine de fois afin d'éliminer les fluctuations temporelles du faisceau qui peuvent survenir pour la même charge ayant traversé la cible. Si des fluctuations importantes se produisent, alors les deux valeurs associées A^{++} et A^+ sont rejetées.

Une série de telles mesures est faite pour chaque pression du gaz de la cible, comme mentionné ci-dessus, dans la gamme de pression allant de 10^{-4} à 10^{-3} Torr.

A la fin, la série de mesures à la plus basse pression est répétée pour déceler une quelconque variation de la pression résiduelle.

2.1.3 Détection des métastables

.....

L'ion d'azote $N^{++}(2s^2, 2p^1)$ n'apparaît que sous l'état 2P tandis que l'ion $N^+(2s^2, 2p^2)$ se manifeste sous l'état fondamental 3P et sous deux états métastables 1D , 1S . Ces états métastables ont la même structure électronique mais le couplage interne entre les électrons $2p$ est différent. N'étant pas en mesure de détecter les populations relatives des ions N^+ produits au cours de la collision, la section efficace totale mesurée sera une moyenne pondérée des sections efficaces correspondant au triplet P et aux deux singlets D et S .

Par contre pour les ions Ne^{++} et Ar^{++} , la situation est inverse.

Ce sont les ions incidents qui peuvent être dans un état métastable car ils ont la configuration (ns^2, np^4) . Ces états métastables ont une durée de vie (Wiese, Smith et Glennor, 1966) telle que leur présence modifie là encore la section efficace mesurée. Mais, il est possible de déterminer si le faisceau incident est contaminé par une certaine proportion d'ions métastables.

La technique de détection consiste à placer une seconde chambre de collisions avant l'aimant sélecteur. Le but de cette cible est de faire varier la fraction de métastables si présents par transitions électroniques et par échanges d'électrons. L'annulation de l'effet des diverses transitions est peu probable et la section efficace d'échange d'ions métastables diffère de celle d'un ion dans l'état fondamental du fait de l'inégalité des défauts énergétiques des réactions respectives.

En ce qui nous concerne, la partie de la ligne avant l'aimant sélecteur (~ 3 m) a été maintenue à une pression d'argon de 3×10^{-5} Torr pour la durée

de l'expérience. La vitesse de pompage aux deux extrémités étant faible, la pression dans le reste de la ligne n'a pas été perturbée (3×10^{-7} Torr). Dans ces conditions la section efficace totale est déterminée de nouveau. Une variation de la valeur absolue supérieure aux erreurs expérimentales indiquerait la présence d'ions métastables.

2.2 TRAITEMENT MATHEMATIQUE DES DONNEES EXPERIMENTALES

2.2.1 Corrections pour la vérification de la condition de cible mince

D'après la relation (2.1), la section efficace totale est proportionnelle à la pente de la droite décrivant la variation du rapport A^+ / A^{++} en fonction de la pression du gaz de la cible. Ainsi l'alignement des points expérimentaux confirme la validité de la condition de cible mince - une seule collision -. Néanmoins le non-alignement de ces points n'est pas un test suffisant pour dire que cette condition n'est pas satisfaite.

La figure 2.5 montre une coupe schématique de la chambre des collisions.

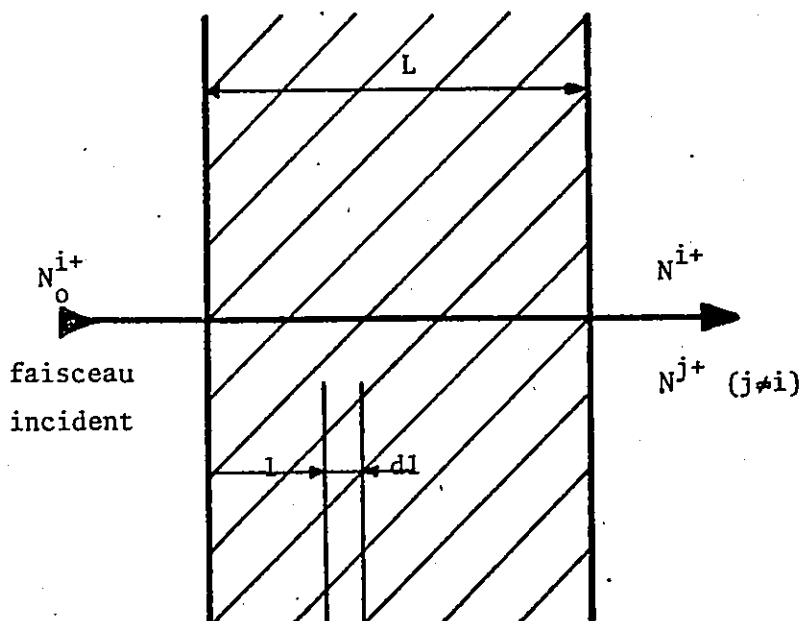


Fig. 2.5

COUPE LONGITUDINALE
DE LA CIBLE

Le changement de population est régi par une loi exponentielle. Aussi pour une tranche dl située à la distance l de l'entrée de la cible, chaque population N^{j+} obéit à l'équation différentielle (Hird et Suk, 1976) :

$$\frac{1}{n} \frac{dN^{j+}}{dl} = \sum_{i \neq j} \sigma_{ij} * N^{i+} - \sum_{i \neq j} \sigma_{ji} * N^{j+} \quad (2.3)$$

Le premier terme du membre de droite représente les ions qui contribuent à l'augmentation de la population N^{j+} tandis que le second illustre au contraire la perte d'ions N^{j+} . Ainsi, si certaines sections efficaces autres que σ_{21} sont non négligeables par rapport à cette dernière, il est évident que l'expression (2.1) n'est plus valable.

Si nous définissons :

$$\sigma_{jj} = - \sum_{i \neq j} \sigma_{ji} \quad (2.4)$$

alors l'équation différentielle (2.3) devient simplement :

$$\frac{1}{n} \frac{dN^{j+}}{dl} = \sum_i \sigma_{ij} * N^{i+} \quad (2.5)$$

La solution de l'équation différentielle se trouve en supposant qu'elle a la forme d'un polynôme en $x = n * l$; x étant " l'épaisseur de la cible " :

$$N^{j+} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k^j * x^k \quad (2.6)$$

Substituons l'équation (2.6) dans l'équation (2.5). L'égalité des coefficients des deux membres permet de déterminer tous les a_k^j par récurrence connaissant les conditions initiales qui ne sont autres que les a_0^j . D'où le résultat suivant :

$$N^{j+} = N_0^{i+} \{ \delta_{ij} + \sigma_{ij} * X + \frac{1}{2} \sum_p \sigma_{ip} * \sigma_{pj} * X^2 \dots \} \quad (2.7)$$

avec N_0^{i+} représentant la population initiale et $X = n * L$.

Quand la pression est nulle la population initiale ne change pas, ce qui est exprimé par le premier terme de l'accolade : δ_{ij} .

Pour la détermination de σ_{21} , supposant la condition de cible mince, les transferts de charges multiples sont peu probables au cours d'une seule collision. Les valeurs des sections efficaces totales pour de tels échanges sont très faibles et par conséquent nous pouvons les négliger. Alors le système d'équations différentielles à résoudre ne comporte que quatre équations - populations 0, 1, 2, 3 - et décrit entièrement le phénomène $2 \rightarrow 1$.

Pour ce faire nous exprimons l'équation (2.7) jusqu'au deuxième ordre en X en explicitant les sections efficaces ayant deux indices égaux. Etant intéressés par les populations N^{2+} et N^+ à la sortie de la chambre des collisions, nous remplaçons dans (2.7) i et j respectivement par 2 et 2, puis par 2 et 1. Pour le cas $i = j = 2$ nous ne gardons que les termes du premier ordre :

$$N^{2+} = N_0^{2+} \left\{ 1 - \sum_{m=2} \sigma_{2m} X \right\} \quad (2.8)$$

Dans le cas $i = 2$ et $j = 1$, il est nécessaire de conserver les termes du deuxième ordre ce qui donne :

$$N^+ = N_0^{2+} \left\{ \sigma_{21} X + \frac{1}{2} \sum_{p=1,2} \sigma_{2p} \sigma_{1p} X^2 - \frac{1}{2} \sigma_{21} X^2 + \left\{ \sum_{l=2} \sigma_{2l} + \sum_{k=1} \sigma_{1k} \right\} \right\} \quad (2.9)$$

Le rapport N^+ / N^{2+} supprime le N_0^{2+} . Certains remaniements, l'utilisation de $(1 + u)^{-1} = 1 - u$ (u petit devant 1) et le fait que nous ne tenons compte que des échanges simples conduisent à :

$$\sigma_{21} = \left(N^+ / (N^{2+} + \frac{1}{2} N^+) X \right) \left(1 - (\sigma_{23} - \sigma_{12} - \sigma_{10}) \frac{X}{2} \right) \quad (2.10)$$

Il est clair que l'expression (2.1) est différente de celle corrigée.

Nous notons la contribution du $\frac{1}{2} N^+$ au dénominateur du rapport ainsi que la présence du premier terme en X qui représente la correction due à des transferts de charges autres que $2 \rightarrow 1$. Les termes d'ordre supérieur en X

deviennent très rapidement négligeables. La condition de cible mince sera vérifiée si les points représentant le rapport des populations corrigé sont alignés aux erreurs expérimentales près (figure 2.6).

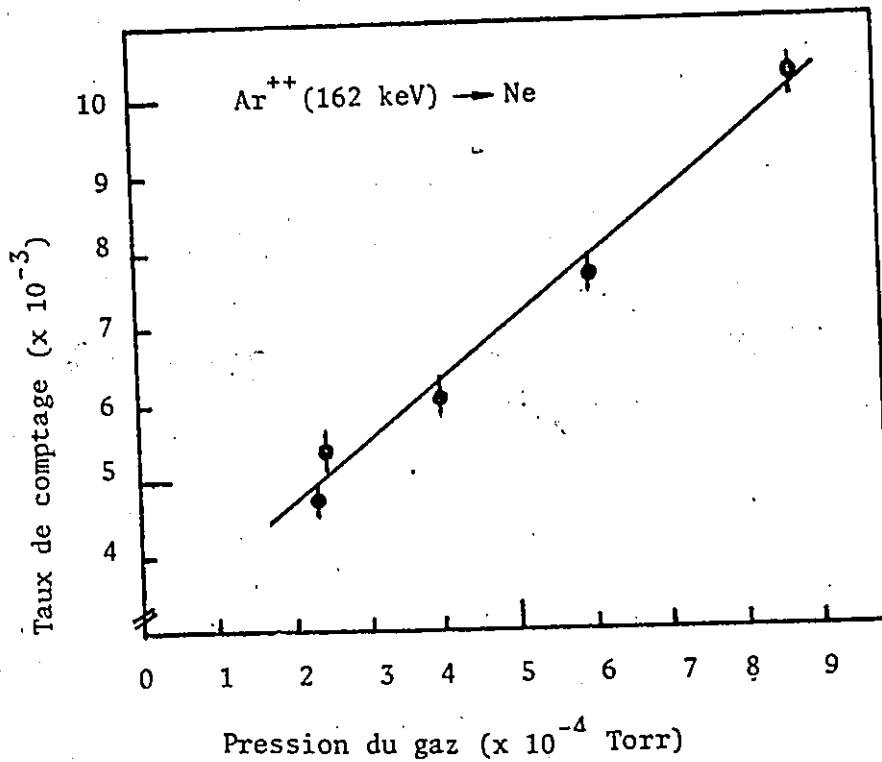


Fig. 2.6

DROITE DU TAUX DE COMPTAGE
EN FONCTION DE LA PRESSION
DU GAZ DE LA CIBLE

2.2.2 Programme du calcul de la section efficace totale

Afin de pouvoir traiter facilement et rapidement l'ensemble des données expérimentales, un programme fut réalisé. Ce n'est pas la complexité des calculs qui motivèrent sa conception mais plutôt le souci d'éviter toute erreur due aux nombreuses manipulations des données. La première étape du calcul consiste à évaluer tous les rapports de population $R_i = A^+ / (A^{++} + \frac{1}{2} A^+)$ pour une série de mesures faites pour une pression du gaz de la cible. Le rapport moyen ainsi que son erreur sont calculés à l'aide des deux expressions ci-dessous

(Evans, 1955; Freund, 1967) :

$$R = N^{-1} \sum_i R_i \quad (2.11)$$

$$E_R = \{ N \sum_i R_i^2 - (\sum_i R_i)^2 \}^{1/2} / (N - 1) \sqrt{N} \quad (2.12)$$

où N est le nombre de mesures effectuées dans une série. Comme il existe toujours de petites fluctuations de pression, cette dernière est choisie comme la moyenne des valeurs mesurées. Ensuite la correction calculée à la section 2.2.1 est appliquée en tenant compte des transferts de charges multiples afin de garder au programme toute sa généralité. Le rapport corrigé est :

$$R_c = R (1 + \frac{1}{2} L * n (\sigma_{10} + \sigma_{12} + \sigma_{13} - \sigma_{20} - \sigma_{23})) \quad (2.13)$$

avec la densité atomique \underline{n} telle que :

$$n(10^{12} \text{ cm}^{-3}) = 9.9609 * P(10^{-6} \text{ Torr}) / T(K) \quad (2.14)$$

Connaissant les différents rapports corrigés et les pressions correspondantes du gaz de la cible, nous évaluons les paramètres de la droite $R_c = f(P)$.

Les points expérimentaux sont lissés par la méthode des moindres carrés pondérés pour tenir compte de l'erreur sur chacune des valeurs de R_c .

En définissant respectivement x_i , y_i , w_i comme étant les pressions, les rapports corrigés et les erreurs sur ces rapports pour une énergie du faisceau, la pente s'exprime par l'équation :

$$\frac{N}{D} = \frac{\sum_i w_i (x_i - x) (y_i - y)}{\sum_i w_i (x_i - x)^2} \quad (2.15)$$

Les facteurs de poids pondèrent les valeurs y_i et sont l'inverse du carré de la déviation standard du rapport moyen. Les valeurs moyennes x et y s'expriment comme suit :

$$x = \sum w_i x_i / \sum w_i \quad \text{et} \quad y = \sum w_i y_i / \sum w_i \quad (2.16)$$

L'erreur sur la pente est $D^{-\frac{1}{2}}$. De plus, l'ordonnée à l'origine est évaluée dans le seul but de faciliter le traçage de la droite dans le repère (P, R_c). Quant à la section efficace totale, elle ne fait intervenir que la pente, la température du gaz de la cible ainsi que la longueur de la chambre des collisions :

$$\sigma(\text{cm}^2) = 1.0351 * 10^{-19} T(\text{K}) * \text{Pente}((10^{-6} \text{ Torr})^{-1}) / L(\text{cm}) (2.17)$$

CHAPITRE 3
O-O-O-O-O-O

RESULTATS EXPERIMENTAUX ET COMPARAISON AVEC DES MESURES ANTERIEURES

We present our experimental results on graphs and tables as a clear visual summary :

N^{++}	→	Ne, Ar, Kr, Xe	on tables and figures 3.1 to 3.4
Ne^{++}	→	He, Ne, Ar, Kr, Xe	3.5 3.9
Ar^{++}	→	Ne, Ar, Kr	3.10 3.12

On the graphs we have added previous σ_{21} measurements outside our energy range so that a comparison can be made between them, allowing for experimental errors.

A brief analysis of each series corresponding to a given incident ion is made in order to extract general information.

An account is given on the possible contamination of the incident beam of Ne^{++} and Ar^{++} by metastables which naturally modify the measured cross sections.

An idea of other possible studies of the influence of all the variables which rule the behaviour and absolute value of the cross section is presented.

3.1 PRESENTATION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

Après traitement sur ordinateur des données expérimentales et vérification de la linéarité du graphe $R_c = f(P)$, les résultats finals sont consignés dans des tableaux et placés sous forme de courbes dans des repères cartésiens. En ordonnée, il y a la section efficace totale de capture tandis qu'en abscisse se trouve l'énergie du faisceau. Ainsi les tableaux et les figures de 3.1 à 3.4 se rapportent-ils à la section efficace de l'azote pour les cibles de néon, d'argon, de krypton et de xénon. Ces résultats seront bientôt publiés. Quant aux tableaux et aux figures de 3.5 à 3.9, ils présentent la section efficace du néon pour les cinq premiers gaz nobles. Ces mesures font l'objet d'une publication par Suk et al (1977). Les tableaux et les figures 3.10 à 3.12 sont consacrés à l'ion d'argon pour les cibles de néon, d'argon et de krypton dont les mesures ont été publiées par Suk et al (1977)*.

Bien entendu la section efficace σ_{21} a déjà été mesurée par divers groupes de recherche pour des énergies soit plus faibles ou plus élevées que les énergies de notre gamme. Aussi nos mesures s'intègrent-elles très bien dans l'ensemble des séries publiées par le complément d'un vide préjudiciable à une étude plus complète de la variation de la section efficace en fonction de l'énergie de l'ion incident. Nous rapportons sur chaque figure les mesures de ces groupes (ensemble non exhaustif) afin de pouvoir mieux exprimer les comparaisons qui s'imposent. Pour ce faire il faut connaître l'ordre de grandeur des erreurs commises sur ces mesures.

Les mesures publiées par Flaks et Solov'ev (1958) sont données avec une précision de 10 % déduite à partir de la reproduction des mesures. Cependant aucune évaluation des erreurs systématiques n'est faite.

* Mesures faites conjointement

Fedorenko (1954) pense que pour ses mesures les erreurs accidentelles sont considérablement moins importantes que les erreurs systématiques en ce qui concerne l'ordre de grandeur. Il évalue les erreurs accidentelles à 10 % dont 7.5 % sont dus à l'erreur sur les mesures des courants et 2.5 % dus à l'imprécision des mesures de pression.

Quant à Klinger et al (1975) leurs mesures seraient entachées d'une erreur inférieure à 30 %, qui proviendrait principalement de l'incertitude avec laquelle l'épaisseur de la cible est déterminée - d'où les résultats renormalisés de Salzborn (1976) par un calcul tenant compte de l'épaisseur de la cible -. Néanmoins leurs mesures sont reproductibles à 5 %.

En ce qui nous concerne, les erreurs statistiques sur nos mesures s'élèvent à 5 % auxquelles il faut ajouter une erreur systématique de même valeur estimée par la dispersion des mesures. Dans notre cas, il est impossible de refaire une mesure avec tous les ajustements (électriques et magnétiques) identiques ce qui permet d'estimer et d'éliminer toute erreur systématique importante dépendante des conditions de fonctionnement.

3.2 ANALYSE SUCCINCTE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX

Les points expérimentaux ont été lissés à l'aide d'un polynôme de degré 2 ou 3 suivant le cas afin de donner une idée de l'évolution de la section efficace en fonction de l'énergie. Le programme est une version modifiée de celui proposé par McCalla (1967), pour tenir compte des erreurs sur les points expérimentaux. Ce lissage est représenté par la courbe en trait plein sur chaque figure.

3.2.1 Sections efficaces totales de l'azote

3.2.1.1 Cible de néon

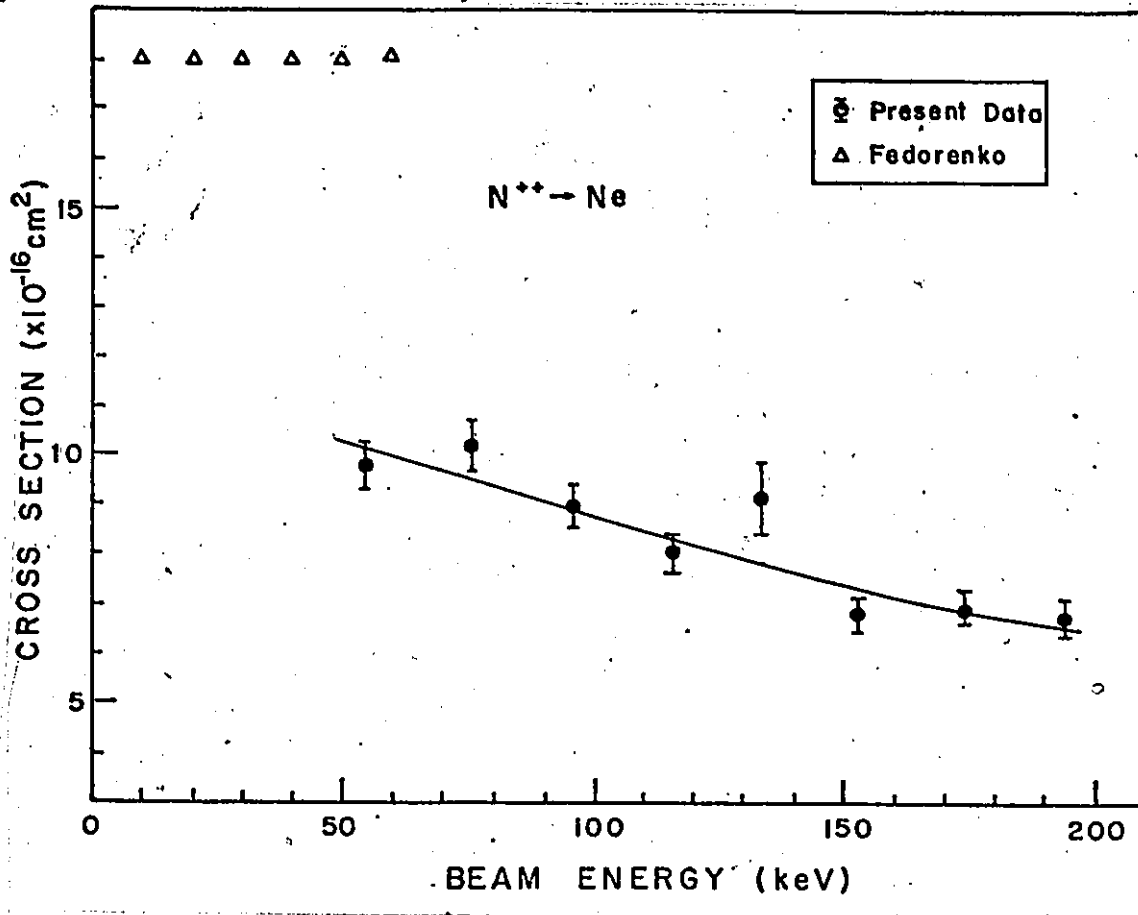


Figure 3.1 : Sections efficaces de l'azote avec cible de néon

Les sections efficaces rangées dans le tableau 3.1 et présentées sur la figure 3.1 sont celles d'un système presque résonnant. La section efficace croît au fur et à mesure que l'énergie du faisceau diminue. Nous ne retenons pas l'idée d'un maximum aux alentours de 75 keV car les mesures de Fedorenko ne montrent aucun signe de décroissance pour des énergies allant jusqu'à 10 keV. Cependant les mesures de Fedorenko sont supérieures aux nôtres par un facteur allant de 1.5 à 2.

TABLEAU 3.1 : Sections efficaces totales de l'azote avec cible de néon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
56.1	9.58	.49
76.2	10.28	.51
96.0	9.09	.45
116.3	8.05	.40
134.1	9.20	.73
153.3	6.87	.35
174.0	6.98	.36
194.2	6.76	.33

3.2.1.2 Cible d'argon

TABLEAU 3.2 : Sections efficaces totales de l'azote avec cible d'argon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
56.2	9.83	.48
75.3	11.87	.58
96.0	12.61	.39
115.1	13.32	1.01
135.3	12.68	.63
155.2	12.45	.61
172.0	11.42	.56
175.2	12.44	.65
198.0	11.72	.60

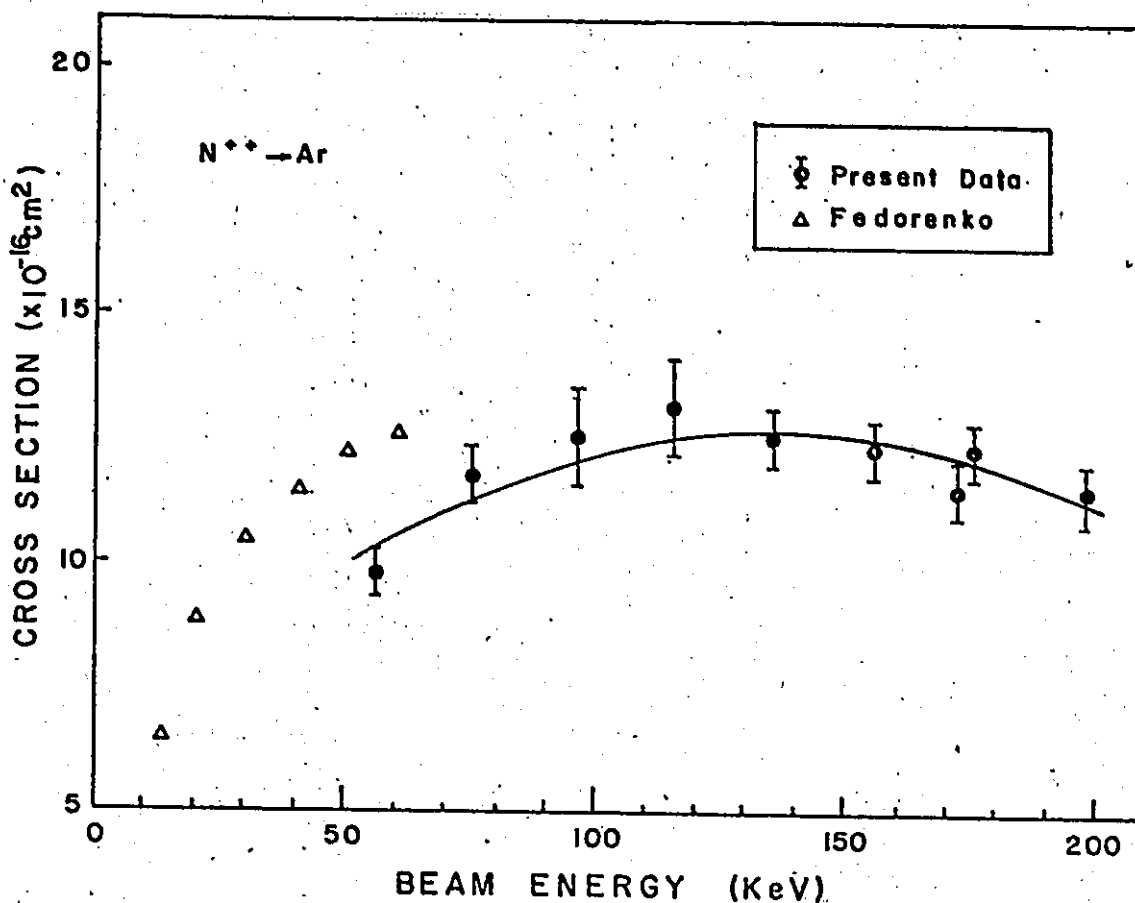


Figure 3.2 : Sections efficaces de l'azote avec cible d'argon

Ces résultats sont consignés dans le tableau 3.2 et montrés sur la figure 3.2 avec celles de Fedorenko. Ici l'accord est satisfaisant aux erreurs expérimentales près entre les deux séries de mesures où elles se recourent. Nos mesures présentent une faible variation avec l'énergie du faisceau pour toute notre gamme. Le lissage donne un maximum aplati vers 135 keV.

3.2.1.3 Cible de krypton

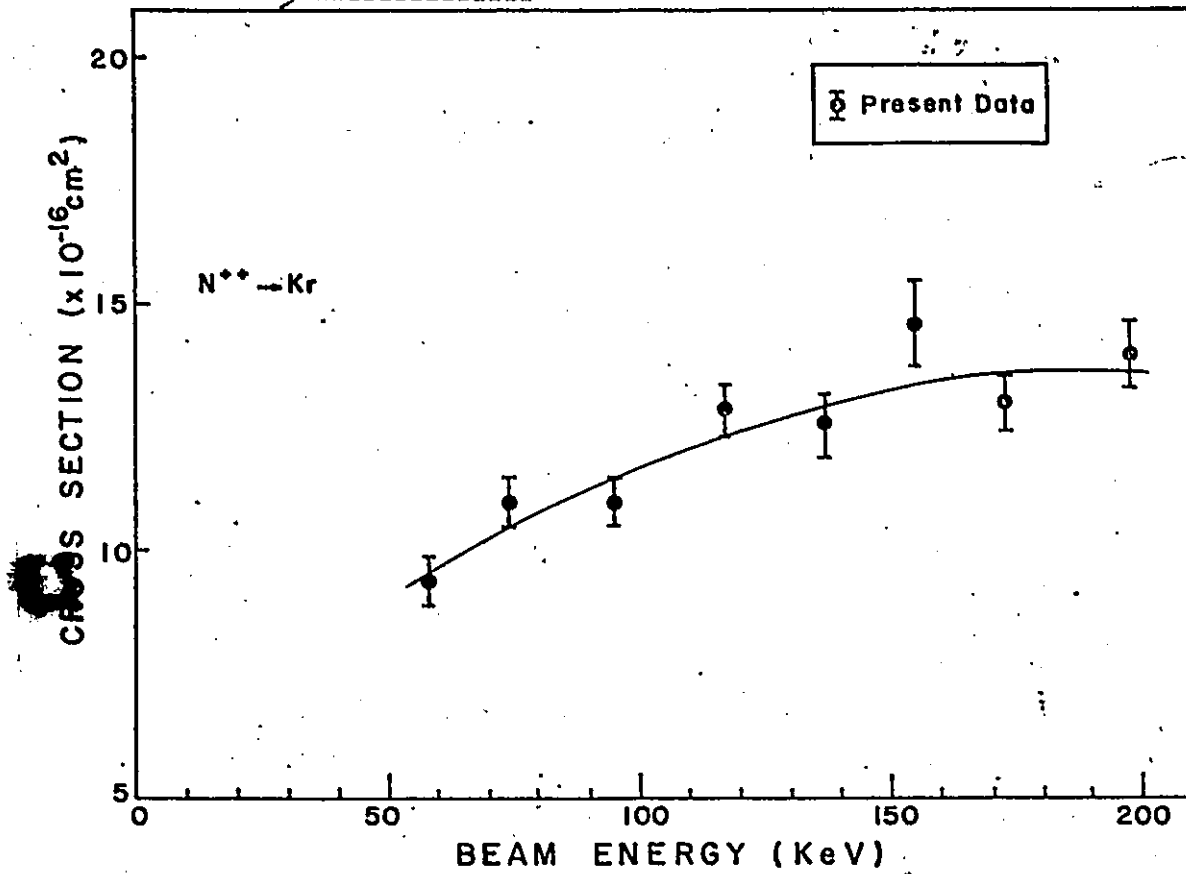


Figure 3.3 : Sections efficaces de l'azote avec cible de krypton

Nos mesures sont placées dans le tableau 3.3, et arrangées sur la figure 3.3. Aucune série de mesures ne semble avoir été faite et par conséquent aucun élément de comparaison n'est disponible. Nous constatons que la croissance avec l'énergie du faisceau est faible et presque linéaire aux erreurs expérimentales près. Un maximum très aplati est donné par le lissage pour 195 keV.

TABLEAU 3.3 : Sections efficaces totales de l'azote avec cible de krypton

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
57.9	9.38	.46
74.2	11.05	.53
95.0	11.03	.55
116.1	11.84	.64
136.8	12.66	.62
173.1	13.10	.65
197.7	13.97	.69

3.2.1.4 Cible de xénon

TABLEAU 3.4 : Sections efficaces totales de l'azote avec cible de xénon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
59.0	11.73	.58
74.8	14.60	.72
97.2	15.00	.75
118.1	16.57	.80
135.1	17.50	.87
156.3	16.80	.99
174.9	18.52	1.02
198.1	16.50	.96

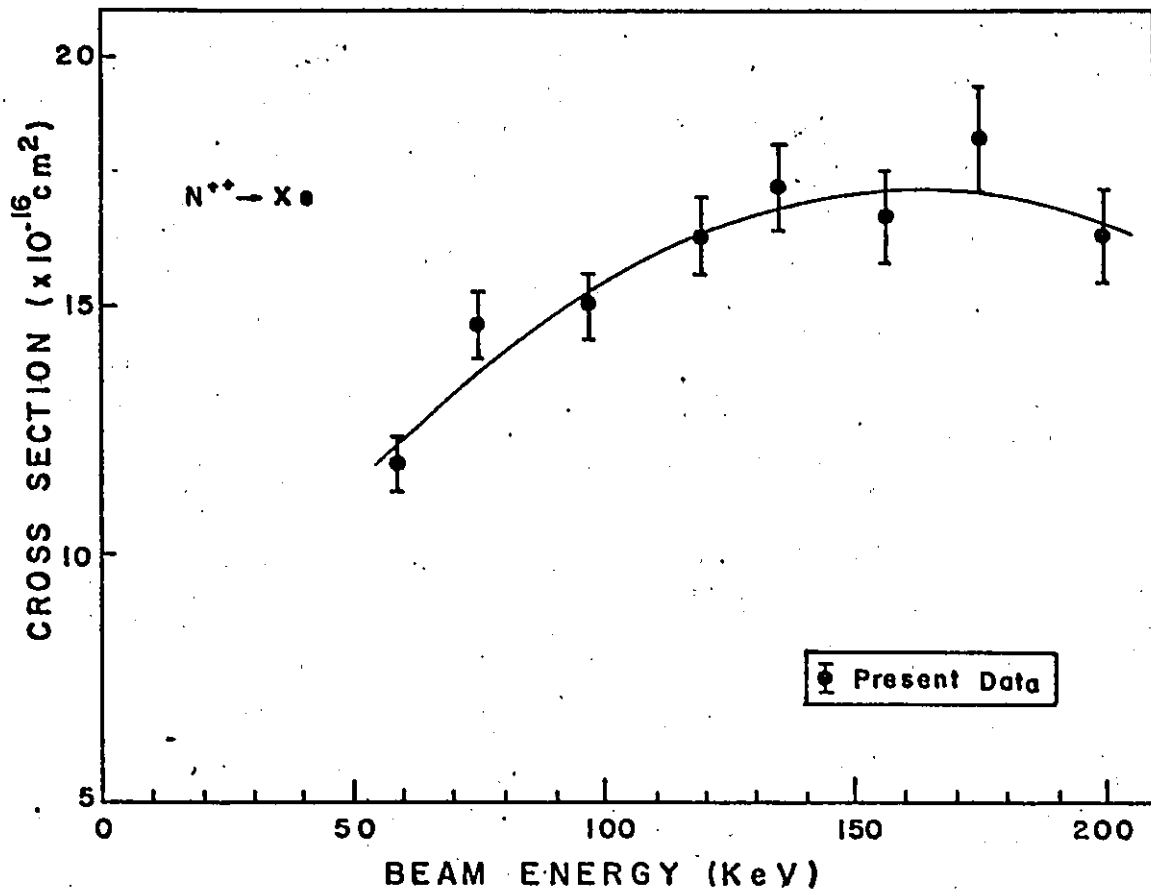


Figure 3.4 : Sections efficaces de l'azote avec cible de xénon.

Les points expérimentaux sont ordonnés dans le tableau 3.4 et agencés sur la figure 3.4. Là encore aucun élément de comparaison n'est disponible. Nous notons un bon accroissement de la section efficace avec l'énergie de l'ion incident et la présence d'un maximum prédit par le lissage vers 160 keV.

3.2.2 Sections efficaces totales du néon

3.2.2.1 Cible d'hélium

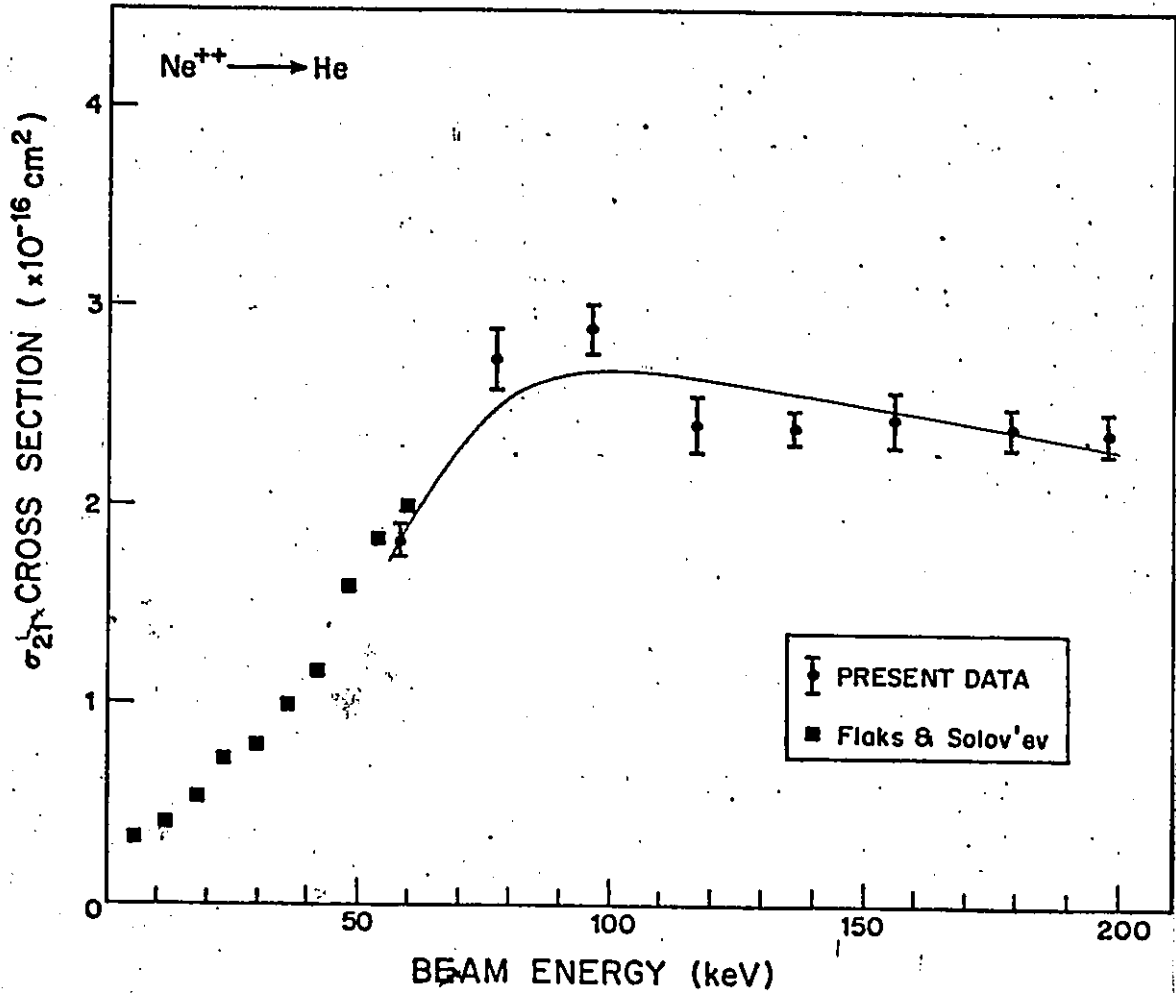


Figure 3.5 : Sections efficaces du néon avec cible d'hélium

Les quantités expérimentales sont arrangées dans le tableau 3.5 et elles sont représentées sur la figure 3.5. L'accord est bon entre nos mesures et celles de Flaks et Solov'ev (FS) à 60 keV. Néanmoins, il semble que les points de FS forment une courbe ayant la concavité opposée à celle désirée. Malgré les fluctuations statistiques des positions des points expérimentaux, un maximum aux alentours de 80 keV est possible. Ce maximum est prédit par

le lissage à 100 keV.

TABLEAU 3.5 : Sections efficaces totales du néon avec cible d'hélium

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
57.9	1.83	.08
77.1	2.73	.15
96.2	2.89	.13
117.2	2.41	.14
136.3	2.40	.08
155.7	2.43	.15
179.1	2.39	.11
197.7	2.36	.12

3.2.2.2 Cible de néon

TABLEAU 3.6 : Sections efficaces totales du néon avec cible de néon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
56.3	2.07	.08
75.1	2.37	.06
95.1	3.34	.13
96.5	3.39	.12
114.8	3.30	.14
134.2	3.63	.12
154.7	3.73	.12
175.1	3.78	.14
193.4	4.35	.11

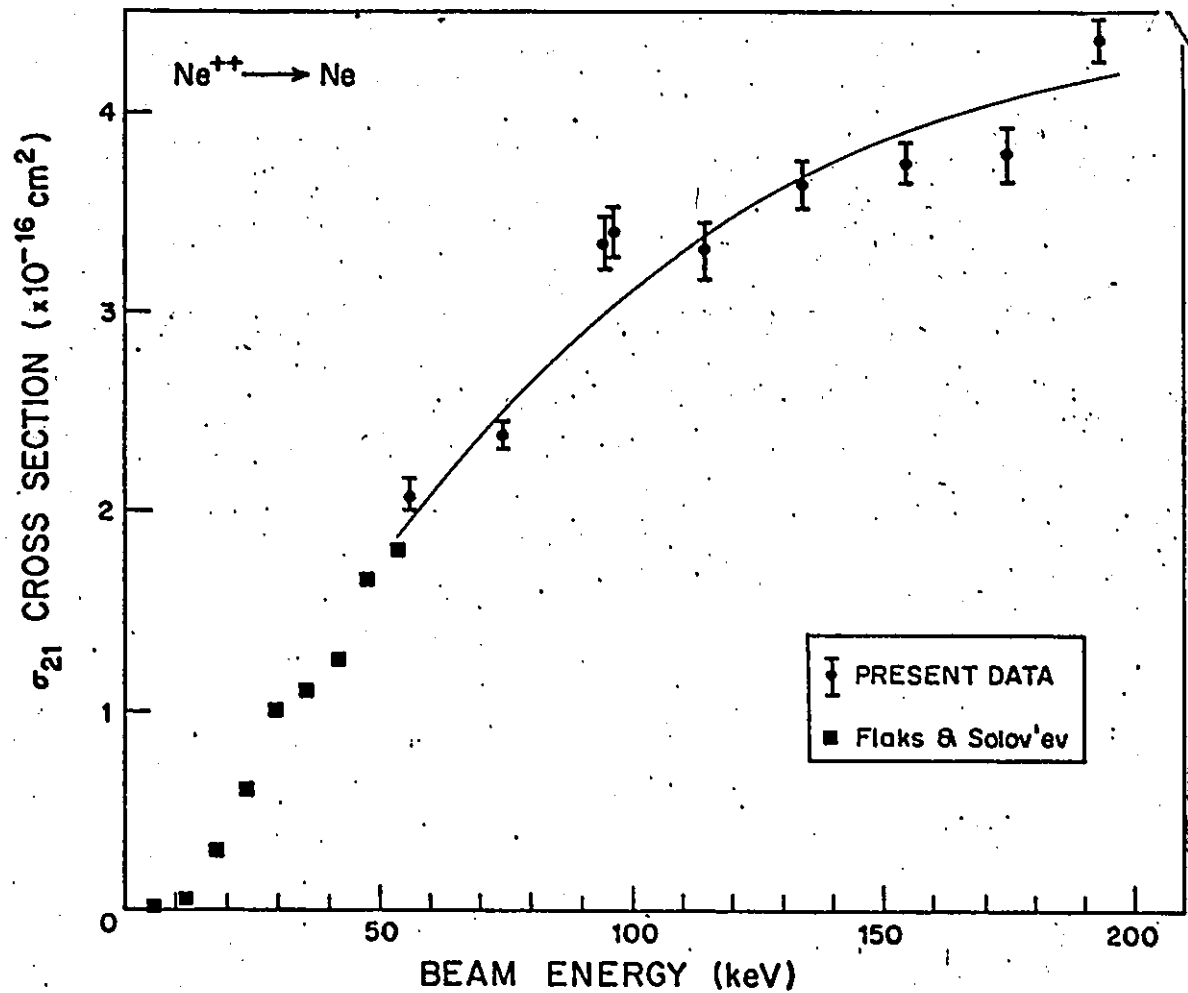


Figure 3.6 : Sections du néon avec cible de néon

Ces sections efficaces placées dans le tableau 3.6 et distribuées sur la figure 3.6 montrent la croissance monotonique en fonction de l'énergie du faisceau. De nouveau un bon accord avec les mesures de FS est à noter. Dans notre gamme des énergies, la courbe ne présente pas de maximum malgré un fléchissement de l'accroissement en fonction de l'énergie à l'extrémité supérieure de notre gamme.

3.2.2.3 Cible d'argon

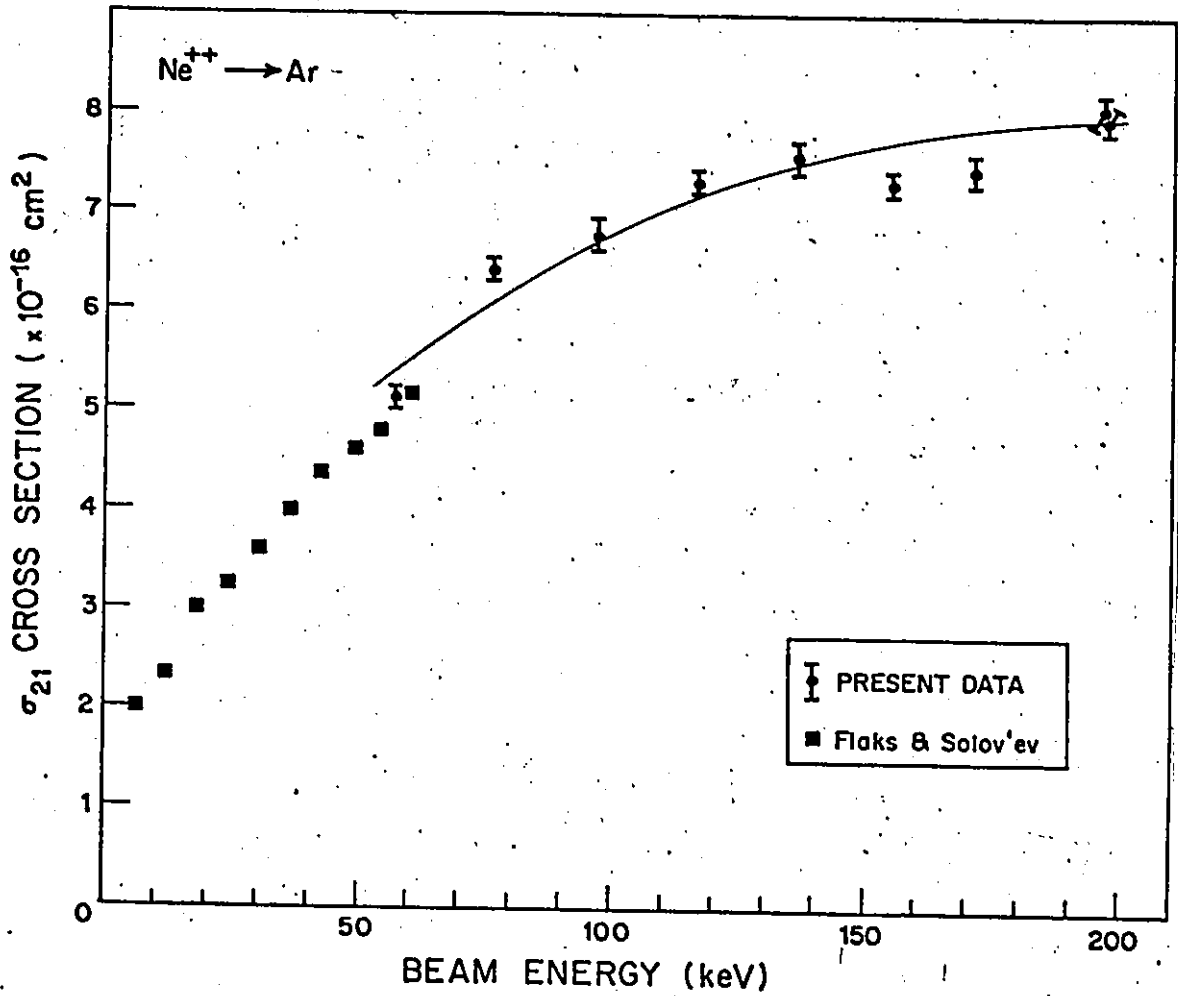


Figure 3.7 : Sections efficaces du néon avec cible d'argon

Les points sont ordonnés dans le tableau 3.7 et disposés sur la figure 3.7. Les mesures de FS s'alignent parfaitement sur les nôtres. Ici encore la section efficace présente un maximum aplati dans notre gamme des énergies (180 keV).

TABLEAU 3.7 : Sections efficaces totales du néon avec cible d'argon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
57.1	5.12	.12
76.3	6.42	.11
97.0	6.78	.15
116.4	7.31	.11
136.5	7.56	.17
155.0	7.36	.15
176.0	7.44	.15
196.8	8.00	.10
196.7	8.05	.10

3.2.2.4 Cible de krypton

TABLEAU 3.8 : Sections efficaces totales du néon avec cible de krypton

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
58.4	7.89	.16
76.7	9.06	.16
98.8	9.62	.17
119.9	10.07	.16
139.3	10.22	.14
142.3	10.05	.22
157.5	10.29	.15
166.0	10.60	.20
176.4	10.74	.11
196.3	10.84	.14

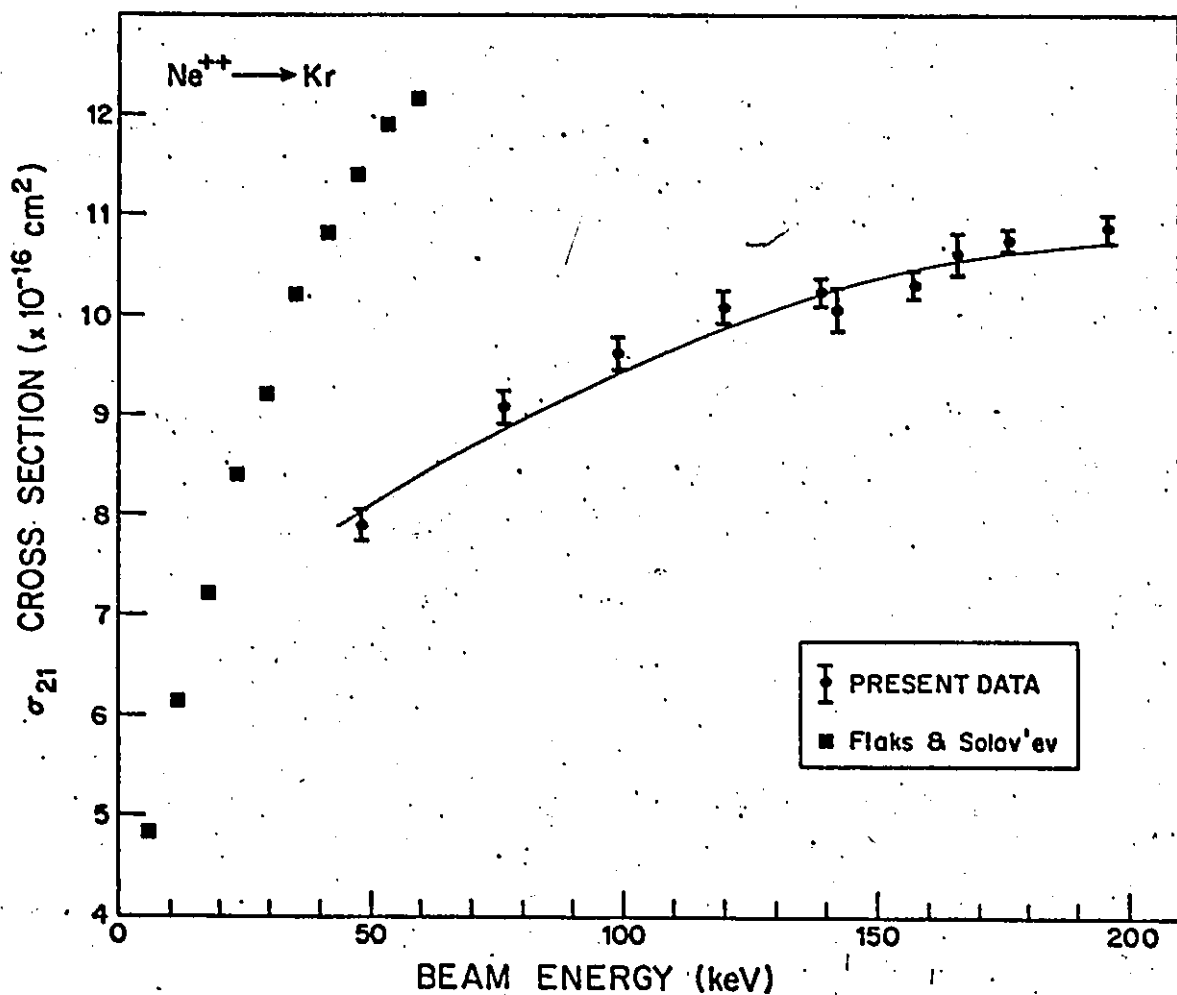


Figure 3.8 : Sections efficaces du néon avec cible de krypton

Ces mesures sont rangées dans le tableau 3.8 et paraissent sur la figure 3.8. Ici, la variation énergétique des points publiés par FS est plus rapide que celle observée pour nos mesures. Par ailleurs les points de FS semblent s'infléchir vers 60 keV. A cette énergie, une différence de 50 % entre ces deux séries de mesures est peut être due à quelque erreur systématique. Le lissage donne un maximum de la section efficace à 200 keV.

3.2.2.5 Cible de xénon

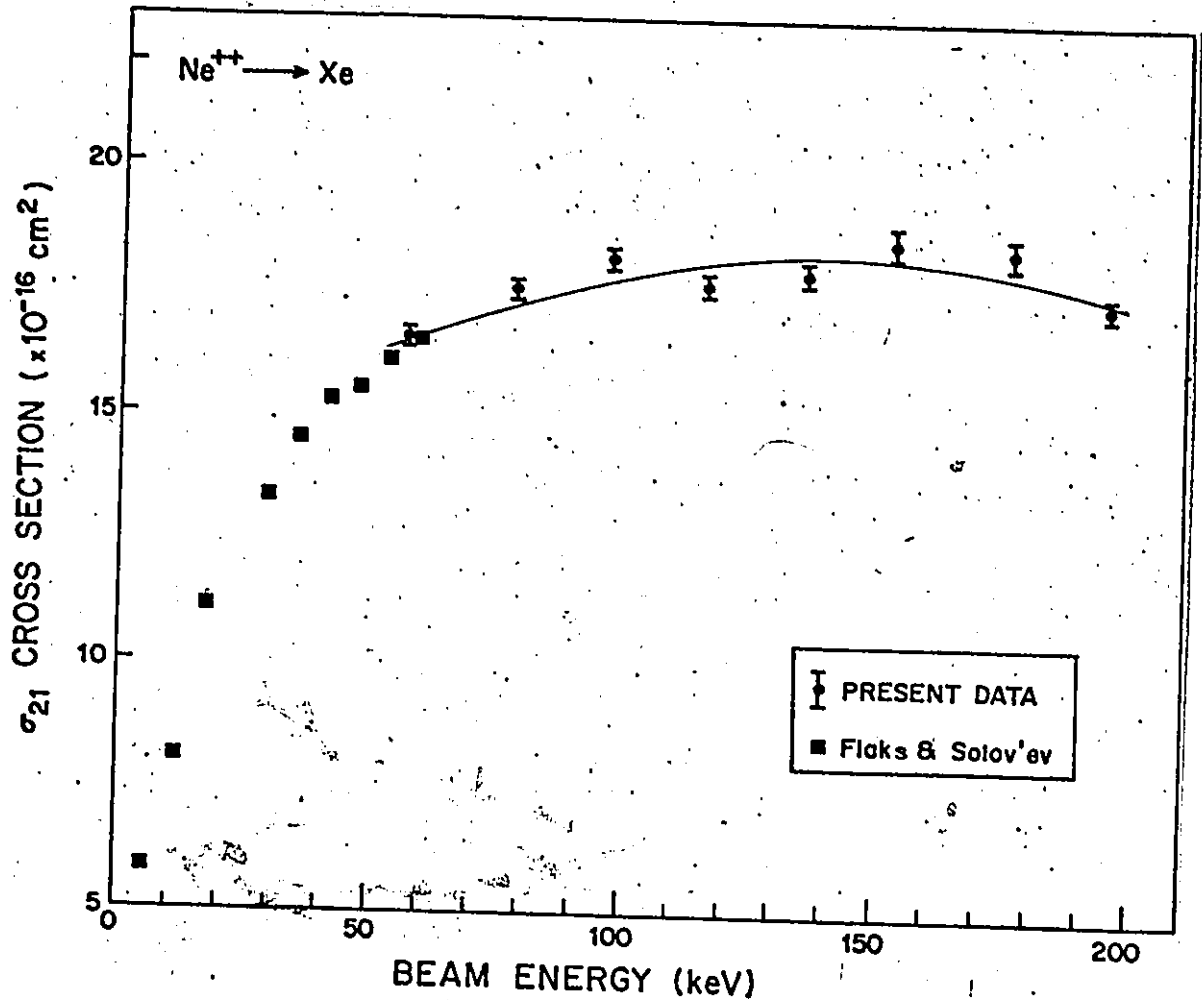


Figure 3.9 : Sections efficaces du néon avec cible de xénon

Les valeurs sont sériées dans le tableau 3.9 et placées sur la figure 3.9 avec celles de FS. Ici, un accord parfait tant pour la variation en fonction de l'énergie du faisceau que pour les valeurs absolues qui coïncident à 60 keV. Malgré la dispersion des points expérimentaux, un maximum peut être prédit pour des énergies un peu supérieures à 110 keV (le lissage donne 140 keV). Aucune oscillation de la section efficace ne doit être retenue.

TABLEAU 3.9 : Sections efficaces totales du néon avec cible de xénon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
57.5	16.54	.17
78.6	17.51	.20
97.5	18.17	.20
116.4	17.64	.20
136.5	17.88	.23
153.8	18.55	.29
170.5	18.37	.27
195.3	17.29	.23

3.2.3 Sections efficaces totales de l'argon

.....

3.2.3.1 Cible de néon

TABLEAU 3.10 : Sections efficaces totales de l'argon avec cible de néon

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
50.6	11.83	.61
63.6	11.64	.43
85.2	10.34	.54
109.9	9.38	.39
132.5	8.19	.52
161.8	8.28	.25
181.1	7.96	.36
191.7	7.87	.33

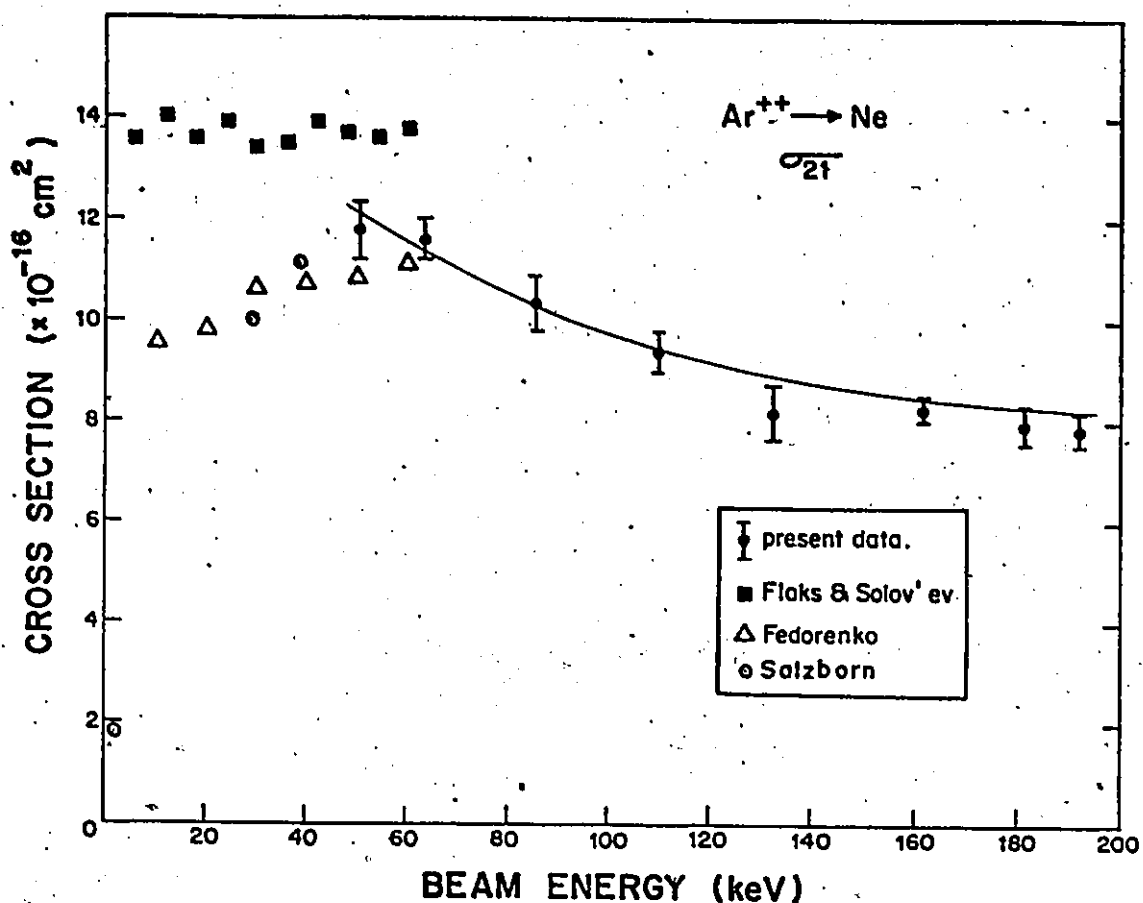


Figure 3.10 : Sections efficaces de l'argon avec cible de néon

Les sections efficaces inscrites par ordre d'énergie croissante dans le tableau 3.10 sont présentées sur la figure 3.10. La courbe illustrant la variation en fonction de l'énergie de l'ion incident présente un maximum prononcé pour une énergie d'environ 50 keV. Bien que nos mesures ne nous permettent pas de le définir plus précisément, il est néanmoins confirmé par les mesures de Salzborn et de Fedorenko. Dans ce cas les mesures de FS sont supérieures de 15 % et ne montrent pas de décroissance de la section efficace avec la diminution de l'énergie.

3.2.3.2 Cible d'argon

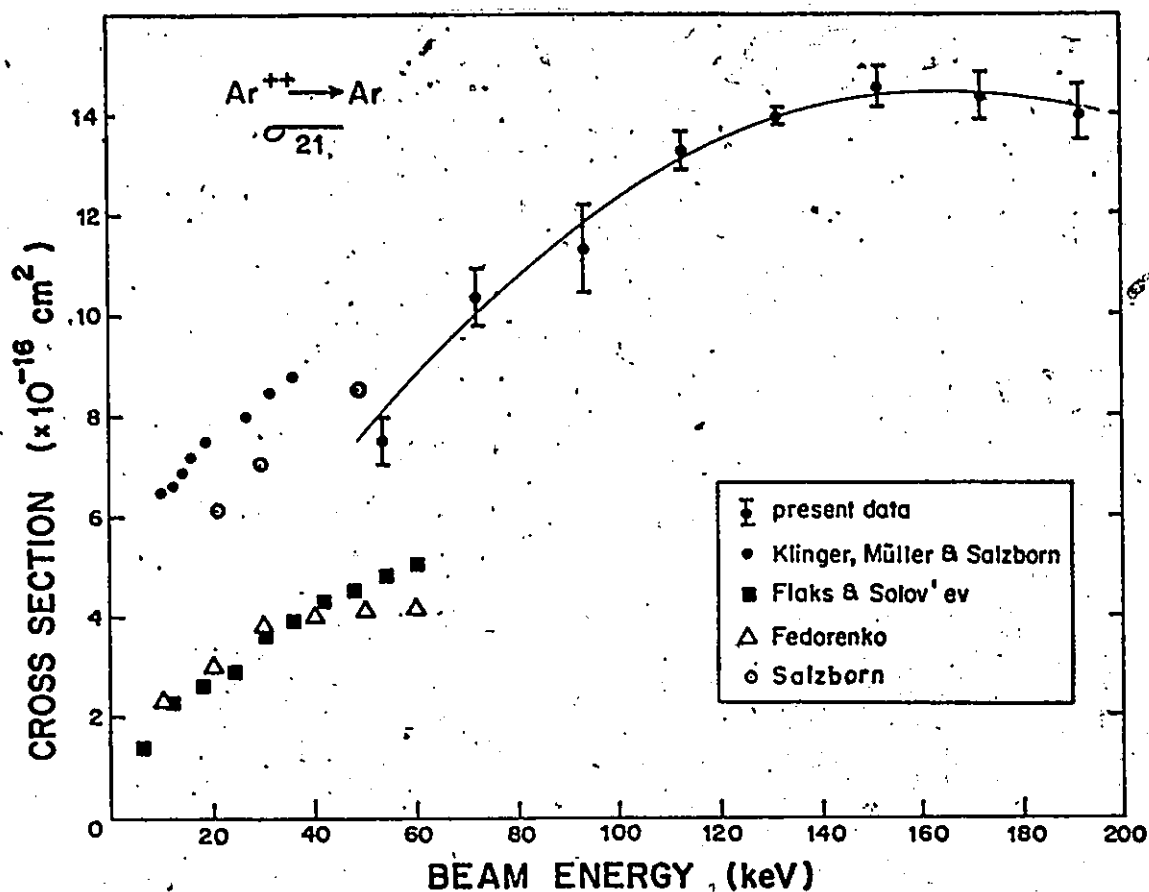


Figure 3.11 : Sections efficaces de l'argon avec cible d'argon

Les valeurs des sections sont groupées dans le tableau 3.11 et montrées sur la figure 3.11. Les mesures précédentes de Klinger et al et de Salzborn montrent l'accroissement de la section efficace en fonction de l'énergie du faisceau, ce que confirme notre série de mesures. Aux environs de 160 keV nous apercevons la présence d'un maximum. Les mesures de FS et celles de Fedorenko sont 40 % plus petites que nos valeurs à 60 keV, où elles présentent un fléchissement de l'accroissement avec l'énergie ce qui laisse suggérer la présence proche d'un maximum.

TABLEAU 3.11 : Sections efficaces totales de l'argon avec cible d'argon

Energie (keV) Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$) Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
53.4	7.49	.47
72.2	10.33	.57
93.7	11.30	.88
113.3	13.27	.37
132.1	13.96	.16
152.2	14.54	.38
172.4	14.35	.46
192.1	14.03	.56

3.2.3.3 Cible de krypton

TABLEAU 3.12 : Sections efficaces totales de l'argon avec cible de krypton

Energie (keV) Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$) Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)

Energie (keV)	Section efficace ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)	Erreur ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$)
52.2	7.80	.11
72.2	11.01	.27
92.5	11.24	.19
112.8	12.69	.34
132.7	13.39	.48
153.2	15.85	.23
171.5	16.44	.81
193.0	15.86	.41

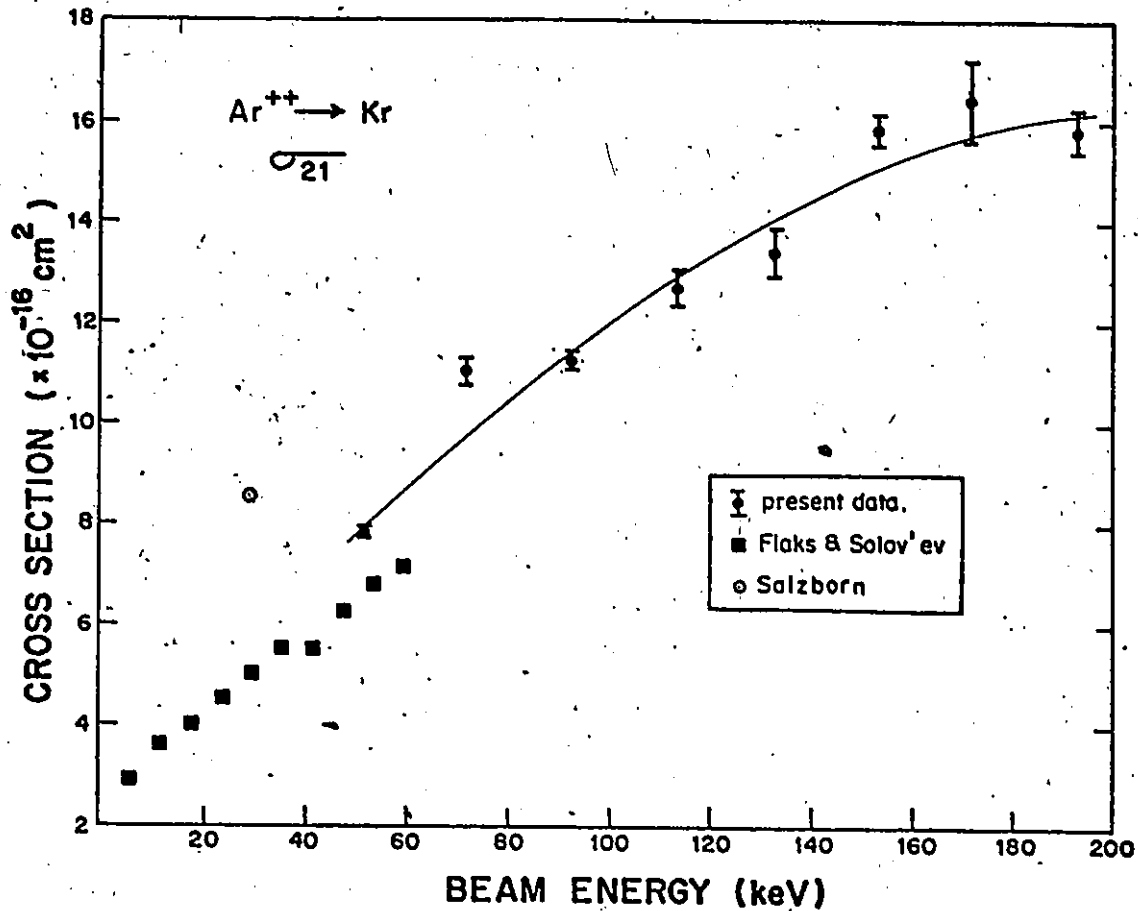


Figure 3.12 : Sections efficaces de l'argon avec cible de krypton

Les sections efficaces sont classées dans le tableau 3.12 et présentées sur la figure 3.12. Ici nous remarquons un meilleur accord entre les mesures de FS et les nôtres que pour la cible d'argon bien que leurs valeurs absolues soient légèrement plus petites. Nous ne pouvons affirmer qu'il y ait un maximum aux environs de 180 keV (pas donné par le lissage) du fait de la dispersion des points expérimentaux. La seule valeur de Salzborn est sensiblement supérieure aux valeurs extrapolées que nous serions censés obtenir à plus basse énergie.

3.2.4 Remarques

La section efficace totale de capture σ_{21} que nous présentons est une fonction croissante des nombres atomiques de l'ion incident (Z_A) et de l'atome de la cible (Z_B). De plus lorsque le nombre atomique de l'ion incident est beaucoup plus petit que celui de la cible, la section efficace évolue peu en fonction de l'énergie de l'ion incident dans notre gamme des énergies.

Pour confirmer nos résultats, nous disposons aussi de deux mesures faites à 100 keV par Winter et al (1977) par une méthode optique. Ce sont celles pour l'ion de néon avec cibles d'hélium et d'argon qui valent respectivement 4.3 et 12 ($\times 10^{-16} \text{ cm}^2$) dont la précision relative est de 50 %. Mais Winter pense que les valeurs absolues pourraient être trois fois trop grandes. Chaque mesure étant seule dans une série, elles n'ont pas été placées sur les figures respectives. En plus, Winter (1977) confirme nos valeurs expérimentales de la série Ne^{++} avec cibles d'hélium, de néon et d'argon, utilisant la soustraction des sections efficaces des ions lents et celles des électrons.

3.2.5 Métastables

Nous avons refait la mesure de σ_{21} de l'ion Ne^{++} avec cible de Kr à 200 keV avec une chambre de pré-collision (section 2.1.3) contenant de l'argon. Le résultat de cette mesure fut un léger accroissement de la section efficace d'un facteur $1.09 \pm .07$. Avec un tel facteur, il ne nous était pas possible de conclure catégoriquement à la présence d'ions métastables, du fait que cette nouvelle section efficace se situe très légèrement au-dessus de la précédente aux erreurs expérimentales près. Si contamination il y a, elle est peu importante et une valeur supérieure de 6 % pourrait être donnée. Cependant,

vu le bon accord obtenu entre les mesures de Flaks et Solov'ev et les nôtres, il est fort probable pour que la contamination soit très faible car F.S. ne font aucune mention de la présence d'ions métastables. Pour les mesures faites avec l'ion incident Ar^{++} aucun test ne fut entrepris car nos mesures sont dans l'alignement, aux erreurs expérimentales près, de celles de Salzborn qui sont exemptes de toute contamination par des ions métastables.

3.3 ETUDES POSSIBLES

Malgré l'abondance de nos mesures, il n'est pas possible d'extraire des informations sur le comportement de la section efficace totale de capture en fonction de tous les paramètres dont elle dépend :

e.g. $\sigma_{mk} = f(Z_A, m, k, E, Z_B)$

où Z_A , m , k , E , Z_B sont respectivement le nombre atomique, les degrés d'ionisation initial et final et l'énergie de l'ion incident ainsi que le nombre atomique de la cible. Seuls les effets qualitatifs de Z_A et Z_B ont pu être établis ainsi que la variation avec l'énergie dans le domaine d'extension de nos mesures.

Quant à l'effet du degré d'ionisation, Fedorenko et al (1960) ont montré à l'aide de mesures entre 0 et 100 keV que la charge électrique de l'ion incident n'a pas d'effet majeur sur l'amplitude de la section efficace. En ce qui concerne Klinger et al (1975), ils ont étudié les sections efficaces de capture de l'ion d'argon à charges multiples pour une cible d'argon. Leurs valeurs expérimentales montrent que les sections efficaces - à l'exception de σ_{21} - sont pratiquement indépendantes de l'énergie des ions incidents (20 - 100 keV) et qu'elles décroissent avec le nombre d'électrons capturés.

L'accélérateur dont nous disposons ne nous permet pas d'obtenir un faisceau d'ions à charges multiples (supérieures à 2) d'intensité suffisante pour faire des mesures de précision acceptable. De plus les études en fonction de m et k où k est égal à zéro ne sont pas réalisables du fait même de la construction de l'analyseur électrostatique.

CHAPITRE 4
O-O-O-O-O-O

FORMALISME GENERAL POUR L'ETUDE DES COLLISIONS

The general study of collisions is divided in three energy regions. In the case of the intermediate region, the main approximation is that which Born-Oppenheimer developed for molecules. This approximation supposes that it is possible to separate the nuclear and electronic motions due to the large mass difference between electrons and nuclei. The nuclear motion can be treated classically while the electronic motion is considered on a quantum basis.

The use of a variational method enables us to go from the wave treatment equations to the classical equations which are called the impact parameter equations. In the coupled equations of the electronic transition amplitudes, the nuclear motion is a parameter and causes the coupling between the electronic states and thus is the source of the inelastic transitions.

After giving the conditions to be fulfilled by the electronic wave functions to satisfy the detailed balancing of the reaction, it is shown how to obtain the total cross section as the integral over all impact parameters of the transition probability to find the system in a given state after the collision.

In order to satisfy the boundary conditions of the Schroedinger equation, the electronic wave functions which are stationary have to be transformed into travelling waves. This transformation implies additional terms in the Schroedinger equation satisfied by the stationary waves.

Finally a brief account of both formalisms used to represent a collision is given. They are the adiabatic and diabatic formulations which are both suitable to describe the collision process.

L'énoncé général de la description d'un phénomène physique ne tient pas compte des difficultés d'obtention de certaines quantités mathématiques ou tout simplement de la difficulté de manier des équations fort complexes. Ceci amène l'emploi d'approximations qui simplifient considérablement le formalisme mathématique. Bien entendu, les résultats dépendent du degré de validité des approximations et sont par conséquent applicables dans des domaines bien définis.

Dans les chapitres de cette deuxième partie, les unités atomiques seront employées ($e = m = \hbar = 1$). Si d'autres unités sont utilisées, elles seront spécifiées. Pour des raisons de clarté, quelquefois, h ou \hbar apparaîtra dans le texte.

4.1 GENERALITES D'INTRODUCTION

4.1.1 Différentes zones énergétiques pour l'étude des collisions

Les collisions avec capture, auxquelles nous nous intéressons, ressortissent au domaine des collisions lentes, c'est-à-dire que la vitesse relative d'approche des deux particules v est beaucoup plus petite que la vitesse orbitale V_{e^-} de l'électron actif impliqué dans l'échange électronique :

$$V_{e^-} \gg v \quad (4.1)$$

Pour définir grossièrement une limite supérieure à la gamme des énergies auxquelles les collisions seront dites lentes nous utilisons la relation :

$$E(\text{keV}) = 25 * M(\text{u.m.a}) * v(\text{u.a})^2 \quad (4.2)$$

dans laquelle nous faisons $v = 1$. Cette valeur de v est telle que pour

des systèmes simples la section efficace de réarrangement passe par un maximum. Nos mesures ayant été faites entre 50 et 200 keV, où la condition $v < 1$ est satisfaite, se situent dans une plage intermédiaire entre les basses et les hautes énergies. Aux basses énergies, l'étude des collisions ne peut se faire qu'à l'aide d'un traitement quantique, simplifié par la méthode des déphasages. Seuls les premiers déphasages, c'est-à-dire pour les faibles valeurs du moment angulaire orbital l , sont à considérer car une particule ayant un moment angulaire élevé ne sera pas affectée par le potentiel d'interaction (Schiff, 1955). Aux hautes énergies, l'approximation de Born-Oppenheimer (section 4.1.2) n'est plus valable et il est nécessaire de lui subroger l'approximation de Born (Messiah, 1964) qui est une méthode de perturbation du potentiel d'interaction entre la particule et la cible à un ordre donné. Rapp et Francis (1962) ont proposé, en fonction des considérations ci-dessus, pour borne supérieure des basses énergies la valeur $v(\text{u.a.}) = 5 \cdot 10^{-4} / \mu^{\frac{1}{2}}$ et pour borne inférieure des hautes énergies $v \approx .5$ (u.a.) où μ est la masse réduite des deux réactants.

4.1.2 Approximation essentielle de la zone énergétique intermédiaire

Pour les énergies de la zone intermédiaire, la longueur d'onde $\lambda = 1 / M v$ associée à l'ion incident est inférieure aux dimensions interatomiques. Il est alors loisible de négliger toute cohérence entre les ondes diffusées par les différents atomes de la cible (Cohen-Tannoudji et al, 1973). De plus pour les réactions de capture, l'onde associée au transfert d'énergie λ_p doit aussi être inférieure aux dimensions interatomiques. Gurnee et Magee (1957) formulèrent ces conditions en fonction de la distance de plus courte

approche b_0 :

$$\begin{aligned} b_0 M v &\gg 1 \\ b_0 \Delta p &\gg 1 \end{aligned} \quad (\text{u.a.}) \quad (4.3)$$

Ceci peut aussi être exprimé par le fait que l'extension des paquets d'ondes qui décrivent le mouvement atomique est petite en comparaison de la distance moyenne entre les atomes de la cible.

L'idée de l'emploi de l'approximation de Born-Oppenheimer* vient de ce que nous considérons les deux atomes de la réaction comme formant une molécule dont la distance internucléaire varie lentement au cours de la collision. Dans l'approximation de B.O., il est possible de séparer le mouvement électronique du mouvement nucléaire. Cette séparation est la conséquence de la grande différence de masse entre le noyau et l'électron (Bethe et Jackiw, 1968; Morrison et al, 1976). L'énergie cinétique des noyaux de la molécule est beaucoup plus petite que celle de l'électron et, comme la période de déplacement est de l'ordre de grandeur de \hbar sur l'énergie, la période nucléaire est beaucoup plus grande que la période électronique. Ainsi donc, dans l'étude du mouvement électronique pourrions-nous considérer les noyaux comme fixes.

Considérant l'équation (4.1) qui définit les collisions lentes, nous percevons l'analogie possible entre une molécule et nos atomes d'une collision pourvu que la vitesse d'approche ne soit pas trop élevée. Etant donné que les deux atomes se déplacent, l'approximation de B.O. sera plus ou moins valide en fonction de la vitesse de déplacement. Cette vitesse est essentielle pour qu'il y ait des transitions électroniques, c'est-à-dire pour qu'il y ait un échange entre les états électroniques au cours de la collision de durée τ_c : la probabilité de transition étant fonction du rapport du temps de collision à

* Article original : Born, M. and Oppenheimer, J.R. 1927, Ann. d. Phys. 84, 457

la période du mouvement interne (section 6.1). L'idée de considérer les noyaux fixes implique un adiabatisme complet et donc pas de transition électronique puisque pour chaque valeur de la séparation internucléaire les électrons évoluent d'un état stable à un autre par quantités infinitésimales - perturbation trop faible -.

Le développement mathématique utilisant cette approximation s'appelle méthode du paramètre d'impact. Elle permet de traiter les atomes comme des particules classiques (éq. 4.3) et de déterminer de manière quantique la probabilité pour qu'une transition ait lieu entre deux états électroniques quantiques.

4.2 THEORIE GENERALE

4.2.1 Formalisme fondé sur l'approximation de Born-Oppenheimer

Suivant l'idée de l'approximation de Born-Oppenheimer, la fonction d'onde totale ψ du système s'exprime comme une combinaison linéaire des états stationnaires :

$$\psi = \sum_i | N_i(R) \rangle \cdot | \phi_i(r, R) \rangle \quad (4.4)$$

où R est la coordonnée internucléaire et r l'ensemble des coordonnées des électrons. La coordonnée internucléaire intervient paramétriquement dans les fonctions électroniques ϕ_i et par conséquent les fonctions nucléaires sont définies en rapport avec l'énergie potentielle des électrons pour chaque configuration du système. La fonction ψ satisfait à l'équation de Schroedinger :

$$H \psi = E \psi \quad (4.5)$$

où E est l'énergie totale du système. L'hamiltonien H peut être séparé en

différentes composantes, c'est-à-dire l'énergie cinétique des noyaux T_N , l'énergie cinétique des électrons T_e et l'énergie potentielle V du système. Dans le cadre de cette approximation, pour une configuration donnée, les fonctions d'onde électroniques sont solutions de :

$$H_e | \phi_i \rangle = E_i^e | \phi_i \rangle \quad (4.6)$$

où $H_e = T_e + V$ est l'opérateur hamiltonien électronique. La substitution de l'équation (4.4) dans l'équation (4.5) et l'utilisation de :

$$\Delta(pq) = (\Delta q) p + (\Delta p) q + 2 \nabla p \cdot \nabla q \quad (4.7)$$

$$T_N = - (1 / 2 M) \Delta_R \quad (4.8)$$

où M est la masse réduite des noyaux, conduisent à l'expression :

$$\sum_i \{ (T_N | \phi_i \rangle | N_i \rangle + ((T_N + H_e) | N_i \rangle) | \phi_i \rangle - M^{-1} \nabla_R | \phi_i \rangle \cdot \nabla_R | N_i \rangle \} = E \sum_i | N_i \rangle | \phi_i \rangle \quad (4.9)$$

Pour obtenir l'équation du mouvement nucléaire, il suffit de projeter l'équation (4.9) sur un des vecteurs électroniques, par exemple ϕ_j (Melius et Goddard, 1974) :

$$\sum_i \{ S_{ij} (T_N + H_e) + \langle \phi_j | T_N | \phi_i \rangle - M^{-1} \langle \phi_j | \nabla_R | \phi_i \rangle \cdot \nabla_R - E S_{ij} \} | N_i \rangle = 0 \quad (4.10)$$

où $S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle$ est l'élément de matrice de recouvrement électronique et $\langle | \dots \rangle$ signifie l'intégration sur les variables électroniques.

Si nous négligeons les termes de couplage entre les états électroniques dus à la vitesse de déplacement finie des noyaux, nous retrouvons l'équation du mouvement nucléaire de B.O.. Ce sont ces termes de couplage qui assurent les transitions entre les états électroniques et qui représentent la diffusion inélastique. Du fait de la vitesse finie de déplacement, le système ne sera pas

adiabatique mais dit quasi-adiabatique. (section 4.4).

4.2.2 Méthode de variation pour l'obtention des équations couplées dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact

Pour obtenir les équations dites du paramètre d'impact à partir de l'équation (4.10), nous utilisons l'idée des paquets d'ondes. Delos et al (1972) présentèrent et analysèrent les avantages et inconvénients de l'approche par les paquets d'ondes. Cette approche suggère que la trajectoire adéquate est celle du centre de masse d'un paquet d'ondes microscopiques puisqu'elle pondère le potentiel de chaque état électronique en fonction de la probabilité de trouver le système dans cet état. De plus, elle est indépendante de la représentation choisie pour décrire les états électroniques et assure la conservation de l'énergie et du moment angulaire. Néanmoins, Delos et Thorson (1972) pensent que cette approche impose la condition trop sévère des faibles dimensions interatomiques et de ce fait réduirait son champ d'application aux énergies assez élevées. Dans la zone énergétique intermédiaire la condition ci-dessus est satisfaite et par conséquent le mouvement nucléaire reste bien défini dans toute la région de diffusion.

Le passage du traitement quantique - formalisme ondulatoire - à la représentation classique a été fait par Delos et al en utilisant un opérateur de densité tandis que Bransden (1972) et Briggs (1976) utilisèrent une méthode de variation. Nous suivrons la démarche proposée par Briggs.

Définissons d'abord le paquet d'ondes qui décrit le mouvement nucléaire $| N(R, t) \rangle$ et la fonction d'onde électronique $|\phi(r, R, t)\rangle$. Cette dernière peut être décomposée sur une base d'états stationnaires telle que :

$$| \phi(r, R, t) \rangle = \sum_n C_n(t) | \phi_n(r, R) \rangle \quad (4.11)$$

La fonction d'onde totale d'essai du système reste le produit $| N \rangle$ par $|\phi\rangle$:

$$\psi(r, R, t) = | N \rangle | \phi \rangle \quad (4.12)$$

Soit la fonctionnelle :

$$F = \int_{-\infty}^{+\infty} dt (N | \langle \phi | \cdot H - i\partial/\partial t | \phi \rangle | N) \quad (4.13)$$

qui représente l'intégrale sur $t \in]-\infty, +\infty [$ de la différence des deux membres de l'équation de Schroedinger, $H\psi = i\partial\psi/\partial t$, intégrée sur les variables $R = (| \dots |)$ - et $r = \langle | \dots | \rangle$ -. Si la fonction d'essai était solution exacte de l'équation de Schroedinger pour tout t , la fonctionnelle serait égale à zéro. Si le choix de la fonction d'essai ψ est correct, la fonctionnelle F doit rester constante pour des variations, au premier ordre, indépendantes des coefficients $C_n(t)$ et de leurs complexes conjugués, ainsi que pour des variations de la fonction nucléaire $| N \rangle$. Les deux conditions de stabilité ci-dessus définissent respectivement les équations des amplitudes de probabilité électroniques et l'équation du mouvement nucléaire. L'équation (4.9) et l'emploi de :

$$i\partial/\partial t (| \phi \rangle | N \rangle) = | \phi \rangle (i\partial/\partial t | N \rangle) + (i\partial/\partial t | \phi \rangle) | N \rangle \quad (4.14)$$

permettent d'exprimer la fonctionnelle F comme suit :

$$\begin{aligned} F &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \{ (N | \langle \phi | \phi \rangle (T_N - i\partial/\partial t) | N \rangle) + \\ & (N | \langle \phi | T_N | \phi \rangle | N \rangle) + (N | \langle \phi | H_e - i\partial/\partial t | \phi \rangle | N \rangle) \\ & - M^{-1} (N | \langle \phi | \nabla_R | \phi \rangle \cdot \nabla_R | N \rangle) \end{aligned} \quad (4.15)$$

4.2.2.1 Equations couplées des amplitudes de probabilité électroniques

L'expression F sera stable pour des variations des coefficients C_m^* indépendantes au premier ordre si elle ne dépend pas de ces coefficients :

$$\partial F / \partial C_m^* = 0 \quad (4.16)$$

En tenant compte de ce que :

$$\partial / \partial C_m^* \left(\sum_n C_n^* \phi_n^* \right) = \phi_m^* \quad (4.17)$$

la condition (4.16) s'exprime pour tout m :

$$\begin{aligned} & (N | \langle \phi_m | \phi \rangle (T_N - i\partial / \partial t) | N) + (N | \langle \phi_m | T_N | \phi \rangle | N) \\ & - (N | \langle \phi_m | H_e - i\partial / \partial t | \phi \rangle | N) - \\ & M^{-1} (N | \langle \phi_m | \nabla_R | \phi \rangle \cdot \nabla_R | N) = 0 \end{aligned} \quad (4.18)$$

C'est à ce stage que l'approximation du paquet d'ondes localisé est prise en considération. La faible extension du paquet permet de l'assimiler à son centre $\rho(t)$. Il est la valeur moyenne d'un ensemble de mesures statistiques qui pourraient être faites pour déterminer la position du paquet :

$$\rho(t) = (N | R | N) \quad (4.19)$$

L'ensemble de ces points $\rho(t)$ pour les diverses valeurs de t constitue " la trajectoire ". Dans le cas limite, il ne doit plus y avoir de différences appréciable entre les descriptions quantique et classique. Ainsi la fonction d'onde électronique et les opérateurs peuvent être développés en séries de Taylor autour de $\rho(t)$. La faible variation de la fonction d'onde $|\phi\rangle$ en fonction de R dans les limites du paquet d'ondes permet de négliger le terme contenant la dérivée seconde de cette fonction. L'équation (4.18) prend la forme :

$$\begin{aligned}
& \sum_n C_n(t) \langle \phi_m | \phi_n \rangle (N | T_N - i\partial / \partial t | N) + \\
& \sum_n C_n(t) \langle \phi_m | H_e - i\partial / \partial t | \phi_n \rangle (N | N) - \\
& i \sum_n C_n(t) \langle \phi_m | \phi_n \rangle (N | N) - \\
& (1/M) \sum_n C_n(t) \langle \phi_m | \nabla_\rho | \phi_n \rangle \cdot (N | \nabla_R | N) = 0 \quad (4.20)
\end{aligned}$$

Le premier terme de cette équation peut être éliminé par la transformation de phase :

$$a_n(t) = C_n(t) \exp \left(-i \int^t dt (N | T_N - i\partial / \partial t | N) \right) \quad (4.21)$$

L'expression des amplitudes de probabilité définies dans le cadre de la méthode du paramètre d'impact :

$$i \sum_n \dot{a}_n(t) \langle \phi_m | \phi_n \rangle = \sum_n a_n(t) \langle \phi_m | H_e - i\partial / \partial t | \phi_n \rangle \quad (4.22)$$

est obtenue en divisant l'équation (4.20) par la norme du paquet d'ondes et la substitution de la différentielle totale par rapport au temps .

Cette différentielle totale est :

$$d / dt = \partial / \partial t |_{\rho=\text{cste}} + \rho(t) \cdot \nabla_\rho |_{t=\text{cste}} \quad (4.23)$$

avec la vitesse du paquet d'ondes :

$$\rho(t) = -i (N | \nabla_R | N) / (M (N | N)) \quad (4.24)$$

Cet ensemble d'équations couplées (4.22) régit les transitions entre les états électroniques de B.O.. Les fonctions d'onde dépendent paramétriquement du mouvement nucléaire. L'élément de la matrice de couplage entre les états électroniques se compose de deux parts ; la première avec l'opérateur H_e est le couplage par un potentiel, tandis que la deuxième part ($i\partial / \partial t$) est le couplage dynamique c'est-à-dire les couplages radial et de rotation (Rosenthal, 1971). Ce sont ces équations (4.22) qui sont utilisées pour la détermination des sections efficaces.

4.2.2.2 Equation du mouvement nucléaire

Pour compléter la définition de l'approximation du paramètre d'impact déterminons l'équation du mouvement nucléaire. Cette équation n'est pas nécessaire si la trajectoire est considérée comme rectiligne (chapitre 5).

Pour obtenir l'équation du mouvement nucléaire, nous considérons la stabilité de la fonctionnelle F pour des variations au premier ordre de $|N\rangle$. La condition de stabilité s'exprime :

$$\begin{aligned} & (T_N - i\partial / \partial t + \langle \phi | H_e - i\partial / \partial t | \phi \rangle + \langle \phi | T_N | \phi \rangle - \\ & (1 / M) \langle \phi | \nabla_R | \phi \rangle \cdot \nabla_R) | N \rangle = 0 \end{aligned} \quad (4.25)$$

Les trois derniers termes représentent la dépendance du mouvement nucléaire en fonction du mouvement électronique. L'approximation de ces termes par un potentiel internucléaire central U, par conséquent indépendant du mouvement électronique, développé au premier ordre en $R - \rho(t)$ du fait de l'application du théorème d' Ehrenfest conduit à l'équation classique du centre de masse du paquet d'ondes :

$$M \dot{\rho}(t) = - \nabla_{\rho} U(\rho(t)) \quad (4.26)$$

Les équations (4.22) et (4.26) sont la définition même de l'approximation du paramètre d'impact.

4.2.3 Expression de la section efficace totale

Du fait de la bonne correspondance entre $\rho(t)$ et $R(t)$, nous remplaçons dans les équations couplées (4.22) ρ par le paramètre R dont la dépendance en t est donnée par l'équation du mouvement nucléaire (4.26).

La meilleure solution de l'équation de Schrödinger :

$$(H_e - i d / dt) | \phi \rangle = 0 \quad (4.27)$$

est une combinaison linéaire de fonctions d'onde $|\phi_n\rangle$. Pratiquement, le nombre des états $|\phi_n\rangle$ sera limité tout en s'assurant que ϕ est une solution approchée satisfaisante. Le choix de la décomposition de ϕ sur une base tronquée atomique ou moléculaire dépend du quotient de la vitesse moyenne des électrons actifs à la vitesse relative des noyaux et des états initial et final considérés, d'où :

$$|\phi\rangle = A \sum_{n=1}^{n_F} C_n(t) |\phi_n\rangle \quad (4.28)$$

où A est l'opérateur antisymétriseur. Par exemple dans le cas particulier du modèle à deux états quantiques (chapitre 5), n_F est égal à 2.

L'ensemble des équations couplées (4.22) dont la solution est sujette à des conditions aux limites appropriées, s'écrit sous forme matricielle :

$$i (S) (\dot{C}) = (K) (C) \quad (4.29)$$

où C est le vecteur colonne représentant les amplitudes des différents états de la base tronquée et S est la matrice de recouvrement électronique dont un élément ij est tel que :

$$S_{ij} = \langle \phi_i | A^\dagger A | \phi_j \rangle \quad (4.30)$$

et K est la matrice de couplage entre les états électroniques dont un élément ij vaut :

$$K_{ij} = \langle \phi_i | A^\dagger (H_e - id/dt) A | \phi_j \rangle \quad (4.31)$$

La fonction ϕ doit être telle qu'elle assure la conservation de la probabilité, c'est-à-dire que sa norme est indépendante du temps :

$$(d/dt) \langle \phi | \phi \rangle = 0 \quad (4.32)$$

Ceci s'explique comme suit :

$$\frac{d}{dt} \langle \phi | \phi \rangle = \left(\frac{d}{dt} \langle \phi | \right) | \phi \rangle + \langle \phi | \left(\frac{d}{dt} | \phi \rangle \right) \quad (4.33)$$

en utilisant le complexe conjugué de l'équation de Schroedinger et en

considérant H_e comme hermitique car il représente l'observable énergie, la substitution dans (4.33) donne :

$$\frac{d}{dt} \langle \phi | \phi \rangle = -i \langle \phi | H_e | \phi \rangle - i \langle \phi | H_e^\dagger | \phi \rangle \quad (4.34)$$

Ce résultat a été obtenu par Green (1965) dans son article où il montre l'invariance de la probabilité de transition sous inversion du temps dans le cadre du paramètre d'impact. Ce résultat se traduit sous forme matricielle par :

$$i(S) = (K) - (K^\dagger) \quad (4.35)$$

Le choix d'une base orthonormale conduit immédiatement à la satisfaction des conditions ci-dessus car les éléments de la matrice de couplage sont hermitiques et symétriques.

L'équation matricielle (4.29) doit être résolue avec la condition limite :

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} C_n(t) = \delta_{in} \quad (4.36)$$

signifiant que le système est dans l'état i bien avant la collision et donc que ϕ_i est solution exacte de l'équation de Schroedinger à $t \rightarrow -\infty$. Soit ϕ^- la fonction d'onde qui satisfait à cette condition. Alors l'amplitude de probabilité pour que le système soit dans l'état f après la collision sera donnée par la limite lorsque $t \rightarrow \infty$ de l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde ϕ_f et ϕ^- :

$$P_f = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \phi_f | \phi^- \rangle \quad (4.37)$$

Si les fonctions d'onde qui constituent ϕ^- sont orthonormales alors :

$$P_f = \lim_{t \rightarrow \infty} C_f(t) \quad (4.38)$$

La probabilité $P = |P_f|^2$ pour que le système soit dans l'état f après la collision est une fonction du paramètre d'impact b et la section efficace

totale pour une énergie du faisceau E sera obtenue par intégration sur l'ensemble des valeurs de \underline{b} :

$$\sigma(E) = \int d^2\vec{b} P(\vec{b}, E) \quad (4.39)$$

4.3 TRANSFORMATIONS DES FONCTIONS D'ONDE

Dans cette section nous allons présenter les transformations que doivent subir les fonctions d'onde pour satisfaire diverses conditions. Par exemple, au cours de la capture, l'électron passe de l'atome de la cible au repos à l'ion incident. L'électron doit gagner l'impulsion nécessaire pour suivre l'ion. Développer la fonction d'onde électronique totale sur une base d'états stationnaires n'est pas satisfaisant car l'équation de Schroedinger n'est pas vérifiée aux limites $t \rightarrow \pm \infty$. Bates et McCarroll (1958) ont montré qu'il était nécessaire de faire mention explicite du mouvement de translation des atomes en utilisant le facteur de translation. Ce facteur n'est autre qu'une transformation unitaire qui change un état stationnaire en une onde progressive. Cette transformation est celle de Galilée bien connue sous la forme :

$$T_G = \exp \left(i \left(\vec{r} \cdot \vec{v} - \int^t v^2/2 \, d\tau \right) \right) \quad (4.40)$$

où \vec{v} est le vecteur vitesse de déplacement et \vec{r} la position de l'électron par rapport à une origine fixe choisie.

Néanmoins, malgré cette modification, l'équation de Schroedinger n'est vérifiée exactement que pour une vitesse nulle quand la distance internucléaire est finie. Avec ce facteur, l'électron est astreint à rester dans le voisinage de l'un ou l'autre des noyaux. Ainsi donc, ce facteur ne représente pas la réalité quand les deux noyaux sont proches et que l'électron est lié au deux (molécule). Aussi quelques auteurs l'ont modifié d'une manière ad hoc afin de remédier à ce défaut (e.g. Thorson et Levy, 1969).

Le facteur de Bates et McCarroll a été déterminé par Schmid (1977) et proposé comme étant la transformation nécessaire pour passer d'un référentiel d'inertie à un référentiel accéléré. L'étude de Schmid, précédée par les préliminaires sur les transformations spaciales (Gottfried, 1966), est structurée de sorte que les différents cas possibles sont présentés par ordre de complexité. D'abord l'opérateur de transformation est exprimé dans le cas particulier où les deux référentiels, précédemment mentionnés, coïncident tant en vitesse qu'en position à un instant $t = t_0$, leur orientation respective restant la même. Ce résultat est étendu au cas où seule l'orientation des deux repères l'un par rapport à l'autre reste la même. Alors, l'opérateur pour un système de N particules s'exprime (éq. 37 de Schmid) :

$$\Gamma_a = \exp (i (\vec{v}(t) \cdot M \vec{R}_{cm} - \phi_2(t))) \exp (-i \vec{d}(t) \cdot \vec{P}) \quad (4.41)$$

avec :

$$\begin{aligned} \phi_2(t) = & \frac{1}{2} M (\vec{d}(t) - \vec{d}_0 - \vec{v}_0 (t - t_0)) \cdot (\vec{v}(t) + \vec{v}_0) \\ & + \frac{1}{2} M v_0^2 (t - t_0) \end{aligned}$$

Dans le cas d'un électron, $M \rightarrow m = 1$, $R_{cm} \rightarrow r$, $P \rightarrow p = m v = v$ et

$d(t) = \int_{t_0}^t v(\tau) d\tau$; si de plus $\vec{d}_0 = \vec{v}_0 = t_0 = 0$, nous retrouvons l'équation (4.40).

Exprimé sous cette forme (éq. 4.41) Γ_a est explicite. La première exponentielle - Γ_q - traduit le transfert de la quantité de mouvement tandis que la deuxième exponentielle - Γ_0 - correspond au transfert d'origine du repère d'inertie au repère accéléré :

$$\Gamma_a = \Gamma_q \Gamma_0 \quad (4.42)$$

Ainsi Γ_0 appliqué à une fonction d'onde du système d'inertie $\psi(\vec{r})$ donnera la fonction $\psi(\vec{r}')$ dans le repère accéléré :

$$\phi(\vec{r}) = \Gamma_a \psi(\vec{r}) = \Gamma_q \psi(\vec{r}') \quad (4.43)$$

L'équation (4.43) pour un électron est identique, par exemple, à l'équation

2.12 de Bransden (1972).

La généralisation au cas où les deux repères tournent l'un par rapport à l'autre consiste à multiplier Γ_a par l'opérateur de rotation adéquat Γ_r - ceci est possible du fait des propriétés des groupes -. L'opérateur de rotation n'est autre que (Messiah, 1964) :

$$\Gamma_r = \exp (i \vec{\theta}(t) \cdot \vec{L}) \quad (4.44)$$

où \vec{L} est le moment cinétique et $\vec{\theta}$ le vecteur rotation. L'introduction de cet opérateur de rotation modifie les fonctions d'onde afin de tenir compte de la rotation de l'axe de quantification généralement choisi comme l'axe de la séparation internucléaire (Shakeshaft, 1972).

Pour les applications pratiques où la vitesse v n'est pas trop élevée, il est possible de remplacer Γ_a par l'unité. Ceci a pour effet d'augmenter la section efficace théorique car au fur et à mesure que v augmente Γ_a oscille plus vite et réduit plus la section efficace.

4.4 ADIABATISME OU DIABATISME

A la section 4.2.1 nous avons vu que les transitions entre les états électroniques sont dues au couplage de ces états au travers du mouvement nucléaire. L'idée d'une vitesse finie de déplacement ne peut être compatible avec la notion d'un adiabatisme parfait. Aussi est-il courant de définir l'évolution du système comme étant quasi-adiabatique quand la vitesse n'est pas trop élevée. De ce fait une controverse naquit pour justifier l'un ou l'autre des formalismes : adiabatique et diabatique.

Etant partis de l'approximation de B.O., il est raisonnable de décrire la collision à l'aide d'une base d'états moléculaires adiabatiques dont, d'après le théorème d'adiabatisme, les courbes d'énergie potentielle obéissent à la loi

de non intersection pour une vitesse de déplacement finie (diagonalisation de l'hamiltonien).

Par contre, Landau, Zener et Stueckelberg (1932) notèrent que la source la plus importante des transitions inélastiques est la quasi-dégénérescence de deux courbes d'énergie potentielle en un point de la séparation nucléaire. Quand les deux courbes s'approchent suffisamment près, elles présentent une courbure aigüe qui leur a permis l'utilisation d'expansions en série qui simplifiaient grandement le problème. De ceci, Lichten (1963-65-67) suggéra d'abandonner la formulation adiabatique et de considérer plutôt une formulation " dynamique " où les états ont une structure moléculaire simple et qui par conséquent se coupent. Il appela cette formulation diabatique. Les états définis ainsi ne sont pas solution de l'hamiltonien. Les éléments non diagonaux représentent les termes de couplage entre les états électroniques. Ainsi, les transitions inélastiques indiquent-elles un couplage non adiabatique (Rosenthal, 1971) et du point de vue de l'adiabaticisme sont la manifestation de la non application de la séparation des coordonnées nucléaires et électroniques de l'approximation de B.O.. Malgré la simplification faite en considérant des orbitales moléculaires diabatiques monoélectroniques, ce que Lichten proposa est un peu plus difficile à manier car il dut préférer la représentation d'Heisenberg à celle de Dirac (Jauch, 1968) dans la formulation des équations.

Ce sont les travaux de Smith (1969) qui permirent d'établir aussi solidement la notion de diabaticisme que celle d'adiabaticisme pour l'étude des collisions. Il définit respectivement les formalismes adiabatique et diabatique par la diagonalisation de l'hamiltonien d'une part et celle de l'impulsion radiale d'autre part. Il montre que ces deux formalismes sont fondés sur des arguments aussi crédibles et que le choix est laissé au gré de l'utilisateur

en fonction du problème à traiter. Néanmoins, le fait qu'il est plus facile d'obtenir des fonctions d'onde moléculaires adiabatiques justifie le plus grand emploi du formalisme adiabatique.

Cependant, une analyse détaillée du caractère réel des fonctions d'onde montre que les courbes d'énergie potentielle se coupent. Ceci du fait que, pour une vitesse finie, l'importance du couplage dynamique amène les électrons à suivre des orbitales diabatiques (dynamiques) plutôt qu'adiabatiques (statiques) (Taulbjerg et Briggs, 1975).

4.5 COMMENTAIRES

La résolution du système d'équations (4.22-) ne peut être effectuée que numériquement du fait de sa complexité. Les contraintes sur les fonctions d'onde, l'introduction du facteur de translation indispensable pour que la section efficace soit indépendante de l'origine choisie, l'expression des conditions aux limites sont autant de facteurs qui rendent le maniement de ces équations difficiles.

De plus, il est toujours agréable d'obtenir quelque expression analytique de la section efficace, même approchée, afin de pouvoir l'étudier en fonction de l'énergie de l'ion incident. C'est pour cela qu'un certain nombre de méthodes approchées ont été développées. Nous discuterons et présenterons l'une d'entre-elles au chapitre 5.

Néanmoins le développement de la théorie générale dans toute sa rigueur est fondamental pour l'élaboration de modèles approchés par l'estimation des approximations.

CHAPITRE 5
O-O-O-O-O-O

LE MODELE A DEUX ETATS QUANTIQUES

As quantitative calculations from fundamental wave mechanics become increasingly difficult for complex reactants such as those considered here, it is important that approximative methods be developed to estimate cross sections. From these methods simple analytic expressions for transition probability are obtained which are useful to provide insight into the nature of collisions and simplify the interpretation of experimental data.

One of these methods is that proposed by Rapp and Francis (1962) which is a model with only two states which are the initial and final states. This model enables us to calculate simply the capture cross sections for a wide range of energies. This model, using the core formulation and frozen atomic orbitals, is an extension of the symmetric resonant case which we summarize first. The interaction potential energy is approximated in the way given by Rosen and Zener (1932); a sech form.

To provide a more realistic description, the energy defect which is an input parameter of the model has been corrected for the Coulomb and polarisation energies so that instead of the energy defect at infinity which is calculated from atomic binding energies, an effective energy defect at the interaction radius is used.

To facilitate the computation of the cross sections some approximations are made following Lee et Hasted (1965) which do not seem to perturb much the result of this approximate model compared to the considerable saving in computer time.

5.1 PRELIMINAIRES : IDEES GENERALES DU MODELE

Ce modèle est basé sur un certain nombre d' " illustrations " qui représentent plus ou moins fidèlement la réalité physique mais dont l'avantage essentiel est de pouvoir formuler de façon simple et plausible les phénomènes qui prennent naissance aux cours des collisions. Bien sûr, elles sont le fruit de profondes réflexions mais néanmoins sujettes à quelques arbitraires.

Né considérant que l'électron actif, il est intéressant de ramener le problème complexe d'un système à plusieurs électrons à celui d'un système à un seul électron. L'atome et l'ion sont donc assimilés à deux charges ponctuelles qui se partagent un électron. En d'autres termes, l'atome B est constitué d'un ion ponctuel B^+ et d'un électron e^- : $B = (B^+ + e^-)$. Il en découle que la fonction d'onde de l'électron dans son état fondamental sera du type hydrogénoïde $1s$ ayant les caractéristiques appropriées suivant la nature de la charge ponctuelle à laquelle l'électron est lié, d'où la connaissance des états initial et final de l'électron.

L'interaction entre un ion A et un atome B est représentée par le potentiel (Geltman, 1969) :

$$V(r, R) = C_1(r) / R^2 + C_2(r) / R^3 + \dots \quad (5.1)$$

C_1 représente l'interaction monopôle-monopôle et C_2 contient les termes de l'interaction monopôle-quadrupôle et de celle dipôle-dipôle. C_1 conduit au deuxième ordre à l'énergie potentielle de polarisation dont la forme asymptote est en R^{-4} . Quant à l'interaction entre les deux ions, le terme dominant est l'interaction de Coulomb. Compte tenu de l'intensité de ces interactions et de la distance de plus courte approche pour les réactions de capture, les ions ne sont diffusés que pour des angles très faibles, sauf dans la zone énergétique des basses énergies. Le transfert énergétique Δp est relié à l'angle de diffusion θ par :

$$\Delta p / p \sim \theta \quad \text{pour } \Delta p / p \text{ petit} \quad (5.2)$$

Bates et McCarroll (1958) suggèrent d'ignorer les effets de l'interaction mutuelle sur le mouvement et ainsi supposent que le vecteur vitesse relative des antagonistes reste constant durant toute la collision. Considérer la trajectoire rectiligne simplifie grandement l'intégration sur le temps en la ramenant aisément à celle sur la coordonnée d'espace x liée à la vitesse par :

$$x = v t \quad (5.3)$$

Avec cette nouvelle approximation, la méthode s'appelle la méthode du paramètre d'impact avec trajectoire rectiligne. Nous l'utilisons dans ce chapitre.

5.2 REVUE DES PRINCIPAUX RESULTATS DU CAS RESONNANT

Avant d'entreprendre l'analyse détaillée des collisions asymétriques nous rappellerons les principaux résultats du cas symétrique, c'est-à-dire des réactions résonnantes. Le défaut énergétique est égal à zéro.

Dans ce cas, les états initial et final sont les mêmes car l'électron appartient à la même charge ponctuelle avant et après l'échange. Ces deux états sont dégénérés car il leur correspond la même valeur de l'énergie. Au cours de la collision des perturbations lèvent cette dégénérescence. Pauling et Wilson (1935) ont montré l'étroite analogie qui existe entre le comportement de l'électron dans le champ de deux atomes identiques et le mouvement oscillatoire de deux systèmes identiques classiques liés par une faible interaction harmonique. Le fait que le niveau d'énergie deux fois dégénéré se divise en deux niveaux n'est autre que la manifestation des deux modes propres du système global. A ces deux modes propres correspondent les deux fonctions normales, nouvelles fonctions d'onde, solutions du problème. Pour les collisions résonnantes

ces deux états sont appelés symétrique (s) et antisymétrique (a). Symétrique veut dire que cet état ne change pas de signe par permutation des coordonnées spatiales des deux états originaux le constituant. Ainsi :

$$\phi_s = N_s (\phi_1 + \phi_2) \quad (5.4)$$

$$\phi_a = N_a (\phi_1 - \phi_2)$$

où ϕ_1 et ϕ_2 représentent respectivement la fonction d'onde de l'électron lié à l'atome A avant et après la collision. N_s et N_a sont les constantes de normalisation. Ces deux états sont communément appelés g et u (gerade et ungerade). L'électron oscille donc entre les deux modes propres avec la pulsation angulaire :

$$w = (E_a - E_s) / 2\hbar \quad (5.6)$$

($E_a - E_s$) étant l'écart entre ces deux modes propres.

Si l'interaction perturbatrice est constante, le module du carré de l'amplitude de présence de l'électron sur l'un ou l'autre des ions à un instant t après que la perturbation a été appliquée donne la probabilité de présence sur l'ion choisi. La solution du système des deux équations différentielles du premier ordre couplées amène à la relation :

$$P_s(t)_{i \rightarrow f} = \sin^2(w t) \quad (5.7)$$

C'est la probabilité pour que l'électron passe de l'état initial i à l'état final f.

Gurnee et Magee (1957) ont considéré w comme une fonction du temps - c'est-à-dire de la distance internucléaire R avec laquelle varie l'interaction. De multiples vérifications de cette considération ont été faites depuis grâce aux diagrammes de corrélation que Fano et Lichten (1965) ont étendus aux collisions de la zone énergétique intermédiaire. La probabilité prend la nouvelle forme :

$$P_{s i \rightarrow f} = \sin^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} (E_a - E_s) / 2\hbar \left(\frac{dx}{v} \right) \right) \quad (5.8)$$

où la pulsation angulaire est intégrée sur toute la trajectoire rectiligne.

Reste à exprimer la différence $(E_a - E_s)$. De la section 5.1 nous adoptons la fonction hydrogénoïde $1s$ où le paramètre z/n est remplacé par la racine carrée du rapport des potentiels d'ionisation I de l'ion et I_H de l'atome d'hydrogène. Soit alors la fonction d'onde ϕ (Ionistu et Ioinescu-Pallas, 1959) :

$$\phi = \pi^{-1/2} (I / I_H)^{3/4} \exp(- (I / I_H)^{1/2} r) \quad (5.9)$$

avec r la séparation entre l'ion et l'électron. Cette description de la fonction d'onde permet de relier les dimensions de l'orbitale au potentiel d'ionisation. Cette approximation est contestable quand l'électron appartient réellement à une orbitale qui n'est pas de type s , e.g. type p . De plus l'équation (5.9) n'est valide que pour une séparation internucléaire suffisamment grande pour que l'orbitale ne se polarise pas trop. Dans ces conditions, il suffit de calculer la forme asymptote de w . Pour R supérieur au rayon de Bohr, la valeur limite de w est :

$$w_{R \gg 1} = \lim_{R \gg 1} \frac{1}{2} (E_a - E_s) = I R \exp(- (I/I_H)^{1/2} R) \text{ u.a.} \quad (5.10)$$

Enfinement pour obtenir la probabilité de transition, il faut intégrer sur la variable x . Cette intégration a été faite par Dalgarno (1958) dont le résultat est (b est le paramètre d'impact : $R^2 = b^2 + x^2$) :

$$\int_{-\infty}^{\infty} w_{R \gg 1} \left(\frac{dx}{v} \right) = 2I b^2 (K_0(\gamma b) + K_1(\gamma b)/\gamma b) / v \quad (5.11)$$

avec $\gamma = (I/I_H)^{1/2}$, et K_0 et K_1 sont les fonctions de Bessel modifiées du second genre d'ordre zéro et un. Comme l'équation (5.10) n'est valable que pour $\gamma R \gg 1$, l'équation (5.11) ne devra être utilisée que pour $\gamma b \gg 1$. Alors, il est possible de prendre les formes asymptotiques des fonctions de Bessel

(Abramowitz et Stegun) qui conduisent à (Rapp et Francis, 1962) :

$$A(b, v) = \int_{-\infty}^{\infty} w_{R \gg 1} \left(\frac{dx}{v} \right) \quad * (5.12)$$

$$= \left(2\pi / \gamma \right)^{1/2} I b^{3/2} \left(1 + (\gamma b)^{-1} \right) \exp(-\gamma b) / v$$

La probabilité $P_s(b, v) = \sin^2(A(b, v))$ oscille entre zéro et un pour les petites valeurs de b puis décroît finalement vers zéro pour les grandes valeurs de b . La section efficace totale sera l'intégrale pour toutes les valeurs du paramètre d'impact de cette probabilité :

$$\sigma(v) = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} P_s(b, v) b db \quad (5.13)$$

5.3 CAS ASYMETRIQUE

5.3.1 Considérations de symétrie

Dans le cas symétrique résonnant, les états asymptotiques du système ($A^+ + A$) sont identiques car les états u et g respectivement antisymétrique et symétrique par rapport à l'échange des coordonnées électroniques sont dégénérés pour $R \rightarrow \pm\infty$ (Garcia et al, 1973). Par contre pour les réactions asymétriques qui nous concernent $A^{2+} + B \rightarrow A^+ + B^+$, il y a deux états asymptotes différents qui correspondent à ($A^{2+} + B$) et ($A^+ + B^+$) appartenant à (AB) $^{2+}$. Le phénomène de capture se manifeste par une transition entre les deux états.

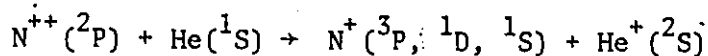
Rapp et Francis (1962) supposent que le moment angulaire et le spin sont conservés au cours de la collision du fait que l'échange a lieu pour des valeurs du paramètre d'impact relativement grandes. L'hamiltonien total est indépendant du moment angulaire total J (constante du mouvement) ce qui entraîne que seules les transitions entre des états de même symétrie Λ et de même multiplicité $g = 2S + 1$ sont possibles. Si les états moléculaires générés

par la combinaison des deux états atomiques après la collision ne sont qu'une partie des états moléculaires avant la collision, la capture n'est possible que dans le rapport de la somme des multiplicités des états après la collision ayant les mêmes Λ et S que les états initiaux à la somme des multiplicités des états initiaux. Ce rapport est le facteur de poids statistique de la réaction :

$$f = \frac{(\sum_i (i=j) g_i) \text{ après la collision}}{(\sum_j g_j) \text{ avant la collision}} \quad (5.14)$$

où i et j indiquent les états et g la multiplicité de l'état.

Pour illustrer ceci considérons la réaction :



où les états peuvent être trouvés dans Herzberg (1945). La combinaison ($^2P + ^1S$) donne les états moléculaires initiaux ($^2\Sigma, ^2\Pi$) (Herzberg, 1950; Rosen, 1964). Les combinaisons ($^3P + ^2S$), ($^1S + ^2S$), ($^1D + ^2S$) donnent respectivement les états moléculaires finals ($^2\Sigma, ^2\Pi, ^4\Sigma, ^4\Pi$), ($^2\Sigma$), ($^2\Sigma, ^2\Pi, ^2\Delta$). Ainsi pour les différents états de N^+ les facteurs de poids sont-ils 1, $\frac{1}{2}$, 1.

5.3.2 Développement mathématique

Dans le domaine des collisions lentes le facteur de translation peut être remplacé par l'unité. Ceci simplifie grandement les calculs. Nous devons garder présent à l'esprit que la section efficace trouvée dans le cadre de cette approximation est supérieure à celle où nous tenons compte adéquatement du facteur de translation (section 6.8).

La fonction d'onde totale normée qui décrit l'état de l'électron s'exprime comme une combinaison linéaire dépendante du temps des

deux états moléculaires initial et final. Ces orbitales moléculaires peuvent être formées de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques (Morrison et al, 1976). Soit ϕ_T la fonction d'onde totale:

$$\phi_T = C_f(t) \phi_f \exp(-i E_f t) + C_i(t) \phi_i \exp(-i E_i t) \quad (5.15)$$

où C_f et C_i sont les coefficients donnant les amplitudes respectives des deux états moléculaires ϕ_f et ϕ_i à un instant t . E_f et E_i sont les énergies totales moléculaires.

Gurnee et Magee (1957) ont remplacé les fonctions moléculaires par les fonctions atomiques correspondant aux états de l'électron quand les atomes sont séparés pour mener plus aisément les calculs. Ces orbitales ne représentent la fonction d'onde réelle que d'une manière asymptotique. Ces orbitales n'évoluent pas avec la distance internucléaire et sont communément appelées orbitales atomiques " gelées ". Soit la fonction d'onde totale dans la description atomique :

$$\phi = C_f(t) |f\rangle \exp(-i w_f t) + C_i(t) |i\rangle \exp(-i w_i t) \quad (5.16)$$

avec chaque orbitale atomique solution de l'équation de Schroedinger stationnaire

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_j \right) |j\rangle = w_j |j\rangle \quad (j = A, B; j = i, f) \quad (5.17)$$

V_A et V_B correspondant aux états f et i .

L'équation du mouvement est l'équation de Schroedinger dépendante du temps dont ϕ est solution :

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta + V_A + V_B \right) |\phi\rangle = i \partial / \partial t |\phi\rangle \quad (5.18)$$

Pour obtenir les équations couplées qui définissent les amplitudes C_f et C_i , il suffit de remplacer ϕ par l'équation (5.16) dans (5.18) et de multiplier (5.18) alternativement par les bras $\langle f |$ et $\langle i |$ où $\langle \dots |$ désigne l'intégration sur tout l'espace :

$$\begin{aligned} \langle f | V_B | f \rangle C_f + \langle f | V_A | i \rangle e^{-i \omega t} C_i &= i (C_f + S C_i e^{-i \omega t}) \\ \langle i | V_B | f \rangle C_f e^{i \omega t} + \langle i | V_A | i \rangle C_i &= i (C_f S e^{i \omega t} + C_i) \end{aligned} \quad (5.19)$$

où $\omega = \omega_i - \omega_f$, S est l'intégrale de recouvrement $\langle i | f \rangle$ tandis que les $V_j^{if} = \langle i | V_j | f \rangle$ sont les éléments de la matrice de couplage entre les états électroniques. (Les équations (5.19) sont le développement des équations (4.22) avec m, n égaux tout à tour à i et f). Les équations (5.19) sont réarrangées pour faire apparaître les termes de couplage entre les deux équations :

$$\begin{aligned} i C_i &= k_1(t) C_i + h_1(t) e^{i \omega t} C_f \\ i C_f &= k_2(t) C_f + h_2(t) e^{-i \omega t} C_i \end{aligned} \quad (5.20)$$

avec :

$$\begin{aligned} k_1(t) &= (V_A^{ii} - S V_A^{fi}) / (1 - S^2) \\ k_2(t) &= (V_B^{ff} - S V_B^{if}) / (1 - S^2) \\ h_1(t) &= (V_B^{if} - S V_B^{ff}) / (1 - S^2) \\ h_2(t) &= (V_A^{fi} - S V_A^{ii}) / (1 - S^2) \end{aligned}$$

Si de plus nous opérons une transformation de phase sur les coefficients C_f et C_i telle que :

$$C_i = a_i \exp\left(-i \int_{-\infty}^t k_1(t') dt'\right), \quad C_f = a_f \exp\left(-i \int_{-\infty}^t k_2(t') dt'\right)$$

alors le système (5.20) prend la forme (Rapp et Francis, 1962) :

$$\begin{aligned} i \dot{a}_i &= h_1(t) \exp(i \omega t) a_f \\ i \dot{a}_f &= h_2(t) \exp(-i \omega t) a_i \end{aligned} \quad (5.21)$$

avec $W t = \omega t + \int_{-\infty}^t (k_1 - k_2) dt'$.

Ce système couplé (5.21) définit l'évolution des amplitudes de probabilité

en fonction du temps pour trouver l'électron dans l'état i ou f .

5.3.3 Hermiticité du système

Pour qu'un opérateur représente une observable physique, il faut qu'il soit hermitique. Notre système couplé (5.21) :

$$i \dot{a}_i = h_1(t) \exp(i W t) a_f$$

$$i \dot{a}_f = h_2(t) \exp(-i W t) a_i$$

n'est pas hermitique car les coefficients de couplage ne sont pas complexes conjugués l'un de l'autre. Ainsi donc ce système ne décrit pas correctement les observables (amplitudes de probabilité de présence) car le principe de micro-réversibilité (Messiah, 1964) n'est pas satisfait. C'est l'absence de l'orthogonalité des fonctions d'onde f et i qui cause la dissymétrie entre h_1 et h_2 (section 4.2.3). Comme l'opérateur $h(t)$ n'est pas hermitique, la probabilité n'est conservée que si la relation ci-dessous existe :

$$\forall t \quad \sum_{n, m} a_n^* a_m \langle n | m \rangle = 1 \quad n, m \in \{ i, f \} \quad (5.22)$$

Elle fait intervenir l'intégrale de recouvrement $\langle n | m \rangle$.

Pour pallier à ce problème, Rapp et Francis (1962) proposèrent de choisir une valeur moyenne pour h_1 et h_2 qui transformerait ce système en un système hermitique. Ils utilisèrent, pour ce faire, la forme préconisée par Rosen et Zener (1932) qui donne la solution à un modèle ayant deux courbes d'énergie potentielle constantes couplées par une interaction proportionnelle à sech (Dinterman et Delos, 1977). Néanmoins Green (1965) a montré que cette procédure est inconsistante avec la définition originale car les coefficients a_n satisfont alors à :

$$\forall t \quad \sum_n |a_n|^2 = 1 \quad n \in \{i, f\} \quad (5.23)$$

Cependant comme cette inconsistance dépend de l'écart entre $\langle n | m \rangle$ et δ_{nm} , pour des valeurs élevées du paramètre d'impact, d'intérêt pour les collisions de capture, il est probable que la procédure soit acceptable et n'introduise qu'un léger changement dans les résultats.

5.3.4 Expression de la probabilité de capture

Le fait d'avoir transformé le système (5.21) en un système hermitique conduit à adopter l'expression (5.10) comme valeur moyenne de $h_1(t)$ et $h_2(t)$. Considérant la trajectoire rectiligne ($R^2 = x^2 + b^2$), il vient :

$$\bar{h}(x) = I (x^2 + b^2)^{\frac{1}{2}} \exp(- (x^2 + b^2)^{\frac{1}{2}}) \quad (5.24)$$

où I est une valeur moyenne entre I_A et I_B des ion et atome A et B; autrement la notation reste inchangée. Afin de pouvoir transformer \bar{h} tel que proposé par Rosen et Zener (1932) $h_{if} = l_1 \operatorname{sech}(l_2 x)$ et utiliser leur expression de la probabilité :

$$|a_f(\infty)|^2 = \sin^2(\pi l_1 / v l_2) \operatorname{sech}^2(\pi \bar{W} / 2v l_2) \quad (5.25)$$

les intégrales des deux formes sur l'ensemble de la trajectoire doivent être égales :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \bar{h}(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} l_1 \operatorname{sech}(l_2 x) dx \quad (5.26)$$

Les deux intégrales sont égales (avec $\bar{h}(0) = h_{if}(0)$) si :

$$\begin{aligned} l_1 &= I b \exp(-\gamma b) \\ l_2 &= \pi \{ 2b \exp(+\gamma b) (K_0(\gamma b) + K_1(\gamma b) / \gamma b) \}^{-1} \end{aligned} \quad (5.27)$$

où K_0 et K_1 sont les fonctions de Bessel modifiées et \bar{W} est une valeur moyenne du défaut énergétique W. La probabilité de capture $P_{a \rightarrow f}$ sera le produit du

facteur de poids f par le carré de l'amplitude de probabilité pour trouver l'électron lié à l'ion A, $| a_f(\infty) |^2$:

$$P_{a_{i \rightarrow f}}(b, v) = f | a_f(\infty) |^2 \quad (5.28)$$

5.4 EXPRESSION DU DEF AUT ENERGETIQUE MOYEN

Du système d'équations couplées (5.21) nous savons que Wt vaut :

$$Wt = wt + \int_{-\infty}^t (k_1(t') - k_2(t')) dt' \quad (5.29)$$

Pour les collisions où la nature de l'interaction ne change pas, la quantité $| k_1 - k_2 |$ est très inférieure à $|w|$ et peut être négligée. Pour les collisions de capture où les interactions avant et après la collision sont différentes, $| k_1 - k_2 |$ prend des valeurs non négligeables et parfois supérieures à $|w|$ pour certains rayons d'interactions (Bates et Lynn, 1959). C'est le cas par exemple de nos réactions $A^{2+} + B \rightarrow A^+ + B^+$ où, avant l'échange de l'électron l'interaction est celle entre un ion et un atome (en R^{-4}) et après l'échange l'interaction dominante est coulombienne (en R^{-1}). Pour tenir compte de la variation du défaut énergétique Hasted et Lee (1962) proposèrent de corriger le défaut énergétique à l'infini par l'addition des énergies moyennes d'interaction de Coulomb et de polarisation. Les interactions pour une réaction comme :



sont :

- interaction de Coulomb : $E_c = (m - n) n / R$
- interaction de polarisation : $E_p = P_\alpha / 2 R^4$

$$\text{avec } P_\alpha = (n \alpha_{A^{+m-n}} + (m - n) \alpha_{B^{+n}}) - m \alpha_B$$

qui est un coefficient dépendant des polarisabilités des atomes ou ions.

Si la distribution de charges est supposée avoir la symétrie sphérique et si l'interaction a lieu entre deux rayons R_1 et R_2 , choisis convenablement en fonction de considérations physiques, les énergies moyennes ont alors les formes :

$$\begin{aligned} \bar{E}_c &= 1.5 (m - n) n (R_1^2 - R_2^2) / (R_1^3 - R_2^3) \\ \bar{E}_p &= -1.5 P_\alpha (R_2^{-1} - R_1^{-1}) / (R_1^3 - R_2^3) \end{aligned} \quad R_1 > R_2 \quad (5.31)$$

Le choix de $R_{1,2}$ est basé sur l'étude de la distribution de charges de deux atomes décrit par le modèle de Thomas-Fermi :

$$R_{1,2} = C_{1,2} \left((Z_A - n)^{2/3} + Z_B^{2/3} \right)^{1/2} \quad (5.32)$$

avec C_1 et C_2 égaux à 1.44 et .48 déterminés à partir de la densité radiale de la couche M de l'argon. Ces coefficients sont indépendants des réactants. Quant au facteur de Bohr (1948) \dots il est obtenu en utilisant une distribution symétrique en Z_A et Z_B (Firsov, 1957-58a,b; Abrahamson, 1963.) qui permet de tenir compte de l'interaction entre deux atomes.

L'énergie moyenne $\bar{E} = \bar{E}_c + \bar{E}_p$ qui est positive, diminue le défaut énergétique à l'infini ΔE ($\Delta E < 0$) :

$$\bar{W} = \Delta E + \bar{E} \quad (5.33)$$

5.5 EXPRESSIONS POUR PROGRAMMER LA SECTION EFFICACE TOTALE

Reprenons l'expression de la probabilité de capture de la section

5.3.4 :

$$P_a \quad (b, v) = \sin^2(\pi l_1 / v l_2) \operatorname{sech}^2(\pi \bar{W} / 2v l_2) \quad (5.34)$$

Du développement de la section 5.2 nous savons que cette relation est surtout valable pour $b \gg 1$, ce qui nous permet de considérer les expressions asymptotes

des fonctions de Bessel modifiées K_0 et K_1 . Nous pouvons écrire :

$$P_{a \ i \rightarrow f}(b, v) = P_{s \ i \rightarrow f}(b, v) \operatorname{sech}^2 \left(\sqrt{I} (\pi b / 2\gamma)^{1/2} / v \right) \quad (5.35)$$

avec :

$$P_{s \ i \rightarrow f}(b, v) = \sin^2 \left(I (2\pi b^3 / \gamma)^{1/2} e^{-\gamma b} (1 + (\gamma b)^{-1}) / v \right) \quad (5.36)$$

qui n'est autre que la probabilité de capture dans le cas résonnant

($\sin^2(A(b, v))$), avec I une valeur moyenne des potentiels d'ionisation des ion et atome A et B.

Dinterman et Delos (1977) ont analysé la précision du résultat en fonction du nombre de termes conservés dans l'approximation des fonctions de Bessel. Dépendamment de la constante déterminant la valeur maximale de l'interaction entre les deux états et de la valeur de la distance internucléaire pour laquelle la différence énergétique entre les deux états est double de l'énergie d'interaction, il est nécessaire de garder plus ou moins de termes. Nous développons les fonctions de Bessel au premier ordre en sachant que pour les faibles valeurs du paramètre d'impact b la probabilité sera plus grande que la probabilité exacte, mais ceci n'aura pas beaucoup d'importance en fonction de l'approximation ci-dessous.

L'argument du sinus de $P_s(b, v)$, $A(b, v)$, décroît de manière exponentielle avec b d'où les oscillations rapides de la fonction sinus entre zéro et un pour les faibles valeurs de b . Pour des valeurs de b plus élevées, l'argument tend vers zéro et le sinus décroît vers zéro dans une dernière oscillation ample. Il est commun de faire l'approximation suivante (Firsov, 1951; Rapp et Francis, 1962) :

$$\begin{aligned} P_s(b, v) &= \frac{1}{2} \quad \text{pour} \quad 0 < b < b_1 \\ P_s(b, v) &= 0 \quad \text{pour} \quad b > b_1 \end{aligned} \quad (5.37)$$

avec b_1 tel que $P_s(h, v) = .25$ pour la dernière fois. La valeur de b_1 est déterminée par la résolution de l'équation :

$$A(b_1, v) = -\pi / 6 \quad (5.38)$$

d'où l'expression de la section efficace totale :

$$\sigma(v) = \frac{1}{2} f \int_0^{b_1} \operatorname{sech}^2(\dots) 2\pi b \, db \quad (5.39)$$

En opérant le changement de variable :

$$u = (\pi b / 2\gamma)^{\frac{1}{2}} \bar{W} / v \quad (5.40)$$

alors σ se présente sous la forme facile à programmer de Lee et Hasted (1965) :

$$\sigma(v) = f \sigma_0 I(u_1) \quad (5.41)$$

où

$$\sigma_0 = \frac{1}{2}\pi b_1^2 \quad (5.42)$$

$$I(u_1) = 4u_1^{-4} \int_0^{u_1} \operatorname{sech}^2(u) u^3 \, du$$

L'emploi de (5.41) et de (5.42) permet d'obtenir par intégration numérique la valeur de la section efficace totale de capture pour une énergie donnée des ions incidents.

CHAPITRE 6
 0-0-0-0-0-0

RESULTATS NUMERIQUES DU MODELE A DEUX ETATS QUANTIQUES

We present the results of the RF's model after having discussed the behaviour of the cross section expected. In view of these results, we modify the model in order to take account of the main approximation made in the course of its development. The modification consists of adjusting both parameters of the model to fit the experimental cross sections which we assume are those for all particles involved in their ground states.

The new parameters I_c and Q_c are defined from the old ones I and \bar{W} such that :

$$I \rightarrow I_c = \text{Min}(I_A, I_B) n_B^{-1}$$

$$\bar{W} \rightarrow Q_c = \bar{W} n_B^{-2/3}$$

where I_A and I_B are the effective ionization potentials of A and B, n_B is the principal quantum number of the electron captured when bound on the target atom B.

From the new theoretical curves, the values of the width of the interaction potential is defined. However it is not possible to assess the mean value proposed by some authors.

In addition we have been able to predict the velocity at which the translation factor begins to affect the magnitude of the cross section.

6.1 DISCUSSION DE L'EQUATION DE LA PROBABILITE DE CAPTURE

Avant de présenter les résultats du modèle à deux états quantiques sans intersection des courbes d'énergie potentielle, nous discuterons brièvement l'allure de la section efficace totale en fonction de la vitesse de l'ion incident. Pour ce faire, considérons l'équation (5.35) qui donne la probabilité de capture :

$$P_a(b, v) = P_s(b, v) \operatorname{sech}^2 \left(\bar{W} \left(\pi b / 2\gamma \right)^{1/2} / v \right) \quad (6.1)$$

Aux hautes énergies le facteur dominant de $P_a(b, v)$ est $P_s(b, v)$ car le sech^2 garde une valeur constante, son argument étant petit. Dans ce cas nous voyons que la section efficace totale se comporte comme celle d'un système symétrique résonnant. A la limite, ceci veut dire que \bar{W} est égal à zéro. Le système ne " ressent " qu'une valeur moyenne des deux potentiels et une interaction de couplage. Ainsi la section efficace totale est-elle principalement déterminée par la valeur de l'interaction de couplage c'est-à-dire γ (équ. 5.24).

Aux basses énergies, le terme en sech^2 diminue la probabilité de capture résonnante $P_s(b, v)$. La section efficace totale décroît rapidement vers zéro avec la vitesse. Cette région est appelée adiabatique puisque la collision se produit si lentement que le système évolue au rythme de la perturbation sans qu'une transition prenne naissance.

De ceci, nous déduisons que la section efficace totale passe par un maximum (Massey, 1949) qui définit les deux régions ci-dessus. Suivant la loi adiabatique de Massey, la section efficace totale passe par un maximum lorsque le temps de collision T_c est comparable au temps au temps de transition T_t . Le temps de collision est le quotient d'une distance atomique a sur la vitesse relative v de déplacement. Le temps de transition est le produit

de \bar{W} par l'inverse de la différence énergétique moyenne \bar{W} . L'égalité de ces deux durées donne la vitesse pour laquelle le maximum se produit :

$$\text{en u.a.} \quad v_{\text{max}} = a * \bar{W} \quad (6.2)$$

6.2 QUELQUES DETAILS SUR LE PROGRAMME POUR CALCULER σ_{21}

La première étape du calcul est l'évaluation de la vitesse à partir de l'énergie et de la masse de l'ion incident, puis la résolution de l'équation (5.38) qui donne la valeur de γb_1 . Une interpolation linéaire est employée pour obtenir la meilleure valeur γb_1 à partir de deux valeurs déjà trouvées. Si la variation entre deux valeurs successives est trop grande alors l'intervalle est divisé par deux.

Avec la valeur de b_1 , la section efficace totale résonnante σ_0 ainsi que u_1 (équ. 5.40), la borne supérieure d'intégration, sont calculées.

Un sous-programme évalue l'intégrale $I(u_1)$ par la méthode de Simpson (Abramowitz et Stegun, équ. 25:4.6). Afin de réduire le temps d'intégration, pour chaque valeur successive de la vitesse nous ajoutons à l'intégrale la valeur correspondant à l'accroissement de u_1 . Comme u_1 croît avec l'inverse de la vitesse, les calculs sont commencés pour la plus grande valeur de l'énergie :

$$\text{pour } v = v'', v'' < v' \quad I = I' + \int_{u_1'}^{u_1''} du \quad (\dots) \quad (6.3)$$

Puis la section efficace $\sigma_{21}(v)$ est exprimée en u.a. et cm^2 . Les valeurs de u_1 , $I(u_1)$ et de σ_{21} en fonction de l'énergie de l'ion incident sont directement présentées sous forme de tableaux et de courbes pour σ_{21} .

6.3 CHOIX DES ETATS

Les restrictions que comporte le modèle diminuent le nombre des états excités disponibles tant pour la cible que pour l'ion incident. Ainsi, seul l'état excité de la cible de gaz noble - autre que l'hélium - est-il l'état $(ns^1 np^6, ^2S)$. C'est la seule configuration qui puisse donner l'état fondamental avant la capture de l'électron ns (considère seulement la capture d'un électron de la couche externe) :

$$B.(ns^2 np^6) \equiv (B^+(ns^1 np^6, ^2S) + e^-_{ns}) \quad (6.4)$$

Quant à la cible d'hélium seul l'état fondamental est possible car l'ion He^+ n'a qu'un électron.

Pour l'ion incident de gaz noble $A^{++}(ns^2 np^4, ^3P, ^1D, ^1S)$, les seuls états excités possibles après capture d'un électron sont ceux ayant la configuration $A^+(ns^2 np^4, nl)$. Les énergies d'excitation qui correspondent à ces niveaux ne doivent pas être trop élevées car elles tendent à augmenter le défaut énergétique \bar{W} . Si l'énergie d'excitation est équivalente à la différence $I(A^+) - I(B)$ alors l'état correspondant sera privilégié par rapport à l'état fondamental. Quant aux excitations de l'ion A^{++} autres que les excitations métastables proches de l'état fondamental ($^1D, ^1S$), elles ne peuvent être envisagées du fait que la transition vers l'état fondamental se produit bien avant que l'ion atteigne la cible (vu les facilités expérimentales).

Pour les ions incidents autres que ceux de gaz noble, les seuls états excités possibles sont $A^+(ns^2 np^i, nl)$ où i dépend de la nature des ions (pour l'ion d'azote, $i=1$).

6.4 RESULTATS NUMERIQUES DU MODELE DE RF

Les deux paramètres qui régissent la section efficace totale sont le potentiel d'ionisation moyen I et le défaut énergétique moyen \bar{W} . Ces deux paramètres s'expriment comme suit en fonction des quantités physiques :

$$I = \frac{1}{2} (I_A + I_B) \tag{6.5a}$$

$$\bar{W} = I_B - I_A + \bar{E} \quad (\Delta E = I_B - I_A) \tag{6.5b}$$

avec les potentiels d'ionisation effectifs :

$$I_A = I(A^+) + E_x(A^{++}) - E_x(A^+) \tag{6.6}$$

$$I_B = I(B) + E_x(B^+)$$

où $E_x()$ est l'excitation au-dessus du niveau fondamental de la particule notée

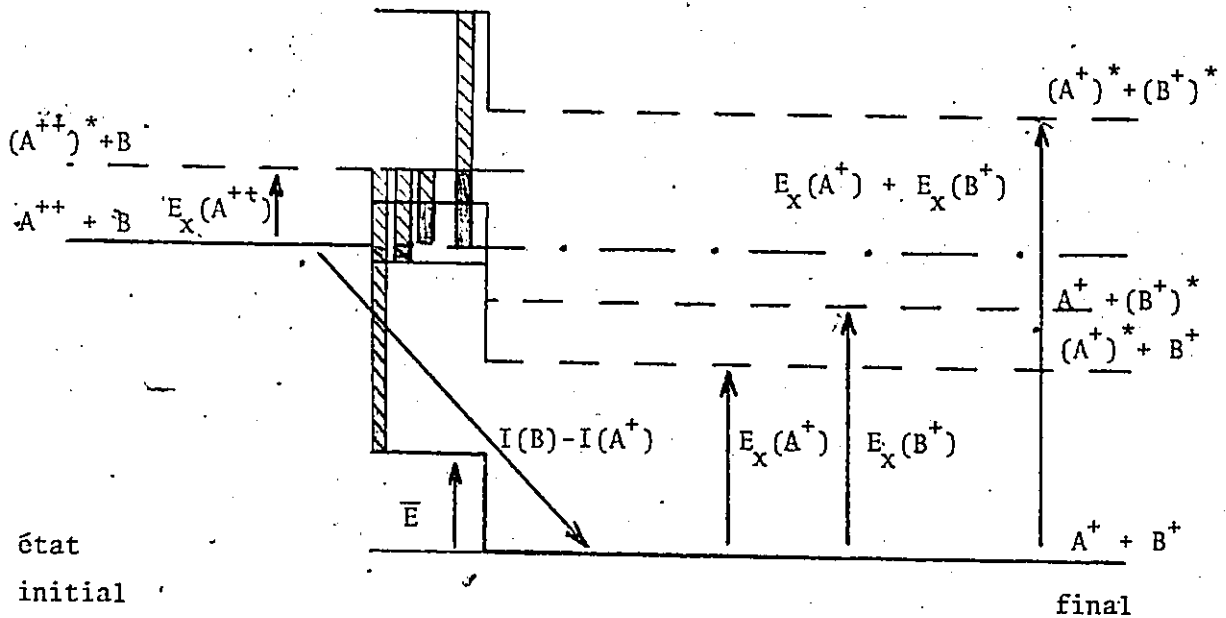




Fig. 6.1 DETERMINATION DU DEFAUT ENERGETIQUE DU MODELE DE RF : \bar{W}

\bar{W}  à partir de l'état fondamental de A^{++}
 à partir de l'état métastable de A^{++}

entre les parenthèses et $I(\)$ est le potentiel d'ionisation expérimental de la particule dans son état fondamental (Moore, 1971) - figure 6.1 -/

Les résultats du programme de calcul sont présentés sur les figures de la section 6.6* par les courbes en trait plein (———). Nous remarquons que cette théorie approximative est loin de produire des résultats précis quant à la valeur absolue de la section efficace. Néanmoins la variation avec l'énergie est satisfaisante (critère de Massey) bien que le maximum soit à une énergie un peu supérieure à celle de l'expérience.

Les ions incidents après la collision ne sont analysés qu'en fonction de leurs charges électriques et de leurs énergies. Ainsi donc la section efficace mesurée inclut les réactions où ces ions ne sont pas dans leurs états fondamentaux. De plus nous ne détectons pas les ions B^+ qui peuvent être excités. La section efficace est donc une moyenne des sections d'un ensemble de réactions; ceci en particulier pour les collisions très asymétriques où le nombre atomique de la cible est très supérieur à celui de l'ion incident.

Pour la réaction $Ne^{++} \rightarrow He$ où l'électron capturé était dans l'état 1s la section efficace théorique est en accord avec l'expérience (mieux que 15 %). Au fur et à mesure que le nombre atomique de la cible Z_B croît, la section efficace totale doit croître du fait de la plus grande extension de l'orbitale de l'électron à capturer (Hasted, 1952). Avec ce modèle, la section efficace reste pratiquement constante quel que soit Z_B et ainsi les valeurs théoriques sont-elles 2.5 à 10 fois plus petites que les valeurs expérimentales pour des cibles allant respectivement du néon au xénon.

* Nous vous prions de nous excuser pour n'avoir pas placé ces figures en regard du texte (éviter la répétition de multiples graphiques).

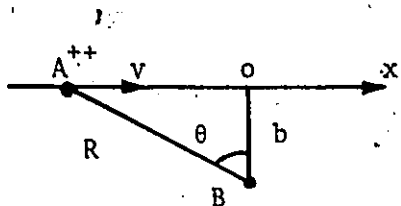
6.5 MODIFICATIONS " EMPIRIQUES "

Vu le désaccord entre la théorie de RF et l'expérience pour des cibles autres que celle d'hélium, nous avons pensé que nous pouvions améliorer cette théorie d'une manière plus ou moins empirique, c'est-à-dire ajuster les paramètres I et \bar{W} . Par exemple, Iovistù et Ionesco-Pallas (1960) ont introduit un coefficient, déterminé à partir d'expériences sur les sections efficaces, qui multiplie le potentiel d'ionisation de la fonction d'onde. Olson (1972) a essayé d'améliorer l'approximation sur l'élément de la matrice de couplage à partir d'un lissage de points expérimentaux (Olson et al, 1971) provenant de l'étude de la section efficace totale de capture σ_{10} .

De l'étude des variations de la section efficace totale de capture σ_{21} en fonction des deux paramètres, nous avons constaté que des réductions de I et de \bar{W} causent chacune une augmentation de la valeur absolue de σ tandis qu'elles ont un effet opposé sur le maximum adiabatique. Un ajustement adéquat des deux paramètres permettrait donc d'augmenter la section efficace sans déplacer sensiblement le maximum. Cependant du fait que le modèle de RF place ce maximum à une vitesse un peu supérieure, il faudra le recalibrer légèrement.

Dans le développement de ce modèle, plusieurs approximations ont été faites en ce qui concerne les fonctions d'onde qui décrivent les états de l'électron. La fonction d'onde moléculaire totale n'est que la combinaison linéaire de deux états atomiques 1s initial et final; c'est l'approximation des orbitales gelées. Melius et Goddard (1974) suggèrent que la fonction d'onde totale de l'électron soit une combinaison linéaire de deux orbitales moléculaires ϕ_M formées à l'aide des deux orbitales atomiques ϕ_A en rotation. Ce qui s'exprime sous forme matricielle par :

$$\begin{pmatrix} \phi_M^1(x) \\ \phi_M^2(x) \end{pmatrix} = \mathcal{R}(\theta(x)) \begin{pmatrix} \phi_A^i \\ \phi_A^f \end{pmatrix} \quad (6.7)$$



où \mathcal{R} représente la matrice de rotation qui définit l'évolution de la collision.

Nous en déduisons que la fonction d'onde du modèle est loin de représenter convenablement la fonction " dynamique " de l'électron. De plus les orbitales devraient être hybridées* (Cohen-Tannoudji et al, 1973), c'est-à-dire être une combinaison d'orbitales s et p car l'interaction entre les deux particules entraîne une polarisation dans le sens de la direction internucléaire. Ainsi l'extension de l'orbitale est-elle supérieure à celle qu'elle aurait si les deux particules étaient infiniment éloignées. Il faut ajouter que la considération d'orbitale de type ls est sans aucun doute la cause majeure de la faiblesse du modèle car pour des cibles ayant un nombre atomique élevé, l'orbitale de l'électron capturé de la couche externe a une extension bien supérieure à celle de type ls dont l'extension est fonction du potentiel d'ionisation.

Pour tenir compte de ce qui vient d'être mentionné, il faut diminuer le potentiel d'ionisation moyen ce qui aura pour effet d'augmenter l'extension de la fonction d'onde et par suite accroîtra la section efficace. Mais étant donné que I intervient aussi dans l'élément de la matrice de couplage (interaction) il faudra diminuer aussi \bar{W} car une diminution de I entraîne un accroissement de la zone d'interaction et par conséquent élève la vitesse à laquelle se produit le maximum. La considération d'orbitales gelées ne permet pas d'estimer I par des quantités atomiques (Melius et Goddard, 1974). Aussi devons-nous faire appel à des modifications déduites de considérations d'ordre physique et examiner leurs effets.

* Article sur l'hybridation : Pauling, L. 1931, J. Amer. Chem. Soc. 53, 1367

Nous avons supposé que l'extension de l'orbitale serait bien prise en compte en multipliant I par une certaine puissance du nombre quantique principal de l'électron capturé de la cible. Le facteur de correction choisi est n_B^{-1} . De plus, étant donné que l'orbitale ayant la plus grande extension définit au mieux le demi rayon moyen d'interaction, nous prenons pour I la quantité minimale entre I_A et I_B . Ceci permet de tenir compte d'une certaine manière de la polarisation des orbitales. Le potentiel d'ionisation moyen corrigé est donc :

$$I_C = \text{Min}(I_A; I_B) * n_B^{-1} \quad (6.8)$$

Avec cette correction, les cibles dont l'électron à capturer est dans l'état 1s ne sont modifiées que par la considération du minimum des deux potentiels d'ionisation effectifs I_A et I_B .

Le facteur de correction pour \bar{W} sera choisi tel que la variable u_1 (équ. 5.40) reste pratiquement constante après corrections de I et de \bar{W} . Cette quantité u_1 est pratiquement proportionnelle à $\bar{W} * I^{-\frac{1}{2}}$. Donc un facteur de correction de n_B^{-1} pour I entraîne un facteur $n_B^{-\frac{1}{2}}$ pour \bar{W} . Il s'est avéré que l'exposant ($-2/3$) était préférable à ($-\frac{1}{2}$) (une valeur intermédiaire aurait pu être choisie et donner satisfaction) pour recalculer le maximum.

La nouvelle expression du défaut énergétique moyen est :

$$Q_C = \bar{W} * n_B^{-2/3} \quad (6.9)$$

6.6 ANALYSE DES NOUVEAUX RESULTATS NUMERIQUES

Ces résultats sont présentés sur les figures 6.2 à 6.13 en trait :

La comparaison entre les résultats théoriques numériques et expérimentaux

s'effectue en deux fois suivant que la section efficace est simple ou composée.

Composée veut dire que la section efficace est la somme de diverses sections efficaces simples correspondant à des couples d'états initiaux et finals.

Dans notre cas la section efficace simple est celle où tous les éléments de la réaction, tant avant qu'après la collision, sont dans leurs états fondamentaux (représentée par la courbe All G.S. sur les figures). Les réactions $N^{++} \rightarrow Ne$, $Ne^{++} \rightarrow He$, $Ne^{++} \rightarrow Ar$, $Ar^{++} \rightarrow Ne$, $Ar^{++} \rightarrow Kr$ appartiennent à cette catégorie. Toutes les autres réactions font partie de la catégorie des sections efficaces composées, sommes pondérées de sections efficaces simples :

$$\sigma_{21}^c(v) = \sum_k \sigma_{21}^{sk}(v) C_k(v) \quad (6.10)$$

où k indique un couple d'états initial et final, C_k est un coefficient donnant la proportion de σ_{21}^{sk} dans la somme et σ_{21}^{sk} est la section efficace simple pour le couple d'états k.

6.6.1 Sections efficaces totales simples

.....

L'étude de la variation de Q_c en fonction du nombre atomique de la cible a mis en évidence l'existence d'une valeur minimale de Q_c très séparée des valeurs suivantes lorsque Z_B est petit par rapport à Z_A . Ceci s'explique par le fait qu'une excitation des produits de la collision, dans le cadre du modèle, augmente trop la valeur de Q_c et par conséquent entraîne une réduction importante de la section efficace (section 6.3). Ainsi donc, si le nombre atomique de la cible Z_B satisfait approximativement la relation suivante avec Z_A : $Z_B \leq 2Z_A$, la section efficace sera principalement celle où chaque particule de la collision se trouve dans son état fondamental. Cependant, il n'est pas exclu que les sections mesurées soient composées principalement de collisions avec toutes les particules dans leurs états fondamentaux et de quelques collisions où les particules

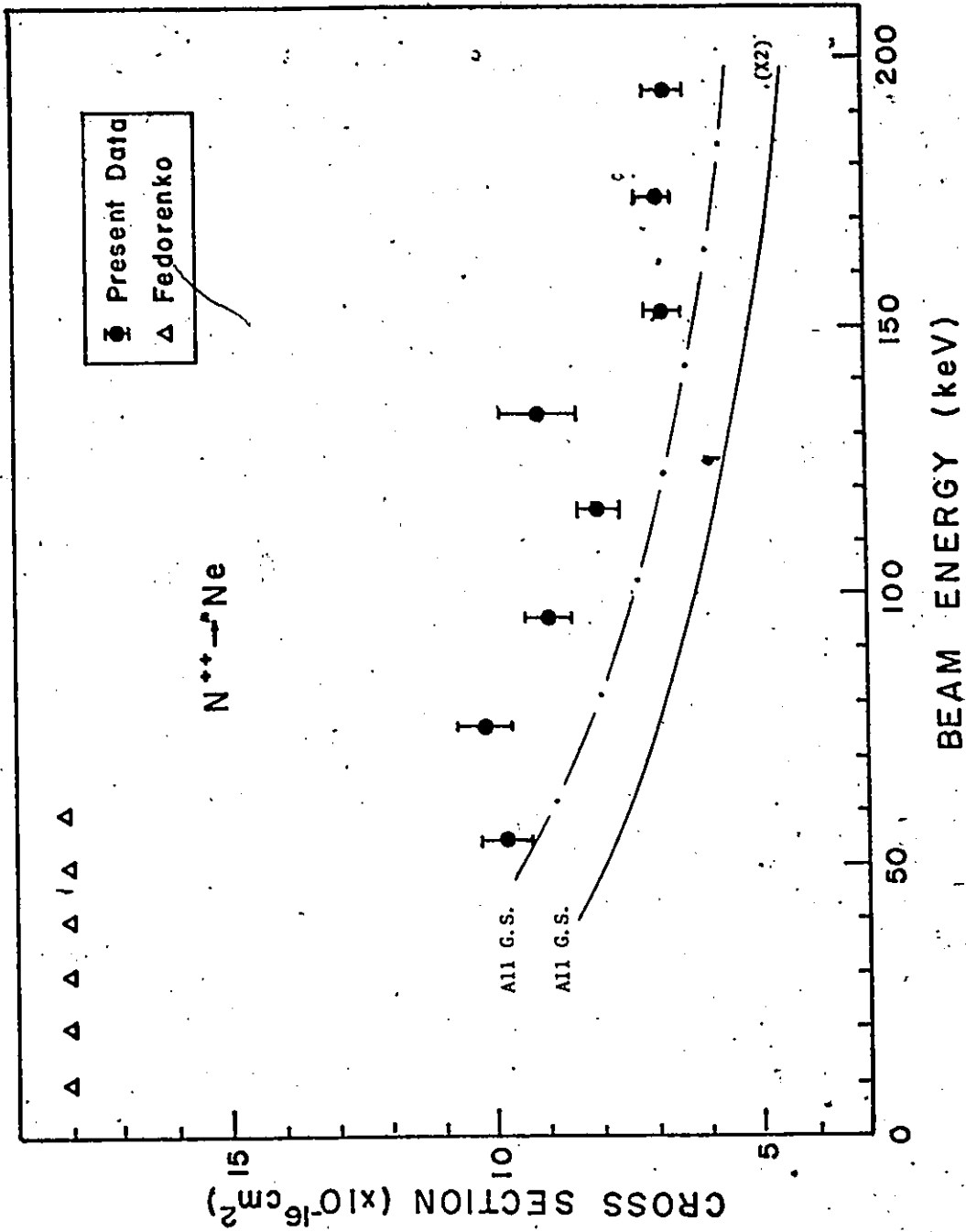


Figure 6.2 : Section efficace totale simple : σ_{21} de l'azote avec cible de néon

— théorie de RF

-.-.- théorie modifiée

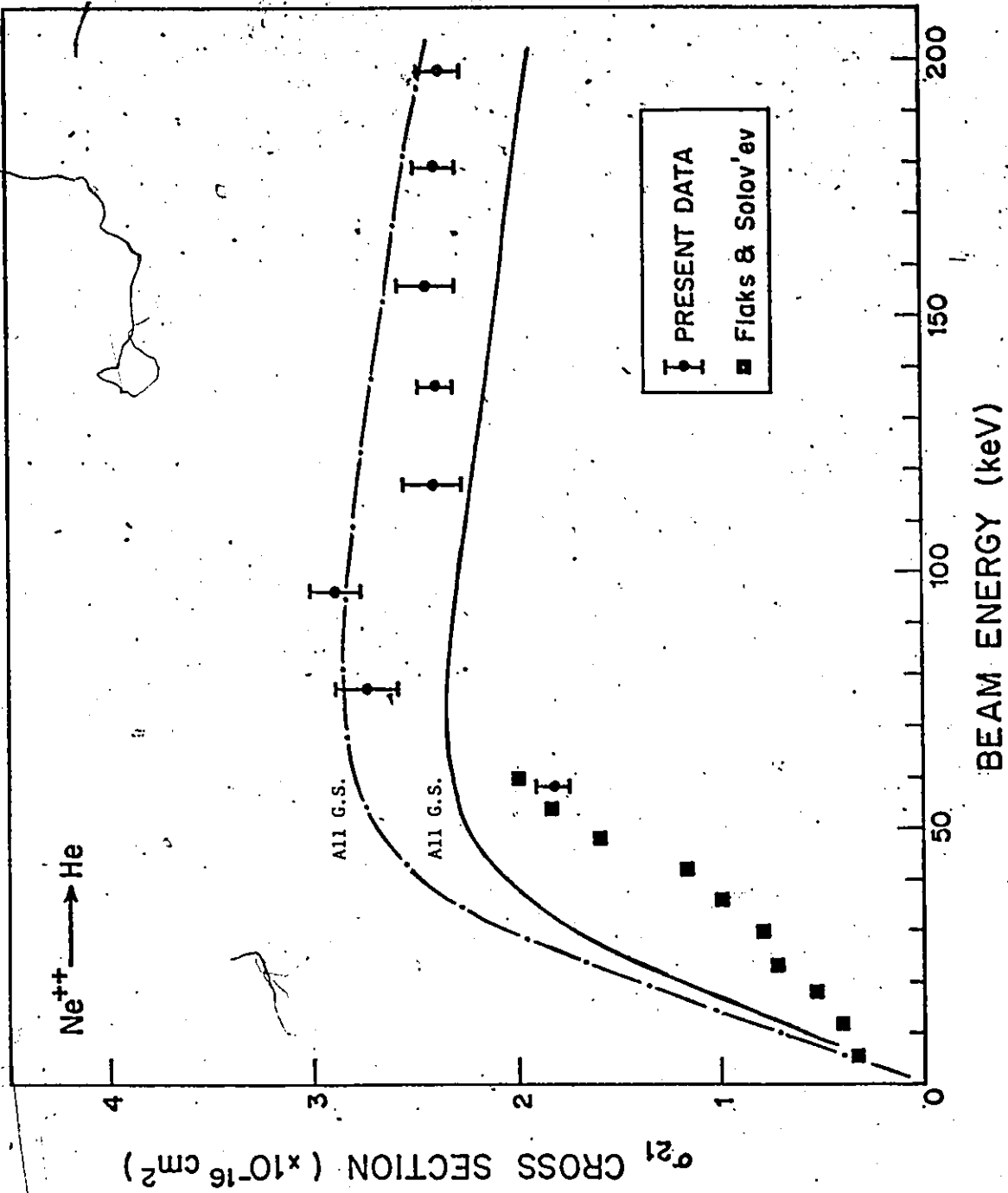


Figure 6.3 : Section efficace totale simple : σ_{21} du néon avec cible d'hélium

— théorie de eRF
 -.-.- théorie modifiée

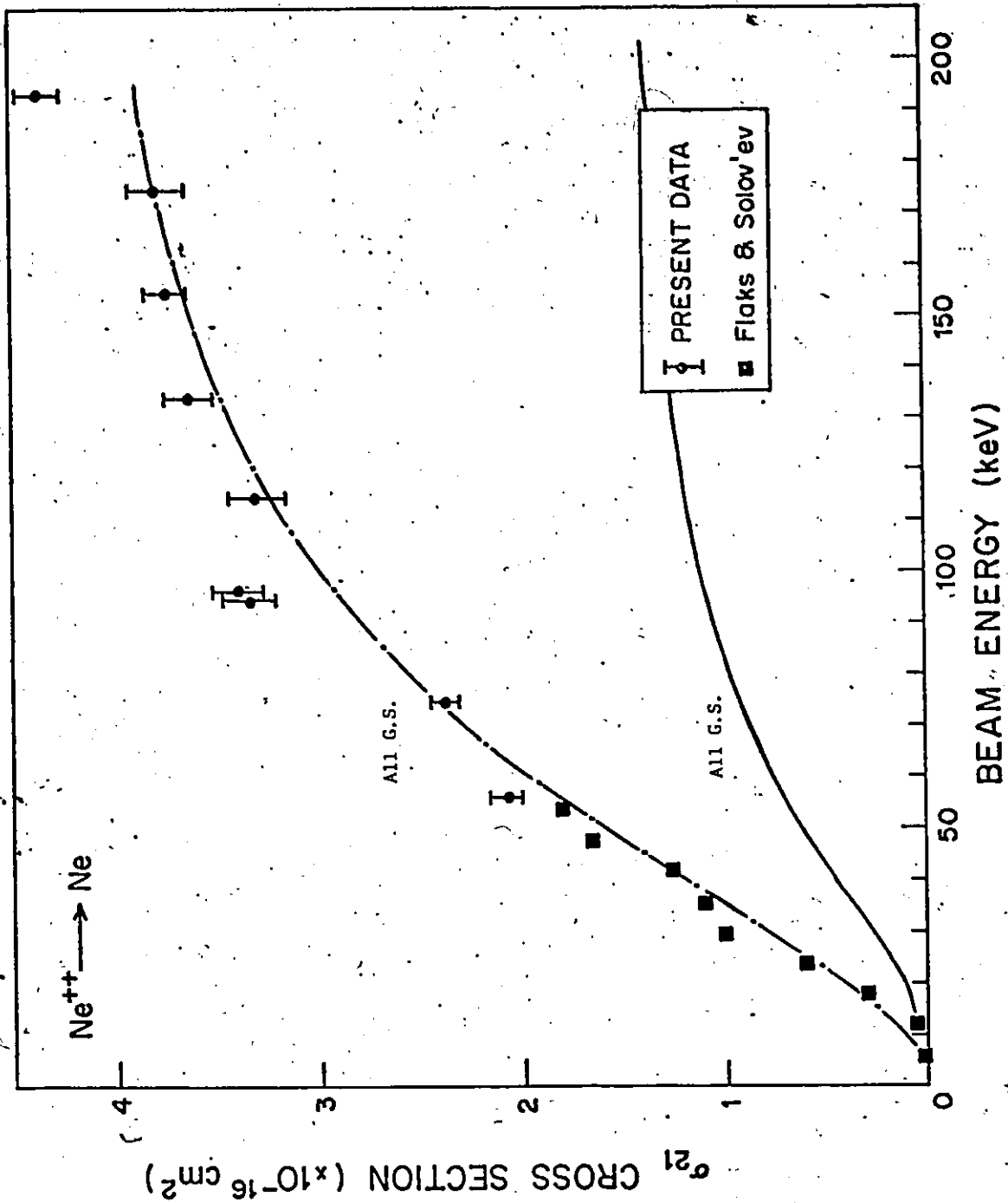


Figure 6.4 : Section efficace totale simple : σ_{21} du néon avec cible de néon

— théorie de RF

-.-.- théorie modifiée

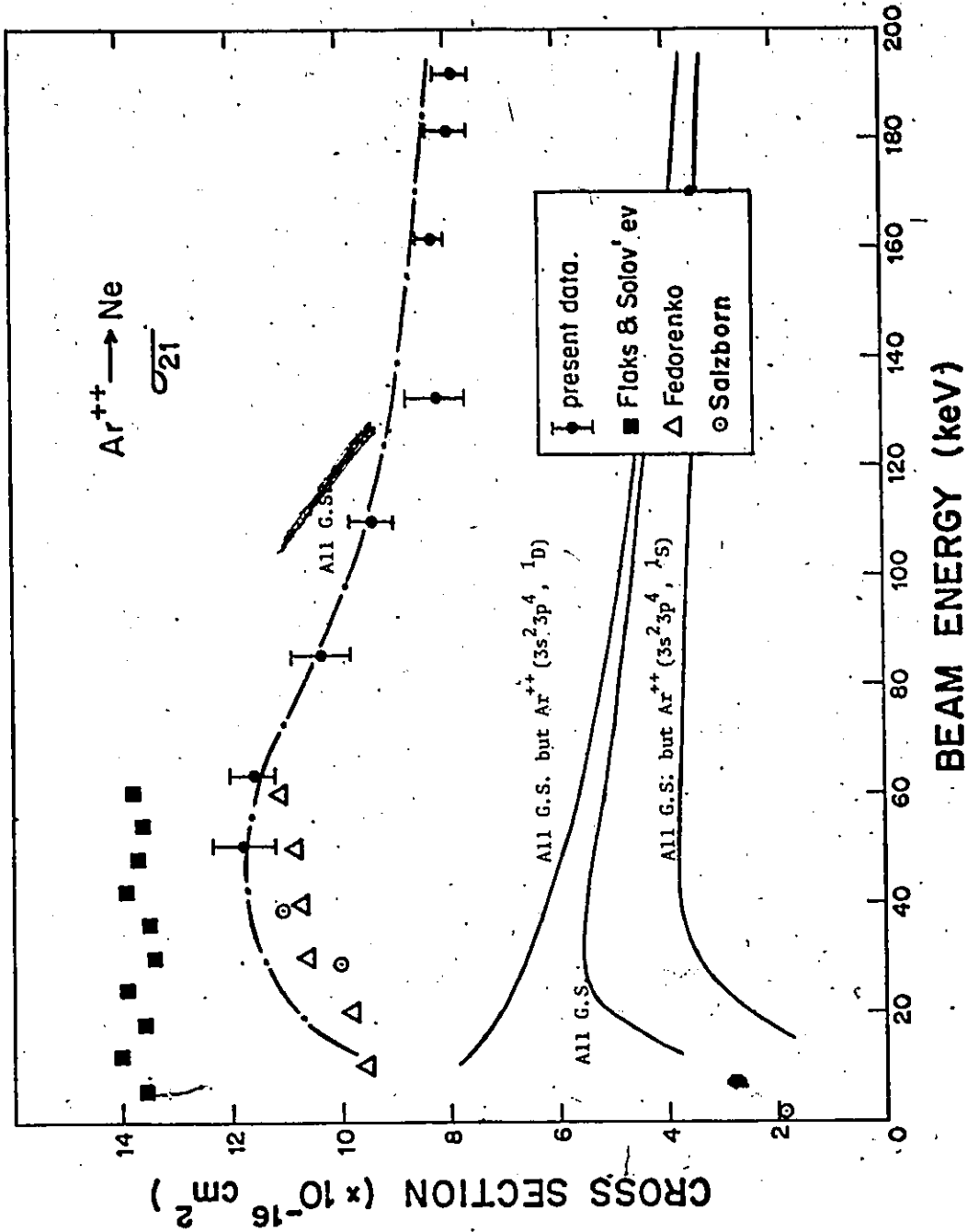


Figure 6.5 : Section efficace totale simple : σ_{21} de l'argon avec cible de néon

— théorie de RF
 .-.-. théorie modifiée

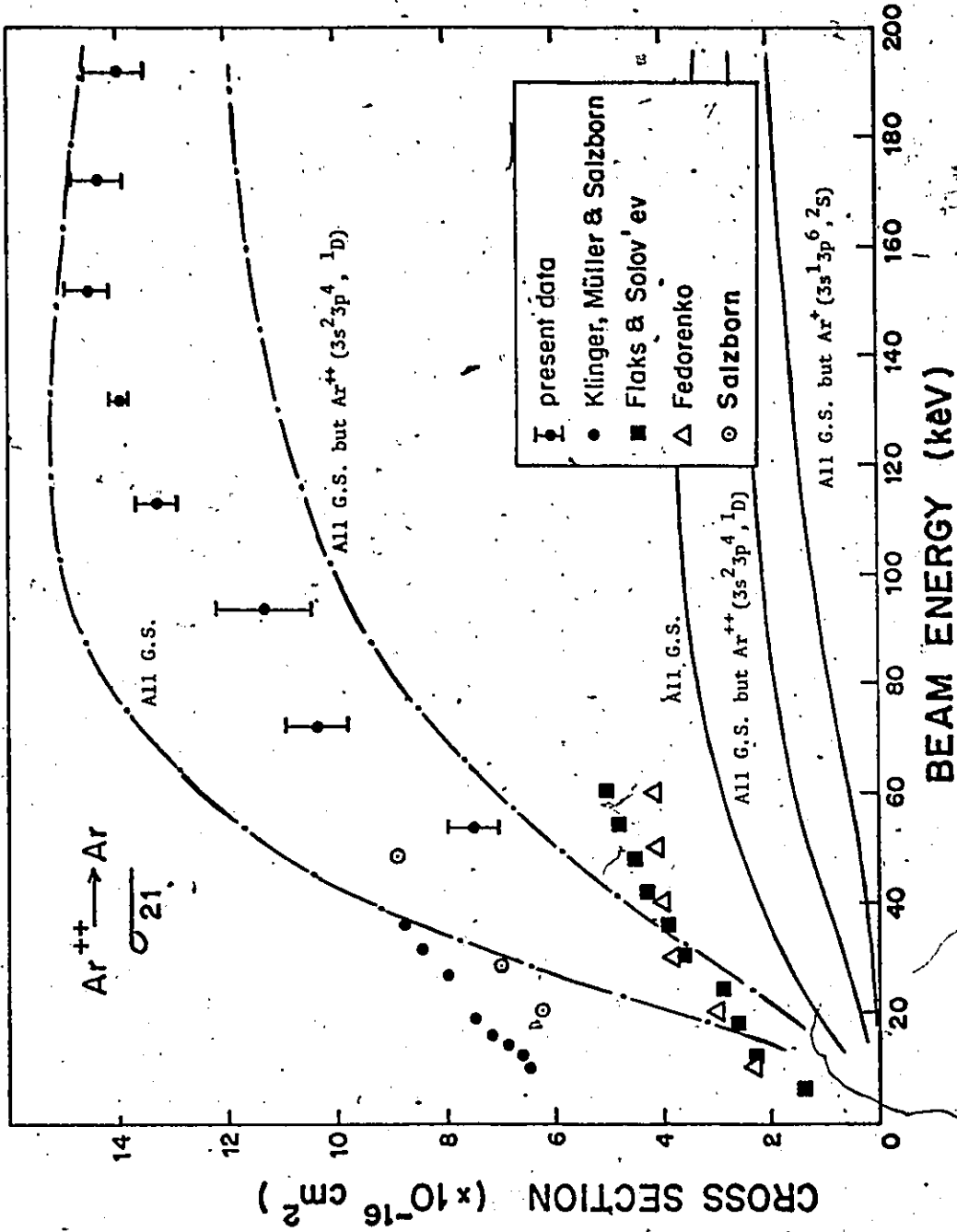


Figure 6.6 : Section efficace totale simple : σ_{21} de l'argon avec cible d'argon

— théorie de RF
 -.- théorie modifiée

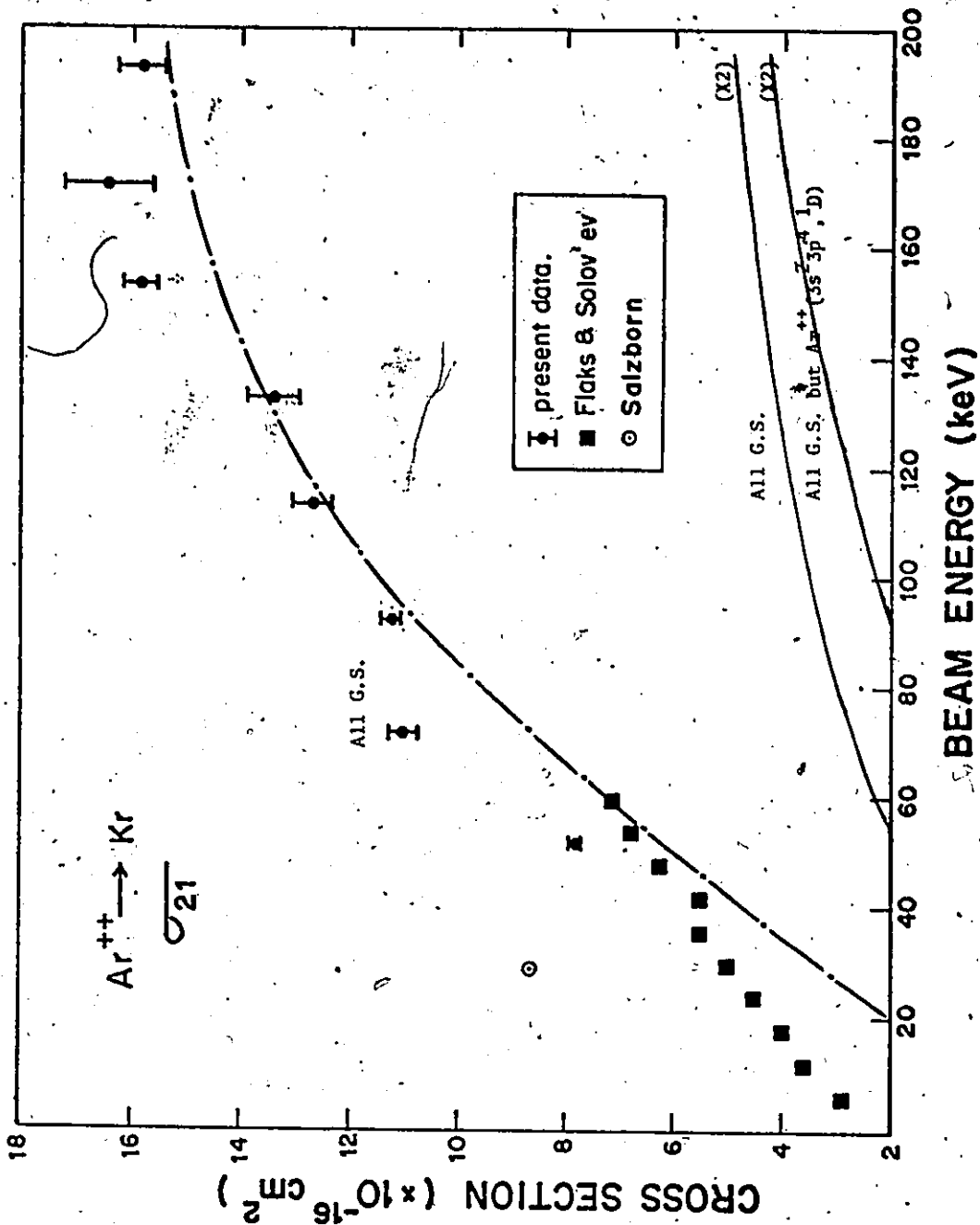


Figure 6.7 : Section efficace totale simple : σ_{21} de l'argon avec cible de krypton

— théorie de RF
 - - - - théorie modifiée

sont excitées. Du fait de la dispersion des résultats expérimentaux d'une même série de mesures et de la nature approximative du modèle, nous ne pouvions espérer un accord entre théorie et expérience meilleur que celui obtenu < 15 % (excepté pour $\text{Ar}^{++} \rightarrow \text{Ar}$, 30 %).

Pour les énergies inférieures à 150 keV, la section efficace de la réaction $\text{Ar}^{++} \rightarrow \text{Ar}$ s'écarte de la courbe théorique All G.S. pour se rapprocher de la courbe où l'ion Ar^{++} est dans l'état métastable 1D . Nous pourrions penser que ce phénomène est la manifestation de la contamination du faisceau par le métastable 1D , le plus proche de l'état fondamental (1.73 eV). Mais nous ne pouvons pas conserver cette idée car les sections renormalisées de Salzborn (1976) sont assurées exemptes de toute contamination et aux erreurs expérimentales près elles sont dans l'alignement de nos mesures. Nous attribuons cet écart à quelque erreur systématique ou bien plutôt au fait que la théorie n'est qu'une représentation approchée de la réalité.

6.6.2 Sections efficaces totales composées

Lorsque $Z_B \gg 2Z_A$, la section efficace totale est la somme pondérée de celle pour l'état fondamental et de celles pour les états excités. Ici, les énergies d'excitation peuvent diminuer Q_c , donc certains états sont privilégiés par rapport à l'état fondamental. Quand un ion plusieurs fois ionisé entre en collision avec un atome neutre, le mécanisme le plus probable est le transfert quasi-résonnant qui implique des états excités de l'ion incident dont les énergies de liaison sont proches du potentiel d'ionisation de l'atome B (Presnyakov et Ulantsov, 1975). Le reste des données expérimentales montrent manifestement que la section efficace est une " moyenne " sur l'ensemble des états possibles.

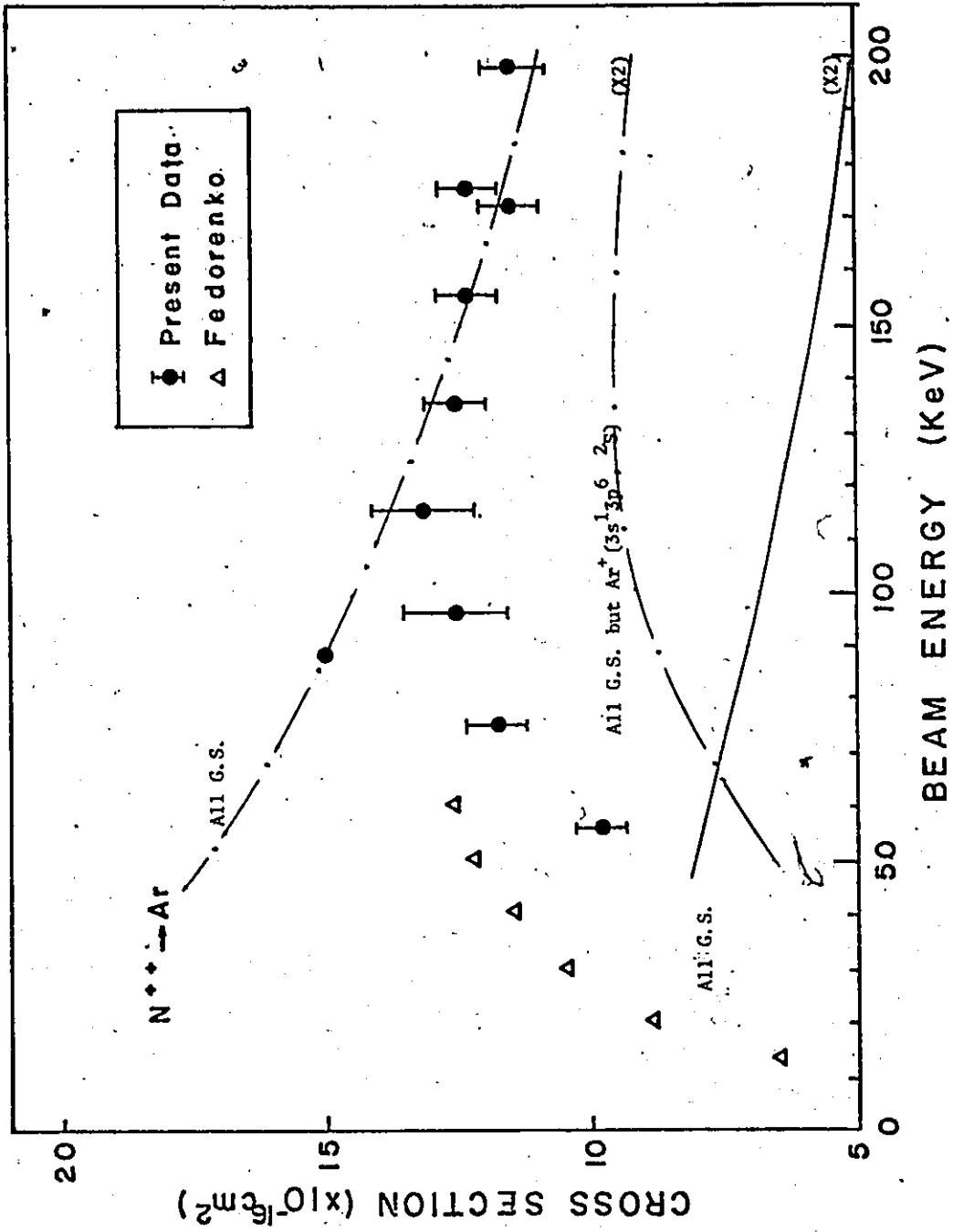


Figure 6,8 : Section efficace totale composée : σ_{21} de l'azote avec cible d'argon

— théorie de RF
 -.-.- théorie modifiée

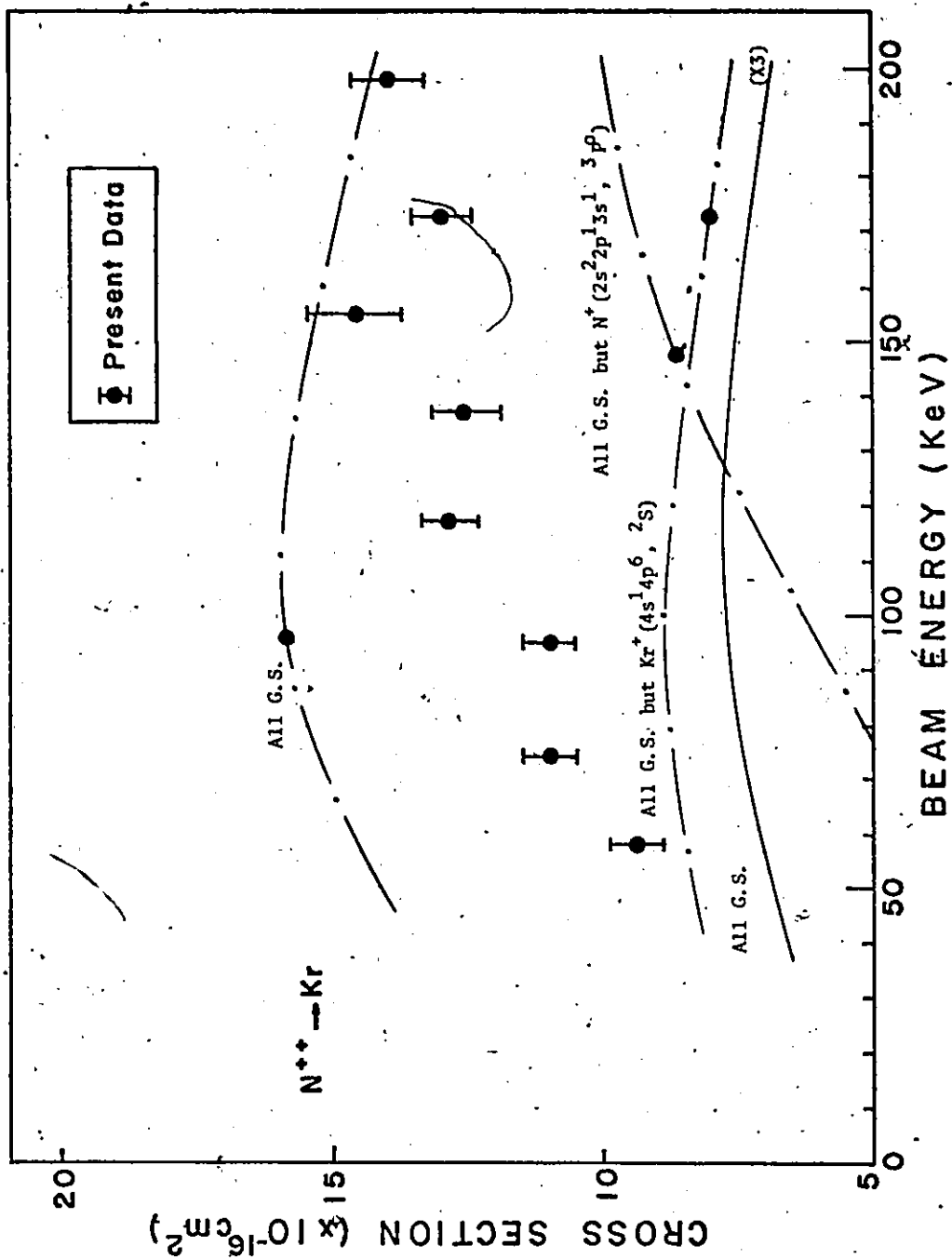


Figure 6.9 : Section efficace totale composée : σ_{21} de l'azote avec cible de krypton

— théorie de RF
 -.- théorie modifiée

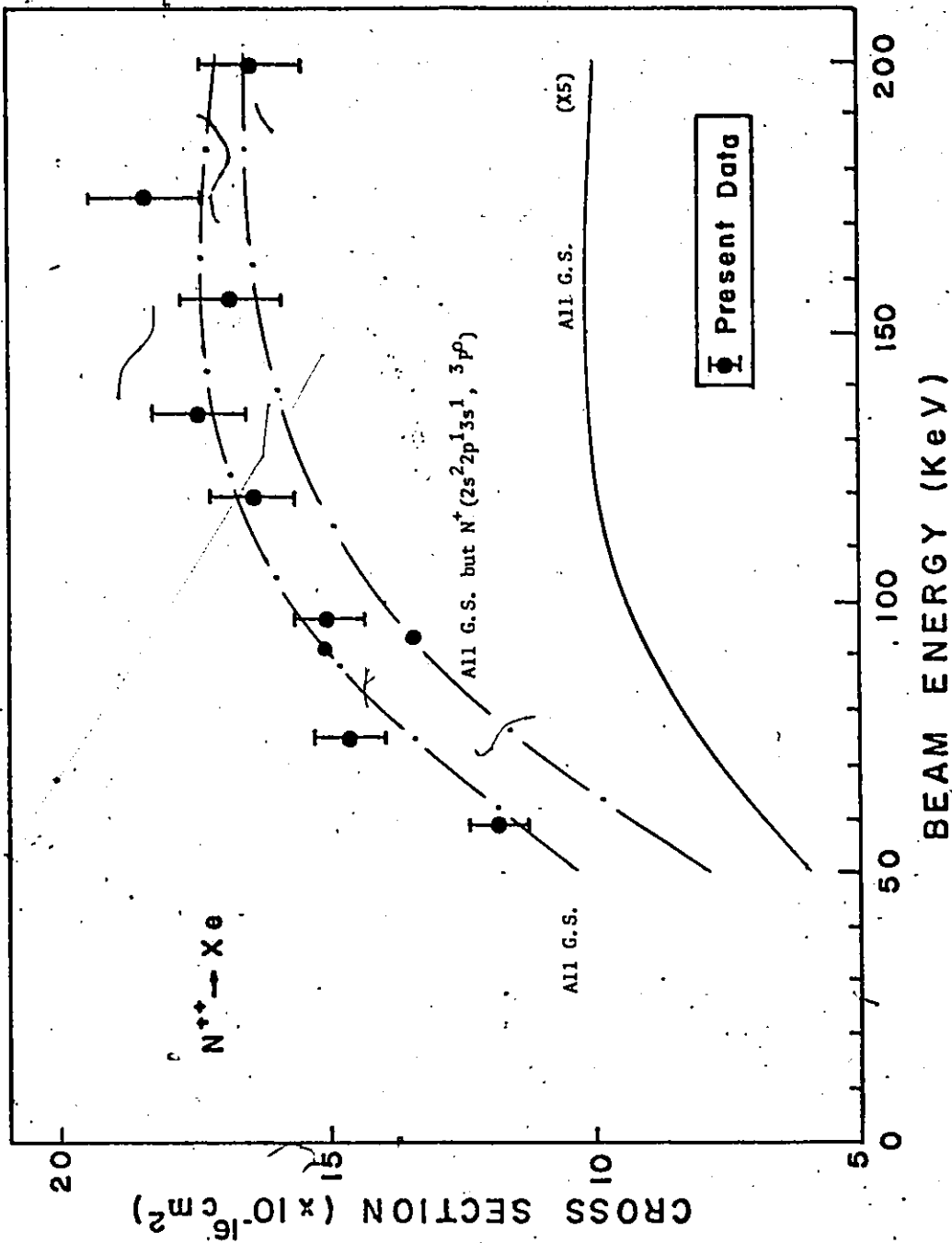


Figure 6.10 : Section efficace totale composée : σ_{21} de l'azote avec cible de xénon

- théorie de RF
- .-.-.- théorie modifiée

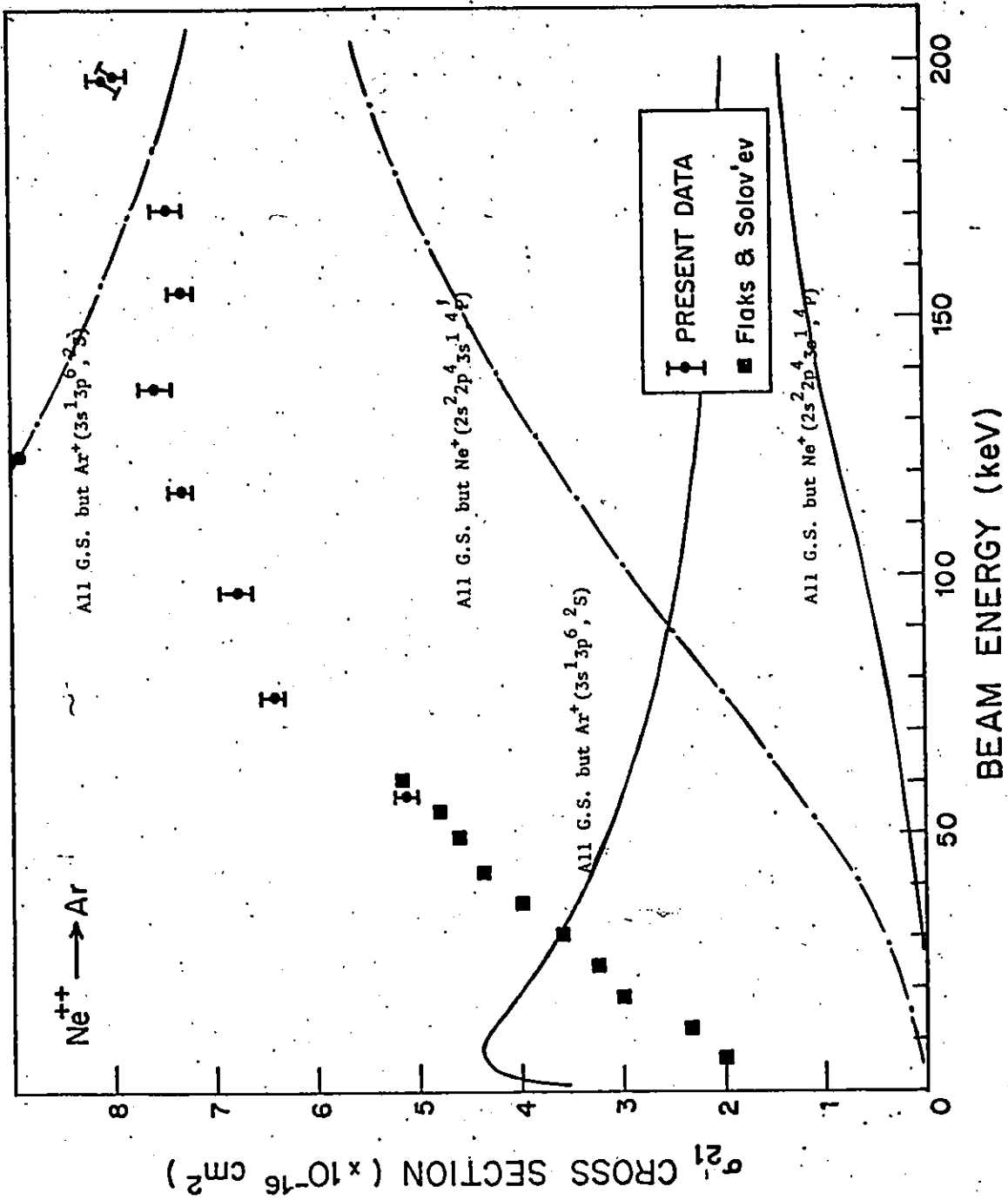


Figure 6.11 : Section efficace totale composée : σ_{21} du néon avec cible d'argon

— théorie de RF
 -·-·- théorie modifiée

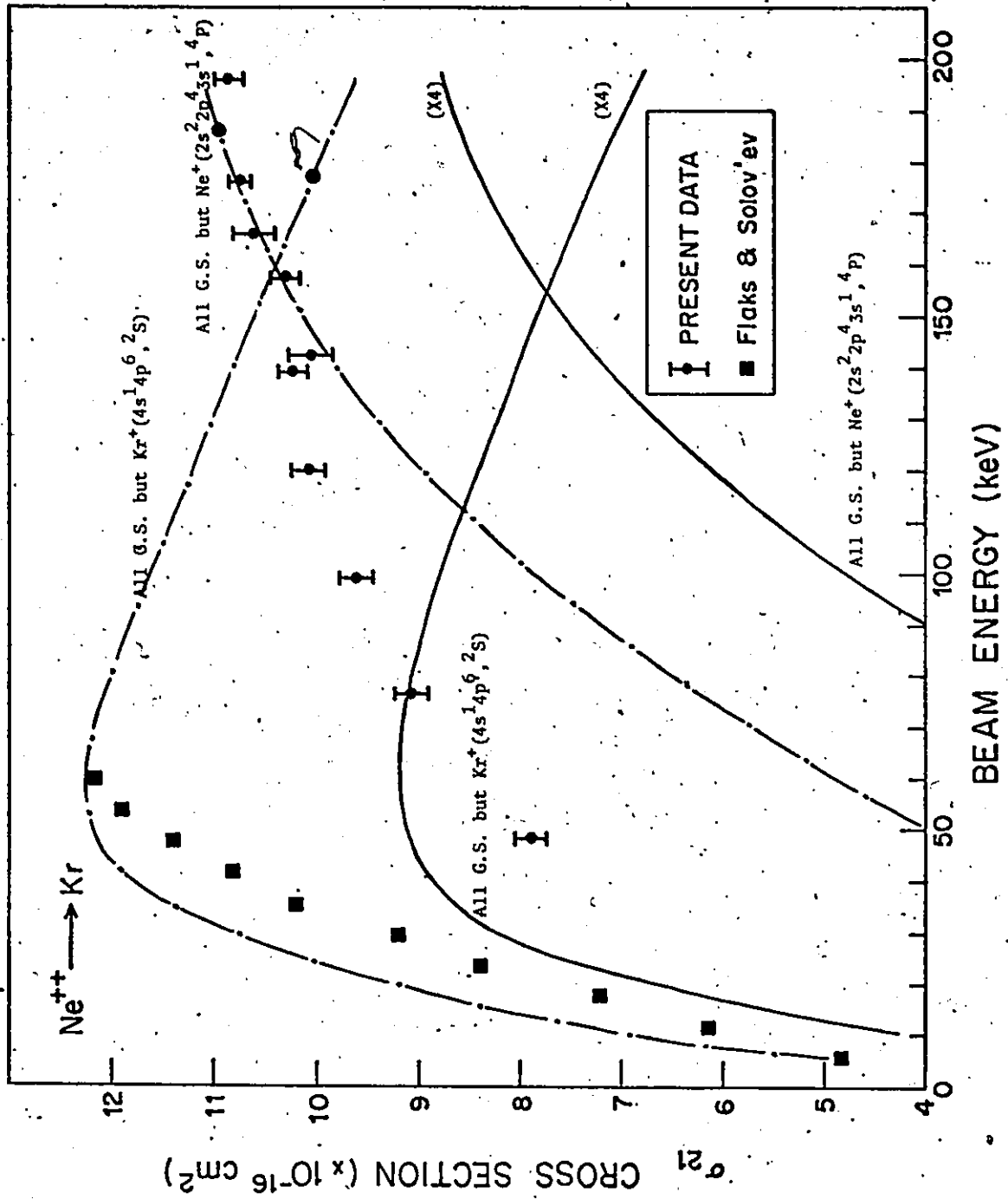


Figure 6.12 : Section efficace totale composée : σ_{21} du néon avec cible de krypton

- théorie de RF
- .-.- théorie modifiée

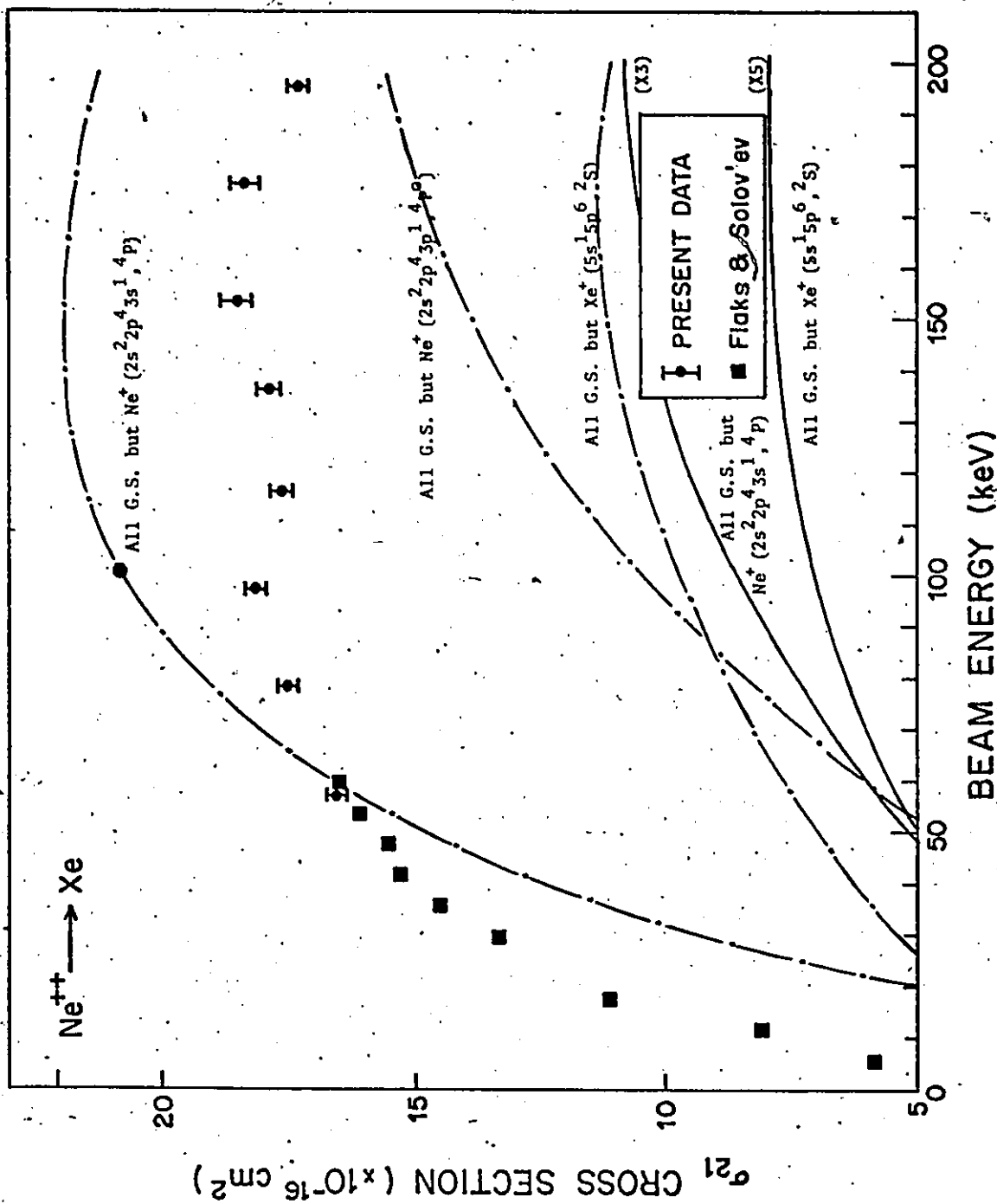
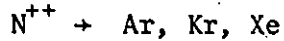
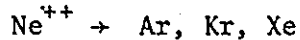


Figure 6.13 : Section efficace totale composée : σ_{21} du néon avec cible de xénon

— théorie de RF
 -.-.- théorie modifiée



Pour les énergies élevées, la section efficace est pratiquement celle de l'état fondamental. Au fur et à mesure que l'énergie de l'ion incident décroît, la proportion des états excités augmente et la section efficace tend à diminuer. Ce fait est clair pour les réactions $N^{++} \rightarrow Ar$ et Kr . Pour le xénon où l'état fondamental et le premier état excité de $N^+ : 3p^0$ ont des sections efficaces du même ordre, les points expérimentaux sont situés sur les deux courbes théoriques. Néanmoins nous pouvons presque assurer qu'aux basses énergies seul l'état fondamental contribue à la section efficace. Au fur et à mesure que l'énergie croît, l'importance de la contribution du premier état excité de $N^+ (3p^0)$ augmente.



Ici tous les états excités sont privilégiés par rapport aux états fondamentaux des produits de la collision. Aussi ne montrons-nous pas les courbes All G.S. qui sont trop petites. L'état $Ne^+ (2s^1 2p^4 3s^1, 4p)$ est le premier état excité possible et donne la section efficace totale la plus élevée. La section efficace mesurée est un mélange des états excités des produits. Là encore les points expérimentaux s'intercalent bien entre les courbes théoriques possibles. Pour $Ne^{++} \rightarrow Kr$, les mesures de FS sont des mesures où domine l'état excité $Kr^+ (2S)$. Soit ci-dessous un aperçu grossier des diverses contributions en fonction de l'énergie de l'ion incident :

	contribution majeure aux	
$Ne^{++} \rightarrow Ar$	hautes énergies (200 keV)	$Ar^+ (2S)$
	basses énergies	$Ne^+ (4P)$
$Ne^{++} \rightarrow Kr$	hautes énergies	$Ne^+ (4P)$
	basses énergies	partage entre $Kr^+ (2S)$ et $Ne^+ (4P)$

Ne⁺⁺ → Xe hautes énergies mélange des états excités de Ne⁺
 basses énergies Xe⁺ (2S)

Quand Z_B croît, l'excitation de B est plus probable aux basses énergies tandis que celle de A est plus probable aux hautes énergies.

Note : La généralisation des conclusions de la section 6.6 ne pourrait être envisagée sans l'apport de nouvelles évidences expérimentales.

6.7 VARIATIONS DE \underline{a} ET DE \bar{E}

6.7.1 Evaluation de la distance \underline{a}

Dans l'énoncé du critère de Massey (éq. 6.2), la distance atomique \underline{a} n'est pas définie précisément. En fait, cette distance n'est autre que la largeur de l'interaction $h_{if}(x)$ dont dépend directement la section efficace (Rapp, 1971). L'interaction est le produit interne des fonctions d'onde initiale et finale couplées par le potentiel : $\langle i | V | f \rangle$. La considération de la vitesse (v_{\max}) pour laquelle la section efficace de capture est maximale (σ_{\max}) et du défaut énergétique (Q_c) nous permet de déterminer les valeurs théoriques de \underline{a} : $a_{th} = v_{\max} / Q_c$. Ces informations sont extraites du programme de la section 6.2 et reproduites dans notre domaine des énergies dans le tableau 6.1. Pour les calculs numériques nous avons utilisé la relation :

$$a_{th}^0 (\text{Å}) = 2.88 (E(\text{keV}) / M(\text{u.m.a.}))^{1/2} / Q_c(\text{eV}) \quad (6.11)$$

Il est à noter que la décroissance du nombre atomique de l'ion incident s'accompagne d'un accroissement de la plage de variations possibles de la largeur de l'interaction. Cependant, ces valeurs de a_{th} ne confirment pas les estimations faites par Hasted (1951-52) et Hasted et Lee (1962) où est donnée une valeur de a_{th}^0 égale à 7 Å. Mais Hasted n'exclut pas

TABLEAU 6.1 : Informations extraites du programme pour calculer σ_{21} .

Réactions / états	v_{\max} (u.a.)	I_c (eV)	Q_c (eV)	$\sigma_{\max}^{\circ 2}$ (Å ²)	a_{th}° (Å)	$u_1(v_{\max})$	$I(u_1)$
$N^{++} \rightarrow Ne$ ($N^+ 1S$)	.463	10.78	3.53	5.89	1.94	.777	.693
Ar ($Ar^+ 2S$)	.639	9.74	5.30	4.74	1.74	.830	.660
Kr (GS)	.526	3.50	-2.39	16.16	3.20	.790	.683
Kr ($Kr^+ 2S$)	.492	6.88	2.98	8.90	2.38	.762	.702
Kr ($N^+ 1D$)	.403	3.50	-1.64	20.63	3.63	.740	.704
Kr ($N^+ 1S$)	.240	3.50	-.78	30.99	4.45	.651	.768
Xe (GS)	.690	2.42	-2.99	17.32	3.33	.851	.649
Xe ($Xe^+ 2S$)	.239	4.68	.87	23.58	3.88	.628	.781
Xe ($N^+ 1D$)	.591	2.42	-2.34	20.85	3.63	.807	.685
Xe ($N^+ 1S$)	.462	2.42	-1.60	26.97	4.14	.742	.714
Xe ($N^+ 3P^0$)	.756	2.23	3.33	16.66	3.25	.886	.628
$Ne^{++} \rightarrow He$ (GS)	.456	24.58	-5.11	2.65	1.27	.759	.704
Ne (GS)	.697	10.78	-6.33	3.88	1.57	.848	.651
Kr ($Ne^+ 4P$)	.700	3.47	3.67	11.83	2.75	.860	.643
Xe ($Xe^+ 2S$)	.580	4.68	-3.18	10.97	2.65	.809	.674
Xe ($Ne^+ 4P$)	.580	2.42	2.27	21.31	3.68	.802	.678
$Ar^{++} \rightarrow Ar$ (GS)	.255	5.25	-1.72	15.08	3.09	.711	.732
Kr (GS)	.529	3.50	-2.39	16.18	3.21	.786	.687

u_1 et $I(u_1)$ définis dans la section 5.5

nous n'avons considéré que les maxima situés à l'intérieur de notre gamme des énergies : $.24 \leq v \leq .75$ u.a. .

la possibilité de valeur particulière pour chaque cas.

Comme nous l'avons mentionné au début de cette section, la section efficace dépend directement de la largeur de l'interaction. Cette affirmation est confirmée qualitativement par l'examen du tableau 6.1. Nous notons que la largeur de l'interaction est égale à la valeur de la distance de plus courte approche quand la section efficace de capture est maximale :

$a_{th} = b_{max}$, avec b_{max} défini comme $\sigma_{max} = \frac{1}{2}\pi * b_{max}^2$. La légère différence visible sur le tableau provient du fait que la section efficace de capture n'est pas calculée pour des valeurs continues de l'énergie mais plutôt par bonds de 5 keV ce qui nécessite des interpolations.

Ainsi donc, si la distance de plus courte approche est égale à b_{max} , pour l'énergie de l'ion incident égale à l'énergie du maximum, la section efficace passe par un maximum ce qui correspond au recouvrement maximal des orbitales au travers du potentiel. Ce maximum intervient pour une énergie donnée de l'ion incident car la trajectoire doit être rectiligne et le temps de collision comparable au temps de transition.

6.7.2 Evolution de la correction \bar{E}

.....

La correction appliquée à E pour tenir compte des énergies d'interaction de Coulomb et de polarisation \bar{E} ne dépend pas correctement du nombre atomique de la cible Z_B . Connaissant les valeurs de Q_C pour les sections efficaces simples, nous avons déterminé E' telle que $E' = Q_C - \Delta E$ (ceci suppose qu'il ne serait pas nécessaire de modifier \bar{W} si la correction de Hasted et Lee était satisfaisante.). Cette énergie (E') croît avec Z_B tandis que la correction de Hasted et Lee décroît avec Z_B . Cette augmentation de E' avec Z_B doit venir principalement de l'énergie de polarisation, car une expression asymptote en

R^{-4} n'est pas valable quand les deux atomes sont proches l'un de l'autre (Z_B croît $\Rightarrow R$ doit être plus grand pour que l'expression asymptote soit valable).

6.8 INFLUENCE DU FACTEUR DE TRANSLATION

Dans le modèle de RF le facteur de translation des éléments de la forme $\langle i | \dots | f \rangle$ est omis : $\exp(i \vec{v} \cdot \vec{R})$ avec $\vec{v} \cdot \vec{R} = vx$ (section 6.5). Rapp (1971) a montré que pour une vitesse $v_{TF} \geq .22$ u.a. la section efficace théorique de la réaction $H^+ \rightarrow H$ avec omission du facteur de translation commence à être supérieure à celle où le facteur de translation est adéquatement introduit.

Ferguson (1961) confirme ceci par un calcul pour cette même réaction : pour $v = .22$ u.a., l'erreur est de l'ordre de 2 % . Dans la mesure où ce résultat serait applicable à nos mesures (le facteur de translation dépend explicitement de v et implicitement de la nature des particules), nous devrions trouver nos sections efficaces théoriques supérieures aux valeurs expérimentales de :

N^{++}	$v \in$.38 - .75	u.a.	6 - 26 %
Ne^{++}		.31 .63		4 17
Ar^{++}		.22 .45		2 9

Cependant, il nous est impossible de noter cet effet, ce qui impose que le \vec{R} du facteur de translation est une fonction de la nature du projectile.

Conservant le raisonnement de Rapp, le facteur de translation commencera à avoir un effet lorsque sa demi-période d'oscillation spatiale sera égale ou inférieure à la largeur de l'interaction qui détermine la section

efficace (voir figure 6.14)

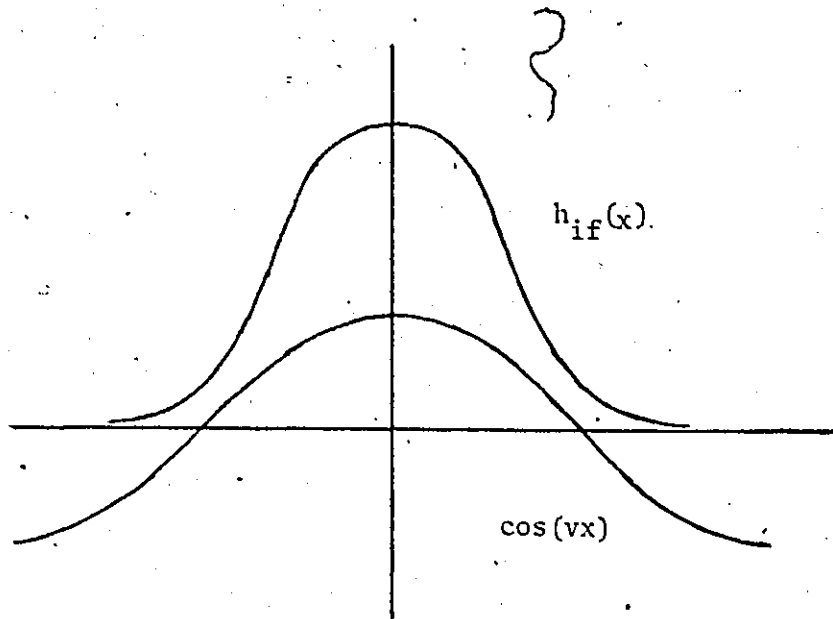


Fig. 6.14 VITESSE v A PARTIR DE LAQUELLE LE FACTEUR DE TRANSLATION DOIT ETRE PRIS EN CONSIDERATION

Ainsi nous obtenons comme borne inférieure de la vitesse :

$$\text{en u.a.} \quad v_{TF} > \pi / a_{th} \quad (6.12)$$

ou en fonction de l'énergie de l'ion incident E_{TF} :

$$E_{TF}(\text{keV}) = 25 \pi^3 a_0^2 (\sigma_{\max}(\text{\AA}) / \frac{1}{2} M(\text{u.m.a.}))^{-1} \quad (6.13)$$

Pour les différentes courbes théoriques, un point indique la limite inférieure E_{TF} à partir de laquelle il faudrait tenir compte du facteur de translation.

Ceci nous montre pourquoi il ne nous était pas possible de détecter une erreur aussi grande que celle présentée ci-dessus.

6.9 CALCUL DES DEUX PARAMETRES I_c ET Q_c DES SECTIONS EFFICACES EXPERIMENTALES COMPOSEES

La démarche théorique consiste à calculer les deux paramètres du modèle à l'aide des deux équations (6.5) et (6.6). Après calcul sur ordinateur, nous obtenons les valeurs de la section efficace en fonction de l'énergie de l'ion incident. Quant à la démarche que nous appellerons expérimentale, la procédure est inverse : les valeurs de la section efficace sont connues et à partir desquelles nous aimerions déduire les deux paramètres. Ceci est particulièrement intéressant dans le cas où la section efficace est composée, c'est-à-dire que divers états finals contribuent à la réaction de capture. Grâce au lissage des points expérimentaux, nous déterminons l'énergie du maximum de la section efficace, ne considérant que les sections efficaces composées ayant leurs maxima dans notre gamme des énergies (afin que le lissage garde toute sa signification).

La détermination du défaut énergétique Q_c s'effectue en se servant de l'équation du critère de Massey et de la relation entre la largeur de l'interaction et de la section efficace maximale. L'expression de Q_c en eV est :

$$Q_c(\text{eV}) = 3.6 \left(E_{\text{max}}(\text{keV}) / \left(M(\text{u.m.a.}) \sigma_{\text{max}}(\text{A}^2) \right)^{\frac{1}{2}} \right) \quad (6.14)$$

Cette méthode ne donne pas le signe du défaut énergétique. Néanmoins ce signe peut être déterminé par comparaison avec les défauts énergétiques des différents états finals possibles. (tableau 6.3)

Quant au potentiel d'ionisation moyen I_c , sa détermination s'obtient par la résolution de l'équation ci-dessous :

$$I_c(\text{eV}) = \left(\frac{1}{2}\pi \right)^3 I_H(\text{eV}) / \left(I_1 * u_1^4 * \sigma_{\text{max}}(\text{u.a.}) \right) \quad (6.15)$$

TABLEAU 6.2 : Valeurs de I_C et Q_C des sections efficaces totales composées

Réaction	E_{\max}^{exp} (keV)	$\sigma_{\max}^{\text{exp}}$ (Å^2)	I_C (eV)	Q_C (eV)	E_{\max}^{th} (keV)	$\sigma_{\max}^{\text{th}}$ (Å^2) (section 6.2)
$N^{++} \rightarrow Ar$	135	12.73	3.9	3.15	130	12.40
Kr	197	13.80	2.7	3.65	200	13.81
Xe	160	17.51	2.4	-2.90	160	17.73
$Ne^{++} \rightarrow Ar$	182	7.83	6.4	3.90	180	7.79
Kr	200	10.76	4.5	3.45	195	10.66
Xe	138	18.20	3.0	2.20	140	18.87

TABLEAU 6.3 : Valeurs de I_C et Q_C pour des états discrets définis à la section 6.3

Réactions / états	I_C (eV)	Q_C (eV)	Réactions / états	I_C (eV)	Q_C (eV)
$N^{++} \rightarrow Ar$ (G.S.)	5.25	-1.19	$Ne^{++} \rightarrow Ar$ ($Ne^+ 4P$)	4.63	6.04
($N^+ 3P^0$)	3.71	7.70	($Ar^+ 2S$)	9.75	-0.54
($Ar^+ 2S$)	9.74	5.30			
$N^{++} \rightarrow Kr$ (G.S.)	3.50	-2.39	$Ne^{++} \rightarrow Kr$ ($Ne^+ 4P$)	3.48	3.67
($N^+ 3P^0$)	2.78	4.94	($Kr^+ 2S$)	6.88	-1.75
($Kr^+ 2S$)	6.88	2.98			
$N^{++} \rightarrow Xe$ (G.S.)	2.42	-2.93	$Ne^{++} \rightarrow Xe$ ($Ne^+ 4P$)	2.42	2.27
($N^+ 3P^0$)	2.23	3.33	($Xe^+ 2S$)	4.68	-3.18
($Xe^+ 2S$)	4.68	0.87			

obtenue à l'aide des équations (5.40) et (5.41). Dans cette équation, u_1 et $I_1 = I(u_1)$ sont définis pour l'énergie du maximum de la section efficace (tableau 6.1). Pour notre gamme des énergies u_1 et I_1 sont bien estimés par les droites :

$$u_1 = .55 + .45 v_{\max}(\text{u.a.})$$

$$I_1 = .82 - .26 v_{\max}(\text{u.a.})$$

obtenues par le lissage des points du tableau 6.1.

Les résultats des calculs effectués pour les sections efficaces composées $N^{++} \rightarrow \text{Ar, Kr, Xe}$ et $\text{Ne}^{++} \rightarrow \text{Ar, Kr, Xe}$ avec les équations (6.14) et (6.15) sont disposés dans le tableau 6.2. Les valeurs de I_c du tableau 6.2 sont celles qui approchent au mieux l'expérience. Du fait des quantités estimées pour le calcul de I_c , ce dernier est supérieur de 5 à 10 % aux valeurs du tableau 6.2. Nous ne pouvons espérer meilleure concordance à cause des diverses manipulations mathématiques. De l'examen des tableaux 6.2 et 6.3, il découle que seul Q_c de la réaction $N^{++} \rightarrow \text{Xe}$ est négatif là où il y a dominance de l'état fondamental.

La section efficace théorique pour l'état hypothétique (I_c, Q_c) ne représente que partiellement la section efficace composée expérimentale (voir les figures 6.15 à 6.20 où nous notons une déviation aux basses énergies). Nous pouvons nous en attendre car la section efficace composée est la somme moyenne des sections efficaces pour différents couples d'états mais dont la proportion varie avec l'énergie (éq. 6.10).

Des valeurs très précises des paramètres I_c et Q_c n'ont pas d'objet, seul l'ordre de grandeur est fondamental (un chiffre significatif après le point décimal). C'est ce que cette méthode nous permet d'atteindre. Nous constatons que les valeurs trouvées s'intègrent bien dans la gamme définie

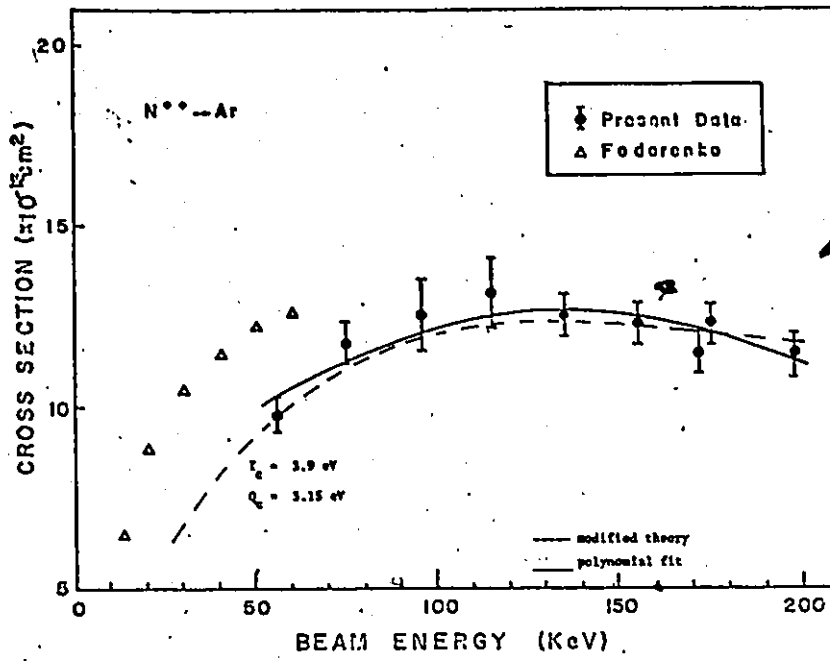
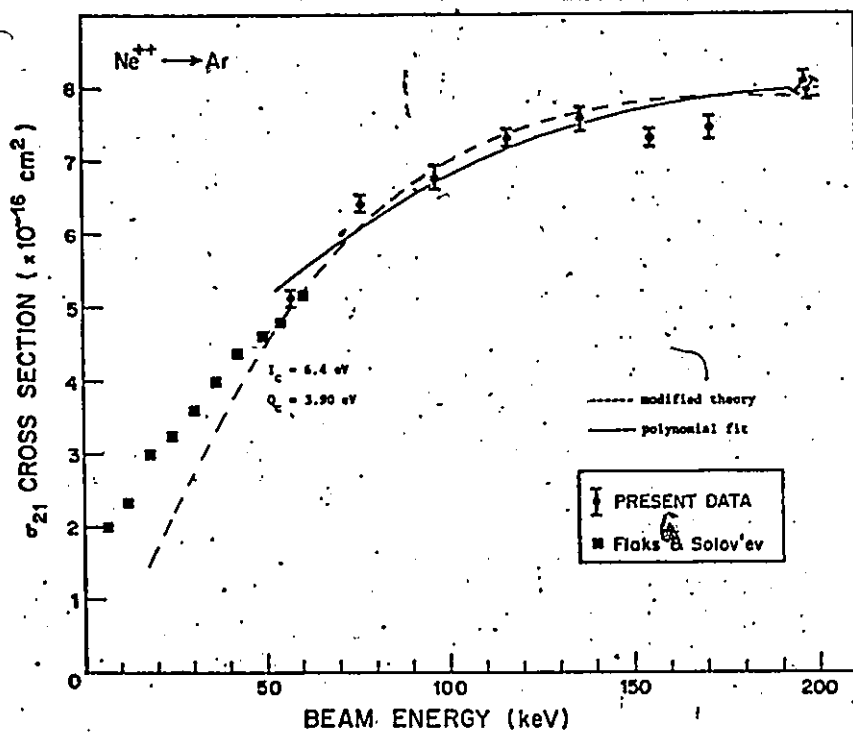


Figure 6.15 : Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $N^{++} \rightarrow Ar$

Figure 6.16 : Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $Ne^{++} \rightarrow Ar$



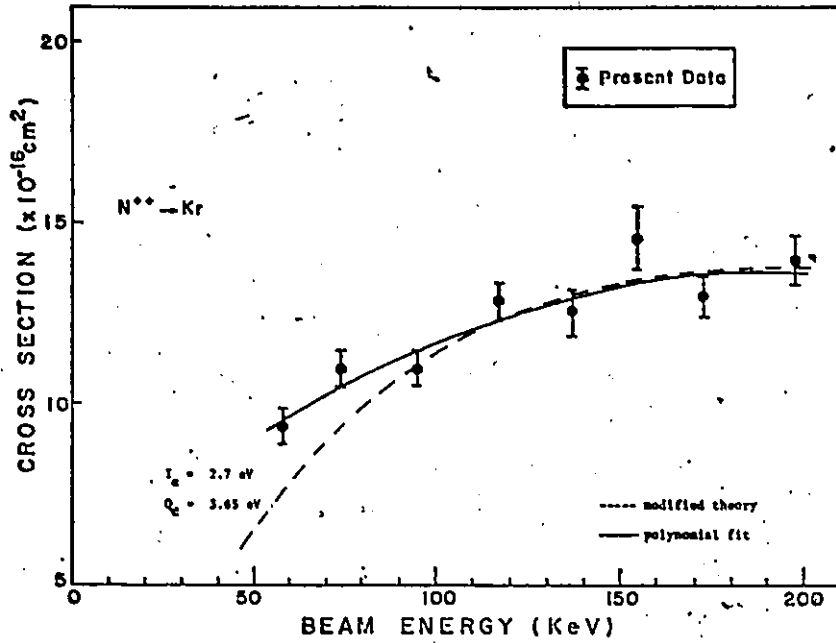
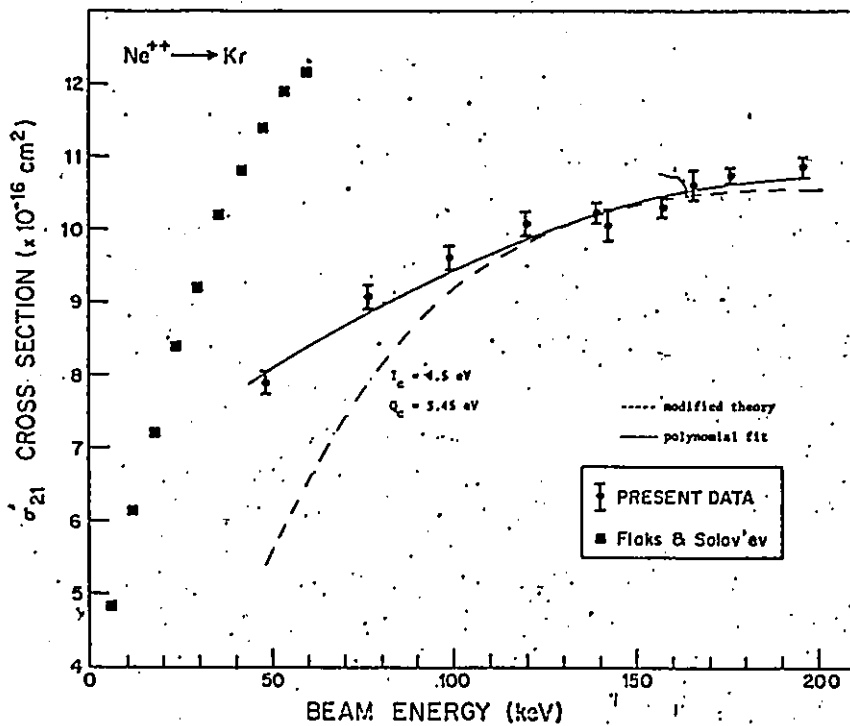


Figure 6.17 : Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $N^{++} \rightarrow Kr$

Figure 6.18 : Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $Ne^{++} \rightarrow Kr$



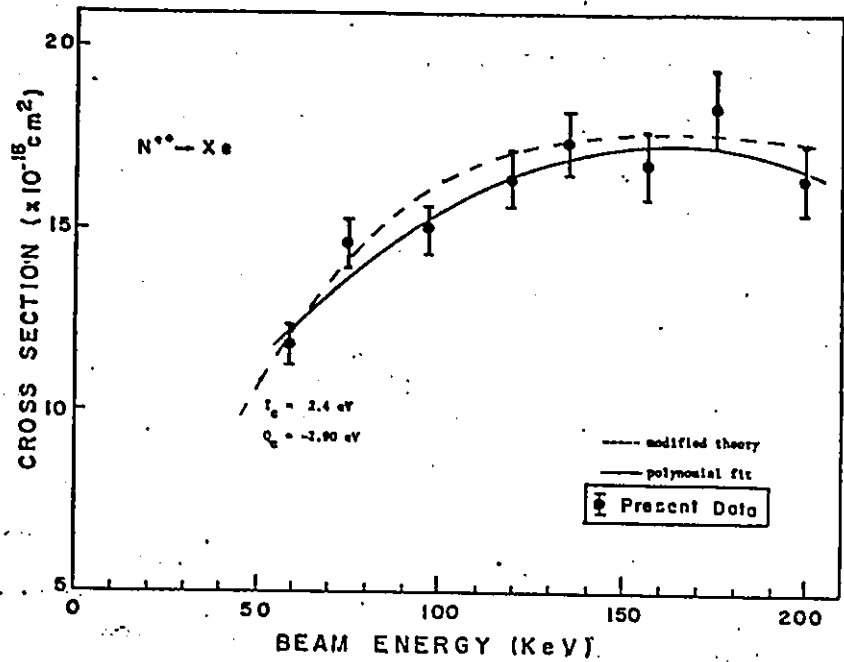
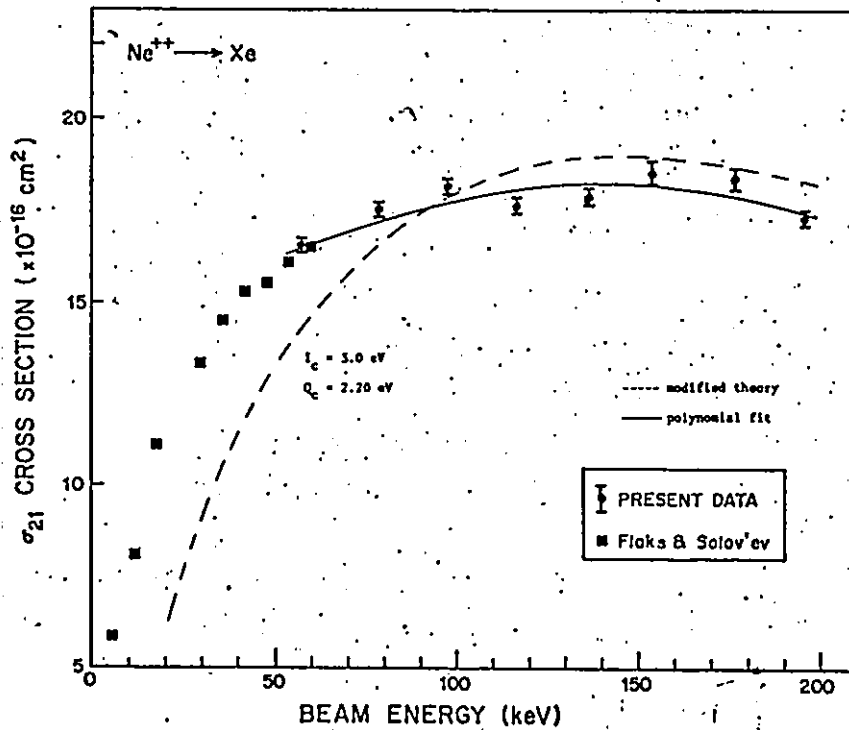


Figure 6.19 : Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $N^{++} \rightarrow Xe$

Figure 6.20 : Comparaison entre théorie et expérience pour σ_{21} composée $Ne^{++} \rightarrow Xe$



au tableau 6.3.

Cette section est particulièrement satisfaisante pour l'expérimentateur qui peut très simplement calculer les valeurs des paramètres et après comparaison avec les valeurs pour les états discrets définis à la section 6.3, il peut déduire la nature des sections efficaces qu'il a mesurées (simples ou composées).

CONCLUSION
O-O-O-O-O-

Les sections efficaces que nous avons présentées dans cette thèse s'intègrent bien entre celles mesurées aux basses et aux hautes énergies.

Les bonnes performances de l'appareillage nous ont permis de faire des mesures précises qui ont pu être utilisées pour faire des comparaisons constructives avec la théorie.

Le formalisme général rigoureux pour l'étude des collisions est trop compliqué pour être appliqué au calcul de la section efficace totale en fonction de l'énergie de l'ion incident. Aussi lui avons-nous préféré le modèle à deux états quantiques, modifié simplement pour tenir compte de l'expression approchée de la fonction d'onde totale car il donne des résultats très satisfaisants. Les autres approximations faites au cours du développement de ce modèle affectent très peu les résultats et nous avons même montré que le facteur de translation n'a que peu d'effet dans notre gamme des énergies. De plus l'expression analytique de la probabilité de transition augmente l'intérêt du modèle car elle aide à analyser le mécanisme physique : la capture se produit principalement quand les particules s'approchent suffisamment de telle sorte que l'énergie d'interaction est double de l'écart entre les deux courbes d'énergie potentielle et quand le temps de collision est de l'ordre du temps de transition. En d'autres mots, l'électron doit avoir l'énergie et le temps nécessaires pour évoluer jusqu'à l'état final et y rester.

Actuellement l'attention est tournée vers des mesures analogues aux nôtres qui complètent la compréhension des mécanismes régissant les sections efficaces de capture pour des ions à charges électriques multiples. Les derniers progrès dans cette voie - tant théoriques qu'expérimentaux - sont ceux,

par exemple, des auteurs ci-dessous :

- Presnyakov et Ulantsov (1975) ont expliqué la raison pour laquelle les sections efficaces des ions à charges multiples sont pratiquement indépendantes de l'énergie de ces ions ($v \ll 1$ u.a.) : ces sections efficaces sont composées de la superposition de sections efficaces simples correspondant à des états excités.

- Olson et Salop (1976), à l'aide d'un modèle approché ont montré que la section efficace de capture pour des ions à charges élevées ($z > 10$) est presque une fonction linéaire du degré d'ionisation de l'ion incident.

- Winter et al (1977) donnèrent l'évidence expérimentale de la capture d'un électron dans un état excité du projectile Ne^{4+} pour les cibles d'hélium et d'argon à vitesse d'approche moyenne.

- Phaneuf et al (1977) ont trouvé expérimentalement que la section efficace de capture de l'ion Ne^{z+} avec cible d'hydrogène atomique est proportionnelle au carré du degré d'ionisation effectif pour une plage de vitesse allant de 1 à 3 u.a. ($z > 2$).

- Müller et Salzborn (1977), par l'analyse d'un grand nombre de sections efficaces de capture, mirent en évidence l'indépendance de la section efficace de la nature du projectile ($z > 4$) et sa variation avec le degré d'ionisation.

Des progrès théoriques pour la prédiction de résultats numériques sont aussi réalisés, en particulier par la création de fonctions d'onde moléculaires. Chibisov (1976) a construit des fonctions d'onde asymptotes à l'ordre zéro (termes en R^{-1}) par la division de l'espace en zones aux limites desquelles les fonctions d'onde sont égales. Ponomarev et Somov (1976) créèrent des fonctions d'onde pour le continu. Par ailleurs, Eichler et Wille (1975) ont proposé des fonctions d'onde moléculaires adiabatiques pour un potentiel atténué

par le nuage électronique - potentiel déduit à l'aide du modèle de Thomas-Fermi - tandis que Aubert et al (1975-76) ont donné des fonctions d'onde moléculaires diabatiques, aussi, pour un potentiel atténué - potentiel défini par des considérations électrostatiques et qui assure le découplage des équations -. En ce qui concerne la méthode du paramètre d'impact, Gaussorgues et al (1975) ont présenté un programme afin de calculer les probabilités de transition pour une trajectoire rectiligne; ils montrèrent les difficultés de programmation inhérentes à la satisfaction des conditions aux limites, ceci afin d'obtenir des résultats fiables.

Jusqu'à présent, les techniques numériques de pointe n'ont pas amélioré sensiblement l'accord entre la théorie et l'expérience et n'apportent pas de précision sur les caractères des collisions. Cependant, une évolution vers une plus grande souplesse d'utilisation est manifeste, ce qui, dans le futur, fera prévaloir ces techniques.

CONCLUSION

The measurements reported in this thesis fill the gap between measurements made at lower and at higher energies. Due to the good precision of the apparatus, absolute cross sections accurate to 10 % were produced, so that a reliable comparison with theory can be made.

The general formalism for studying collisions in our energy range, which takes into account all the significant interactions and two-center molecular states is too complicated to give numerical predictions for general applications. The two state model, although it does not give accurate absolute values of the cross section, is simple to handle and by its analytical expression of the charge transfer probability is of great use for understanding the physics mechanisms which dominate the charge exchange process.

These mechanisms are such that the exchange occurs mostly when the particles come close enough together so that the interaction energy is twice that between the appropriate states and when the collision time is of the same order as the transition time. In other words, the electron must be given the right energy and the right time to go once to the final state and not come back. As the approximations made in this model do not change much the shape of the cross section as a function of the velocity of the incident ion - except the omission of the translational factor - we used corrections to modify the model for the main approximation which is the use of too rapidly decreasing wave functions. We hope that it will give good predictions for all cross sections to which the two state model can be used.

There is at present considerable interest in related measurements which add to our general understanding of charge changing cross sections. Recent advances of this type [theoretical and experimental] which relate to the present measurements are :

- Presnyakov & Ulantsov (1975) explained the reason why charge changing cross sections for multiple charge ions are nearly independent of the incident ion energy [$v \ll 1$ a.u.]: it is the superposition of simple cross sections for given excited states.

- Olson & Salop (1976), with the aid of an approximate model, showed that for highly charged ions the cross section varies almost linearly with the ionicity of the incident ion ($z > 10$).

- Winter et al (1977) gave experimental evidence of electron capture into excited projectile states at moderate impact velocity for Ne^{4+} with helium and argon targets.

- Phaneuf et al (1977) found that the experimental capture cross section for multiple charge nitrogen ions by atomic hydrogen roughly scales as the square of an effective ionicity in the velocity range 1 to 3 a.u. (ion electric charge greater than 2).

- Muller & Salzborn (1977), by the analysis of a great number of charge changing cross sections, showed that the cross section is nearly independent of the nature of the projectile (ionicity greater than 4) but depends on the ionicity.

Also progress is being made in mathematical formulation. The methods and techniques to obtain two center molecular wave functions are progressing. Chibisov (1976) constructed zeroth order approximation (terms in R^{-1}) wave functions in the case of the two state model at large distances between centers by breaking the whole space into zones and matching the wave functions at the boundaries. Ponomarev & Somov (1976) created wave functions for the continuum. Besides that, Eichler & Wille (1975) proposed adiabatic molecular wave functions for a screened potential - using a Thomas-Fermi model for the potential - while Aubert et al (1975-76) gave diabatic molecular shielded orbitals - using

a potential which preserves separability of the equations and defined by classical electrostatic considerations. - Concerning the impact parameter method, Gaussorgues et al [1975] presented a program to calculate transition probabilities, in the straight line approximation, which, in addition, states the different computational difficulties inherent in the conditions required at the boundaries to obtain good predictions.

Up to the present these more advanced techniques have not added significantly to the accuracy with which the magnitude and variation of the cross sections can be calculated and the greatly increased complexity of the numerical work does not seem to add significantly to the physical understanding of the collision process. However the situation may change in the future.



REFERENCES

o-o-o-o-o-

Abramowitz, M. and Stegun, I.A., Handbook of Mathematical Functions

Dover Publications, Inc. N.Y.

Abramson, A.A. 1963, Phys. Rev. 130, 693

Aubert, M. and Bessis, N. and G. 1975, Phys. Rev. A12, 2298-2311.

Aubert, M. and Le Sech, C. 1976, Phys. Rev. A13, 632

Bates, D.R., McCarroll, F.R.S. and R. 1958, Proc. Roy. Soc. London A245, 175-83

Bates, D.R. and Lynn F.R.S. and N. 1959, Proc. Roy. Soc. London A253, 141-53

Bethe, H.A. and Jackiv, R. 1968, Intermediate Quantum Mechanics, W.A. Benjamin

Bohr, N. 1948, K. Danske Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 18, 8

Bransden, B.H. 1972, Rep. Prog. Phys. 35, 949-1005

Briggs, J.S. 1976, Rep. Prog. Phys. 39, 217-89

McCalla, T.R. 1967, Introduction to Numerical Methods and Fortran Programming,

J. Wiley and Sons N.Y.

Chibisov, M.I. 1976, J.E.T.P. 42, 232-36

Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. and Laloë, F. 1973, Mécanique Quantique, Tomes 1 et

2, Hermann, Paris

Dalgarno, A. 1958, Phil. Trans. Roy. Soc. A250, 426

Delos, J.B., Thorson, W.R. and Knudson, S.K. 1972, Phys. Rev. A6, 709-20

Delos, J.B. and Thorson, W.R. 1972, Phys. Rev. A6, 720-27

Dintermán, T.R. and Delos, J.B. 1977, Phys. Rev. A15, 463-74

- Evans, R.D. 1955, *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill
- Eichler, J. and Wille, U. 1975, *Phys. Rev.* A11; 1973-82
- Fano, U. and Lichten, W. 1965, *Phys. Rev. Letters* 14, 627-29
- Fedorenko, H.B. 1954, *J. Tech. Phys. (USSR)* 24, 769-83
- Fedorenko, N.V., Flaks, I.P. and Filippenko, L.G. 1960, *J.E.T.P.* 11, 519-23
- Firsov, O.B. 1951, *Zh. Eksper. Teor. Fiz.* 21, 1001
- 1957, *J.E.T.P.* 5, 1192
- 1958, *J.E.T.P.* 6, 534
- 1958, *J.E.T.P.* 7, 308
- 1959, *J.E.T.P.* 36, 1076-80
- Flaks, I.P. and Solov'ev, E.S. 1958, *Soviet Phys. Tech. Phys.* 3, 564 and 577
- Freund, J.E. 1967, *Modern Elementary Statistics*, Prentice Hall Englewood Cliffs
- Garcia, J.D., Fortner, R.J. and Kavanagh, T.M. 1973, *Rev. Modern Phys.* 45,
111-177
- Gaussorgues, C., Piacentini, R.D. and Salin, A. 1975, *Comp. Phys. Comm.* 10,
223-233
- Geltman, S. 1969, *Topics in Atomic Collision Theory*, Academic Press N.Y.
- Gottfried, K. 1966, *Quantum Mechanics*, Benjamin, Reading, Mass.
- Green, T.A. 1965, *Proc. Phys. Soc.* 86, 1017-29
- Gurnee, E.F. and Magee, J.L. 1957, *J. Chem. Phys.* 26, 1237-48
- Hasted, J.B. 1951, *Proc. Roy. Soc. London* A205, 421
- 1952, *Proc. Roy. Soc. London* A212, 235
- Hasted, J.B. and Lee, A.R. 1962, *Proc. Phys. Soc.* 79, 702-9

Herzberg, G. 1945, Atomic Spectra and Atomic Structure, Dover Publications N.Y.

— 1950, Molecular Spectra and Molecular Structure, I. Spectra of Diatomic Molecules, Van Nostrand, Reinhold Company, N.Y.

Hird, B, and Suk, H.C. 1976, Phys. Rev. A14, 928-36

Hird, B., Suk, H.C. and Guilbaud, A. 1976, Rev. Sci. Instrum. 47, 138-42

Hughes, A.L. and Rojansky, V. 1929, Phys. Rev. 34, 284-90

Iovistu, I.P. and Ionescu-Pallas, N. 1959, Soviet Phys. Tech. Phys. 4, 781-91

Jauch, J.M. 1968, Foundations of Quantum Mechanics, Addison-Wesley

Klinger, H., Müller, A. and Salzborn, E. 1975, J. Phys. Atom. Molec. Phys. B8, 230-38

Landau, L.P. 1932, J. Phys. (USSR) 2, 46

Lee, A.R. and Hasted, J.B. 1965, Proc. Phys. Soc. 85, 673-77

Lichten, W. 1963, Phys. Rev. 131, 229-38

— 1965, Phys. Rev. 139, A27-34

— 1967, Phys. Rev. 164, 131-42

Massey, H.S.W. 1949, Rep. Prog. Phys. 12, 248

Melius, C.F. and Goddard III, W.A. 1974, Phys. Rev. A10, 1541-58

Messiah, A. 1964, Mécanique Quantique, Dunod Paris

Moore, C.E. 1971, " Atomic Energy Levels ", NSRDS-NBS 35, Washington, U.S.A.

Morrison, M.A., Estle, T.L. and Lane, N.F. 1976, Quantum States of Atoms, Molecules and Solids, Prentice-Hall, Inc. Englewood Cliffs, N.J.

- Müller, A. and Salzborn, E. 1977 Phys. Letters 62A, 391
- Olson, R.E., Smith, F.T. and Bauer, E. 1971, Applied Optics 10, 1848
- Olson, R.E. 1972, Phys. Rev. A6, 1822
- Olson, R.E. and Salop, A. 1976, Phys. Rev. A14, 579-85
- Pauling, L. and Wilson, E.B. 1935, Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill Books Company, Inc. N.Y.
- Phaneuf, R.A., Meyer, F.W., McKnight, R.H., Olson, R.E. and Salop, A. 1977, J. Phys. Atom. Molec. Phys. B10, L425
- Ponomarev, L.I. and Somov, L.N. 1976, J. Comp. Phys. 20, 183-95
- Presnyakov, L.P. and Ulantsov, A.D. 1975, J. Quant. Electron. 4, 1320-24
- Rapp, D. and Francis, W.E. 1962, J. Chem. Phys. 37, 2631-45
- Rapp, D. 1971, Quantum Mechanics, Holt, Rinehart and Winston
- Reinhardt, J. and Gréiner, W. 1977, Rep. Prog. Phys. 40, 219-95
- Rosen, B. 1964, Spectroscopie Electronique Moléculaire, Handbuch Der Physik
Herausgegeben von S. Flugge Springer-Verlag
- Rosen, N. and Zener, C. 1932, Phys. Rev. 40, 502-7
- Rosenthal, H. 1971, Phys. Rev. A4, 1030-42
- Salzborn, E. 1976, IEEE Trans. Nuclear Science NS-23, 947-58
- Schiff, L.I. 1955, Quantum Mechanics, McGraw-Hill Books Company, Inc. N.Y.
- Schmid, G.B. and Garcia, J.D. 1977, Phys. Rev. A15, 85-101
- Schmid, G.B. 1977, Phys. Rev. A15, 1459-68
- Shakeshaft, R. 1972, J. Phys. Atom. Molec. Phys. B5, 559

Smith, F.T. 1969, Phys. Rev. 179, 111-23

Stuckelberg, E.C.G. 1932, Helv. Phys. Acta. 5, 370

Suk, H.C. 1977, Ph.D. Thesis Ottawa, University of Ottawa 919 c 1977

Suk, H.C., Guilbaud, A. and Hird, B. 1977, Can. J. Phys. 55, 1594-600

Suk, H.C., Guilbaud, A. and Hird, B. 1977, submitted and accepted by J. Phys.

Atom. Molec. Phys. B

Taulbjerg, K. and Briggs, J.S. 1975, J. Phys. Atom Molec. Phys. B8, 1895-1908

Thorson, W.R. and Levy II, H. 1969, Phys. Rev. 181, 230-44

Wiese, W.L., Smith, M.W. and Glennon, B.M. 1966, Atomic Transition Probabilities

NSRDS-NBS 4, Washington, U.S.A.

Winter, H., Bloemen, E. and de Herr, F.J. 1977, J. Phys. Atom. Molec. Phys.

B10, L453

1977, J. Phys. Atom. Molec. Phys.

B10, L599

Winter, H. 1977, Private Communication

Zener, C. 1932, Proc. Roy. Soc. London A137, 696

```

C * - * - * - * - * - * - * - * - * - * - * - * - * - * - * - *
C CE PROGRAMME PERMET DE CALCULER LA SECTION EFFICACE TOTALE, SIGMA 21,
C ET SON ERREUR.
C VOIR :
C * ATOMIC NUCLEUS EVANS P. 762 DEVIATION STANDARD
C * MODERN ELEMENTARY STATISTICS FREUND P. 331 LISSAGE PAR
C LA METHODE DES MOINDRES CAPRES.
C * SECOND YEAR LAB ( DR. HIRD ) ERREUR STATISTIQUE SUR UNE SOMME.
C LEAST SQUARES FIT TO (COUNT RATE RATIO/PRESSURE) LINEAR FUNCTIONAL RELATION.
C ***** SIGMA 21 CORRECTED - THIN TARGET CONDITION - *****
C TEMPERATURE AT WHICH THE EXPERIMENT HAS BEEN DONE : T ( K )
C ENERGY AT WHICH THE EXPERIMENT HAS BEEN DONE : E ( KEV )
C TARGET LENGTH = SL ( CM.)
C CROSS SECTION =-SIG (1.E-15*(CM**2))

```

```

0001 DIMENSION A(12), IA2(4), IP2(4), IAI(4), IPI(4)
0002 READ(5,102) E,T,SL,A
0003 FORMAT(3F10.2,12A4)
0004 I WRITE(6,103) E,T,SL,A
0005 I03 FORMAT(14H1 ENERGY = ,F5.1,24H KEV TEMPERATURE = ,F6.2,
C 117H K TARGET = ,F7.4,4H CM./1H0,12A4)
C READ THE TOTAL CROSS SECTIONS USED IN THE CORRECTION.
0006 READ(5,109) SIG10, SIG12, SIG13, SIG20, SIG23
0007 FORMAT( 5F10.5 )
0008 I WRITE(6,110) SIG10, SIG12, SIG13, SIG20, SIG23
0009 I09 FORMAT( 9H0 SIG10=,F6.3, 8H SIG12=,F6.3, 8H SIG13=,F6.3,
C 118H SIG20=,F6.3, 8H SIG23=,F6.3)
C STE=4.8304E-3*SL*(SIG10+SIG12+SIG13-SIG20-SIG23)/T
0010 READ(5,105)(IA2(I),IP2(I),IAI(I),IPI(I),I=1,4)
0011 FORMAT(8(I6,I4))
C INITIAL CONDITIONS OF INTERMEDIATE VARIABLES
0012 I WRITE(6,104)
C XBIN = 0.
0013 YBM = 0.
0014 XYP = 0.
0015 SXP2 = 0.
0016 SXYP = 0.
0017 N = 0.
0018 SR = 0.
0019 SR2 = 0.
0020 SPR = 0.
0021 SPR = 0.
0022 SPR = 0.

```

```

C * RUN *
0023 WRITE(6,104)
0024 I04 FORMAT(,0.,72H IONS +2 PRESSURE (COUNTS) IONS +1 (COUN
C TS) (E-6 TORR),/)
C COUNTS FOR DOUBLY IONISED IONS : A2
C " " "SINGLY " " " " " A1
C PRESSURE IN E-6 TORR.
0025 9 DO 10 J=1,4
0026 IF(IA2(J).EQ.0) GO TO 11
0027 A2=IA2(J)
0028 P2=IP2(J)
0029 A1=IA1(J)
0030 P1=IPI(J)
0031 N = N + 1
0032 R = A1 / ( A2 + A1 / 2. )
0033 WRITE(6,106) A2, P2, A1, P1, R

```

```

0034 FORMAT( 4( 5X, F10.2),5X, F10.8 /)
0035 SR = R + SR
0036 SR2 = SR2 + R * R
0037 SPI2 = SPI2 + P1 + P2
0038 SPR=SPR+P1*P1+P2*P2
0039 READ(5,105)(IA2(I),IP2(I),IA1(I),IPI(I),I=1,4)
0040 GO TO 9
C 11 SIGMR = SORT(( N * SR2 - SR * SR ) / N, / (N-1))
P = 2. * N
SIGMP = SORT(( P * SPR - SPI2 * SPI2 ) / P / (P - 1.))
C MEAN RATIO
Y=SR/N
C STANDARD DEVIATION OF THE MEAN RATIO
SY = SIGMR / SORT(N-1.)
C MEAN PRESSURE
PM = SPI2 / P
C CORRECTED MEAN RATIO - TARGET THICKNESS CORRECTION -
YM=Y*(1.+CSTE*PM)
C STANDARD DEVIATION OF THE MEAN PRESSURE
SP = SIGMP / SORT(P-1.)
WRITE(6,107)SIGMR, SIGMP, Y, SY, YM, PM, SP
107 FORMAT(22H STD.DEV.OF RATIO = ,F10.3,21H STD.DEV.OF PRESS = ,
1F10.3//15H MEAN RATIO = ,F10.6,8H +/- ,F10.6//25H CORRECTED M
2EAN RATIO = ,F10.6//18H MEAN PRESSURE = ,F10.3,8H +/- ,F10.3//
C * END OF EXPERIMENT *
C VALUE OF THE SLOPE, METHOD OF LINEAR LEAST SQUARE FIT
AND ITS ERROR
SISY2=1./SY/SY
REVIN = REVIN + SISY2
XBM = XBM + PM * SISY2
YBM = YBM + YM * SISY2
SXP2 = SXP2 + PM * PM * SISY2
SXYP = SXYP + PM * YM * SISY2
READ(5,105)(IA2(I),IP2(I),IA1(I),IPI(I),I=1,4)
IF(IA2(1).NE.0) GO TO 30
SN = SXYP - XBM * YBM / REVIN
SD = SXP2 - XBM * XBM / REVIN
SLOPE = (1.E+6) * SN / SD
ERROR = (1.E+6) / SORT(SD)
INTERCEPT +/- ERROR IN INTERCEPT = CEPT +/- ERCEPT.
CEPT=(YBM-SN*XBM/SD)/REVIN
ERCEPT=SORT(SXP2/REVIN/SD)
C TOTAL CROSS SECTION SIGMA 21
SIGMA =1.0351E-19*TSLOPE/SL
WRITE(6,108) SLOPE, ERROR, CEPT, ERCEPT, SIGMA, E
108 FORMAT(20H0 EQU. FOR BEST LINE/11H RATIO = (,F10.5,3H+/-,F8.5,14H
E)*PRESSURE + (,F10.5,3H+/-,F10.5,2H).//
124H TOTAL CROSS SECTION = ,IPE12.4,11H CM*2 AT,OPF5.1,4H KEV)
READ(5,102) E,T,SL,A
C GOING TO ANOTHER EXPERIMENT
IF(E.NE.0.0) GO TO 1
RETURN
END

```

```

0001 C LISSAGE AVEC POLYNOME DE LA FORME: A0 + A1*X + A2**X**2 + ...
0002 C *****
0003 C MODIFIED PROGRAM TO TAKE INTO ACCOUNT ERRORS ON EXPERIMENTAL POINTS
0004 C INTRODUCTION TO NUMERICAL METHODS AND FORTRAN PROGRAMMING
0005 C THOMAS RICHARD MC CALLA
0006 C *****
0007 C *****
0008 C MAXIMUM NUMBER OF DATA POINTS = 200
0009 C DEGREE OF HIGHEST POLYNOMIAL = 20
0010 C DOUBLE PRECISION X(200),Y(200),W(200),XC(40),YX(20),A(20),B(20),
0011 C * C(20,20), D(20,20)
0012 C DIMENSION TITRE(10)
0013 C N = NUMBER OF EXPERIMENTAL POINTS - 1
0014 C M = DEGREE OF THE POLYNOMIAL
0015 C READ(5,100) N, M, TITRE
0016 C IF(N.EQ.0) RETURN
0017 C MPI = N + 1
0018 C MPI = M + 1
0019 C M2 = M * 2
0020 C W = FACTEUR DE POIDS
0021 C READ(5,101) (X(I), Y(I), W(I), I=1,NPI)
0022 C WRITE(6,120) TITRE
0023 C WRITE(6,101)(X(I),Y(I),W(I), I = 1,NPI)
0024 C FORM SUMS OF POWERS OF X(I)
0025 C DO 20 K = 1, M2
0026 C XC(K) = 0.00000
0027 C DO 15 I = 1, NPI
0028 C XC(K) = XC(K) + X(I)**K * W(I)
0029 C CONTINUE
0030 C FORM SUM OF Y(I) AND WI
0031 C YC = 0.0000
0032 C WI = 0.0000
0033 C DO 22 I = 1, NPI
0034 C WI = WI + W(I)
0035 C YC = YC + Y(I) * W(I)
0036 C FORM SUMS OF PRODUCTS Y(I) * X(I)**K
0037 C DO 30 K = 1, M
0038 C YX(K) = 0.0000
0039 C DO 25 I = 1, NPI
0040 C YX(K) = YX(K) + Y(I) * X(I)**K * W(I)
0041 C CONTINUE
0042 C GENERATE NORMAL MATRIX C USING SUMS OF POWERS OF X(I)
0043 C DO 40 I = 1, MPI
0044 C DO 35 J = 1, MPI
0045 C IPJM2 = I + J - 2
0046 C IF(IPJM2) 33, 31, 33
0047 C (I,1) = WI
0048 C GO TO 35
0049 C (I,J) = XC(IPJM2)
0050 C CONTINUE
0051 C CONTINUE
0052 C GENERATE RIGHT-SIDE MATRIX B
0053 C B(1) = YC
0054 C DO 45 I = 2, MPI
0055 C B(I) = YX(I-1)
0056 C INVERT NORMAL MATRIX C
0057 C CALL INVER(C, D, MPI)
0058 C MATRIX D IS INVERSE OF NORMAL MATRIX
0059 C FORM MATRIX PRODUCT OF INVERSE AND RIGHT-SIDE MATRIX

```

0039
0040
0041
0042
0043
0044
0045
0046
0047
0048
0049
0050
0051
0052
0053
0054
0055
0056
0057
0058
0059
0060
0061
0062

```

DO 55 I = 1, MPI
A(I) = 0.000
DO 54 J = 1, MPI
A(I) = A(I) + D(I,J) * B(J)
CONTINUE
WRITE(6,111)
WRITE(6,110) (A(K), K = 1, MPI)
DO 2 I = 1, NPI
Y(I) = A(I)
IF( X(I).EQ.0.00000000) GO TO 2
DO 3 J=2, MPI
Y(I) = Y(I) + A(J) * X(I)**(J-1)
CONTINUE
WRITE(6,121)
WRITE(6,110)(Y(I),X(I),I=1,NPI)
GO TO 1
FORMAT(13, I2, 10A4)
FORMAT(3F10.4)
FORMAT( 8(2X,E12.6))
FORMAT(18H-COEFFICIENTS A(K))
FORMAT(5X,10A4//30H
RETURN
VALEUR DE Y(XI) POUR CHAQUE XI)

```

54
55

3
2

100
101
110
111
120
121

YI
WI

```

0001 SURROUTINE INVER(A, B, N)
0002 MATRIX INVERSION BY ELIMINATION WITH PARTIAL PIVOTING
0003 ORIGINAL MATRIX = A INVERSE MATRIX = B
0004 DOUBLE PRECISION A(20,20), B(20,20)
0005 DOUBLE PRECISION AMAX, ATMP, BTMP, DEL, DIV, AMULT
0006 EPS = 0.0000001
0007 CONSTRUCT IDENTITY MATRIX B(I,J) = I
0008 DO 6 I = 1, N
0009 DO 5 J = 1, N
0010 IF(I-J) 4,3,4
0011 B(I,J) = 1.0
0012 GO TO 5
0013 B(I,J) = 0.0
0014 CONTINUE
0015 CONTINUE
0016 LOCATE MAXIMUM MAGNITUDE A(I,K) ON OR BELOW MAIN DIAGONAL
0017 DEL = 1.0
0018 DO 45 K = 1, N
0019 IF(K-N) 12,30,30
0020 IMAX = K
0021 AMAX = DABS(A(K,K))
0022 KPI = K + 1
0023 DO 20 I = KPI, N
0024 IF(AMAX-DABS(A(I,K))) 15,20,20
0025 IMAX = I
0026 AMAX = DABS(A(I,K))
0027 CONTINUE
0028 INTERCHANGE ROWS IMAX AND K IF IMAX NOT EQUAL TO K
0029 IF(IMAX-K) 25,30,25
0030 DO 29 J = 1, N
0031 ATMP = A(IMAX,J)
0032 A(IMAX,J) = A(K,J)
0033 A(K,J) = ATMP
0034 BTMP = B(IMAX,J)
0035 B(IMAX,J) = B(K,J)
0036 B(K,J) = BTMP
0037 DEL = -DEL
0038 CONTINUE
0039 TEST FOR SINGULAR MATRIX
0040 IF(DABS(A(K,K))-EPS) 93,93,35
0041 DEL = A(K,K) * DEL
0042 DIVIDE PIVOT ROW BY ITS MAIN DIAGONAL ELEMENT
0043 DIV = A(K,K)
0044 DO 38 J = 1, N
0045 A(K,J) = A(K,J) / DIV
0046 B(K,J) = B(K,J) / DIV
0047 REPLACE EACH ROW BY LINEAR COMBINATION WITH PIVOT ROW
0048 DO 43 I = 1, N
0049 AMULT = A(I,K)
0050 IF(I-K) 39,43,39
0051 DO 42 J = 1, N
0052 A(I,J) = A(I,J) - AMULT * A(K,J)
0053 B(I,J) = B(I,J) - AMULT * B(K,J)
0054 CONTINUE
0055 WRITE(6,120) ((B(I,J), I=1,N), J=1,N)
0056 WRITE(6,110)
0057 WRITE(6,121)

```

```

0051 WRITE(6,110) DEL
0052 RETURN
0053 WRITE(6,113) K
0054 GO TO 99
0055 FORMAT(2X,E15.8)
0056 FORMAT(25H-SINGULAR MATRIX FOR K =.12)
0057 FORMAT (20H-ELEMENTS OF INVERSE)
0058 FORMAT(21H-VALUE OF DETERMINANT)
0059 END

```

```

0001 ASYMMETRIC CHARGE TRANSFER CROSS SECTIONS.
0002 A.R.LEE & J.B.HASTED PROC.PHYS.SOC. 85(1965)673.
0003 AMU = BEAM MASS (A.M.U.)
0004 EI = IONISATION ENERGY (EV).
0005 ESTART = BEAM ENERGY FOR FIRST. CALCULATION (KEV).
0006 DELTA = -CHANGE IN BEAM ENERGY FOR NEXT CALCULATION (KEV).
0007 NDELTA = NUMBER OF REPEATS OF CALCULATION.
0008 Q = ENERGY DEFECT (EV).
0009 ONE BLANK CARD FOR A NEW GRAPH. TWO BLANK CARDS FOR THE END OF RUN
0010
0011 DOUBLE PRECISION SI, U1,U2
0012 DIMENSION XX(100),YY(10,100),TITLE(9,10)
0013 IR=5
0014 IW=6
0015 1 DO 9 J=1,10
0016 2 FORMAT(SF10.3,I2,9A3)
0017 K=J-1
0018 IF(NDELTA.EQ.0) GO TO 10
0019 WRITE(IW,3) (TITLE(I,J),I=1,9), AMU,EI,Q,ESTART,DELTA,NDELTA
0020 3 FORMAT(2H1,9A3/13H0 BEAM MASS =,F10.3,26H AMU, IONISATION ENERGY
0021 & =,F10.3,21H EV, ENERGY DEFECT =,F10.3,4H EV./
0022 &AM ENERGY =,F10.3,29H KEV. NUMBER OF DECREMENTS =,I2,/)
0023 WRITE(IW,4) K BEAM ENERGY(KEV) VEL(CM/SEC) SIGMA0(AU) U1 I(U1
0024 4 FORMAT(82H0 BEAM ENERGY(CM**2),13H GRAPH # ,I1/)
0025 U2=0.0
0026 SI=0.0
0027 DO 8 I=1,NDELTA
0028 E=ESTART-(I-1)*DELTA
0029 V=43928730*SQRT(E/AMU)
0030 E = BEAM ENERGY (KEV). V = BEAM VELOCITY (CM/SEC).
0031 N=0
0032 ITERATIVE SEARCH FOR A SOLUTION Y TO EQUATION 12 OF LEE & HASTED.
0033 FIRST GUESS AT VELOCITY AND Y. Y = GAMMA*RH01/A0.
0034 Y2=8.27E+5
0035 Y=6.0
0036 Y2=6.5
0037 V1=V2
0038 5 CALL BESK(Y,0,BK0,IER)
0039 AK0 = BK0
0040 CALL BESK(Y,1,BK1,IER)
0041 AK1 = BK1
0042 V2= 4.16350E+8*Y*(Y*AK0 + AK1)
0043 IF (ABS(V2-V).LT.100.0.OR.ABS(V2-V1).LT.100.0) GO TO 6
0044 ITERATE Y AND V.
0045 Y1=Y2
0046 Y2=Y
0047 LINEAR INTERPOLATION FOR NEXT TRIAL VALUE.
0048 Y=Y2+(V-V2)*(Y2-Y1)/(V2-V1)
0049 IF(ABS(Y-Y2).GT.0.5) Y=SIGN(0.5,Y-Y2)+Y2
0050 N=N+1
0051 IF(N.GT.200) RETURN
0052 GO TO 5
0053
0054
0055
0056
0057
0058
0059
0060
0061
0062
0063
0064
0065
0066
0067
0068
0069
0070
0071
0072
0073
0074
0075
0076
0077
0078
0079
0080
0081
0082
0083
0084
0085
0086
0087
0088
0089
0090
0091
0092
0093
0094
0095
0096
0097
0098
0099
0100
0101
0102
0103
0104
0105
0106
0107
0108
0109
0110
0111
0112
0113
0114
0115
0116
0117
0118
0119
0120
0121
0122
0123
0124
0125
0126
0127
0128
0129
0130
0131
0132
0133
0134
0135
0136

```

```

0037 6 RHO12=13.605826*Y*Y/EI
0038 C 1.5707963 = PI/2.
0039 C SIGMA0=1.5707963*RH012
0040 C Q=ABS(Q)
0041 C G=EXP(Y)/(14.089443*Y*(1.000000+1.000000/Y))
0042 C U1=G*Q/SQRT(EI)
C LOOK UP THE INTEGRAL.
C CALL INT(SI,U1,U2)
C
C CHANGE THE UPPER LIMIT OF INTEGRATION TO THE LOWER LIMIT FOR THE
C NEXT CALCULATION.
0043 U2=U1
0044 C SIGMA=SIGMA0*SI
C CHANGE UNITS FROM A.U. TO CM**2.
0045 SIGCM =2.800284E-17*SIGMA
0046 SIGCM0=2.800284E-17*SIGMA0
0047 WRITE(IW,7)E,V,SIGMA0,U1,SI,SIGMA,SIGCM
0048 7 FORMAT(3H ,F9.3,8X,1PE11.4,0PF10.4,F9.3,F7.3,F9.3,1PE15.3)
0049 111=NDELTA +1-I
0050 XX(111)= E
0051 YY(J,111)= SIGCM
0052 8 CONTINUE
0053 NMAX=NDELTA
0054 9 CONTINUE
0055 K=10
0056 10 IF(J.EQ.1) RETURN
0057 CALL PLOT2(XX,YY,1, K ,1,NMAX,10,100,TITLE)
0058 GO TO 1
0059 11 RETURN
0060 END

```

K

2

```

0001 SUBROUTINE INT(SI,X1,X2)
0002 INTEGRATION BY SIMPSON'S METHOD OF THE FUNCTION X**3*(SECH(X))**2.
0003 C
0004 C
0005 C
0006 C
0007 C
0008 C
0009 C
0010 C
0011 C
0012 C
0013 C
0014 C
0015 C
0016 C
0017 C
0018 C
0019 C
0020 C
0021 C
0022 C

```

SI = (4/X**4)INTEGRAL(X**3*(SECH(X))**2*DX).
 X1 = LOWER LIMIT. X2 = UPPER LIMIT.
 DOUBLE PRECISION S, EDX, EXX, A, SUM, SI, X, X1, X2, DX
 DIMENSION S(2)
 DX=0.0005
 N=(X1-X2)/DX
 X=X2
 EXX = EXP(X)
 EDX = EXP(DX)
 A=EXX+1.000000/EXX
 SUM=X*X*X/A/A
 S(1)=0.0
 S(2)=0.0
 DO 1 L=1,N,2
 DO 1 K=1,2
 X=X+DX
 EXX=EXX*EDX
 A=EXX+1.000000/EXX
 S(K)=S(K)+X*X*X/A/A
 SUM=SUM+4.000000*S(1)+2.000000*S(2)-X*X*X/A/A
 SI=(SI*X2*X2*X2+16.000000*SUM*DX/3.000000)/X/X/X/X
 RETURN
 END

Subroutine BESK

This subroutine computes the K Bessel function for a given argument x and order n. The recurrence relation:

$$K_{n+1}(x) = \frac{2n}{x} K_n(x) + K_{n-1}(x) \quad (1)$$

is used for this evaluation.

The initial values K_0 and K_1 are found as follows:

For $x > 1$:

$$K_0(x) = e^{-x} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} G_0(x) \quad (2)$$

$$K_1(x) = e^{-x} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} G_1(x) \quad (3)$$

where $x = 1/t$ for $t < 1$:

$$G_0\left(\frac{1}{t}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} = 1.2533141 - 0.1566642t + 0.08811128t^2 - 0.09139095t^3 + 0.1344596t^4 - 0.2299850t^5 + 0.3792410t^6 - 0.5247277t^7 + 0.5575368t^8 - 0.4262633t^9 + 0.2184518t^{10} - 0.06680977t^{11} + 0.009189383t^{12} \quad (4)$$

$$G_1\left(\frac{1}{t}\right) \sqrt{\frac{\pi}{2}} = 1.2533141 + 0.4699927t - 0.1468583t^2 + 0.1280427t^3 - 0.1736432t^4 + 0.2847618t^5 - 0.4594342t^6 + 0.6283381t^7 - 0.6632295t^8 + 0.5050239t^9 - 0.2581304t^{10} + 0.07880001t^{11} - 0.0108242t^{12} \quad (5)$$

For $x \approx 1$:

$$\gamma = \text{Euler's constant} = 0.5772156649 \quad (6)$$

$$K_0(x) = -\left(\gamma + \log \frac{x}{2}\right) + \sum_{s=1}^{\infty} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s} \frac{1}{(s!)^2} \left[H_s - \left(\gamma + \log \frac{x}{2}\right) \right] \quad (7)$$

where:

$$H_s = \sum_{r=1}^s \frac{1}{r} \quad (8)$$

$$K_1(x) = \frac{1}{x} + \sum_{s=1}^{\infty} \left(\frac{x}{2}\right)^{2s-1} \frac{1}{(s!)^2} \left[\frac{1}{2} + s \cdot \left(\gamma + \log \frac{x}{2} - H_s\right) \right] \quad (9)$$

```

.....
SUBROUTINE BESK
      COMPUTE THE K BESSSEL FUNCTION FOR A GIVEN ARGUMENT AND ORDER
      LEAVE
      CALL BESK(A,EN,IER)
      DESCRIPTION OF PARAMETERS
      A -THE ARGUMENT OF THE K BESSSEL FUNCTION DESIRED
      EN -THE ORDER OF THE K BESSSEL FUNCTION DESIRED
      IER -RESULTANT ERROR CODE WHERE
      IER=0 NO ERROR
      IER=1 A IS NEGATIVE
      IER=2 A IS ZERO OR NEGATIVE
      IER=3 A -GT. 170. MACHINE RANGE EXCEEDED
      IER=4 EN -GT. 10**7C
      REPARMS
      A MUST BE GREATER THAN OR EQUAL TO ZERO
      SUBROUTINES AND FUNCTIONS SUBPROGRAMS REQUIRED
      NONE
      METHOD
      COMPUTES ZERO ORDER AND FIRST ORDER BESSSEL FUNCTIONS USING
      SERIES APPROXIMATIONS AND THEN COMPUTES N TH ORDER FUNCTION
      USING RECURSIVE RELATION.
      DESCRIBING RELATION AND POLYNOMIAL APPROXIMATION TECHNIQUE
      AS DESCRIBED BY G.J.M. FITZGERALD, POLYNOMIAL APPROXIMATIONS
      TO BESSSEL FUNCTIONS OF ORDER ZERO AND ONE AND IC RELATION
      FUNCTIONS, P.T.A.C. V.11,1957,PP.80-88, AND G.A. NATION,
      "A TREATISE ON THE THEORY OF BESSSEL FUNCTIONS", CAMBRIDGE
      UNIVERSITY PRESS, 1958, P. 42
.....
SUBROUTINE BESK(A,EN,IER)
      COMMON T(12)
      EN=IC
      IF(AIC(1),1)
      1C IER=1
      2C IER=2
      3C IER=3
      4C IER=4
      5C IER=5
      6C IER=6
      7C IER=7
      8C IER=8
      9C IER=9
      10C IER=10
      11C IER=11
      12C IER=12
      13C IER=13
      14C IER=14
      15C IER=15
      16C IER=16
      17C IER=17
      18C IER=18
      19C IER=19
      20C IER=20
      21C IER=21
      22C IER=22
      23C IER=23
      24C IER=24
      25C IER=25
      26C IER=26
      27C IER=27
      28C IER=28
      29C IER=29
      30C IER=30
      31C IER=31
      32C IER=32
      33C IER=33
      34C IER=34
      35C IER=35
      36C IER=36
      37C IER=37
      38C IER=38
      39C IER=39
      40C IER=40
      41C IER=41
      42C IER=42
      43C IER=43
      44C IER=44
      45C IER=45
      46C IER=46
      47C IER=47
      48C IER=48
      49C IER=49
      50C IER=50
      51C IER=51
      52C IER=52
      53C IER=53
      54C IER=54
      55C IER=55
      56C IER=56
      57C IER=57
      58C IER=58
      59C IER=59
      60C IER=60
      61C IER=61
      62C IER=62
      63C IER=63
      64C IER=64
      65C IER=65
      66C IER=66
      67C IER=67
      68C IER=68
      69C IER=69
      70C IER=70
      71C IER=71
      72C IER=72
      73C IER=73
      74C IER=74
      75C IER=75
      76C IER=76
      77C IER=77
      78C IER=78
      79C IER=79
      80C IER=80
      81C IER=81
      82C IER=82
      83C IER=83
      84C IER=84
      85C IER=85
      86C IER=86
      87C IER=87
      88C IER=88
      89C IER=89
      90C IER=90
      91C IER=91
      92C IER=92
      93C IER=93
      94C IER=94
      95C IER=95
      96C IER=96
      97C IER=97
      98C IER=98
      99C IER=99
      100C IER=100
      101C IER=101
      102C IER=102
      103C IER=103
      104C IER=104
      105C IER=105
      106C IER=106
      107C IER=107
      108C IER=108
      109C IER=109
      110C IER=110
      111C IER=111
      112C IER=112
      113C IER=113
      114C IER=114
      115C IER=115
      116C IER=116
      117C IER=117
      118C IER=118
      119C IER=119
      120C IER=120
      121C IER=121
      122C IER=122
      123C IER=123
      124C IER=124
      125C IER=125
      126C IER=126
      127C IER=127
      128C IER=128
      129C IER=129
      130C IER=130
      131C IER=131
      132C IER=132
      133C IER=133
      134C IER=134
      135C IER=135
      136C IER=136
      137C IER=137
      138C IER=138
      139C IER=139
      140C IER=140
      141C IER=141
      142C IER=142
      143C IER=143
      144C IER=144
      145C IER=145
      146C IER=146
      147C IER=147
      148C IER=148
      149C IER=149
      150C IER=150
      151C IER=151
      152C IER=152
      153C IER=153
      154C IER=154
      155C IER=155
      156C IER=156
      157C IER=157
      158C IER=158
      159C IER=159
      160C IER=160
      161C IER=161
      162C IER=162
      163C IER=163
      164C IER=164
      165C IER=165
      166C IER=166
      167C IER=167
      168C IER=168
      169C IER=169
      170C IER=170
      171C IER=171
      172C IER=172
      173C IER=173
      174C IER=174
      175C IER=175
      176C IER=176
      177C IER=177
      178C IER=178
      179C IER=179
      180C IER=180
      181C IER=181
      182C IER=182
      183C IER=183
      184C IER=184
      185C IER=185
      186C IER=186
      187C IER=187
      188C IER=188
      189C IER=189
      190C IER=190
      191C IER=191
      192C IER=192
      193C IER=193
      194C IER=194
      195C IER=195
      196C IER=196
      197C IER=197
      198C IER=198
      199C IER=199
      200C IER=200
      201C IER=201
      202C IER=202
      203C IER=203
      204C IER=204
      205C IER=205
      206C IER=206
      207C IER=207
      208C IER=208
      209C IER=209
      210C IER=210
      211C IER=211
      212C IER=212
      213C IER=213
      214C IER=214
      215C IER=215
      216C IER=216
      217C IER=217
      218C IER=218
      219C IER=219
      220C IER=220
      221C IER=221
      222C IER=222
      223C IER=223
      224C IER=224
      225C IER=225
      226C IER=226
      227C IER=227
      228C IER=228
      229C IER=229
      230C IER=230
      231C IER=231
      232C IER=232
      233C IER=233
      234C IER=234
      235C IER=235
      236C IER=236
      237C IER=237
      238C IER=238
      239C IER=239
      240C IER=240
      241C IER=241
      242C IER=242
      243C IER=243
      244C IER=244
      245C IER=245
      246C IER=246
      247C IER=247
      248C IER=248
      249C IER=249
      250C IER=250
      251C IER=251
      252C IER=252
      253C IER=253
      254C IER=254
      255C IER=255
      256C IER=256
      257C IER=257
      258C IER=258
      259C IER=259
      260C IER=260
      261C IER=261
      262C IER=262
      263C IER=263
      264C IER=264
      265C IER=265
      266C IER=266
      267C IER=267
      268C IER=268
      269C IER=269
      270C IER=270
      271C IER=271
      272C IER=272
      273C IER=273
      274C IER=274
      275C IER=275
      276C IER=276
      277C IER=277
      278C IER=278
      279C IER=279
      280C IER=280
      281C IER=281
      282C IER=282
      283C IER=283
      284C IER=284
      285C IER=285
      286C IER=286
      287C IER=287
      288C IER=288
      289C IER=289
      290C IER=290
      291C IER=291
      292C IER=292
      293C IER=293
      294C IER=294
      295C IER=295
      296C IER=296
      297C IER=297
      298C IER=298
      299C IER=299
      300C IER=300
      301C IER=301
      302C IER=302
      303C IER=303
      304C IER=304
      305C IER=305
      306C IER=306
      307C IER=307
      308C IER=308
      309C IER=309
      310C IER=310
      311C IER=311
      312C IER=312
      313C IER=313
      314C IER=314
      315C IER=315
      316C IER=316
      317C IER=317
      318C IER=318
      319C IER=319
      320C IER=320
      321C IER=321
      322C IER=322
      323C IER=323
      324C IER=324
      325C IER=325
      326C IER=326
      327C IER=327
      328C IER=328
      329C IER=329
      330C IER=330
      331C IER=331
      332C IER=332
      333C IER=333
      334C IER=334
      335C IER=335
      336C IER=336
      337C IER=337
      338C IER=338
      339C IER=339
      340C IER=340
      341C IER=341
      342C IER=342
      343C IER=343
      344C IER=344
      345C IER=345
      346C IER=346
      347C IER=347
      348C IER=348
      349C IER=349
      350C IER=350
      351C IER=351
      352C IER=352
      353C IER=353
      354C IER=354
      355C IER=355
      356C IER=356
      357C IER=357
      358C IER=358
      359C IER=359
      360C IER=360
      361C IER=361
      362C IER=362
      363C IER=363
      364C IER=364
      365C IER=365
      366C IER=366
      367C IER=367
      368C IER=368
      369C IER=369
      370C IER=370
      371C IER=371
      372C IER=372
      373C IER=373
      374C IER=374
      375C IER=375
      376C IER=376
      377C IER=377
      378C IER=378
      379C IER=379
      380C IER=380
      381C IER=381
      382C IER=382
      383C IER=383
      384C IER=384
      385C IER=385
      386C IER=386
      387C IER=387
      388C IER=388
      389C IER=389
      390C IER=390
      391C IER=391
      392C IER=392
      393C IER=393
      394C IER=394
      395C IER=395
      396C IER=396
      397C IER=397
      398C IER=398
      399C IER=399
      400C IER=400
      401C IER=401
      402C IER=402
      403C IER=403
      404C IER=404
      405C IER=405
      406C IER=406
      407C IER=407
      408C IER=408
      409C IER=409
      410C IER=410
      411C IER=411
      412C IER=412
      413C IER=413
      414C IER=414
      415C IER=415
      416C IER=416
      417C IER=417
      418C IER=418
      419C IER=419
      420C IER=420
      421C IER=421
      422C IER=422
      423C IER=423
      424C IER=424
      425C IER=425
      426C IER=426
      427C IER=427
      428C IER=428
      429C IER=429
      430C IER=430
      431C IER=431
      432C IER=432
      433C IER=433
      434C IER=434
      435C IER=435
      436C IER=436
      437C IER=437
      438C IER=438
      439C IER=439
      440C IER=440
      441C IER=441
      442C IER=442
      443C IER=443
      444C IER=444
      445C IER=445
      446C IER=446
      447C IER=447
      448C IER=448
      449C IER=449
      450C IER=450
      451C IER=451
      452C IER=452
      453C IER=453
      454C IER=454
      455C IER=455
      456C IER=456
      457C IER=457
      458C IER=458
      459C IER=459
      460C IER=460
      461C IER=461
      462C IER=462
      463C IER=463
      464C IER=464
      465C IER=465
      466C IER=466
      467C IER=467
      468C IER=468
      469C IER=469
      470C IER=470
      471C IER=471
      472C IER=472
      473C IER=473
      474C IER=474
      475C IER=475
      476C IER=476
      477C IER=477
      478C IER=478
      479C IER=479
      480C IER=480
      481C IER=481
      482C IER=482
      483C IER=483
      484C IER=484
      485C IER=485
      486C IER=486
      487C IER=487
      488C IER=488
      489C IER=489
      490C IER=490
      491C IER=491
      492C IER=492
      493C IER=493
      494C IER=494
      495C IER=495
      496C IER=496
      497C IER=497
      498C IER=498
      499C IER=499
      500C IER=500
      501C IER=501
      502C IER=502
      503C IER=503
      504C IER=504
      505C IER=505
      506C IER=506
      507C IER=507
      508C IER=508
      509C IER=509
      510C IER=510
      511C IER=511
      512C IER=512
      513C IER=513
      514C IER=514
      515C IER=515
      516C IER=516
      517C IER=517
      518C IER=518
      519C IER=519
      520C IER=520
      521C IER=521
      522C IER=522
      523C IER=523
      524C IER=524
      525C IER=525
      526C IER=526
      527C IER=527
      528C IER=528
      529C IER=529
      530C IER=530
      531C IER=531
      532C IER=532
      533C IER=533
      534C IER=534
      535C IER=535
      536C IER=536
      537C IER=537
      538C IER=538
      539C IER=539
      540C IER=540
      541C IER=541
      542C IER=542
      543C IER=543
      544C IER=544
      545C IER=545
      546C IER=546
      547C IER=547
      548C IER=548
      549C IER=549
      550C IER=550
      551C IER=551
      552C IER=552
      553C IER=553
      554C IER=554
      555C IER=555
      556C IER=556
      557C IER=557
      558C IER=558
      559C IER=559
      560C IER=560
      561C IER=561
      562C IER=562
      563C IER=563
      564C IER=564
      565C IER=565
      566C IER=566
      567C IER=567
      568C IER=568
      569C IER=569
      570C IER=570
      571C IER=571
      572C IER=572
      573C IER=573
      574C IER=574
      575C IER=575
      576C IER=576
      577C IER=577
      578C IER=578
      579C IER=579
      580C IER=580
      581C IER=581
      582C IER=582
      583C IER=583
      584C IER=584
      585C IER=585
      586C IER=586
      587C IER=587
      588C IER=588
      589C IER=589
      590C IER=590
      591C IER=591
      592C IER=592
      593C IER=593
      594C IER=594
      595C IER=595
      596C IER=596
      597C IER=597
      598C IER=598
      599C IER=599
      600C IER=600
      601C IER=601
      602C IER=602
      603C IER=603
      604C IER=604
      605C IER=605
      606C IER=606
      607C IER=607
      608C IER=608
      609C IER=609
      610C IER=610
      611C IER=611
      612C IER=612
      613C IER=613
      614C IER=614
      615C IER=615
      616C IER=616
      617C IER=617
      618C IER=618
      619C IER=619
      620C IER=620
      621C IER=621
      622C IER=622
      623C IER=623
      624C IER=624
      625C IER=625
      626C IER=626
      627C IER=627
      628C IER=628
      629C IER=629
      630C IER=630
      631C IER=631
      632C IER=632
      633C IER=633
      634C IER=634
      635C IER=635
      636C IER=636
      637C IER=637
      638C IER=638
      639C IER=639
      640C IER=640
      641C IER=641
      642C IER=642
      643C IER=643
      644C IER=644
      645C IER=645
      646C IER=646
      647C IER=647
      648C IER=648
      649C IER=649
      650C IER=650
      651C IER=651
      652C IER=652
      653C IER=653
      654C IER=654
      655C IER=655
      656C IER=656
      657C IER=657
      658C IER=658
      659C IER=659
      660C IER=660
      661C IER=661
      662C IER=662
      663C IER=663
      664C IER=664
      665C IER=665
      666C IER=666
      667C IER=667
      668C IER=668
      669C IER=669
      670C IER=670
      671C IER=671
      672C IER=672
      673C IER=673
      674C IER=674
      675C IER=675
      676C IER=676
      677C IER=677
      678C IER=678
      679C IER=679
      680C IER=680
      681C IER=681
      682C IER=682
      683C IER=683
      684C IER=684
      685C IER=685
      686C IER=686
      687C IER=687
      688C IER=688
      689C IER=689
      690C IER=690
      691C IER=691
      692C IER=692
      693C IER=693
      694C IER=694
      695C IER=695
      696C IER=696
      697C IER=697
      698C IER=698
      699C IER=699
      700C IER=700
      701C IER=701
      702C IER=702
      703C IER=703
      704C IER=704
      705C IER=705
      706C IER=706
      707C IER=707
      708C IER=708
      709C IER=709
      710C IER=710
      711C IER=711
      712C IER=712
      713C IER=713
      714C IER=714
      715C IER=715
      716C IER=716
      717C IER=717
      718C IER=718
      719C IER=719
      720C IER=720
      721C IER=721
      722C IER=722
      723C IER=723
      724C IER=724
      725C IER=725
      726C IER=726
      727C IER=727
      728C IER=728
      729C IER=729
      730C IER=730
      731C IER=731
      732C IER=732
      733C IER=733
      734C IER=734
      735C IER=735
      736C IER=736
      737C IER=737
      738C IER=738
      739C IER=739
      740C IER=740
      741C IER=741
      742C IER=742
      743C IER=743
      744C IER=744
      745C IER=745
      746C IER=746
      747C IER=747
      748C IER=748
      749C IER=749
      750C IER=750
      751C IER=751
      752C IER=752
      753C IER=753
      754C IER=754
      755C IER=755
      756C IER=756
      757C IER=757
      758C IER=758
      759C IER=759
      760C IER=760
      761C IER=761
      762C IER=762
      763C IER=763
      764C IER=764
      765C IER=765
      766C IER=766
      767C IER=767
      768C IER=768
      769C IER=769
      770C IER=770
      771C IER=771
      772C IER=772
      773C IER=773
      774C IER=774
      775C IER=775
      776C IER=776
      777C IER=777
      778C IER=778
      779C IER=779
      780C IER=780
      781C IER=781
      782C IER=782
      783C IER=783
      784C IER=784
      785C IER=785
      786C IER=786
      787C IER=787
      788C IER=788
      789C IER=789
      790C IER=790
      791C IER=791
      792C IER=792
      793C IER=793
      794C IER=794
      795C IER=795
      796C IER=796
      797C IER=797
      798C IER=798
      799C IER=799
      800C IER=800
      801C IER=801
      802C IER=802
      803C IER=803
      804C IER=804
      805C IER=805
      806C IER=806
      807C IER=807
      808C IER=808
      809C IER=809
      810C IER=810
      811C IER=811
      812C IER=812
      813C IER=813
      814C IER=814
      815C IER=815
      816C IER=816
      
```

```

C 35 G1=0011.222141+.665592707113-.346893071123+.128643707113
2-.122141+.665592707113-.346893071123+.128643707113
4-.61622141+.122141+.665592707113-.346893071123+.128643707113
4-.61622141+.122141+.665592707113-.346893071123+.128643707113
IFIA=132C.3C.21
10 EN=01
RETURN
C
C PREP MC.N3 CCPFLTE BA USING RECURRENCE RELATION
C
31 CC 33 J=2.A
GJ=2.01FLCAT1J)-1.10E1/2*MC
IPICJ=1.C87C132.23.22
32 I0=4
CC 1C 34
33 CC=03
34 I0=0
35 EN=01
RETURN
C
C CCPFLTE MC USING SERIES EXPANSION
C
37 CC=0
38 J=1.
FACT=1.
FJ=C
CC 4C J=1.0
HJ=1./FLCAT1J)
39 J=2*J
FACT=FACT*J*J
FJ=J*J
40 CC=CC+J*FACT*(J-J)
IPICJ=132.42.43
42 EN=01
RETURN
C
C CCPFLTE R3 USING SERIES EXPANSION
C
43 22J=0
FACT=1.
FJ=1.
GJ=1./FLCAT1J)-1.10E1/2*MC
CC 3C J=2*J
22J=22J*J
HJ=1./FLCAT1J)
FACT=FACT*J*J
FJ=J*J
44 GJ=1.0+J*FACT*(J-1.0E1/2*MC+J)
IPICJ=1321.32.21
45 EN=01
RETURN
END
BESK 740
BESK 750
BESK 760
BESK 770
BESK 780
BESK 790
BESK 800
BESK 810
BESK 820
BESK 830
BESK 840
BESK 850
BESK 860
BESK 870
BESK 880
BESK 890
BESK 900
BESK 910
BESK 920
BESK 930
BESK 940
BESK 950
BESK 960
BESK 970
BESK 980
BESK 990
BESK1000
BESK1010
BESK1020
BESK1030
BESK1040
BESK1050
BESK1060
BESK1070
BESK1080
BESK1090
BESK1100
BESK1110
BESK1120
BESK1130
BESK1140
BESK1150
BESK1160
BESK1170
BESK1180
BESK1190
BESK1200
BESK1210
BESK1220
BESK1230
BESK1240
BESK1250
BESK1260
BESK1270
BESK1280
BESK1290
BESK1300

```

Extrait de : I B M Application Program

System / 360 Scientific Subroutine Package Version III

Mathematics - Special functions BESK--K Bessel function

pages 367-8

POOR COPY