



## AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : [ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr](mailto:ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr)

## LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

[http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg\\_droi.php](http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php)

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

# **THESE DE DOCTORAT**

*PRESENTE PAR*

**Issam ABBAS**

*POUR OBTENIR LE DIPLOME DE*

**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE PAUL VERLAINE DE METZ**

---

**IONISATION D'ATOMES, DE MOLECULES ET DE BIOMOLECULES  
PAR IMPACT D'IONS MULTICHARGES DE HAUTES ENERGIES  
COMPARAISON QUANTIQUE ET CLASSIQUE**

---

*Soutenance le mardi 6 mai 2008  
devant la Commission d'Examen :*

<b>Rapporteur</b>	<b>H. BACHAU</b>	Directeur de Recherches au CNRS
<b>Rapporteur</b>	<b>J. Y. CHESNEL</b>	Maitre de Conférences à l'université de Caen
<b>Directeur de thèse</b>	<b>J. HANSSEN</b>	Professeur à l'Université de Metz
<b>Examineur</b>	<b>A. LE PADELLEC</b>	Maitre de Conférences à l'université de Toulouse III
<b>Invité</b>	<b>C. CHAMPION</b>	Maitre de Conférences à l'université de Metz



## Dédicace

*A mon épouse Fidaa dont l'amour et la patience étaient toujours le grand support pour moi.*

*A ma mère qui m'a entouré par sa tendresse pendant toute ma vie.*

*A la mémoire de mon père et de ma sœur qui ont quittés ce monde avant que je ne termine ce travail.*



## *Tables des matières*

<b>Introduction Générale .....</b>	<b>1</b>
 <b><i>PARTIE I</i> .....</b>	 <b>5</b>
<b>Chapitre I .....</b>	<b>7</b>
<b>Concepts et Principes de la Théorie des Collisions .....</b>	<b>7</b>
<b>I.1. Origines classiques du problème .....</b>	<b>7</b>
<b>I.2. Définitions basiques .....</b>	<b>11</b>
<b>I.2.1. Collision .....</b>	<b>12</b>
<b>I.2.2. Voies .....</b>	<b>13</b>
<b>I.2.3. Section efficace .....</b>	<b>14</b>
<b>I.2.4. Domaines d'énergies.....</b>	<b>16</b>
 <b>Chapitre II .....</b>	 <b>19</b>
<b>Modèles classiques .....</b>	<b>19</b>
<b>II.1. Caractéristiques générales d'un modèle classique .....</b>	<b>20</b>
<b>II.2. Modèles CTMC (Classical Trajectory Monte Carlo) .....</b>	<b>20</b>
<b>II.2.1. Représentation classique de la distribution électronique initiale .....</b>	<b>21</b>
<b>II.2.2. Intégration numérique .....</b>	<b>24</b>
<b>II.2.3. Critères finaux et sections efficaces .....</b>	<b>25</b>
<b>II.2.4. Validité des modèles CTMC .....</b>	<b>26</b>
<b>II.3. Modèles COB (Classical Over-Barrier) .....</b>	<b>28</b>
<b>II.3.1. Modèle COB mono-électronique de Bohr-Lindhardt .....</b>	<b>29</b>
<b>II.3.2. Modèle COB multiélectronique de Bárány et al. ....</b>	<b>33</b>
<b>II.3.3. Modèle COB multiélectronique de Niehaus .....</b>	<b>35</b>
<b>II.3.4. Modèle COB d'Ostrovsky .....</b>	<b>38</b>
<b>II.3.5. Modèle COB de Sattin .....</b>	<b>43</b>
<b>II.3.6. Validité des modèles COB .....</b>	<b>45</b>
<b>II.4. Conclusion .....</b>	<b>46</b>

<b><i>PARTIE II</i></b> .....	47
<b>Chapitre III</b> .....	49
<b>Présentation de notre modèle</b> .....	49
<b>III.1. Introduction</b> .....	49
<b>III.2. Théorie</b> .....	50
<b>III.2.1. Condition COB</b> .....	51
<b>III.2.2. Conditions initiales</b> .....	52
<b>III.2.3. Propagation du système</b> .....	55
<b>III.2.4. Conditions et Critères finaux</b> .....	58
<b>III.2.5. Probabilités des processus ionisants et Sections Efficaces</b> .....	61
<b>III.3. Remarques sur le calcul numérique</b> .....	63
<b>Chapitre IV</b> .....	67
<b>Résultats et Discussions : Cas de cibles atomiques</b> .....	67
<b>IV.1. Cible d'Hydrogène</b> .....	67
<b>IV.1.1. Cas de simple Capture (SC)</b> .....	67
<b>IV.1.2. Cas de simple Ionisation (SI)</b> .....	68
<b>IV.2. Cible d'Hélium</b> .....	72
<b>IV.2.1. Cas de processus simples</b> .....	73
<b>IV.2.1.1. Simple Capture (SC)</b> .....	73
<b>IV.2.1.2. Simple Ionisation (SI)</b> .....	76
<b>IV.2.2. Cas de processus doubles</b> .....	79
<b>IV.2.2.1. Transfert Ionisation (TI)</b> .....	79
<b>IV.2.2.2. Double Capture (DC)</b> .....	82
<b>IV.2.2.3. Double Ionisation (DI)</b> .....	85
<b>IV.2.3. Remarques importantes</b> .....	88
<b>Chapitre V</b> .....	91
<b>Résultats et Discussions : Cas des cibles moléculaires</b> .....	91
<b>V.1 Cible Hydrogène moléculaire</b> .....	91
<b>V.1.1 Sections efficaces pour le projectile He<sup>2+</sup></b> .....	92
<b>V.1.1.1 Processus Simples</b> .....	92
<b>V.1.1.1.1. Simple Capture (SC)</b> .....	92

V.1.1.1.2. Simple Ionisation (SI) .....	94
V.1.1.2 Processus Doubles .....	95
V.1.1.2.1. Transfert Ionisation (TI) .....	95
V.1.1.2.2. Double Capture (DC) .....	96
V.1.1.2.3. Double Ionisation (DI) .....	97
V.1.2 Sections efficaces pour le projectile C <sup>6+</sup> .....	98
V.1.2.1 Processus Simples .....	98
V.1.2.1.1. Simple Capture (SC) .....	98
V.1.2.1.2. Simple Ionisation (SI) .....	99
V.1.2.2 Processus Doubles .....	100
V.2 Cibles biologiques .....	102
V. 2.1 Collisions ion-H <sub>2</sub> O .....	102
V.2.1.1 Processus Simples .....	102
V.2.1.1.1 Simple Capture (SC) .....	102
V.2.1.1.2 Simple Ionisation (SI) .....	105
V.2.1.2 Processus Doubles .....	107
V. 2.2 Cibles base ADN .....	109
Conclusion et perspectives .....	111
Références .....	115



# *Introduction Générale*

Depuis plusieurs décennies, l'études des processus collisionnels ionisant de cible atomique ou moléculaire par l'impact d'un projectile chargé sont fondamentaux dans un grand nombre de domaines de la physique comme la physique des plasmas, l'astrophysique et la biophysique ([Bet.]\*, [Fan.] et [Ino.]). Mais, plus récemment, un nouveau développement est apparu en médecine nucléaire en particulier dans le domaine des thérapies par irradiation, où les données des sections efficaces sont indispensables pour pouvoir modéliser les effets et les dépôts d'énergies sur la matière vivante [Nak.].

La description d'une collision ion-atome ou ion-molécule est un problème délicat et complexe, car il implique au moins trois particules, ce qui est déjà un grand défi pour des théoriciens [Sto.]. La mécanique quantique a été intensivement utilisée pour décrire des collisions ion-atome depuis les années trente où Bethe a réalisé un travail fondamental pour décrire l'émission d'électron par des particules chargées en utilisant l'approximation de Born du premier ordre construite à partir de la théorie des perturbations. Après guerre, beaucoup d'autres modèles quantiques, semi-classiques ou classiques ont été construits et développés pour résoudre ce problème [Sto].

Mais, comme pour beaucoup d'autres sciences, l'avancement dans le domaine de la physique des collisions est lié à la disponibilité de données expérimentales, qui seules peuvent justifier la validité de tel ou tel modèle d'approximation. Or, bien qu'une quantité importante de données expérimentales, et théoriques, soient disponibles pour les collisions ion-atome et cela pour une large gamme d'énergies d'impact, celles-ci restent encore relativement rares pour les collisions ion-molécule et plus encore pour des collisions ion-biomolécules. Ce qui

---

\* Les références sont classées à la fin du mémoire par ordre alphabétique, et indiquées dans le texte par les trois premières lettres du nom du premier auteur entre deux crochets comme : [Abc.], ou avec un numéro si plusieurs références existent pour le même auteur comme : [Abc.1], [Abc.2] ...etc., ou avec un quatrième lettre en cas de ressemblance des trois premières lettres comme : [Abcd.], [Abcf] ...etc.

est à remarquer est que, jusqu'au présent, la matière vivante est souvent modélisée par la molécule d'eau. Mais, malgré tout, même pour cette cible, les données expérimentales ou théoriques disponibles sont presque limitées aux processus ionisants faisant intervenir un seul électron (Simple Capture *SC* ou Simple Ionisation *SI*). Nous avons, en particulier, les expériences de Toburen *et al.* [Tob.], de Gobet *et al.* [Gob.], Bolorizadeh et Rudd [Bol.] et, surtout, de Rudd *at al.* [Rud.2, 3 et 4], qui nous fournissent, principalement, des sections efficaces totales pour des processus ionisants simples (*SC* ou *SI*) et pour des projectiles comme le proton et la particule alpha. De plus, les gammes d'énergies d'impact étudiées ne recouvrent pas toujours les domaines qui nous intéressent dans cette étude. De même, les données expérimentales pour des cibles biomoléculaires sont, à notre connaissance, vraiment très rares.

Concernant le travail présent, nous avons développé un modèle classique pour traiter des collisions de type ion-atome ou ion-molécule. Ce modèle est inspiré de celui de Zarour et Saalman [Zar.] basé sur les approximations : Classical Over-Barrier (COB), et Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC). Celui-ci a été conçu, principalement, pour traiter des collisions dans le domaine des faibles énergies. Nous avons introduit, en particulier, deux améliorations importantes : (i) la description des conditions initiales des électrons de la cible, et (ii) les critères déterminant les différents processus ionisants finaux.

La nouveauté la plus importante de ce travail c'est que les modifications que nous avons apportées nous ont permis d'avoir un modèle simple pouvant traiter des collisions impliquant des cibles moléculaires biologiques ( $H_2O$ , Adénine et Cytosine), ceci étant quasiment impossible avec les modèles quantiques ou classiques actuellement disponibles. Un autre point important de notre modèle est la possibilité de calculer, simultanément, les sections efficaces totales de plusieurs processus ionisants.

Pour pouvoir valider notre modèle, nous l'avons appliqué, en premier lieu, à l'étude des systèmes collisionnels impliquant des projectiles multichargés ( $H^+$ ,  $He^{2+}$ ,  $Li^{3+}$ ,  $Be^{4+}$ ,  $C^{6+}$ ,  $O^{8+}$  et  $Ne^{10+}$ ) avec des cibles simples ( $H$ ,  $He$  et  $H_2$ ) pour lesquelles des données expérimentales et théoriques sont nombreuses. Nous avons, ensuite, étudié des collisions avec la molécule d'eau qui est d'un grand intérêt biologique, et

pour laquelle des données expérimentales ou théoriques existent, au moins pour les processus ionisant simples (SC et SI). L'obtention de résultats satisfaisants pour la cible  $H_2O$  nous encouragé à appliquer notre modèle à deux grosses biomolécules ; l'Adénine et la Cytosine pour lesquelles aucune autre donnée ni expérimentales ni théoriques n'est disponible.

Un nombre important de tests a été réalisé pour pouvoir déterminer le domaine de validité du modèle. Nous avons trouvé que les meilleurs résultats sont obtenus pour une gamme d'énergie de collision allant de quelques dizaines de keV/uma jusqu'à quelques MeV/uma. Ainsi, nos résultats présentés dans ce travail sont compris entre 10 et 5000 keV/uma.

Tout au long de ce mémoire, les unités atomiques sont utilisées sauf indication contraire.



# *Partie I*

Dans cette partie, nous allons aborder la théorie des collisions, ces origines se trouvant dans la mécanique classique, et en particulier les définitions et les principaux concepts associés à cette théorie, en particulier, en ce qui concerne les collisions entre des ions avec des atomes ou des molécules. Nous allons, ensuite, discuter les principales méthodes d'approximation classiques : (CTMC «Classical Trajectory Monte Carlo», et COB «Classical Over-Barrier »).



# *Chapitre I*

## Concepts et Principes de la Théorie des Collisions

### **I.1. Origines classiques du problème :**

Bien que les études quantiques des collisions atomiques aient commencé début du XX<sup>e</sup> siècle, faisant suite aux grandes découvertes des rayonnements atomiques et nucléaires (voir [McD.]), et à la création de la mécanique quantique (par des physiciens comme M. Planck, A. Einstein, N. Bohr, W. Heisenberg, E. Schrödinger, etc.) les origines, en fait, montent plus loin dans le passé, aux travaux comme ceux de G. Galilée, de I. Newton, de J. L. Lagrange, de W. R. Hamilton ... qui ont consacré de très importantes parties de leurs efforts scientifiques à construire et à développer la mécanique classique. Celle-ci a été conçue pour décrire et expliquer tous les phénomènes physiques, des petites particules aux plus grands corps célestes.

Mais, pour bien rester dans le cadre général du sujet de cette thèse, il vaut mieux commencer par nous poser la question suivante : « Que-ce que c'est une collision ? ». En cherchant une réponse à cette question on peut dire qu' « une collision est un phénomène produit suite à une interaction, plus ou moins instantanée, entre deux, ou plusieurs, systèmes, qui peut transformer ces systèmes ». Bien que cette définition puisse s'appliquer à n'importe quel type de collision (entre des voitures, des galaxies... etc.) ce qui nous intéresse dans ce mémoire sont les collisions entre des particules comme des ions, des atomes ou des molécules. Et, bien que ce type de particules ne fût pas connu à l'époque de la création de la mécanique classique, les concepts comme : le point matériel, la charge, le potentiel, la force,

la quantité du mouvement...etc., peuvent, tous, être utilisés pour décrire une collision entre des ions et des atomes ou des molécules.

En fait, du point de vue de la mécanique classique, une collision n'est qu'un cas particulier du but général de cette mécanique. C'est à dire pouvoir décrire, à tout instant, la position et la vitesse de toutes les particules, ou des points matériels, constituant le système en question. Pour cela, nous avons besoin d'introduire une certaine fonction qui regroupe le temps  $t$ , la position et la vitesse de chaque particule. Cette fonction-là est la fonction de Lagrange  $L(q, \dot{q}, t)$  (voir [Lan.]) qui, en s'associant avec le principe de moindre action (ou principe de Hamilton) nous conduit à trouver les équations de Lagrange. Celles-ci s'écrivent pour un système de  $S$  degrés de liberté :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0 \quad (\alpha=1,2,\dots,S) \quad (\text{I-1})$$

où  $q_\alpha$  et  $\dot{q}_\alpha$  représentent, respectivement, les coordonnées et les vitesses *généralisées* correspondant au degré de liberté  $\alpha$ .

Mathématiquement, elles forment un système de  $S$  équations différentielles du second ordre à  $S$  fonctions inconnues  $q_\alpha(t)$  [Lan.]. La solution générale d'un tel système contient  $2S$  *constantes arbitraires* qui imposent la connaissance de  $2S$  *conditions initiales* qui caractérisent l'état du système à un instant donné (par exemple, les valeurs initiales des coordonnées et des vitesses).

La question qui se pose est « comment résoudre ces équations différentielles ? ». En fait, c'est là où demeure un des principaux problèmes de la mécanique classique, et en quelque sorte de la mécanique quantique.

Les grandeurs, qui déterminent l'état d'un système en mouvement, varient avec le temps, mais il existe des fonctions de ces grandeurs qui *conservent une valeur constante* pendant le mouvement et dépendant seulement des *conditions initiales*. Ces fonctions sont les *intégrales du mouvement*. L'origine profonde de ces intégrales du mouvement est liée aux propriétés fondamentales de l'espace et du temps, plus précisément à leur uniformité et leur isotropie, et

elles sont dotées d'une propriété très importante : l'additivité (voir [Lan.]). L'intégrale du mouvement la plus importante est l'énergie totale du système, qui découle de l'uniformité du temps, et qui nous donne la loi de conservation de l'énergie totale (capitale pour les sciences physiques modernes, anciennes, quantiques comme classiques).

Prenons l'exemple d'un système mécanique fermé constitué de  $N$  points matériels qui réagissent les uns avec les autres via une certaine interaction définie par une fonction  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_i \dots)$ , où  $\vec{r}_i$  est le rayon vecteur du  $i^{\text{ième}}$  point matériel et  $\vec{v}_i$  sa vitesse. La fonction de Lagrange s'écrit :

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2} - U(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_i \dots) \quad (\text{I-2})$$

où  $m_i$  est la masse du  $i^{\text{ième}}$  point. Le premier terme constitue l'énergie cinétique du système et le deuxième son énergie potentielle. On peut vérifier à partir de l'uniformité du temps et de la fonction de Lagrange [Lan.] que :

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2} + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_i \dots) \quad (\text{I-3})$$

Cette équation est, en fait, à l'origine de l'équation de Schrödinger qui constitue la version quantique ; aussi jouent-elles, toutes les deux, le rôle principal, l'une en mécanique classique et l'autre en mécanique quantique.

La deuxième loi de conservation découle de l'homogénéité de l'espace, c'est la conservation de l'impulsion. Pour un système fermé, on vérifie, à partir de la fonction de Lagrange et de l'homogénéité de l'espace, que l'impulsion totale  $\vec{P}$  du système, qui est la somme des impulsions de tous ses points matériels, est conservée :

$$\vec{P} = \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i \quad (\text{I-4})$$

L'isotropie de l'espace donne lieu, à son tour, à la troisième loi de conservation : celle du moment cinétique total  $\vec{M}$  d'un système fermé :

$$\vec{M} = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{P}_i \quad (\text{I-5})$$

Ainsi, un système fermé possède en tout sept intégrales : l'énergie, et les trois composantes de chacun des vecteurs impulsion et moment cinétique, et ceci quel que soit le nombre des points matériels du système étudié.

Donc, indépendamment du nombre des équations du mouvement que nous avons à résoudre afin de déterminer l'état exact du système à tout instant  $t$  (ce qui nécessitent  $(2S-1)$  intégrales indépendantes de mouvement), le nombre des intégrales du mouvement est limité à sept au maximum (pour un système fermé). C'est cela qui rend, en général, le problème très délicat.

Ainsi, ce que nous avons discuté ci-dessus montre deux choses : **(i)** la mécanique classique peut traiter, en principe, des problèmes comme les problèmes de collisions entre des particules chargées ; électrons, protons, ions...etc. Et **(ii)** que ce traitement ne peut pas nous fournir des solutions exactes (sauf pour les quelques cas les plus simples) des équations du mouvement, et qu'il nous faut nous contenter de travailler avec des solutions approchées.

Au niveau de la mécanique quantique, on peut arriver à un résultat semblable. D'un côté, la mécanique quantique est basée, en quelque sorte, sur la mécanique classique, malgré la différence de formulation entre les deux, et malgré le contenu différent attribué aux grandeurs physiques, qui ont perdu, en mécanique quantique, leur certitude initiale pour laisser la place aux nouvelles notions de densité de probabilité, et de fonction d'onde...etc. D'un autre côté, les lois de conservation sont vérifiées, à leur tour, en mécanique quantique malgré le principe d'incertitude s'y trouvant (défini par la relation de Heisenberg). Et enfin, comme en mécanique classique, la mécanique quantique n'a pu nous fournir des solutions exactes des problèmes quantiques que dans les cas les plus simples, car les solutions exactes des équations de Schrödinger deviennent impossibles pour des systèmes composés de plus de deux particules.

Ainsi, nous arrivons à la conclusion suivante : quelle que soit la mécanique utilisée, classique ou quantique, pour étudier les problèmes de la physique des collisions les solutions exactes sont, en général, impossibles, donc les solutions approchées sont inévitables.

## I.2. Définitions basiques :

Avant d'entrer dans la discussion concernant les approximations et les différents types de modèles traitant les collisions, nous allons d'abord définir les termes et les outils qu'utilise la théorie des collisions.

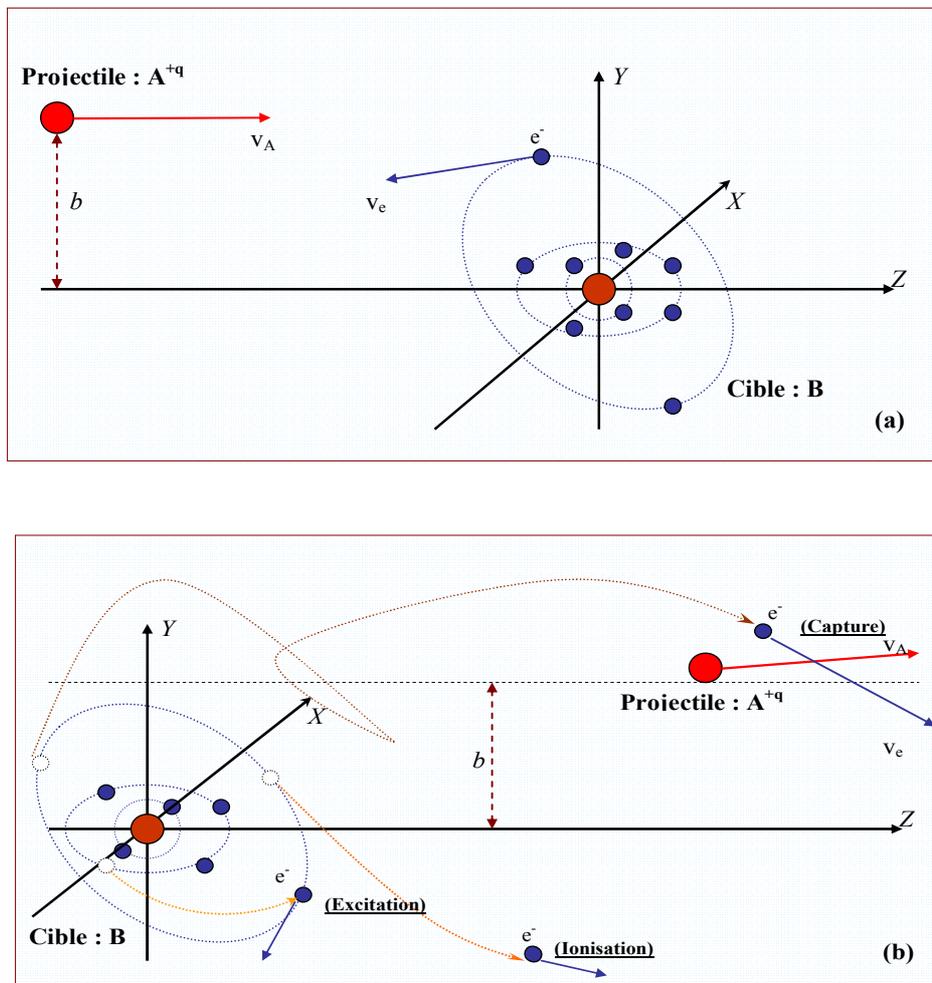


Figure (I-1) : Illustration schématique d'une collision.

(a) : Voie d'entrée.

(b) : Voie de sortie, les processus possibles.

### I.2.1. Collision :

Nous avons donné, ci-dessus, la définition d'une collision, mais dans notre cas les systèmes étudiés sont composés des particules élémentaires, soit : électron, noyaux, ions, molécule, agrégat d'atomes ou de molécules.

Les collisions typiques impliquent, *généralement*, deux particules  $A$  et  $B$ , où  $B$  est considéré fixe, c'est la **cible**,  $A$  est en mouvement, c'est le **projectile**. Ces collisions, entre  $A$  et  $B$ , sont classées en trois types principaux :

- *Diffusion élastique :*

Ici, les deux systèmes ne subissent aucun changement dans leur structure interne, seule la trajectoire change. Ce type de collision est exprimé selon l'équation :



- *Diffusion inélastique :*

Ici,  $A$  et (ou)  $B$  subissent des changements dans leur structure interne, ou état quantique. Nous pourrions écrire :



Où les étoiles sont pour désigner la (les) particule(s) qui a (ont) subi des changements internes.

- *Diffusions réactives :*

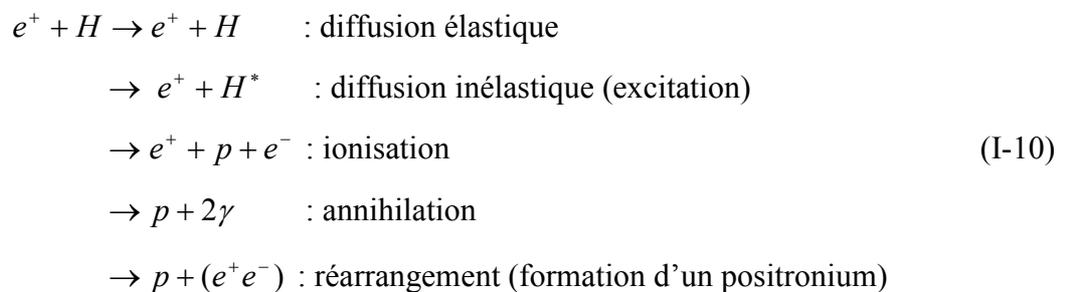
Ici, le système initial composé de  $A$  et  $B$  donne lieu à un autre système final composé d'autres particules ( $C, D, \text{etc.}$ ) :



Ce type de réactions est aussi appelé « Collision de réarrangement » [Joa.], car il se produit à cause d'un échange d'un, ou de plusieurs, des composants des particules ( $A$  et  $B$ ) initialement impliquées en collision.

### I.2.2. Voies de sortie :

Par ailleurs, il peut y avoir plusieurs modes de fragmentation, ou de réarrangement, possibles, et ceci donne lieu au concept de « Voie de sortie » qui présente une des possibilités de fragmentation ou de réarrangement collisionnels du système. Par exemple, pour une collision entre un positron  $e^+$  comme projectile, et un atome d'hydrogène comme cible, on peut avoir plusieurs voies de sortie comme :



En fait, le concept de voie de sortie n'est pas toujours sans ambiguïté, car, par exemple, si on ne fait pas la distinction, dans la voie de sortie, entre une cible excitée ou non excitée on peut considérer les deux premières voies de sortie de (I-10) comme une seule voie. Donc, la détermination des voies n'est pas indépendante de ce que nous voulons étudier [Joa.].

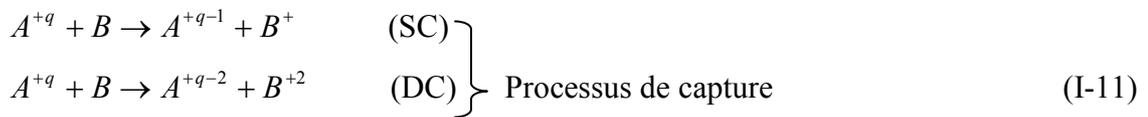
Dans ce mémoire, nous sommes intéressés, principalement, à trois types de processus collisionnels. En fait, les collisions que nous allons étudier sont du type des diffusions *inélastiques avec réarrangement* qui font intervenir des ions positifs multichargés, comme projectiles, et des atomes ou des molécules, comme cibles. Ces *trois principaux processus* sont :

(i)- ***La capture*** : Ici, un ou plusieurs électrons de la cible se retrouvent liés au projectile. Dans le cas où un seul électron est capturé on parle d'une «*Simple Capture - SC*», si deux électrons sont capturés on parle de «*Double Capture – DC*»...etc.

(ii)- **L'ionisation** : ici, un ou plusieurs électrons de la cible sont éjectés par le projectile et deviennent des particules libres. Comme dans le cas précédent, on peut parler d'une « *Simple Ionisation – SI* » pour un électron ionisé, ou d'une « *Double Ionisation – DI* » pour deux électrons...etc.

(iii)- **Transfert-Ionisation (TI)** : dans ce processus de collision nous avons, simultanément, un électron capturé et un autre ionisé.

Nous pouvons récapituler l'ensemble de ces processus dans les équations suivantes :



On peut noter que, bien que le processus d'excitation, correspondant aux changements d'état quantique d'un ou plusieurs électrons de la cible (sans être capturés ou ionisés), soient traitables, en principe, par les modèles classiques, il n'aura pas d'intérêt particulier dans ce mémoire.

### I.2.3. Section efficace :

Le terme «*Section Efficace*» est un des termes les plus répandus, et les plus importants, dans la théorie des collisions. Il exprime les résultats d'une collision, ou, autrement dit, la probabilité que l'on trouve un certain type d'événement conduisant à un processus donnée. Il est défini comme : «*le rapport du nombre d'événements de ce type par unité de temps et par unité de diffuseur, au flux relatif des particules incidentes*» [Joa.].

Nous allons travailler, principalement, avec la « *section efficace totale* », que nous allons illustrer plus précisément. Prenons le cas (voir *fig.3-2*) d'une collision d'un flux  $\Phi_A$  de particules incidentes de type  $A$ , dont la vitesse est  $v_i$ , sur une cible composée des particules de type  $B$ , dont le nombre des diffuseurs, sur lesquels interagit le flux des particules incidentes, est  $n_B$ . Dénotons par  $N_{tot}$  le nombre des particules du type  $A$ , qui ont interagi avec les diffuseurs de la cible et induit un processus, par unité de temps. Ainsi, La section efficace totale  $\sigma_{tot}$ , selon cette définition-là, s'écrit comme :

$$\sigma_{tot} = \frac{N_{tot}}{\Phi_A n_B} \quad (\text{I-14})$$

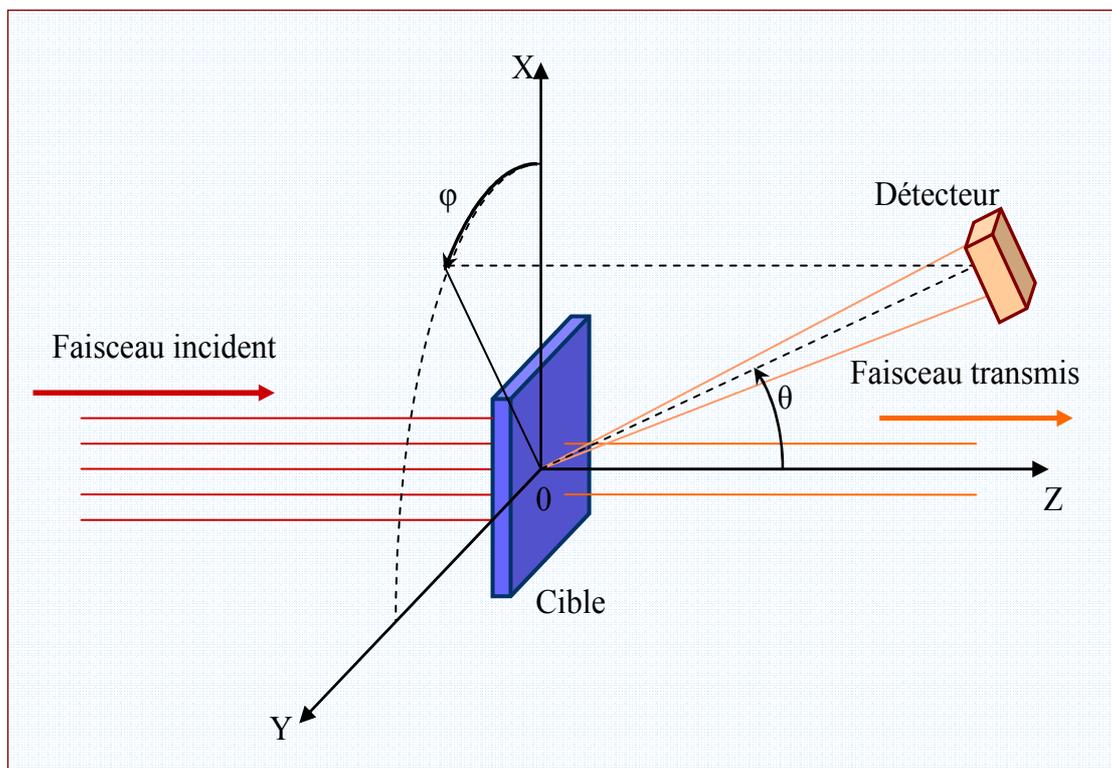


Figure (I-2) : Illustration schématique d'une expérience de collision.

La probabilité  $P_{tot}$  qu'une particule incidente interagisse avec un des diffuseurs cibles s'écrit comme :

$$P_{tot} = \frac{N_{tot}}{N_A} \quad (\text{I-15})$$

Où  $N_A$  est le nombre de toutes les particules, de type  $A$ , incidentes sur la cible par l'unité de temps. Donc, nous pouvons facilement vérifier le lien direct entre la section efficace et la probabilité  $P_{tot}$  via la relation :

$$P_{tot} = \hat{N}_B \sigma_{tot} \quad (\text{I-16})$$

où  $\hat{N}_B$  représente la densité superficielle moyenne des particules  $B$  dans la cible.

A partir de la relation-définition (I-14), nous pouvons estimer la dimension de la section efficace totale (surface). L'unité utilisée pour ce type de « section efficace » pour des collisions ion-atome ou ion-molécule est basée sur le premier *rayon de Bohr*  $r$  qui est environ  $5.3 \cdot 10^{-9} \text{ cm}^2$ , et qui correspond à une surface  $\pi \times r^2 \approx 10^{-16} \text{ cm}^2$ , et, donc, les « sections efficaces totales » sont de cet ordre de grandeur.

Il existe aussi d'autres mesures, pour exprimer des résultats plus détaillés, des collisions ; *les sections efficaces différentielles*. Si, par exemple, nous nous intéressons non seulement à la probabilité d'une certain type d'interaction, mais aussi à la distribution angulaire des particules à l'issue de cette collision, dans ce cas la section efficace différentielle  $\sigma_{dif}(\theta, \varphi)$  est définie à partir de  $\sigma_{tot}$  par :

$$\sigma_{dif}(\theta, \varphi) = \frac{d\sigma_{tot}}{d\Omega(\theta, \varphi)} \quad (\text{I-17})$$

Où  $\Omega(\theta, \varphi)$  représente l'angle solide correspondant à la direction finale du projectile après la collision.

#### **I.2.4 Domaines d'énergies :**

Les mesures expérimentales des processus d'échange de charge, d'ionisation, d'excitation, *etc.*, pour des collisions ion-atome ou ion-molécule, se font sur une gamme d'énergies

cinétiques des projectiles (appelée aussi : *énergie d'impact ou de collision*), allant de quelques eV/uma jusqu'à plusieurs centaines de MeV/uma. Mais, on peut faire une très claire distinction entre deux principaux domaines énergétiques : les « *faibles énergies d'impact* » et les « *grandes énergies d'impact* ». Le critère utilisé pour faire cette distinction est : le rapport entre la vitesse du projectile, et les vitesses orbitales ( $v_0$ ) des électrons dans la cible [Bra.1]. Autrement dit, l'énergie cinétique d'un projectile ayant une vitesse plus petite que la *vitesse typique orbitale* de l'électron de la cible est considérée dans le domaine des faibles énergies, sinon elle est considérée comme étant dans le domaine des grandes énergies. Normalement, nous prenons cette *vitesse typique orbitale*  $v_0$  comme celle de l'électron de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental ( $1s$ ), qui présente aussi *l'unité atomique des vitesses*. Par exemple, pour un proton, comme projectile d'une vitesse  $v$  -en unité atomique-, l'énergie  $E$  (en keV/uma) égale à

$$E = 25v^2 \quad (\text{I-18})$$

Ainsi, l'énergie :  $E=25 \text{ keV/uma}$ , sépare les deux domaines d'énergies « faibles » et « grandes ».

Ceci n'est pas une simple distinction formelle, car elle ne distingue pas seulement deux différents types de résultats (sections efficaces), mais elle concerne aussi les critères et les limites des approximations qu'on peut adopter pour le traitement théorique des problèmes de collisions.

En fait, il est relativement facile de donner la justification, au niveau des approximations, d'un tel genre de distinction ; car, concernant le domaine des *faibles énergies*, la vitesse du projectile est faible, donc les mouvements orbitaux des électrons cibles deviennent très rapides par rapport au mouvement relatif du projectile et de la cible, ceci nous permet de faire des approximations dans lesquelles se trouve la possibilité de regarder le projectile comme étant immobile, donc, au niveau des approximations quantiques, on peut traiter la fonction d'onde du système comme étant une superposition des fonctions d'ondes représentant la pseudo-molécule formée des électrons et des noyaux de la cible et du projectile, ou par une superposition des fonctions d'ondes atomiques centrées autour de chaque noyau [Bra.1].

Dans le domaine des *grandes énergies*, nous avons l'inverse : le mouvement du projectile devient plus rapide que celui des électrons cibles, ce qui permet, au niveau quantique, de traiter le processus de la collision comme étant une sorte de perturbation de la fonction d'onde du système cible.

On utilise aussi le terme « énergies intermédiaires » qui correspond aux énergies dont la valeur est située proche de celle séparant les deux domaines de faible et haute énergie. Cela donc correspond aux énergies allant de quelques unes à quelques dizaines de keV/uma.

Dans ce mémoire, le domaine d'énergies qui nous intéresse est, principalement, le domaine des hautes énergies, allant de quelques dizaines de keV/uma jusqu'à quelques MeV/uma (en fonction du système étudié). En fait, c'est le domaine d'énergie pour lequel notre modèle est valide (comme nous allons le voir ci-après).

## *Chapitre II*

### **Modèles Classiques**

Dans ce chapitre, nous discutons de la description classique des collisions, ion-atome ou ion-molécule, et nous en présenterons quelques modèles classiques.

Nous avons mentionné dans le chapitre précédent que notre problème constitue un des problèmes les plus importants de la mécanique classique, soit de décrire, à tout instant, la position de chaque particule. Nous avons déjà parlé des difficultés concernant la résolution des équations différentielles du mouvement. Mais l'évolution rapide dans le domaine de l'informatique, surtout ces deux dernières décennies, nous a donné la possibilité de réétudier, numériquement, beaucoup des questions scientifiques qui nécessitent des calculs longs.

Mais, en fait, pouvoir résoudre ces équations du mouvement n'est pas suffisant pour solutionner un problème de collisions de type ion-atome ou molécule, car il faut, en premier lieu, déterminer les conditions initiales du problème. En effet, en mécanique quantique, celles-ci sont contenues implicitement dans les fonctions d'onde du système, tandis que, en mécanique classique nous devons échantillonner celles-ci. Donc, il nous faut introduire une (des) méthode(s) d'approximation(s) pour simuler les fonctions d'ondes, et la nature probabiliste des conditions initiales. Nous allons discuter, par la suite, ces diverses méthodes.

Nous devons encore affronter la question des critères de choix des différents processus collisionnels (ionisation, capture, etc.). Si, de plus, nous nous intéressons au calcul des sections efficaces différentielles, nous aurons besoin de définir d'autres critères pour représenter les «conditions finales» (contenues implicitement en mécanique quantique par les fonctions d'onde décrivant le système), et que nous aurons à utiliser dans le modèle classique. Nous allons discuter plus précisément ces critères, qui, suivant le modèle adopté

pour représenter les conditions initiales (ou finales), peuvent influencer notablement les résultats obtenus.

## II.1. Caractéristiques générales d'un modèle classique :

Malgré la grande diversité des modèles classiques pour simuler des collisions, nous pouvons donner certains aspects généraux qui caractérisent presque tous ces modèles. En fait, ils sont basés sur les remarques suivantes :

- a.* Les mouvements des particules sont gouvernés par les lois classiques de Newton.
- b.* La représentation des conditions initiales du système (en particulier la distribution spatiale ou énergétique des électrons de la cible) a une nature plus ou moins quantique (selon le modèle).
- c.* Critères, de nature classique ou semi-classique, pour déterminer le type de processus ionisant (ionisation, capture, etc.).
- d.* Aspect statistique de traitement des résultats pour obtenir les sections efficaces.

Nous devons faire une remarque importante, c'est que les deux aspects (*b* et *c*), qui déterminent les conditions initiales et finales, sont plus ou moins quantiques, et jouent, en général, le rôle principal pour distinguer les modèles classiques les uns des autres.

## II.2. Modèles CTMC (Classical Trajectory Monte Carlo) :

La première étude du genre CTMC a été faite en 1936 par Hirschfelder *et al.* pour la réaction ( $H-H_2$ ) (voir [Ols.1]), mais l'absence de moyen de calcul ne leur a permis que de calculer une seule trajectoire. En fait, cette méthode a été pratiquement introduite dans les années soixante par Karplus *et al.* [Kar.], et par Abrines et Percival [Abr.1, 2] pour étudier des collisions ion-atome. Dans les théories purement classiques précédentes au modèle CTMC,

deux hypothèses de base ont été faites : **(i)** Les particules obéissent aux lois Newtoniennes durant la collision, **(ii)** les collisions de multi-particules ont été approchées par des collisions de type deux-corps pour chaque électron de l'atome cible. Dans le modèle CTMC d'Abrines et Percival, seule l'hypothèse **(i)** a été retenue, ce qui a permis de traiter classiquement des collisions de type trois-corps d'une façon plus précise, il a été repris et amélioré par Olson et Salop [Ols.1] et enfin optimisé par Cohen [Coh.]. Il a été appliqué avec succès dans beaucoup de problèmes [Ols.2], [Ban.], [Pea.], [Pas.], [Per.], [Bec.], [Err.1] et [Err.2].

Cette méthode est basée sur des intégrations numériques des systèmes soumis à des interactions mutuelles de type Coulombien. Elle consiste en trois étapes : (1) reproduction classique de la distribution électronique initiale dans la cible, (2) intégration numérique des équations de mouvements Newtoniennes, et (3) classification des différents processus après la collision via un choix de critères.

Comme une partie du modèle CTMC est proche de ce que nous avons développé, nous allons un peu détailler un exemple comme la réaction *ion+hydrogénoïde*.

### II.2.1 Représentation classique de la distribution électronique initiale :

Celle-ci repose sur la connaissance des positions et des quantités de mouvement électronique. Le choix de ces conditions initiales se fait à partir d'un ensemble de paramètres aléatoires qui peuvent donner une distribution classique possible dans l'espace de phase du système. Abrines et Percival [Abr.1] ont montré la possibilité d'utiliser l'équation de Kepler du mouvement planétaire pour représenter les conditions initiales de l'atome d'hydrogène par un groupe de paramètres déterminés aléatoirement. Ces paramètres sont ceux qui décrivent la géométrie de l'orbitale classique ; comme les angles et l'excentricité. L'énergie  $E_0$  de liaison de l'électron dans la cible, pour un certain état  $n$ , a été fixée par exemple selon la relation de Bohr  $E_0 = -1/2n^2$  pour l'atome d'hydrogène.

Prenons, donc, l'exemple de la réaction entre un ion  $A$  et un atome d'hydrogène (ou un hydrogénoïde) composé d'un noyau  $B$  et d'un électron  $C$ , avec les charges  $Z_A$ ,  $Z_B$  et  $Z_C=-1$ , respectivement (voir [Ols.1] et [Coh.]). Pour simplifier le traitement, on utilise les *coordonnées généralisées*  $C_j$  (où  $j = 1, 2, \dots, 9$ ), où  $C_1, C_2, C_3$  représentent les coordonnées Cartésiennes de l'électron  $C$  par rapport à  $B$ ,  $C_4, C_5, C_6$  représentent les coordonnées

Cartésiennes du projectile  $A$  par rapport au centre de masse de  $(B + C)$ , et  $C_7, C_8, C_9$  représentent les coordonnées Cartésiennes du centre de masse total du système. De la même manière, nous pouvons exprimer les composantes des vecteurs de quantité de mouvement par  $P_j$  (où  $j = 1, 2, \dots, 9$ ). Les coordonnées initiales de l'électron, par rapport au noyau de la cible, sont exprimées en coordonnées sphériques  $R_e, \theta$  et  $\varphi$  :

$$\left. \begin{aligned} C_1^0 &= R_e \sin \theta \cos \varphi, \\ C_2^0 &= R_e \sin \theta \sin \varphi, \\ C_3^0 &= R_e \cos \theta. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-1})$$

où  $R_e$  est la distance entre  $B$  et  $C$ , et  $\theta$  et  $\varphi$  sont aléatoires. De même, les composantes du vecteur  $\vec{P}_e$  de quantité du mouvement *relative* de l'électron  $C$  par rapport à la particule  $B$  sont calculées, en introduisant un paramètre  $\eta$  aléatoirement choisi entre  $-\pi$  et  $\pi$ , via:

$$\left. \begin{aligned} P_1^0 &= -P_e (\sin \varphi \cos \eta + \cos \varphi \cos \theta \sin \eta), \\ P_2^0 &= P_e (\cos \varphi \cos \eta - \sin \varphi \cos \theta \sin \eta), \\ P_3^0 &= P_e \sin \varphi \sin \eta. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-2})$$

Où  $P_e$  est la magnitude de  $\vec{P}_e$ .

Pour l'état  $1s$  de l'atome d'hydrogène, qui a une symétrie sphérique, Abrines et Percival l'ont représenté par un ensemble micro-canonique. Ainsi, pour chaque orbitale aléatoirement sélectionnée, il faut résoudre par itération l'équation de Kepler :

$$\theta_n = u - \epsilon \sin u \quad (\text{II-3})$$

où  $u$  est l'angle excentrique et  $\epsilon$  est l'excentricité de l'orbitale.  $\theta_n$  et  $\epsilon$  sont choisis aléatoirement. Pour  $\theta_n$  et  $\epsilon$  donnés, l'angle  $u$  est trouvé itérativement.

Donc, le calcul de  $R_e$  et  $P_e$  devient possible via :

$$\left. \begin{aligned} R_e &= (Z_B / 2E_0)(1 - \epsilon \cos u) \\ P_e &= (2E_0)^{1/2}(1 - \epsilon^2 \cos^2 u)^{1/2} / (1 - \epsilon \cos u) \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-4})$$

Où  $E_0$  est l'énergie de liaison (en unité atomique) de l'électron ( $C$ ).

Pour chaque trajectoire les six paramètres seront choisis aléatoirement :

$$\left. \begin{aligned} -\pi \leq \varphi \leq \pi; \quad -1 \leq \cos \theta \leq 1; \quad -\pi \leq \eta \leq \pi \\ 0 \leq \epsilon^2 \leq 1; \quad 0 \leq \theta_n \leq 2\pi; \quad 0 \leq b^2 \leq b_{\max}^2. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-5})$$

où  $b$  est le paramètre d'impact de collision, et  $b_{\max}$  est la valeur maximale pour laquelle une ionisation ou une capture est possible. Le choix de  $b_{\max}$  se fait par des calculs tests. Si  $b_{\max}$  est trop grand le nombre de trajectoires à calculer augmente fortement.

Pour les conditions initiales du projectile, nous pouvons simplifier en choisissant l'axe  $z$  en direction de sa vitesse relative initiale  $v_{rel}$ , ainsi, nous avons :

$$\left. \begin{aligned} P_4^0 = P_5^0 = 0, \\ P_6^0 = \left( \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B + m_C} \right) v_{rel}. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-6})$$

où  $m_A$ ,  $m_B$  et  $m_C$  sont, respectivement, les masses de  $A$ ,  $B$  et  $C$ . De plus, si nous imposons au projectile  $A$  et au centre de masse de  $(B+C)$  de se trouver dans le plan  $(y,z)$ , nous pouvons écrire :

$$\left. \begin{aligned} C_4^0 = 0, \quad C_5^0 = b, \\ C_6^0 = -(R_0^2 - b^2)^{1/2} \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-7})$$

où  $R_0$  est la distance initiale entre  $A$  et le centre de masse de  $(B+C)$ . Cette distance dépend de la charge  $Z_A$  du projectile  $A$  avec comme condition d'être *suffisamment grande pour garantir l'indépendance des sections efficaces calculées de la position initiale du projectile*. Celle-ci est, typiquement, choisie  $\geq 10 Z_A u.a.$ .

### II.2.2 Intégration numérique :

Après avoir fixé les conditions initiales via les relations II-1 à II-7, les trajectoires du système seront déterminées via les 12 équations couplées suivantes :

$$\left. \begin{aligned}
 \dot{C}_j &= \left( \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_C} \right) P_j, \quad (j = 1, 2, 3), \\
 \dot{C}_j &= \left( \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B + m_C} \right) P_j, \quad (j = 4, 5, 6), \\
 \dot{P}_j &= \frac{m_C}{m_B + m_C} \left( \frac{m_C}{m_B + m_C} C_j + C_{j+3} \right) \left( \frac{Z_A Z_C}{R_1^3} \right) + C_j \left( \frac{Z_B Z_C}{R_2^3} \right) \\
 &+ \frac{m_B}{m_B + m_C} \left( \frac{m_B}{m_B + m_C} C_j - C_{j+3} \right) \left( \frac{Z_A Z_C}{R_3^3} \right), \quad (j = 1, 2, 3), \\
 \dot{P}_j &= \left( \frac{m_C}{m_B + m_C} C_{j-3} + C_j \right) \left( \frac{Z_A Z_B}{R_1^3} \right) - \left( \frac{m_B}{m_B + m_C} C_{j-3} - C_j \right) \left( \frac{Z_A Z_C}{R_3^3} \right), \quad (j = 4, 5, 6).
 \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-8})$$

où les distances  $R_1$ ,  $R_2$  et  $R_3$  représentent, respectivement, celles entre  $(A$  et  $B)$ ,  $(B$  et  $C)$  et  $(A$  et  $C)$ , ces distances peuvent être exprimées en fonction des coordonnées  $C_j$  par :

$$\left. \begin{aligned}
 R_1 &= \left[ \left( \frac{m_C}{m_B + m_C} C_1 + C_4 \right)^2 + \left( \frac{m_C}{m_B + m_C} C_2 + C_5 \right)^2 + \left( \frac{m_C}{m_B + m_C} C_3 + C_6 \right)^2 \right]^{1/2}, \\
 R_2 &= (C_1^2 + C_2^2 + C_3^2), \\
 R_3 &= \left[ \left( \frac{m_B}{m_B + m_C} C_1 - C_4 \right)^2 + \left( \frac{m_B}{m_B + m_C} C_2 - C_5 \right)^2 + \left( \frac{m_B}{m_B + m_C} C_3 - C_6 \right)^2 \right]^{1/2}.
 \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-9})$$

L'intégration numérique du mouvement se fait, pour une distribution initiale, un paramètre d'impact et autres paramètres aléatoires fixés, en calculant les trajectoires classiques de toutes les particules, pour un pas de temps  $\Delta t$  convenablement choisi. La distance internucléaire initiale est fixée à une valeur suffisamment grande pour que les forces d'interaction Coulombiennes entre le projectile et la cible soient négligeables. Tandis que le choix de la distance de séparation finale nécessite qu'elle soit suffisamment grande pour respecter deux conditions [Ols.1] : **(i)** que l'interaction entre  $A$  et  $B$  soit négligeable, **(ii)** que l'électron choisisse son processus (capturé, recapturé ou ionisé). Cette distance est typiquement de l'ordre de  $10^4$  u.a. ou  $(1000Z_A \text{ u.a.})$ , en fonction de la charge  $Z_A$  du projectile.

### II.2.3 Critères finaux et sections efficaces :

Après avoir calculé une trajectoire concernant une valeur de  $b$ , ce qui est répété un grand nombre de fois, nous vérifions l'état de l'électron ; si il est lié au projectile, une capture est comptée ; si il se trouve encore lié à la cible, aucun processus à compter ; ou si il n'est ni lié à la cible ni au projectile, l'électron est ionisé (Voir [Ols.1] et [Kar.]).

Soit  $N_{tot}$  le nombre de toutes les trajectoires calculées pour une valeur de  $b$ , et  $N_i$  le nombre des cas où on a compté un processus de type  $i$  parmi ces  $N_{tot}$  trajectoires-là. Ainsi, la section efficace totale  $\sigma_i$  (pour le processus  $i$ ) sera calculée par l'intégrale :

$$\sigma_i = 2\pi \int_0^{b_{\max}} P_i(b) b db \quad (\text{II-10})$$

où  $i$  est pour désigner un processus (ionisation, capture, etc.), et  $P_i(b)$  exprime la probabilité du processus  $i$  (pour le paramètre d'impact  $b$ ), donnée par :

$$P_i(b) = \frac{N_i}{N_{\text{tot}}} \quad (\text{II-11})$$

Pour la capture, il est possible de *quantifier* l'état correspondant à l'énergie de liaison  $E_P$  de l'électron par rapport au projectile en utilisant la relation :

$$E_P = -\frac{Z_A^2}{2n_C} \quad (\text{II-12})$$

où  $n_C$  correspond au nombre quantique principale de l'état. Ce nombre  $n_C$  n'est, en général, pas entier. Les auteurs utilisent la règle suivante pour déterminer  $n$  :

$$[n(n-1/2)(n-1)]^{1/3} \leq n_C \leq [n(n+1/2)(n+1)]^{1/3} \quad (\text{II-13})$$

D'autres règles existent, aussi, pour le calcul des nombres quantiques angulaires  $l$  ([Ols.3] et [Ols.4]).

#### II.2.4 Validité des modèles CTMC :

Nous avons indiqué les grandes lignes du modèle CTMC au cas des systèmes collisionnels de type *ions nus* avec un hydrogéoïde, mais cette méthode est applicable à des systèmes plus compliqués. Les résultats obtenus avec ce modèle (voir *Figures II-1, a et b*), sont comparables aux résultats des modèles quantiques beaucoup plus sophistiqués, comme le modèle de Close-Coupling [III.], surtout dans le domaine d'énergies intermédiaires. Il est à

remarquer que : **(i)** le traitement devient de plus en plus difficile pour les systèmes les plus compliqués, **(ii)** par contre, la fiabilité de la Méthode CTMC fait qu'elle est souvent la seule source d'informations sur beaucoup de processus collisionnels [Ost.].

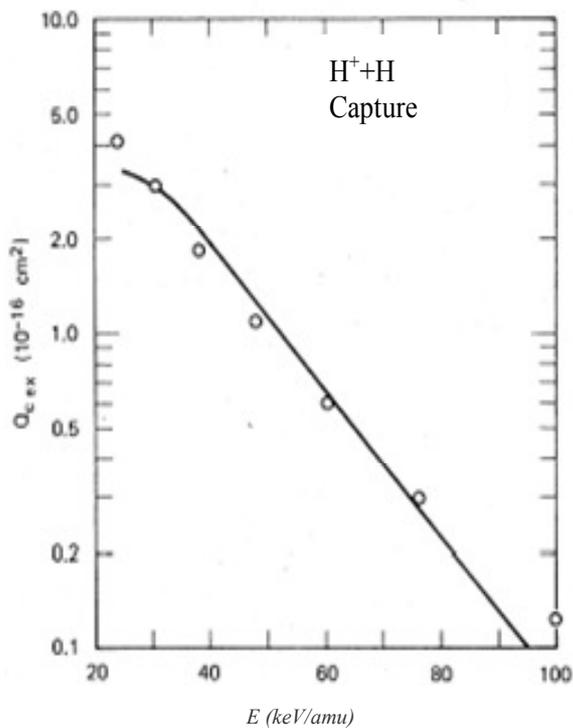


Figure (II-1-a)

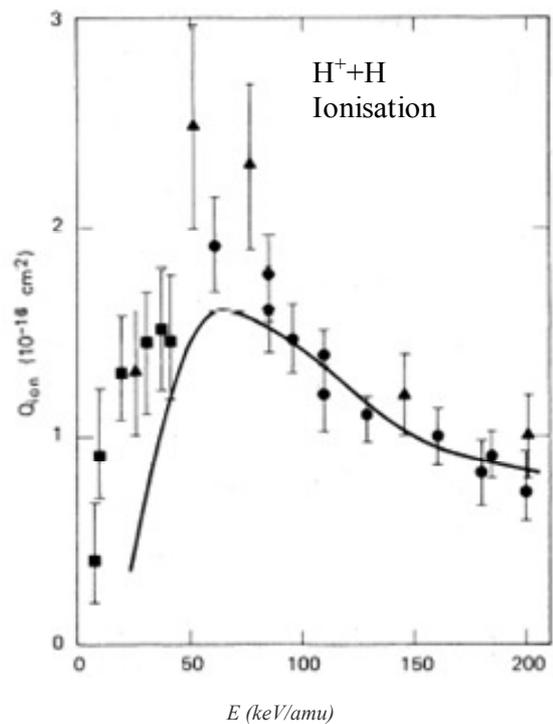


Figure (II-1-b)

Résultats du modèle CTMC (ligne solide) de Olson et Salop [Ols.1] pour des sections efficaces totales pour la collision  $H^+ + H$ . Figure (II-1-a) : « Capture » : (circle) McClure [McC.]; Figure (II-1-b) : « Ionisation » : (carré) Fite *et al.* [Fit.]; (cercle) Gilbody et Ryding [Gil.]; (triangle) Park *et al.* [Par.].

### II.3. Modèles COB (Classical Over-Barrier) :

Vers le début des années 80 [Nie.], avec l'abondance des résultats expérimentaux, et faute d'un traitement quantique valide, pour les systèmes collisionnels qui impliquent plusieurs électrons actifs, il était d'importance de trouver un nouveau traitement.

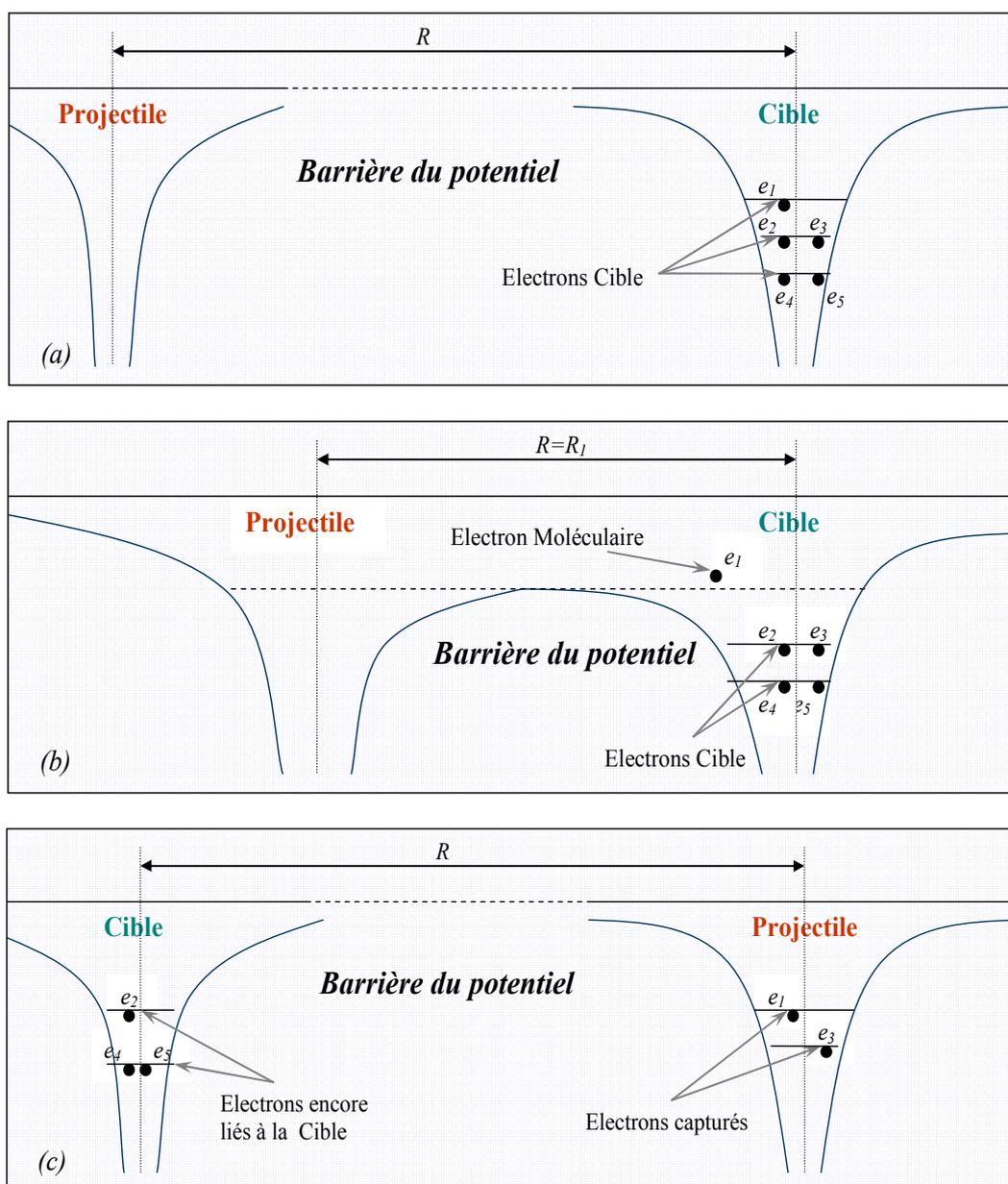


Figure (II-2) ; « Schémas d'un processus de capture dans un modèle COB » :

- (a) : Avant la collision ; haute barrière de potentiel, interaction négligeable.
- (b) : Durant la collision ; baisse de la barrière de potentiel, interaction possible.
- (c) : Après la collision ; à nouveau, haute barrière de potentiel, interaction négligeable des électrons qui ont été capturés par le projectile.

Le premier modèle COB a été introduit par Bohr-Lindhardt en (1954) ([Ost.] et [Bra.1]), mais, pratiquement, le vrai commencement des modèles COB était avec les travaux de H. Ryufuku *et al* (1980) [Ryu.], et puis avec Bárány *et al* en (1985) (voir [Ost.]) pour traiter la capture multiélectronique. Ce modèle a été repris et amélioré par Niehaus en (1986). Plusieurs autres versions ont été développées sur la base des travaux de Bárány *et al*, et Niehaus. Parmi celles-ci se trouvent le modèle d'Ostrovky [Ost.] et le modèle de F. Sattin ([Sat.1] et [Sat.2]).

### II.3.1 Modèle COB mono-électronique de Bohr-Lindhardt [Bra.2]:

Soit un système collisionnel composé d'un projectile ionique nu  $A$  d'une charge  $Z_A$ , et une cible hydrogénoïde composée d'un noyau  $B$ , d'une charge  $Z_B$ , et un électron. Le processus de capture se fait en deux étapes : **(i)** libération de l'électron de son orbitale autour  $B$ , **(ii)** sa capture par le projectile  $A$ .

L'énergie initiale de liaison de l'électron dans la cible (à  $t=-\infty$ ) est :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z_B^2}{n^2} \quad (\text{II-14})$$

où  $n$  est le nombre quantique principal. L'approche du projectile va modifier l'énergie initiale de l'électron :

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Z_B^2}{n^2} - \frac{Z_A}{R} \quad (\text{II-15})$$

où  $R$  est la distance internucléaire. Le deuxième terme correspond, en fait, à l'effet Starck. Soit un point sur l'axe internucléaire, entre  $A$  et  $B$ , et à une distance  $y$  par rapport à  $B$ , l'énergie potentielle vue de l'électron (*Figure II.3*) :

$$V(y) = -\frac{Z_B}{y} - \frac{Z_A}{R-y} \quad (\text{II-16})$$

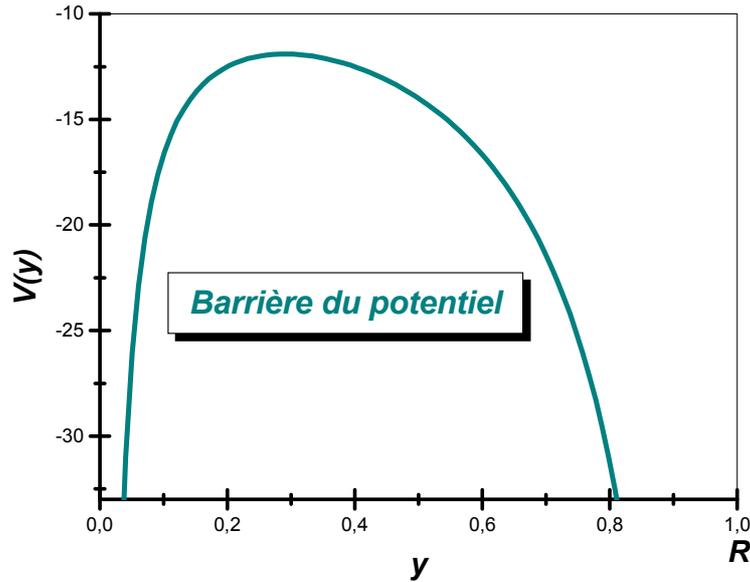


Figure (II-3) : Exemple d'une barrière du potentiel  $V(y)$  donné par l'équation (II-16).

Le potentiel  $V(y)$  se présente comme une barrière si  $y$  est entre  $B$  et  $A$  (voir figure II-3) où le sommet de cette barrière survient pour  $y = y_m$  donné par :

$$y_m = \frac{Z_B^{\frac{1}{2}} R}{Z_A^{\frac{1}{2}} + Z_B^{\frac{1}{2}}}, \quad (\text{II-17})$$

avec le potentiel correspondant donné par :

$$V(y_m) = -\frac{1}{R} \left( Z_A^{\frac{1}{2}} + Z_B^{\frac{1}{2}} \right)^2 \quad (\text{II-18})$$

La libération de l'électron devient possible quand son énergie donnée par (II-15) devient égale ou supérieure au sommet de barrière de potentiel donné par (II-18), ce qui correspond à une certaine distance  $R_l$  donnée par :

$$R_l = \frac{2n^2 \left( Z_B + 2Z_A^{\frac{1}{2}} Z_B^{\frac{1}{2}} \right)}{Z_B^2} \quad (\text{II-19})$$

Pour le cas où  $Z_A \gg Z_B$ ,  $R_1$  s'écrit :

$$R_1 \approx \frac{4n^2 Z_A^{\frac{1}{2}}}{Z_B^{\frac{3}{2}}} \quad (\text{II-20})$$

La capture, ne sera possible que si l'énergie de liaison entre l'électron et le projectile est, au moins, équivalente à son énergie cinétique *relative* par rapport au projectile. La vitesse correspondante est donnée par  $v_r$ , la vitesse de  $A$  par rapport à  $B$ . Ainsi, pour une certaine distance internucléaire  $R=R_2$  nous avons :

$$-\frac{Z_A}{R_2} + \frac{1}{2}v_r^2 = 0 \quad (\text{II-21})$$

soit

$$R_2 = \frac{2Z_A}{v_r^2} \quad (\text{II-22})$$

Donc, nous pouvons distinguer deux cas :

(i)  $R_2 < R_1$ , correspondant aux hautes énergies d'impact. Cela survient pour  $v_r$  suffisamment grande, et où la section efficace de capture peut être exprimée comme une section efficace géométrique  $\pi R_2^2$ . Mais, on peut remarquer que pour le cas où  $R_2 < R < R_1$ , l'électron sera considéré comme libéré sans être capturé. Pour tenir compte de telles situations, la section efficace géométrique est multipliée par un certain poids correspondant à la probabilité que l'électron soit libéré avant d'être capturé. Cette probabilité est considérée comme le rapport entre le temps de la collision ( $R_2/v_r$ ), et la période de l'électron sur son orbitale initiale ( $a_n/v_n$ ), où  $a_n$  est le rayon de l'orbitale et  $v_n$  la vitesse de l'électron sur cet orbital. Ainsi, la section efficace de capture sera :

$$\sigma_1^C = 8\pi Z_A^3 \left( \frac{v_n}{a_n} \right) v_r^{-7} \quad (\text{II-23})$$

(ii)  $R_2 > R_1$ , cela correspond aux faibles énergies d'impact, Bohr et Lindhardt considèrent que seule la capture intervient, ainsi, la section efficace de capture est :

$$\sigma_2^C = \pi R_1^2 \approx \frac{16\pi n^4 Z_A}{Z_B^3} \quad (\text{II-24})$$

La figure (II-4) montre un exemple des sections efficaces de capture obtenues avec ce modèle simple, elles sont satisfaisantes vu la simplicité du modèle.

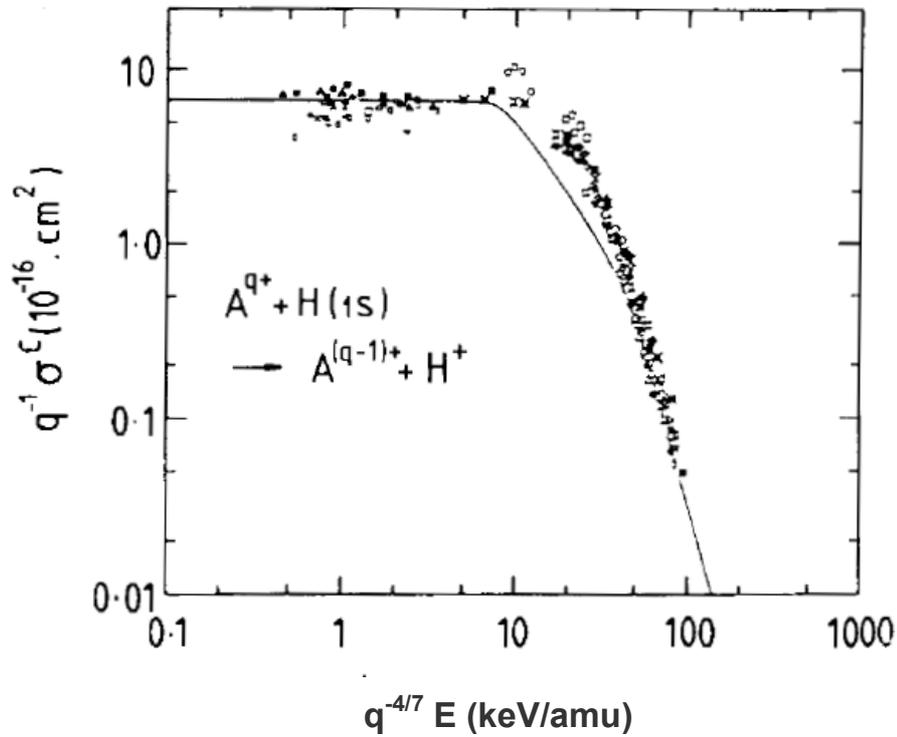
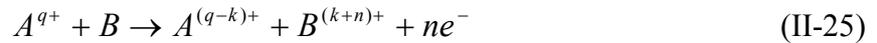


Figure (II-4) : Sections efficaces totales de capture pour des collisions ( $A^{+q}+H$ ), avec  $q$  entre 4 et 13. Courbe solide correspond au modèle de Bohr-Lindhardt, les résultats expérimentaux donnés dans [Knu.].

### II.3.2 Modèle COB multiélectroniques de Bárány *et al.* [Bárá.]:

Bárány *et al.* [Bárá.] ont développé une approche d'une nature statistique et géométrique pour estimer les sections efficaces totales des processus multi-ionisants pour des collisions de faibles énergies d'impact entre des ions et des cibles multiélectroniques. Cette approche, comme celle de Bohr-Lindhardt, ne fait aucun recours au calcul de trajectoires.

Supposons la collision suivante



où  $q$ ,  $k$  et  $n$  sont des entiers. On considère que le transfert du premier électron se passe du cœur de la cible d'une charge  $z=I$  vers un ion (projectile) d'une charge  $q$ , et que cela arrive quand la barrière de potentiel entre les deux puits attractifs devient plus petite que l'énergie de liaison de l'électron après avoir pris en compte l'effet Starck. Nous avons

$$I + q/R = (q^2 + 1)^2 / R \quad (\text{II-26})$$

où :  $I$  est le potentiel d'ionisation du cœur de la cible, et  $R$  est le rayon caractéristique de la capture qui est donné, à partir de l'équation précédente, par

$$R = \frac{(2q^2 + 1)}{I} \quad (\text{II-27})$$

d'où la section efficace totale de la capture

$$\sigma = \pi R^2 \quad (\text{II-28})$$

La généralisation de ces relations-là, pour prendre en compte les processus *multi-ionisants*, (sans entrer beaucoup dans les détails) est faite (voir [Bárá.]) en définissant des nombres ( $m=1, 2, 3, \dots, N$ ) et des rayons  $R_m$  donnés par :

$$R_m = [2(q - m + 1)^{1/2} m^{1/2} + m] / I_m \quad (\text{II-29})$$

nous pouvons, ainsi, exprimer les sections efficaces totales pour les différents processus multi-ionisants comme

$$\left. \begin{aligned} \sigma_1 &= \pi(R_1^2 - R_2^2), \\ \sigma_2 &= \sum_{k=1}^2 \sigma_q^0 \quad \quad \quad = \pi(R_2^2 - R_3^2), \\ &\dots\dots\dots \\ \sigma_m &= \sum_{k=1}^m \sigma_q^0 \quad \quad \quad = \pi(R_m^2 - R_{m+1}^2), \\ &\dots\dots\dots \\ \sigma_N &= \sum_{k+n \geq N}^N \sigma_q^0 \quad \quad \quad = \pi R_N^2. \end{aligned} \right\} \quad (\text{II-30})$$

où  $\sigma_q^0 \quad \quad \quad$  est la section efficace des processus simultanés de la capture de  $k$  électron par le projectile tandis que la cible a perdue  $m$  électrons, ainsi,  $\sigma_1$  correspond à la simple capture,  $\sigma_2$  correspond soit à la double capture soit à la somme des processus simultanés de la simple capture et la simple ionisation, etc.

Les résultats de l'application de cette approche simple, obtenus en utilisant les équations (II-29) et (II-30), sur des collisions  $Ar^{+q} + Ar$  (avec  $q$  entre 4 et 8) sont donnés dans le *tableau 1*, aussi que les données expérimentales correspondantes. Nous remarquons un accord satisfaisant avec l'expérience.

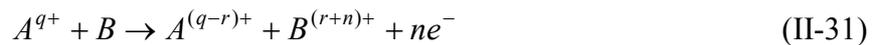
Nous avons à réaffirmer que ce modèle a une nature statistique et statique, et qu'il est applicable pour des faibles énergies d'impact où le processus dominant est la capture, et où les sections efficaces sont peu variables en fonction de l'énergie.

$q$	$m=1$		$m=2$		$m=3$		$m=4$		$m=5$	
	<i>Exp.</i>	<i>Théo.</i>								
4	32	<b>25</b>	15	<b>16</b>	4	<b>13</b>	–	–	–	–
5	26	<b>29</b>	17	<b>18</b>	13	<b>15</b>	1	<b>7</b>	–	–
6	39	<b>32</b>	22	<b>20</b>	14	<b>17</b>	7	<b>7</b>	–	–
7	57	<b>36</b>	28	<b>23</b>	13	<b>19</b>	12	<b>7</b>	4	<b>6</b>
8	53	<b>40</b>	26	<b>25</b>	21	<b>21</b>	11	<b>8</b>	13	<b>6</b>

Tableau 1 (tiré de [Bára.]) : Sections efficaces totales des processus multi-ionisants (en  $10^{-16} \text{ cm}^2$ ) pour des collisions entre des projectiles  $Ar^{q+}$ , de faibles énergies d'impact et des atomes de  $Ar$ . La charge du projectile varie entre 4 et 8. (*Théo.*) : Résultats du modèle COB défini par les équations (II-29, 30) ; (*Exp.*) : données expérimentales.

### II.3.3 Modèle COB multiélectronique de Niehaus :

Comme dans le modèle précédent, le modèle COB de Niehaus a aussi une nature statistique et statique. Soit un système collisionnel identique à celui donné par *éq.*(II-25) que nous réécrivons :



A  $t = -\infty$ , le projectile se trouve loin de cible, de la sorte qu'il existe une *barrière* de potentiel (voir *figure II-2*) qui rend classiquement impossible le transfert des électrons de la cible vers le projectile, mais au fur et à mesure de l'avancement du projectile, cette barrière va baisser. A partir d'une certaine distance internucléaire  $R_l$ , l'électron le plus faiblement lié  $e_l$  devient *moléculaire* (ceci signifie simplement que l'électron va avoir la possibilité de tourner autour de n'importe lequel des deux noyaux), et aura une certaine probabilité  $W_l$  d'être capturé (passer au projectile). Plus le projectile se rapproche de la cible plus il est possible que d'autres électrons ( $e_2, e_3, \dots$ ) 'deviennent' *moléculaires*, et chacun d'entre eux aura une certaine probabilité pour être capturé. Cette probabilité dépend de son énergie de liaison, de l'interaction avec le projectile et les autres électrons *déjà 'créés'* (ce mot signifie simplement

que l'électron devient actif), aussi que du temps dans lequel cette possibilité de transfert existe. Le projectile, en continuant son déplacement, va faire, à nouveau, remonter la barrière de potentiel, après avoir dépassé le point correspondant à la distance d'approche minimale, ce qui rediminue la possibilité de transfert électronique entre la cible et le projectile, jusqu'à ce que cette possibilité redevient nulle.

Le calcul de la section efficace du processus de capture est de nature statistique, il se fait en introduisant le concept du *micro-état*. Par exemple, pour un calcul concernant la capture de  $r$  électrons, parmi les  $N$  électrons (numérotés de 1 à  $N$  selon leurs croissantes énergies de liaison) initialement liés à la cible, il y a  $\binom{N}{r}$  combinaisons possibles de capturer. Par exemple, pour  $N=6$ ,  $r=2$ , un *micro-état*

$$(j) = (1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0) \quad (\text{II-32})$$

où (1) correspond à une capture et (0) à une recapture par la cible. La section efficace de capture de  $r$  électrons sera la somme de toutes les sections efficaces partielles concernant chacun des micro-états possibles

$$\sigma_r = \sum_{(j)} \sigma_r^{(j)} \quad (\text{II-33})$$

Les sections efficaces partielles peuvent s'exprimer en termes de : **(i)** distance  $R_i$  pour laquelle l'électron  $i$  devient actif, **(ii)** probabilités  $W_i$  et  $(1-W_i)$  pour ce que l'électron actif  $i$  soit, respectivement, capturé ou recapturé. Ce calcul est inspiré du précédent modèle de Bárány *et al.*. Par exemple, pour le micro-état donné par (II-32), la section efficace est

$$\sigma_r^j = \sum_{i=1}^{i_{\max}} A_i P_i^j \quad (\text{II-34})$$

où  $i_{\max}$  est le plus petit de  $N$  et  $q$ ,  $A_i$  sont des sections efficaces géométriques données par les équations (II-30) du modèle de Bárány *et al.*, et les probabilités  $P_i^j$  sont données par :

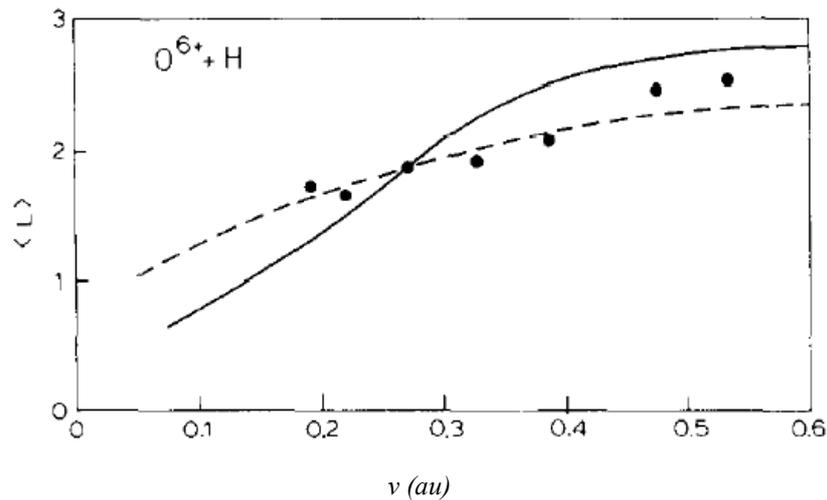
$$P_i^j = \begin{cases} 0 & \text{pour } i < i_0 = 3 \\ W_1^j (1 - W_2^j) W_3^j & \text{pour } i = i_0 = 3 \\ W_1^j (1 - W_2^j) W_3^j \prod_{i_0+1}^{i_{\max}} (1 - W_i^j) & \text{pour } i_0 < i \leq i_{\max} \end{cases} \quad (\text{II-35})$$

où  $i_0$  est l'ordre de l'électron le *plus lié* dans le micro-état considéré, et les probabilités  $W_i^j$  sont données par :

$$W_i^j = (n_i^j)^2 [(n_i^j)^2 + (m_i^j)^2]^{-1} \quad (\text{II-36})$$

avec  $n_i^j$  et  $m_i^j$  les nombres quantiques principaux pour l'électron  $i$ , respectivement, dans le cas de capture et de recapture. Voir [Nie.] pour plus de détails.

Le modèle de Niehaus a été amélioré pour étudier des aspects quantiques plus détaillés concernant les processus d'échange de charge (voir, par exemple, [Bur.]). La *figure* (II-5) montre un exemple des résultats de ce modèle.



*Figure (II-5) :* Calculs, par un modèle COB [Bur.], de la valeur moyenne du moment angulaire  $\langle L \rangle$ , en fonction de la vitesse du projectile  $v$ , pour le processus de capture, pour la collision  $O^{6+} + H \rightarrow O^{5+} (n=4) + H^+$ . Courbes, solide et hachurée ; deux différents calculs COB (voir [Bur.]); Données expérimentales de Dijkkamp *et al.* (cercles) [Cir.].

### II. 3.4 Modèle COB d'Ostrovsky :

Ce modèle est conçu pour décrire d'une manière simple les caractéristiques les plus importantes des comportements des trajectoires électroniques et ceci pour des collisions dans le domaine des énergies faibles et intermédiaires [Ost.].

L'idée de ce modèle, est la description analytique et géométrique du processus d'échange de charge, cela le différencie du modèle de Niehaus, dans lequel cette description-là a un aspect plus statistique.

Pour l'illustrer, nous allons prendre le cas le plus simple : l'échange de charge dans une collision entre un proton  $A$  et un atome d'hydrogène de noyau  $B$ .

Du point de vue de l'électron, le potentiel Coulombien  $U(\vec{r}, \vec{R})$  des deux autres ions induit deux puits de potentiel, qui sont séparés par une barrière, dont le sommet constitue un point de selle. Ce potentiel est donné par

$$U(\vec{r}, \vec{R}) = -\frac{1}{r} - \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}|} \quad (\text{II-37})$$

où  $\vec{r}$  et  $\vec{R}$  sont, respectivement, les vecteurs de position de l'électron et du projectile  $A$  par rapport à  $B$ . Dans l'espace ( $3D$ ), les deux puits de potentiel forment deux surfaces fermées (voir *Figure II-6*) qui peuvent s'intégrer pour former une seule surface fermée durant une certaine période de la collision, ce qui peut permettre l'échange de charge via l'*ouverture* entre les deux puits.

La probabilité pour que l'électron soit capturé dépend de plusieurs critères : la grandeur de l'*ouverture*, et le temps de son ouverture, mais aussi, du niveau quantique de l'électron dans la cible.

Pour préciser ce modèle, exprimons la situation des (figures 6 - [3 à 12]) en coordonnées cylindriques, et un plan qui contient l'axe internucléaire (voir *Figure II-7*). Dans ce plan, l'équation (II-37) s'écrit, en coordonnées cylindriques, sous la forme suivante :

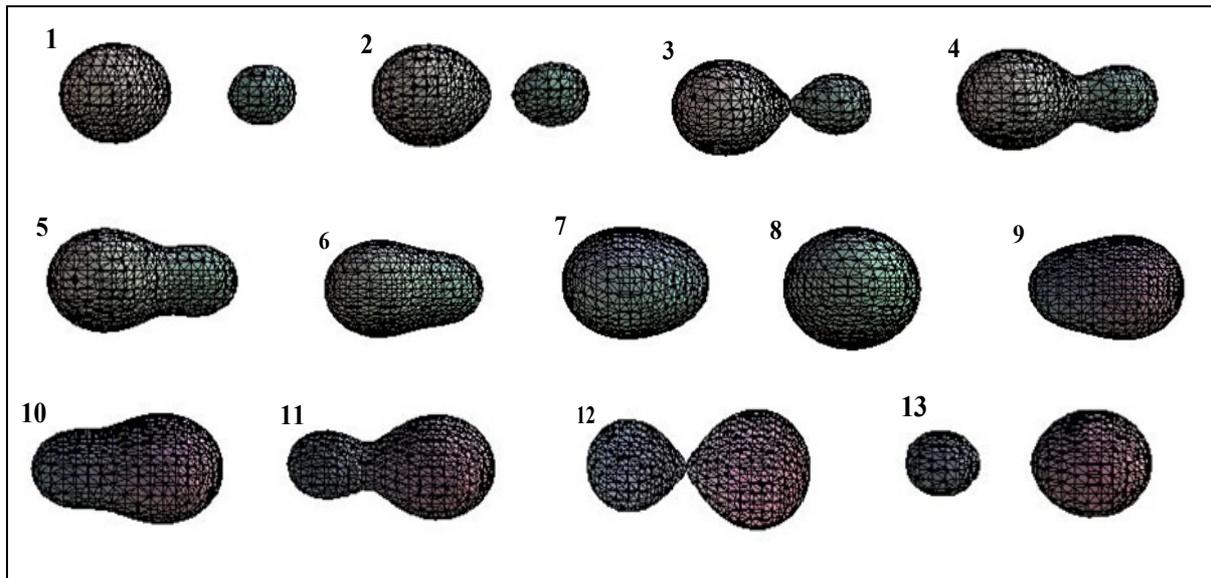


Figure (II-6) : représentation schématique en 3D des puits de potentiel pendant la collision, selon le modèle COB d'Ostrovsky.

$$U(\vec{r}, \vec{R}) = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (R/2)^2}} \quad (\text{II-38})$$

Initialement, l'électron se trouve dans un certain niveau quantique  $n$  avec une énergie de liaison  $E_n$ . A l'approche du projectile son niveau énergétique initial va être corrigé par l'effet Starck, et s'écrit :

$$E(R) = -E_n - \frac{\xi}{R} \quad (\text{II-39})$$

où  $\xi$  est un paramètre numérique entre 0 et 1.

Pour  $R$  donnée, nous pouvons calculer le rayon de la fenêtre d'ouverture  $\rho_m$ , en fonction de  $R$  et  $E_n$ , à partir de (II-38) et (II-39), nous obtenons :

$$\rho_m = R \left( \frac{4}{(E_n R + \xi)^2} - \frac{1}{4} \right)^{1/2} \quad (\text{II-40})$$

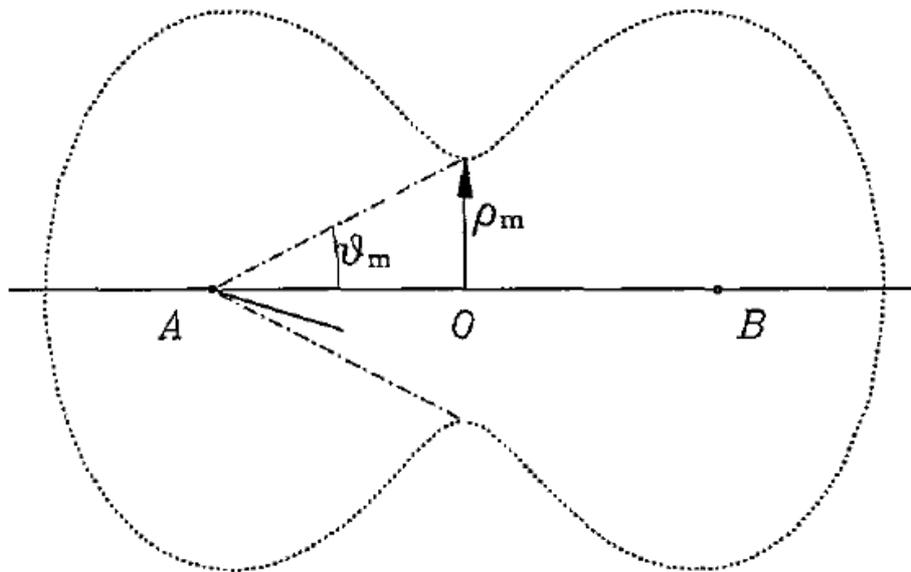


Figure (II-7) : La géométrie des calculs, concernant le modèle COB d'Ostrovsky, pour une collision proton-H. La courbe pointillée représente une section de la surface de l'équipotentiel  $U=E$  avec un plan contenant l'axe AB.

L'angle maximal de l'ouverture, vue par  $B$  (ou, aussi, par  $A$ , pour ce cas symétrique), peut être exprimé, à son tour, en fonction de  $R$  et  $E_n$  comme :

$$\cos \vartheta_m = \frac{1}{4} (E_n R + \xi) \quad (\text{II-41})$$

Ainsi, selon ce modèle, l'échange de charge peut être décrit par une sorte de « fuite des trajectoires classiques » de l'électron via cette ouverture.

Pour le calcul de la probabilité d'échange de charge (ou la fuite électronique, selon l'expression d'Ostrovsky), il faut : **(i)** pouvoir représenter les trajectoires électroniques classiques pour l'état quantique concerné, **(ii)** trouver un moyen pour calculer analytiquement le rapport des trajectoires qui puissent passer par l'ouverture, parmi tous les trajectoires possibles.

Dans le cas symétrique ( $H^+ + H$ ), l'atome d'hydrogène, dans son état initial ( $1s$ ), est présenté par un *ensemble* de trajectoires électroniques elliptiques d'excentricité  $1$ , i.e. des lignes droites. La déformation de cet ensemble, due à l'approche du projectile, sera négligée. Ces trajectoires sont orientées aléatoirement, et seule une *fraction*  $N_\Omega$  d'entre elles a une chance de *passer* par l'ouverture ; celles qui sont *orientées* vers l'ouverture :

$$N_\Omega = \frac{1}{2}(1 - \cos \vartheta_m). \quad (\text{II-42})$$

Si nous exprimons par  $W(t)$  la probabilité de trouver l'électron dans le puits qui correspond à son état initial, nous obtenons après un temps  $dt$ , une diminution de la probabilité due à la fuite de trajectoires, s'écrivant :

$$dW(t) = -N_\Omega \frac{dt}{T} W \quad (\text{II-43})$$

où  $T$  est la période de l'électron sur son orbital. Ainsi, la probabilité de fuite est :

$$P = 1 - W(\infty) = 1 - \exp\left(-\frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} N_\Omega dt\right) \quad (\text{II-44})$$

L'intervalle important est  $|t| < t_m$  qui correspond au temps d'ouverture entre les deux puits.

En utilisant (II-40) à (II-44), et dans le cas d'une *trajectoire rectiligne* ( $R = \sqrt{b^2 + v^2 t^2}$ ), nous pouvons simplifier l'intégration analytique (dans l'éq. II-44), et obtenir :

$$\int_{-\infty}^{\infty} N_\Omega dt = \frac{1}{8v} \left[ (4 - \xi) z_m - E_n b^2 \ln \frac{z_m + (4 - \xi)/E_n}{b} \right] \quad (\text{II-45})$$

où :

$$z_m = vt_m = \sqrt{\left(\frac{4 - \xi}{E_n}\right)^2 - b^2} \quad (\text{II-46})$$

Ici,  $z_m$  est la coordonnée  $z$  (parallèle à la direction de la collision) correspondante à la disparition de l'ouverture (*i.e.* :  $\rho_m = 0$ ), et calculé à partir de (II-40) en y posant  $\rho_m = 0$ , tandis que  $z=0$  correspond à la distance d'approche minimale.

La probabilité  $P$  (donnée par éq. II-44) concerne le passage de l'électron du puits de la cible à celui du projectile. Mais en prenant en compte la possibilité que l'électron retourne au puits de la cible (avant la disparition de l'ouverture), la probabilité recherchée, pour ce cas symétrique, s'écrit [Ost.] :

$$P = \frac{1}{2} \left[ 1 - \exp \left( - \frac{2}{T} \int_{-\infty}^{\infty} N_{\Omega} dt \right) \right] \quad (\text{II-47})$$

Enfin, la section efficace s'écrit en fonction de  $P$  (donnée par éq. II-47) comme :

$$\sigma = 2\pi \int_0^{b_{\max}} P b db \quad (\text{II-48})$$

Ostrovsky a développé des calculs semblables pour des cas non symétriques (voir [Ost.]). Pour avoir une idée des résultats, que ce modèle peut nous fournir, voir *Figure (II-8)* (tirée de [Ost.]), qui compare les probabilités  $P(b).b$  (en fonction de paramètre d'impact  $b$ ) avec celles obtenues avec un modèle CTMC, où on peut remarquer un accord bon entre les deux modèles.

Mais, il est à noter que le traitement devient de plus en plus compliqué pour les systèmes les plus compliqués, et les résultats ne sont pas toujours aussi satisfaisants (voir [Ost.]). De plus, le paramètre  $\xi$  peut influencer largement les résultats, et son origine et sa valeur ne sont pas déterminées de manière satisfaisante.

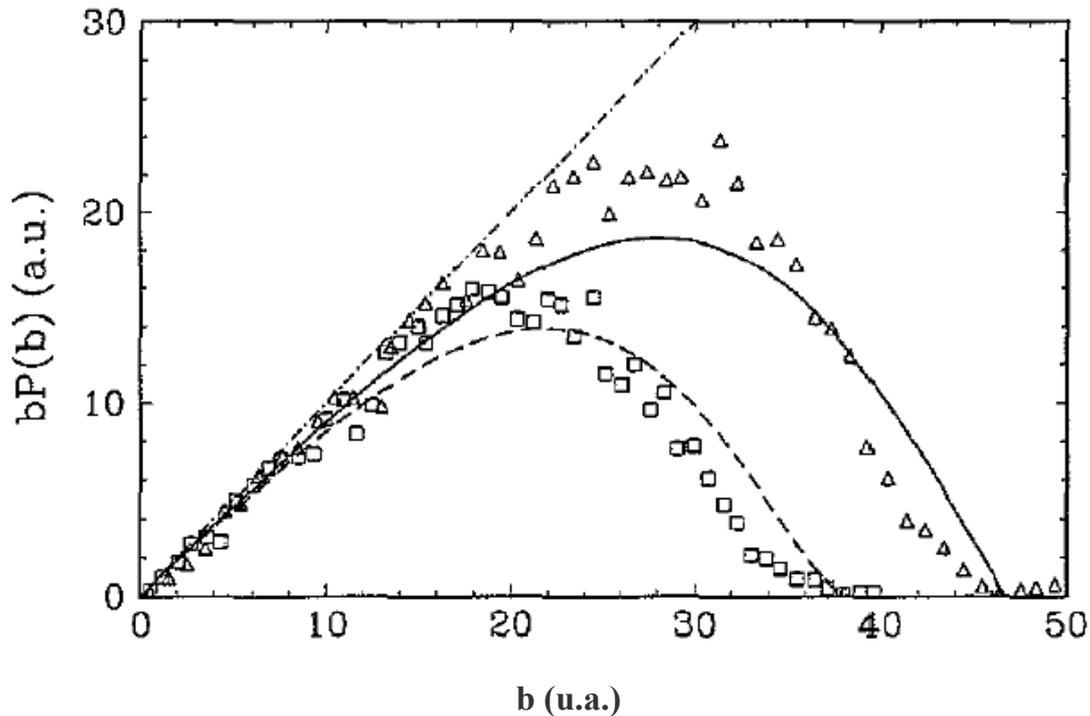


Figure (II-8) : Probabilité d'échange de charge du modèle COB d'Ostrovsky : (i)  $N^{5+} + Cs(6s)$  (dash) pour vitesse de collision 0.894 (u.a.) ; (ii)  $Ar^{3+} + Cs(6s)$  (solide) pour vitesse de collision 0.529 (u.a.). (triangles) et (carrés) résultats CTMC de pascale *et al.* [Pas.]. La ligne (dash-dot) correspond à une probabilité  $P=1$ .

### II.3.5 Modèle COB de Sattin :

Le modèle COB développé par F. Sattin ([Sat.1 à 3]) se base sur le modèle précédent d'Ostrovsky. Bien que ce modèle ait été conçu, principalement, pour traiter des collisions simples de type ion nu sur des cibles atomiques à un seul électron actif, il contient des améliorations intéressantes au niveau du traitement analytique classique et au niveau des types de processus. Soit :

(i) Concernant l'énergie initiale totale  $E$  de l'électron, Sattin fait une distinction entre deux cas : 1) Si la distance internucléaire  $R$  est très grande ; nous utilisons (II-39), 2) Si  $R$  est très petite (*que le modèle d'Ostrovsky avait négligées*), le système (noyaux + électron actif) devient moléculaire, donc, Sattin fait une approximation sur l'énergie initiale totale :  $E(R) \rightarrow (Z_p + 1)^2 E_n$ , où  $Z_p$  représente la charge du projectile.

(ii) Concernant le calcul de la probabilité  $W(t)$  (éq. II-43), Sattin donne une expression pour la période  $T_e$ , qui peut être appliquée même pour  $l > 0$ , et qui peut prendre en considération l'influence de l'approche du projectile [Sat.2] :

$$T_e = \sqrt{2} \int_{r^-}^{r^+} \frac{dr}{\sqrt{\frac{1}{r} - E - \frac{l(l+1)}{2r^2}}} \quad (\text{II-49})$$

où  $r^+$ ,  $r^-$  représentent les points de retour de l'électron sur son orbitale, donnés par :

$$r^\pm = \frac{1 \pm \sqrt{1 - 2E l(l+1)}}{2E} \quad (\text{II-50})$$

(iii) Une troisième amélioration importante, concerne la possibilité de traiter, non seulement la capture, mais aussi, l'ionisation, et cela via l'expression suivante de l'énergie de liaison de l'électron  $E'_n$  par rapport au projectile :

$$E'_n = E_n + \frac{Z_p - 1}{R} - \frac{v^2}{2} + v_e v \cos \theta \quad (\text{II-51})$$

où  $\theta$  désigne l'angle entre les deux vitesses : de l'électron  $\vec{v}_e$ , et du projectile  $\vec{v}$ . Ainsi, selon l'angle  $\theta$ , l'énergie  $E'_n$  peut être positive (ionisation) ou négative (capture).

La *Figure (II-9)* (tirée de [Sat.2]) montre un exemple des résultats de ce modèle pour le cas  $I^{+q} + Cs$ , elle donne des sections efficaces de capture en fonction de la charge du projectile  $Z_p$ , pour une très faible énergie d'impact (où la capture est presque indépendante de l'énergie d'impact).

Malgré les résultats relativement satisfaisants, et malgré l'aspect analytique très intéressant de ce modèle, nous avons des remarques semblables à celles du modèle d'Osrovsy en ce qui concerne la difficulté rapidement croissante pour le traitement des cas les plus compliqués.

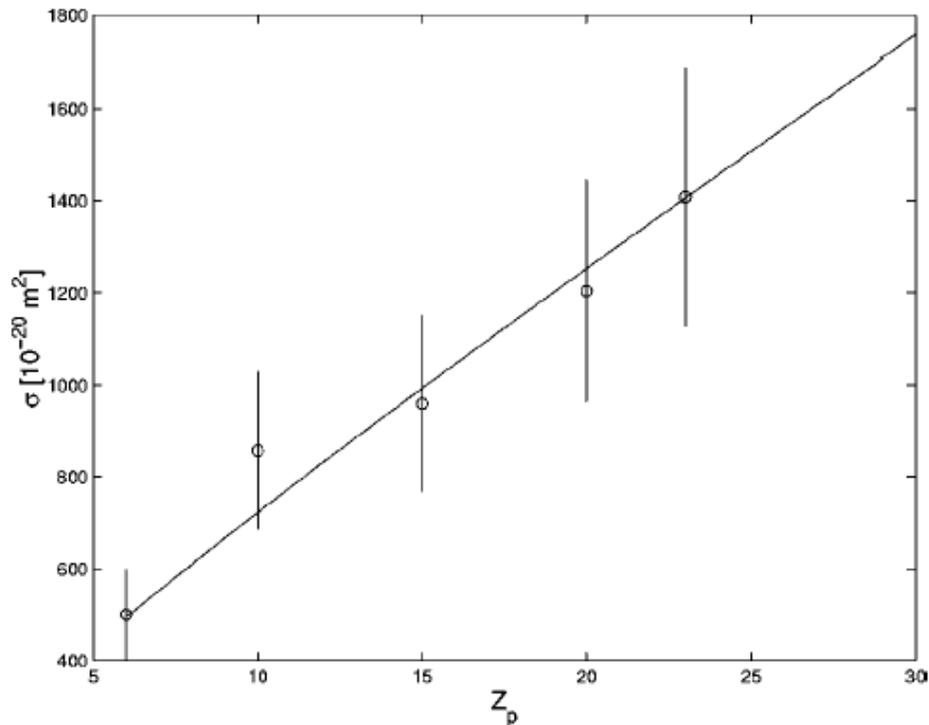


Figure (II-9) [Sat.2] : Sections efficaces de capture pour des collisions de type  $I^{+q} + Cs$ , en fonction de la charge du projectile, pour une très faible énergie d'impact. Ligne solide ; modèle COB de Sattin, cercles avec barres d'erreur de 20% [Sat.2].

### II.3.6. Validité des modèles COB :

En général, les modèles COB sont conçus pour traiter les processus collisionnels dont l'énergie d'impact est relativement faible (pour laquelle la capture est le processus dominant quasi indépendamment de l'énergie d'impact). Les résultats obtenus avec ces modèles sont relativement bons au vu leur simplicité relative.

En ce qui concerne les systèmes collisionnels, étudiés via COB, nous pouvons constater qu'il dépend du modèle : le modèle de Niehaus a été conçu pour le traitement des systèmes impliquant plusieurs électrons actifs, tandis que les autres modèles (d'Ostrovsky et de Sattin) sont efficaces pour un seul électron actif.

## II.4. Conclusion :

Pour conclure ce chapitre consacré à montrer quelques modèles classiques de type CTMC et COB, nous pouvons dire que dans la plupart de ces modèles l'aspect statistique est très présent, et cela pour représenter la nature probabiliste qui se trouve implicitement dans les fonctions d'onde dans le traitement quantique, bien que ces modèles aient, presque toujours, un certain côté quantique, surtout dans les modèles CTMCs pour représenter les conditions initiales de la cible.

En ce qui concerne le domaine de validité : *(i)* au niveau d'énergie d'impact, les modèles classiques semblent donner des meilleurs résultats dans le domaine des énergies faibles et intermédiaires ; *(ii)* au niveau des systèmes étudiés, le traitement des problèmes collisionnels devient rapidement de plus en plus difficile : pour représenter les conditions initiales (cas des modèles CTMC), et pour le traitement statistique ou analytique (cas des modèles COB). Une difficulté supplémentaire pour les modèles COB, par rapport aux CTMC, est que la détermination du type de processus ionisant nécessite un traitement particulier pour chaque cas.

Enfin, il faut noter que le développement rapide de l'informatique semble favoriser ce genre de traitements classiques des problèmes collisionnels, surtout, en vue des résultats obtenus (Voir, par exemple, [Ill.] et [Ost.]), et cela dans le domaine des énergies d'impact faibles et intermédiaires.

# *Partie II*

Dans cette partie, nous présentons notre modèle et nos résultats. Elle est composée de trois chapitres (*III*, *IV* et *V*). Le premier est consacré à la présentation détaillée du modèle, le deuxième et le troisième présentent et discutent nos résultats pour les systèmes de type ion-atome (pour les cibles : *H* et *He*) et de type ion-molécule (pour les cibles : *H<sub>2</sub>*, *H<sub>2</sub>O*, *Adénine* et *Cytosine*).



# *Chapitre III*

## **Présentation de notre modèle**

### **III.1. Introduction :**

Notre modèle est un modèle classique qui combine des aspects appartenant à deux autres modèles classiques : CTMC et COB. En effet, il consiste à :

(i) calculer un grand nombre de trajectoires classiques pour des collisions ions-atomes ou molécules, où les mouvements de toutes les particules impliquées sont gouvernés par les lois de Newton,

(ii) déterminer pour chaque trajectoire, via certains critères, les types de processus ionisants obtenus.

Bien que ce modèle soit partiellement inspiré du papier de B. Zarour et U. Saalman (2003) [Zar.], plusieurs modifications essentielles y ont été introduites, en particulier ce qui concerne : le potentiel d'interaction, les conditions initiales, et les critères finaux déterminant les différents processus ionisants. Nous allons montrer et discuter ces modifications dans les paragraphes suivants.

Une autre différence importante, par rapport au travail de Zarour et Saalman [Zar.], concerne le domaine d'énergie d'impact, en effet, nous nous sommes intéressés au domaine des grandes énergies, tandis que ceux de Zarour et Saalman [Zar.] portent sur le domaine des faibles énergies.

### III.2. Théorie :

Prenons le cas du système ion  $A$  de charge  $Z_A$  comme projectile, et un atome neutre (bien que le traitement d'une cible non-neutre soit aussi possible) comme cible  $B$  (composée d'un noyau de charge  $Z_B$ , et de  $Z_B$  électrons).

Nous appelons une 'simulation' le calcul numérique qui commence et qui se termine à une distance internucléaire  $R_A$  suffisamment grande et qui est définie par : la vitesse du projectile  $\vec{v}_A$ , le paramètre d'impact  $b$  et quelques autres conditions initiales aléatoires de la cible.

Au début d'une simulation la cible se trouve à l'origine des coordonnées du système de laboratoire, dont l'axe des  $z$  est dirigé dans la direction de la vitesse initiale du projectile se trouvant dans le plan  $YOZ$  (Figure III-1).

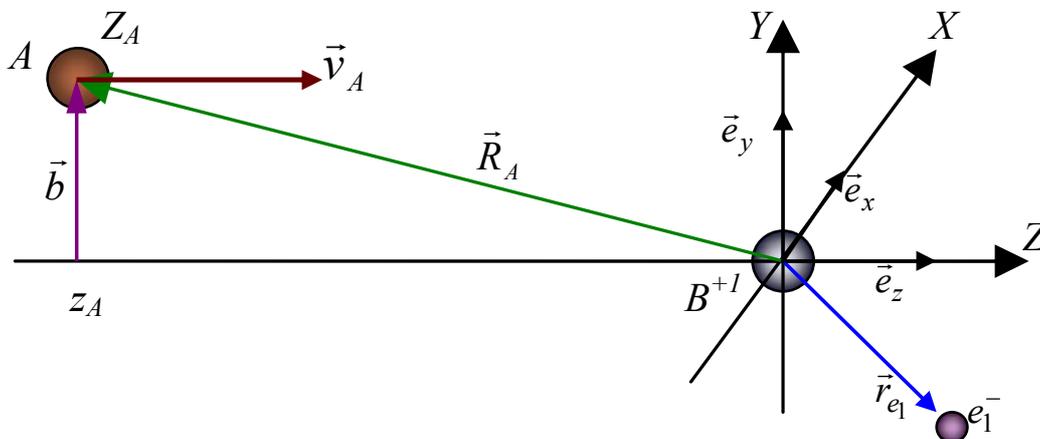


Figure (III-1) : La géométrie de la collision dans le système de coordonnées du laboratoire.

Nous plaçons le projectile en un  $z$  suffisamment grand (de l'ordre de  $-50$  u.a.) pour que l'interaction avec la cible soit négligeable. Tandis que la coordonnée  $y$  du projectile nous donne le module du paramètre d'impact  $\vec{b}$ . Donc, la distance internucléaire  $R_A$ , est donnée par la relation :

$$\vec{R}_A = z_A \vec{e}_z + \vec{b} \quad (\text{III-1})$$

où  $z_A$  est la coordonnée du projectile sur l'axe des  $z$ , et  $\vec{e}_z$  est le vecteur unité du même axe.

### III.2.1. Condition COB :

Les électrons de la cible ne sont pas traités explicitement au début, mais sont pris comme des *particules virtuelles* qui pourraient être « créées » durant la collision. En fait, ils sont considérés comme « confinés » dans le puits de potentiel de la cible, et « cachés » derrière la barrière de potentiel se trouvant entre la cible et le projectile. (Voir *figure II-2-a*).

En approchant, le projectile va faire baisser la barrière de potentiel total  $V_{tot}$ , vu par l'électron le moins lié, donné par :

$$V_{tot}(\vec{r}_{e_1}) = V_A(\vec{r}_{e_1} - \vec{R}_A) + V_B(\vec{r}_{e_1} - \vec{R}_B) \quad (\text{III-2})$$

où,  $V_A$  et  $V_B$  sont le potentiel induit respectivement par le projectile et le noyau cible, tandis que  $\vec{r}_{e_1}$ ,  $\vec{R}_A$  et  $\vec{R}_B$  sont, respectivement, les vecteurs de position de l'électron, du projectile et de la cible ( $\vec{R}_B = \vec{0}$  au début de la simulation). Avec  $V_A = -Z_A / |\vec{r}_{e_1} - \vec{R}_A|$  et  $V_B = -1 / |\vec{r}_{e_1} - \vec{R}_B|$ .

Pour un certain instant  $t_0$ , il se peut que la barrière devienne plus basse que le niveau d'énergie de l'électron le moins lié (*figure II-2-b*), donc il existe une *possibilité de création* du premier électron, autrement dit, l'électron devient actif. Si celui-ci est créé, nous avons la possibilité de création d'un deuxième électron et ainsi de suite. L'éloignement du projectile va remonter la barrière (*figure II-2-c*), ce qui entraîne (d'un point de vue purement classique), au bout d'un certain temps, la non création d'autres électrons.

### III.2.2. Conditions initiales :

Nous allons à ce stade développer trois points qui influencent significativement nos résultats : **(i)** la formule donnant le potentiel d'interaction particule-particule, **(ii)** les conditions initiales concernant la cible, et **(iii)** nos critères concernant la création des électrons.

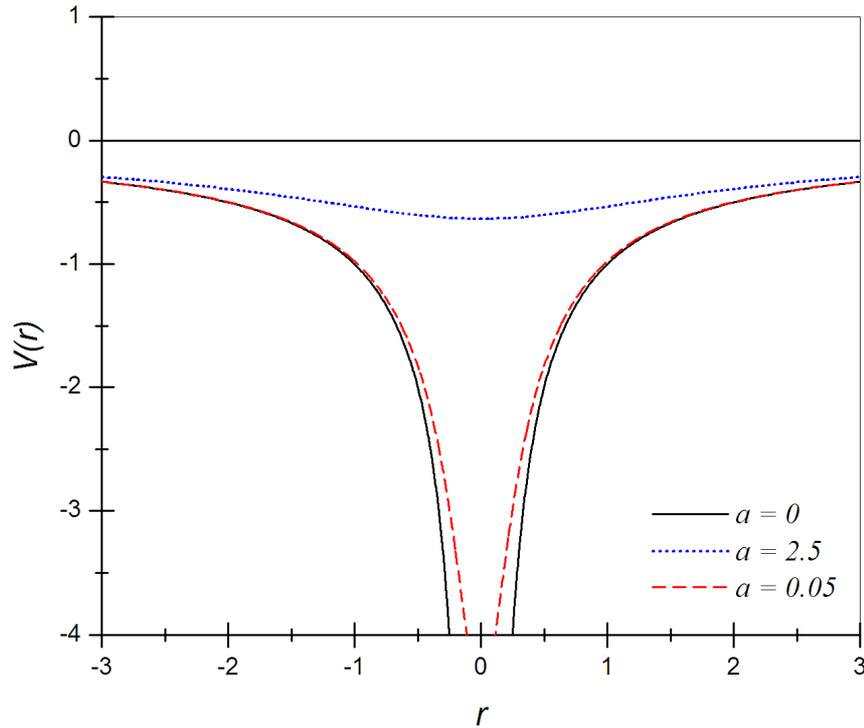


Figure (III-2) : Comparaison des comportements du potentiel en fonction du paramètre ( $a$ ) en trois cas : **(i)** pour  $a=0$ , correspondant au vrai potentiel Coulombien ; **(ii)** pour  $a=2.5$ , qui correspond au potentiel utilisé dans le modèle de Zarour et Saalman [Zar.] ; et **(iii)** pour  $a=0.05$ , correspondant à notre travail.

#### **(i) Potentiel d'interaction :**

Pour des raisons concernant la stabilité numérique du programme de calcul, le potentiel Coulombien utilisé  $V(r)$  (pour décrire une interaction particule-particule) contient un paramètre numérique  $a$ , et s'écrit :

$$V(r) = \frac{q_1 q_2}{|\vec{r}_{12}| + a} \quad (\text{III-3})$$

où  $q_1$  et  $q_2$  sont les charges des deux particules (projectile, noyau-cible ou électrons),  $a$  est un paramètre numérique évitant de donner des pôles dans des simulations numériques (dont l'usage est répandu comme pour les interactions de type laser-atome [Sie.]).

La *Figure III-2* présente trois potentiels correspondant à trois valeurs de  $a$  : 0, 0.05 et 2.5. Nous constatons que l'influence de sa valeur sur la forme du potentiel est très significative. En fait, la valeur  $a = 2.5$  (qui avait été adoptée par Zarour et Saalman [Zar.]) déforme largement le potentiel dans une région non négligeable autour de la particule, tandis que notre choix est que ce paramètre n'ait pas d'influence importante sur le comportement du potentiel pour des distances d'interaction suffisamment grandes, sachant qu'il joue sur le comportement de façon non négligeable pour les petites distances. Comme les résultats des calculs sont très sensibles au comportement du potentiel, nous avons cherché la plus petite valeur que nous pouvions attribuer à ce paramètre ( $a$ ), tout en préservant la stabilité numérique du programme de calcul. Ainsi, nous avons choisi  $a = 0.05$ .

Ce choix du paramètre ( $a \ll 1$ ) a l'avantage de mieux préserver le vrai comportement du potentiel d'interaction, sauf pour des très petites distances d'interaction qui ont peu d'influence sur les sections efficaces.

#### **(ii) Conditions initiales de la cible :**

L'énergie d'ionisation, bien qu'elle soit un élément essentiel pour bien représenter les électrons de la cible, ne suffit pas pour reproduire l'aspect probabiliste de la distribution électronique dans l'espace des phases. Autrement dit, nous avons besoin de déterminer la position et la vitesse de l'électron au moment de sa création.

Nous avons choisi une *représentation aléatoire sur une surface sphérique* quel que soit l'état quantique correspondant à l'électron. Le diamètre de cette sphère a été *fixé* de l'ordre de 1 à quelques *u.a.* (selon la cible), ce qui peut représenter, en fait, un des points faibles de notre modèle, et qui nécessite encore d'être amélioré pour pouvoir mieux prendre en compte l'extension spatiale de la cible.

La représentation aléatoire du vecteur de vitesse de l'électron créé dépend de deux grandeurs : **(1)** son module, et **(2)** sa direction.

(i) Module de vitesse : Après avoir déterminé une position aléatoire  $\vec{r}_{e_1}$  pour le *premier* électron qui pourrait être créé, l'énergie potentielle relative (électron-cible)  $V_{e_1}^B(\vec{r}_{e_1})$  sera déterminée (via Eq. III-3) (où le mot 'relative' et l'exposant  $B$  signifient que la grandeur est calculée par rapport à la cible  $B$ ), et nous pouvons facilement estimer son *énergie cinétique relative à la cible* ( $T_{e_1}^B$ ), sachant que son *énergie totale relative à la cible* ( $E_{e_1}^B$ ) est de l'ordre de son énergie de liaison initiale  $E_L$ . Donc, nous pouvons écrire (pour une cible neutre) :

$$T_{e_1}^B = E_{e_1}^B + \frac{1}{r_{e_1}} \approx E_L + \frac{1}{r_{e_1}} \quad (\text{III-4})$$

Par ailleurs, comme la cible se trouve initialement à l'origine des coordonnées, nous avons identifié la valeur de l'énergie cinétique relative (électron-cible) à l'énergie cinétique totale de l'électron. Donc, le *module* de vitesse du premier électron sera :

$$v_{e_1} \approx \sqrt{2T_{e_1}^B} \quad (\text{III-5})$$

Pour le deuxième électron créé (suite à la création du premier électron), nous procédons exactement de la même manière, sauf qu'il faut prendre en considération l'augmentation de la charge de la cible d'une unité. Vu la grande différence de masse entre le noyau de la cible et l'électron, nous pouvons identifier la valeur de *l'énergie cinétique relative* (électron-cible) à *l'énergie cinétique totale*, et estimons la vitesse de l'électron créé. Et ainsi de suite pour les autres électrons créés...

(ii) La direction de vitesse de l'électron créé est déterminée via un vecteur unitaire  $\vec{u}$  aléatoirement choisi. Le choix de ce vecteur unitaire se fait grâce à deux angles aléatoires :  $\theta$  qui varie entre  $0$  et  $\pi$ , et  $\varphi$  qui varie entre  $0$  et  $2\pi$ . Donc, nous avons enfin :

$$\vec{v}_{e_1} = v_{e_1} (\sin \theta \cos \varphi \vec{i} + \sin \theta \sin \varphi \vec{j} + \cos \theta \vec{k}) \quad (\text{III-6})$$

**(iii) Critère de création des électrons :**

Si la condition COB (voir ci-dessus) est vérifiée (soit : l'énergie de l'électron est au moins égale à la barrière de potentiel), un critère supplémentaire a été introduit pour confirmer définitivement la création (ou non création) de l'électron.

L'idée se trouvant derrière cette condition est liée au fait que les sections efficaces des processus de capture ou d'ionisation sont proportionnelles au temps de passage du projectile et inversement proportionnelles à la période  $t_e$  de l'électron sur son orbitale classique donnée par

$$t_e = 2\pi(Z_B + 1) \frac{1}{\sqrt{2(E_e^B)^3}} \quad (\text{III -7})$$

où  $E_e^B$  est l'énergie de liaison électron-cible. En fait, il existe des positions de l'électron qui sont plus favorables pour qu'il soit éjecté de la cible, donc plus la période  $t_e$  est petite, plus le nombre de ces révolutions autour du noyau augmente, et donc plus l'électron passe par ces positions les plus favorables.

Donc, le nouveau critère consiste à comparer, à chaque pas de temps ( $\Delta t$ ), un nombre aléatoire  $\delta$ , dont la valeur est entre 0 et 1, au rapport  $\Delta t/t_e$ . Si  $\delta < \Delta t/t_e$ , la création de l'électron est validée, sinon on passe au pas de temps suivant.

Ainsi, la création de l'électron n'est confirmée qu'en vérifiant simultanément les deux conditions : (i) condition COB et (ii) condition  $\delta < \Delta t/t_e$ .

**III.2.3. Propagation du système :**

Après avoir introduit les conditions initiales du système, nous montrons comment évolue le système durant une simulation.

La formule du potentiel total d'interaction  $V_{e_1}(\vec{r})$  vu par le premier électron *virtuel* (qui peut être créé) est :

$$V_{e_1}(\vec{r}) = -\frac{Z_A}{|\vec{r}_{e_1} - \vec{R}_A| + a} - \frac{1}{|\vec{r}_{e_1}| + a} \quad (\text{III -8})$$

ou, de façon général, pour le  $i^{\text{me}}$  électron *virtuel*, après la création de  $(i-1)^{\text{eme}}$  électron :

$$V_{e_i}(\vec{r}) = -\frac{Z_A}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{R}_A| + a} - \frac{(i-1)}{|\vec{r}_{e_i}| + a} + \sum_{j \neq i} \frac{1}{|\vec{r}_{e_i} - \vec{r}_{e_j}| + a} \quad (\text{III -9})$$

où  $i$  indique l'électron concerné par les procédures de création,  $j$  indique les électrons déjà créés,  $\vec{r}_{e_i}$  est le vecteur de position l'électron virtuel  $i$ . Si nous représentons le potentiel  $V_{e_1}(\vec{r})$  pour un plan contenant le projectile et la cible (*Figure III -3*) nous constatons que *le maximum* de la barrière se trouve sur l'axe internucléaire, et qu'il représente, en même temps, un *minimum* dans un plan perpendiculaire à l'axe internucléaire, car ce point représente un *point de selle* de potentiel.

Si ce potentiel *maximum* est plus petit que l'énergie  $\hat{E}_{e_i}^B$  (énergie de liaison électron-cible modifiée par l'effet Starck), il y aura une *possibilité* de création (ce qui représente, en effet, le premier critère de création). Où l'énergie de liaison  $\hat{E}_{e_i}^B$  est donnée par :

$$\hat{E}_{e_i}^B = E_{e_i}^B - \frac{Z_A}{|\vec{r}_{e_i}| + a} + \sum_{j \neq i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j| + a} \quad (\text{III -10})$$

Ainsi, si ce critère est validé, l'autre critère (discuté dans le paragraphe précédent) sera appliqué pour valider (ou non) la création définitive de l'électron.

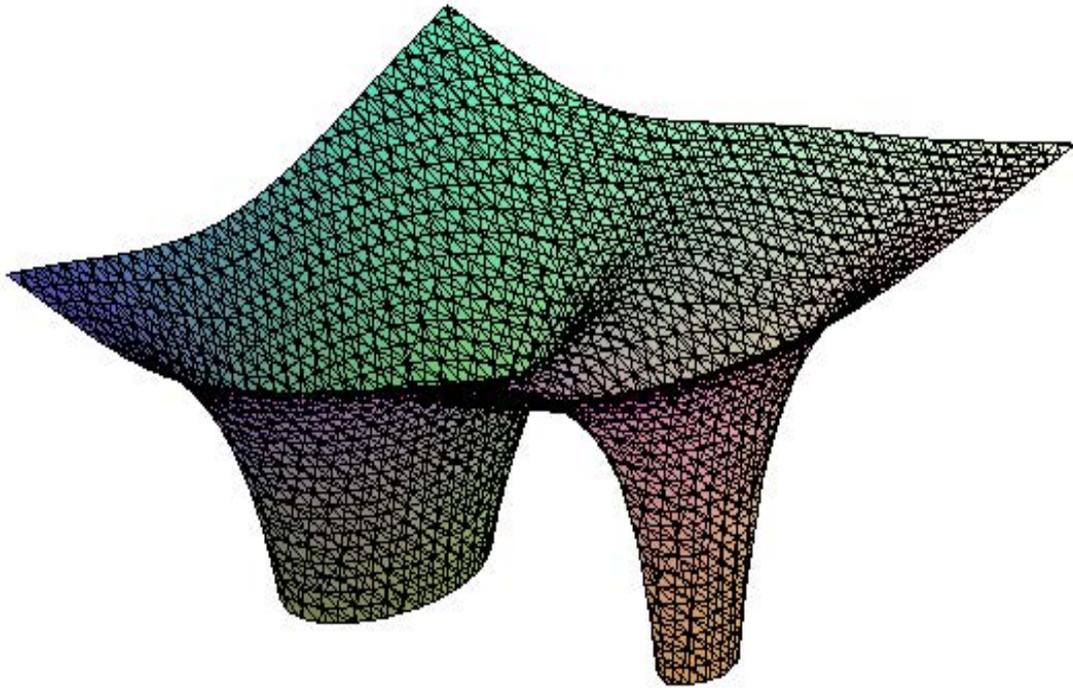


Figure (III -3) : Représentation de la barrière du potentiel vu par le premier électron virtuel, pour une certaine position, de ce dernier, se trouvant dans un plan contenant l'axe internucléaire.

Après la création, l'électron (comme les autres particules  $A$  et  $B$ ) suit une trajectoire classique. Les positions et vitesses se calculent de la façon suivante : soit une particule  $i$  ( $i = A, B$  ou un  $e^-$ ) dont les vecteurs de position et de vitesse, pour un instant  $t$ , sont donnés par

$$\vec{r}_i = x_i \hat{i} + y_i \hat{j} + z_i \hat{k} \quad (\text{III-11})$$

$$\vec{v}_i = v_{x_i} \hat{i} + v_{y_i} \hat{j} + v_{z_i} \hat{k} \quad (\text{III-12})$$

La particule  $i$  est soumise à une force totale  $\vec{F}_i$  donnée en fonction de ses composantes par

$$\vec{F}_i = m_i (a_{x_i} \hat{i} + a_{y_i} \hat{j} + a_{z_i} \hat{k}) \quad (\text{III-13})$$

où  $m_i$  est la masse de la particule  $i$ , et  $a_{x_i}$ ,  $a_{y_i}$  et  $a_{z_i}$  sont les composantes de son vecteur d'accélération totale  $\vec{a}_i$ .

Le calcul, pour l'instant suivant  $t' = t + \Delta t$ , donne la position et la vitesse  $\vec{r}'_i$  et  $\vec{v}'_i$ , en calculant leur variation  $\Delta \vec{r}_i$  et  $\Delta \vec{v}_i$  :

$$\vec{r}'_i = \vec{r}_i + \Delta \vec{r}_i \quad (\text{III-14})$$

$$\vec{v}'_i = \vec{v}_i + \Delta \vec{v}_i \quad (\text{III-15})$$

avec  $\Delta \vec{r}_i = \Delta t \cdot \vec{v}_i \quad (\text{III-16})$

et  $\Delta \vec{v}_i = \Delta t \cdot \vec{a}_i \quad (\text{III-17})$

Ces procédures s'appliquent jusqu'à la fin de la simulation, où le projectile devient suffisamment éloigné de la région d'impact, et les critères finaux seront appliqués pour déterminer les différents types de processus ionisants.

#### III.2.4. Conditions et critères finaux :

A la fin d'une simulation (pour  $R$  suffisamment grande) nous aurons les positions et les vitesses finales de toutes les particules, sur lesquelles nous allons appliquer les critères déterminant les différents processus ionisants ( $SC$ ,  $SI$ ,  $TI$ , ...).

Théoriquement, il n'existe pas de critères absolus pour déterminer ces processus. Zarour et Saalman [Zar.] ont appliqué un critère géométrique. Celui-ci consiste à comparer à la fin d'une simulation la position de chaque électron créé, par rapport à un rayon critique  $R_{Cr}$  centré sur la cible ou le projectile, et de considérer l'électron comme capturé

(recapturé) s'il se trouve dans la *sphère critique* du projectile (de la cible) (définie par  $R_{Cr}$ ), sinon il est considéré comme étant ionisé. Cette méthode a deux points faibles : **(i)** il n'y a aucune considération des vitesses ou des énergies des électrons, **(ii)** les rayons critiques ne prenant pas en compte les charges des noyaux (projectile ou cible) et cela reste totalement arbitraire.

Dans notre modèle, nous avons introduit d'autres critères plus physiques qui prennent en considération, pas seulement les positions relatives des particules mais aussi leurs énergies (cinétiques et potentielles) relatives (par rapport à la cible ou au projectile).

Ces nouveaux critères consistent à calculer, *approximativement*, à la fin de la simulation l'énergie de liaison entre l'électron et le projectile ou la cible et de le considérer comme lié si l'énergie est négative.

L'énergie de liaison électron-noyau est estimée via : l'énergie potentielle *relative*, et l'énergie cinétique *relative*.

L'énergie potentielle relative (au projectile  $A$  ou à la cible  $B$ ) est estimée via :

$$V_{A(B')}^i \approx \frac{-Z_{A(B')}}{|\vec{r}_i - \vec{R}_{A(B')}|} + \sum_{j \neq i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{III-18})$$

où  $B'$  est le cœur final de la cible,  $V_{A(B')}^i$  est l'énergie potentielle relative entre l'électron  $i$  et  $A(B')$ .  $Z_{A(B')}$  et  $\vec{R}_{A(B')}$  sont, respectivement, la charge et le vecteur de position du  $A(B')$ .

L'énergie cinétique relative  $T_{A(B')}^i$  est :

$$T_{A(B')}^i \approx \frac{1}{2} (\vec{v}_i - \vec{v}_{A(B')})^2 \quad (\text{III-19})$$

où  $\vec{v}_i$  et  $\vec{v}_{A(B')}$  sont, respectivement, la vitesse de l'électron  $i$  et la vitesse du projectile (cœur cible  $B'$ ) par rapport au système de coordonnées de laboratoire.

Donc :

$$E_{A(B')}^i \approx \frac{1}{2} (\vec{v}_i - \vec{v}_{A(B')})^2 - \frac{Z_{A(B')}}{\sqrt{|\vec{r}_i - \vec{R}_{A(B')}|^2}} + \sum_{j \neq i} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{III-20})$$

Ainsi, nos critères nous donnent :

- (i) Si  $E_A^i < 0$ , l'électron  $i$  est lié au projectile, et nous avons un processus de capture.
- (ii) Si  $E_{B'}^i < 0$ , l'électron il est soit toujours lié à la cible, soit a été recapturé par la cible après avoir été ionisé.
- (iii) Si  $E_A^i > 0$  et  $E_{B'}^i > 0$ , (simultanément), l'électron n'est lié ni au projectile, ni à la cible, et nous avons un processus d'ionisation.

L'énergie  $E_{A(B')}^i$ , donnée par la formule (III-20), a un comportement présentant, en général, dans nos calculs une sorte d'oscillation périodique autour d'une valeur moyenne qui, elle, reste relativement constante [Voir *figure (III-4)*]. L'origine de ces oscillations est le paramètre numérique ( $a$ ) introduit dans la formule qui donne le potentiel d'interaction (voir *éq. III-3*). Mais Pratiquement, grâce à la nature statistique des calculs, l'impact de ces oscillations sur les résultats finaux est relativement faible.

*Figure (III -4)* montre quelques exemples des oscillations de l'énergie  $E_A^i$  en fonction de la distance  $z_A$ . Etant négatifs, tous ces exemples correspondent à des processus de capture. Dans la région de la collision (autour de l'origine), nous pouvons constater que chacune des courbes commence, brutalement, à un certain point qui indique le moment de création de l'électron. Le fait que certaines courbes commencent avec des valeurs positives signifie que la capture s'est passée après une certaine période dans laquelle l'électron créé était encore fort influencé par le champ du noyau de la cible.

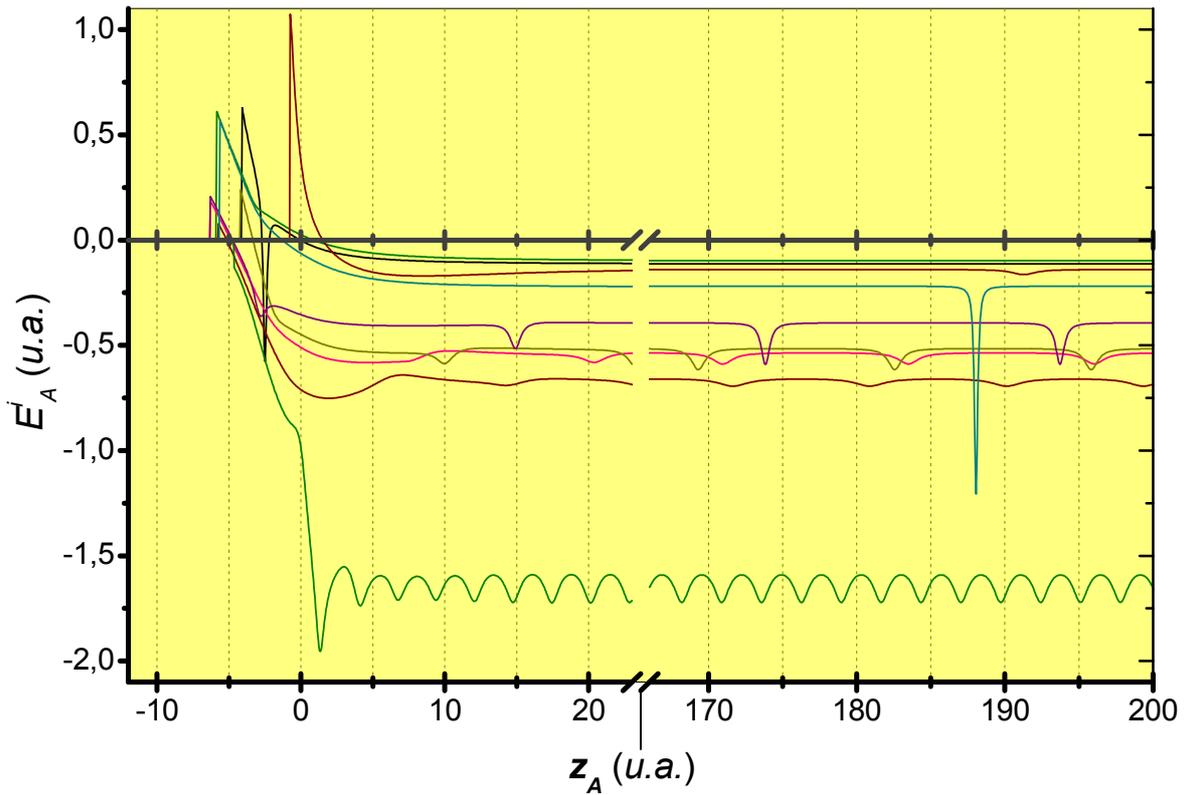


Figure (III -4) : Différents exemples de comportement de l'énergie de liaison *électron-projectile*, pour une collision  $He^{2+} + H$ , et pour les mêmes énergies et paramètres d'impact, en fonction de la coordonnée du projectile  $A$  sur l'axe  $Z$ .

### III.2.5. Probabilités des processus ionisants et Sections Efficaces :

Soit  $N(b)$  le nombre total de simulations qui ont été faites pour un certain paramètre d'impact  $b$ , et soit  $N_{PI}(b)$  le nombre de cas trouvés correspondant à un processus ionisant ( $PI$ ), parmi les  $N(b)$  cas étudiés pour le même  $b$ . La probabilité  $P_{PI}(b)$ , (pour le processus  $PI$ ) pour le paramètre d'impact  $b$ , est donnée par :

$$P_{PI}(b) = \frac{N_{PI}(b)}{N(b)} \quad (\text{III-22})$$

La figure (III-5 ; **a**, **b**, **d** et **c**) montre quelques exemples de la variation de  $P_{PI}(b).b$  (pour *SC* et *SI*), en fonction de  $b$ , pour quatre valeurs d'énergie d'impact, et pour une collision  $\text{He}^{2+} + \text{H}$ .

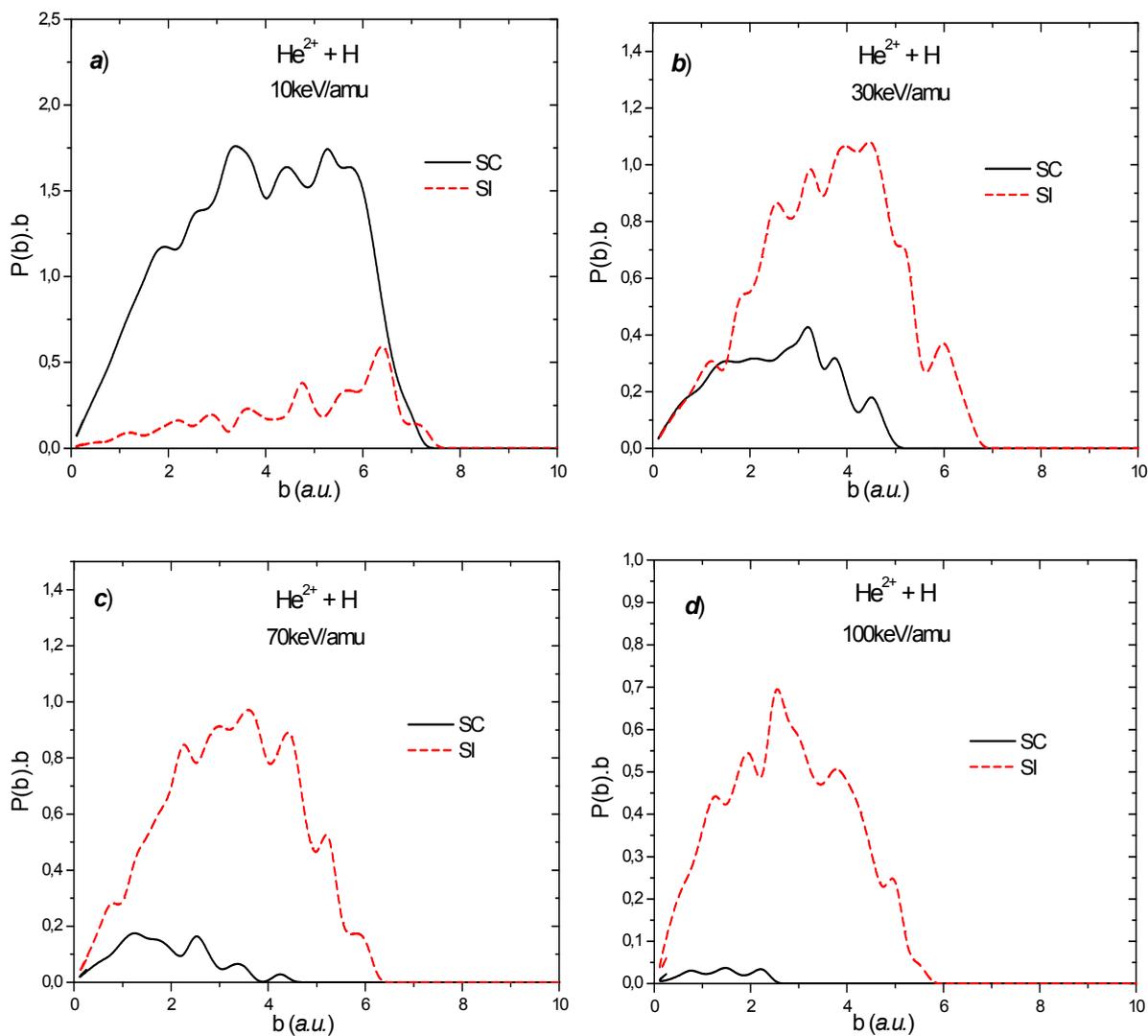


Figure (III-5 ; **a**, **b**, **c** et **d**) : Exemples de nos résultats concernant le comportement du produit  $P(b).b$  en fonction du paramètre d'impact  $b$ , pour le système collisionnel  $\text{He}^{2+} + \text{H}$ , et pour les deux processus possibles pour ce système : simple capture (SC) et simple ionisation (SI). Les figures **a**, **b**, **c** et **d** sont, respectivement, pour les énergies d'impact : 10, 30, 70 et 100 keV/amu.

Ainsi, en calculant toutes les probabilités correspondantes à toutes les valeurs du paramètre d'impact, nous allons estimer la section efficace  $\sigma_{PI}$  correspondante au processus  $PI$  grâce à l'intégrale :

$$\sigma_{PI} = 2\pi \int_0^{b_{\max}} P_{PI}(b) \cdot b \cdot db \quad (\text{III-23})$$

où  $b_{\max}$  est le paramètre d'impact maximal à partir duquel l'influence du projectile devient négligeable (de l'ordre de quelques dizaines de u.a. suivant le système étudié).

### III.3. Remarques sur le calcul numérique :

Avant de lancer les calculs, quelques points techniques doivent être discutés :

**(i) Choix de  $\Delta t$  :** Bien que la valeur de  $\Delta t$  influence la précision des résultats, il peut faire varier significativement le temps total de calcul. Ce choix est très important pour la détermination du paramètre numérique ( $a$ ). Car, plus  $\Delta t$  est petit, plus le paramètre  $a$  peut être choisi petit, donc plus les potentiels peuvent s'approcher de la réalité. Cela veut dire que nous avons un double intérêt pour que  $\Delta t$  soit le plus petit possible.

En fait, la discontinuité du calcul, à cause de  $\Delta t$ , peut engendrer des erreurs numériques qui s'accumulent pendant la simulation, ce qui va créer une *tendance général*, pour les électrons créés, à s'échapper de la cible, donc favoriser les processus ionisants dans nos simulations. Ce rôle négatif de  $\Delta t$  est plus important dans le domaine des faibles énergies où la vitesse du projectile est plus faible (comme nous allons voir dans les chapitres suivants).

Tandis que le rôle négatif du paramètre numérique ( $a$ ) devient plus important dans le domaine de hautes énergies, où l'interaction projectile-cible devient non négligeable pour les petites distances, et où le paramètre  $a$  va affaiblir considérablement cette interaction, ce qui va, donc, défavoriser la création des électrons, donc sous-estimer les processus ionisants.

Ainsi, nous allons constater, dans nos résultats, qu'il se trouve une tendance générale à la surestimation surtout pour les faibles énergies d'impact, et une légère tendance à la sous-estimation pour les hautes énergies.

Ce problème (de  $\Delta t$  et  $a$ ) est partiellement remédiable en choisissant des valeurs plus petites de ces paramètres (au détriment du temps de calcul). Concernant notre choix de  $\Delta t$ , il a été pris de l'ordre de  $10^{-19}$  sec.

**(ii) Choix de  $\Delta b$  :** Bien qu'il soit préférable, en général, de prendre  $\Delta b$  le plus petit possible, nous constatons qu'à partir d'une certaine valeur l'influence de  $\Delta b$  dans nos résultats est négligeable.

Notre choix pour  $\Delta b$  est de l'ordre de  $0.2$  u.a.. Sachant que le nombre  $N_b$  de tous les paramètres d'impact  $b$  traités vérifie la relation suivante

$$N_b \cdot \Delta b \geq b_{\max} \quad (\text{III-21})$$

et qu'il est choisi de l'ordre de quelques centaines, le paramètre d'impact maximal étudié  $b_{\max}$  est, donc, de l'ordre de quelques dizaines d'unités atomiques.

**(iii) Nombre de trajectoires  $N(b)$  :** Le nombre de trajectoires calculées pour chaque valeur de  $b$  influence les résultats, mais aussi le temps de calcul. Son rôle devient plus important quand les sections efficaces sont faibles, comme pour les processus multi-ionisants. Dans nos calculs, nous avons remarqué qu'à partir d'une certaine valeur de  $N(b)$  (quelques centaines) l'impact de ce nombre sur les résultats finaux devient négligeable (pour les systèmes, les processus et la gamme d'énergie étudiés).

*Figure (III-6)* montre un diagramme algorithmique simplifié de nos procédures de calculs.

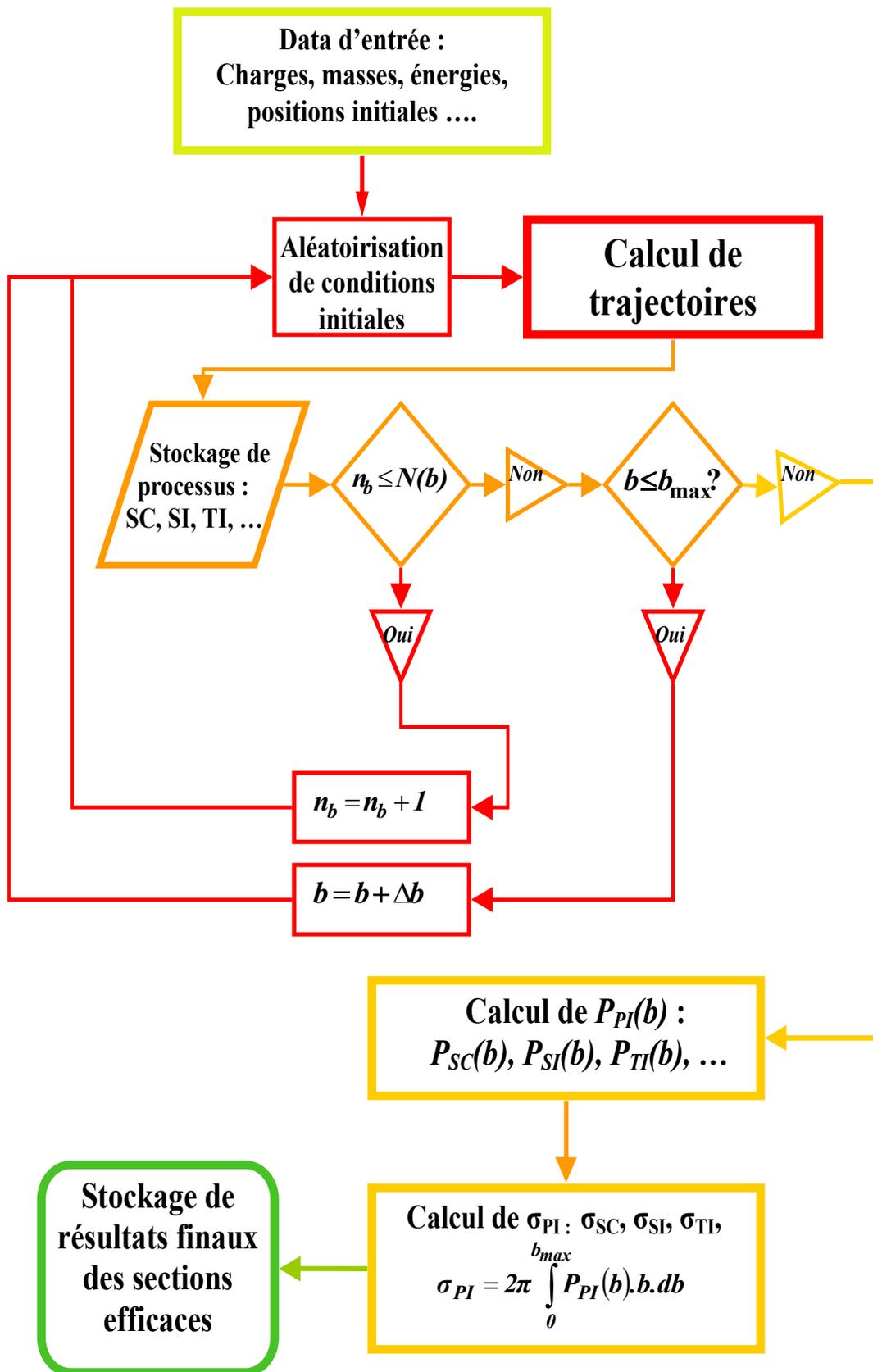


Figure III-6 : diagramme algorithmique simplifié des procédures de calculs.



# Chapitre IV

## Résultats et Discussions

### « Cas de cibles atomiques »

#### IV.1. Cible d'Hydrogène :

Les *figures (IV-1) à (IV-6)* présentent nos résultats, pour des ions projectiles ( $A^{q+} = \text{He}^+, \text{Li}^{3+}, \text{Be}^{4+}, \text{C}^{6+}, \text{O}^{8+}$  ou  $\text{Ne}^{10+}$ ) totalement nus. C'est le système le plus simple, car il est à trois corps, ce qui évite le problème des interactions électron-électron. De plus, il n'y a que deux processus ionisants à étudier ; la simple capture (SC) et la simple ionisation (SI).

Nous comparons nos résultats avec des données expérimentales et théoriques existantes. Nos résultats se comparent, globalement, de façon très satisfaisante avec les autres données existantes.

##### IV.1.1. Cas de simple Capture (SC):

Nos résultats pour ces systèmes sont comparés avec les données expérimentales de : Pivovar *et al.*, [Piv.1], Allison [All.1], Hvelplund *et al.* [Hve.], Seim *et al.* [Sei.], Meyer *et al.* [Mey.] et de Shah *et al.* [Sha.3], et les résultats théoriques de : Toshima (close-coupling) [Tos.], Belkić *et al.* (CDW : Continuum-Distorted-Wave) [Bel.1 et 2] et de Errea *et al.* (CTMC) [Err.1], et Illescas et Riera (CTMC) [Ill.].

La remarque principale que nous pouvons directement émettre ici est que nos résultats sont en accord très satisfaisant avec les données expérimentales et théoriques dans le

domaine des énergies de collision  $>100 \text{ keV/uma}$ . Par contre, notre modèle surestime les résultats pour des énergies  $< 100 \text{ keV/uma}$ . Nous constatons, pour le cas de  $\text{He}^{2+} + \text{H}$ , que les autres modèles théoriques, même le modèle de close-coupling, surestiment les données pour les faibles énergies d'impact, en particulier le modèle CDW qui n'est valable en général, que dans le domaine de hautes énergies (voir *figure IV-1-2*).

#### IV.1.2. Cas de simple Ionisation (SI):

Ici, nos résultats sont comparés avec les données expérimentales de : Shah *et al.* [Sha.1, Sha.2 et Sha.5], Seim *et al.* [Sei.] et Meyer *et al.* [Mey.], et les résultats théoriques de : Toshima (close-coupling) [Tos.], Errea *et al.* (CTMC) [Err.], de Janev *et al.* (ASP : Adiabatic Super-Promotion) [Jan.1], et Illescas et Riera (CTMC) [Ill.].

Le comportement général de nos résultats est plutôt satisfaisant en comparant avec les autres données disponibles même aux énergies intermédiaires, mais avec une tendance à la sous-estimation pour les hautes énergies de collision et une légère surestimation pour un certain domaine d'énergies intermédiaires qui diffère selon le projectile (revoir les remarques à la fin du chapitre précédent).

Figure (IV-1) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) (bleue) et d'ionisation (SI) (rouge) pour la collision ( $He^{2+} + H$ ). Notre modèle : (full-line). Données expérimentales ; (SC) : (up-triangles) Pivovar *et al.* [Piv.1], (down-triangle) Allison [All.1], (carrées) Hvelplund *et al.* [Hve.1] ; (SI) : (up-triangles) Shah et Gilbody [Sha.1], (down-triangles) Shah et Gilbody [Sha.2]. Résultats théoriques : (dash) Close-Coupling deToshima [Tos.], (dash-dot-dot) CDW de Belkic *et al.* [Bel.1], (dash-dot) CTMC de Illescas et Rierra [III.].

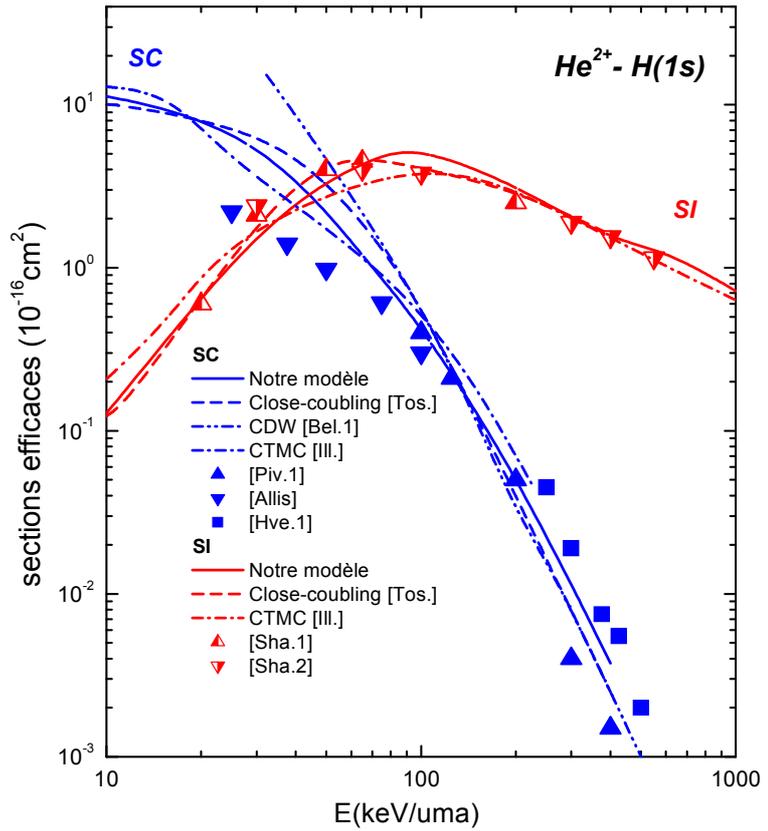


Figure (IV-2) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) (bleue) et d'ionisation (SI) (rouge) pour la collision ( $Li^{3+} + H$ ). Notre modèle : (full-line). Données expérimentales ; (SC) : (down-triangles) Seim *et al.* [Sei.], (up-triangle) Shah et Gilbody [Sha.3] ; (SI) : (cercles) Shah et Gilbody [Sha.4]. Résultats théoriques : (dot) Close-Coupling deToshima [Tos.], (dash) CTMC de Errea *et al.* [Err.1], (dash-dot-dot) CDW de Belkic *et al.* [Bel.2], (dash-dot) CTMC de Illescas et Rierra [III.].

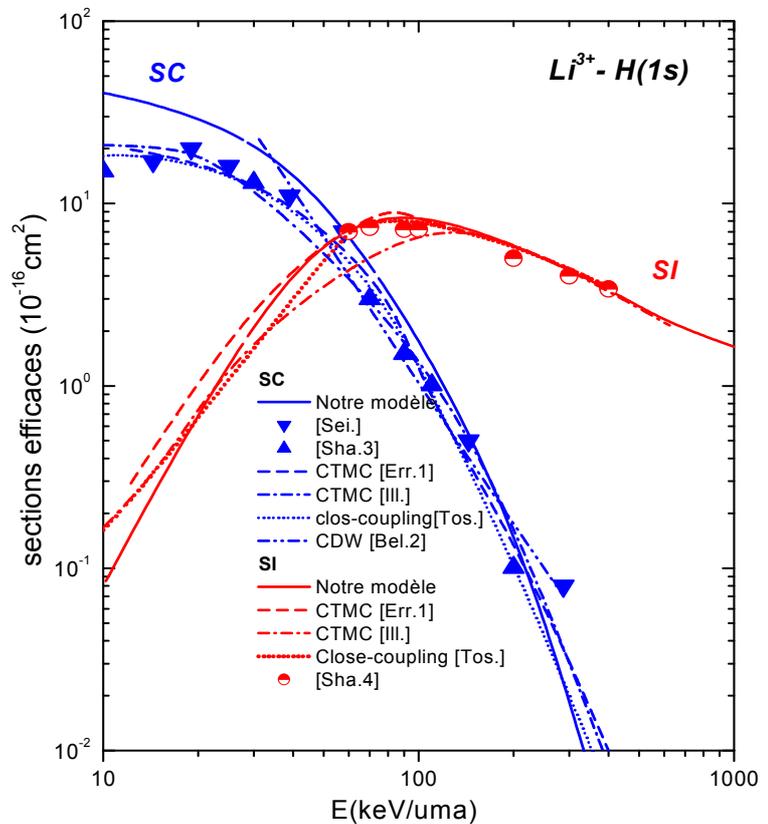


Figure (IV-3) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) (bleue) et d'ionisation (SI) (rouge) pour la collision ( $Be^{4+} + H$ ). Notre modèle : (full-line). Résultats théoriques : (dash) Close-Coupling deToshima [Tos.], (dash-dot) CTMC de Illescas et Rierra [III.].

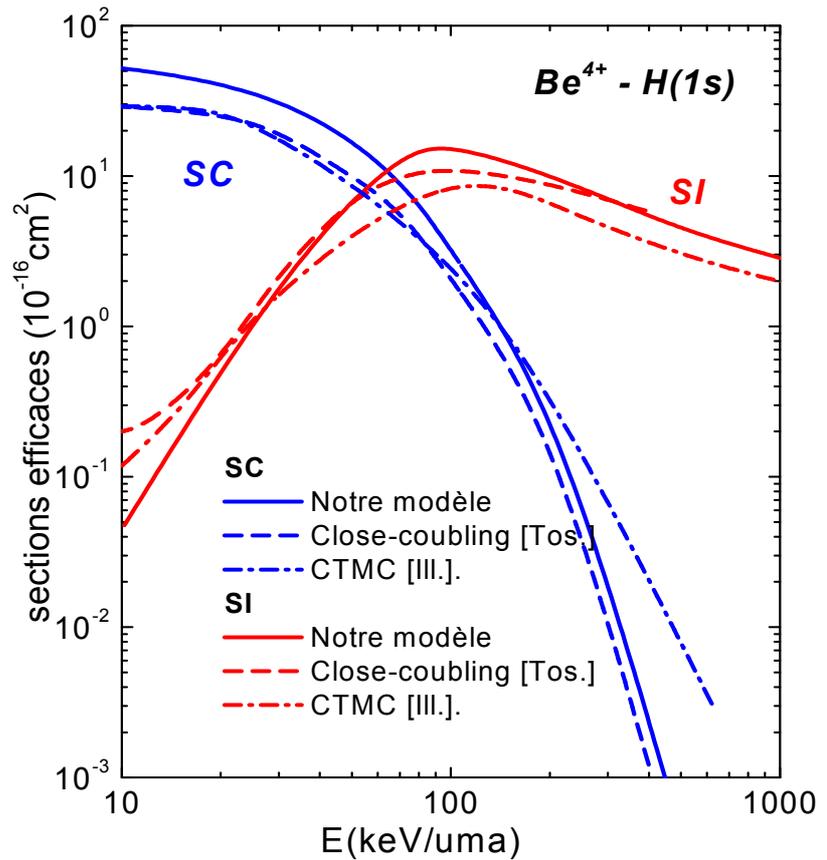


Figure (IV-4) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) (bleue) et d'ionisation (SI) (rouge) pour la collision ( $C^{6+} + H$ ). Notre modèle : (full-line). Données expérimentales ; (SC) : (triangles) Meyer *et al.* [Mey.]; (SI) : (triangle) Shah et Gilbody [Sha.5]. Résultats théoriques : (SC) : (dash) Close-Coupling deToshima [Tos.], (dot) Close-Coupling de Fritsch et Lin.[Fri.]; (SI) : (dash) Close-Coupling deToshima [Tos.], (dash-dot-dot) Adiabatic Super-promotion Approximation (ASP) de Janev *et al.* [Jan.1], (dash-dot) CTMC de Illescas et Rierra [III.].

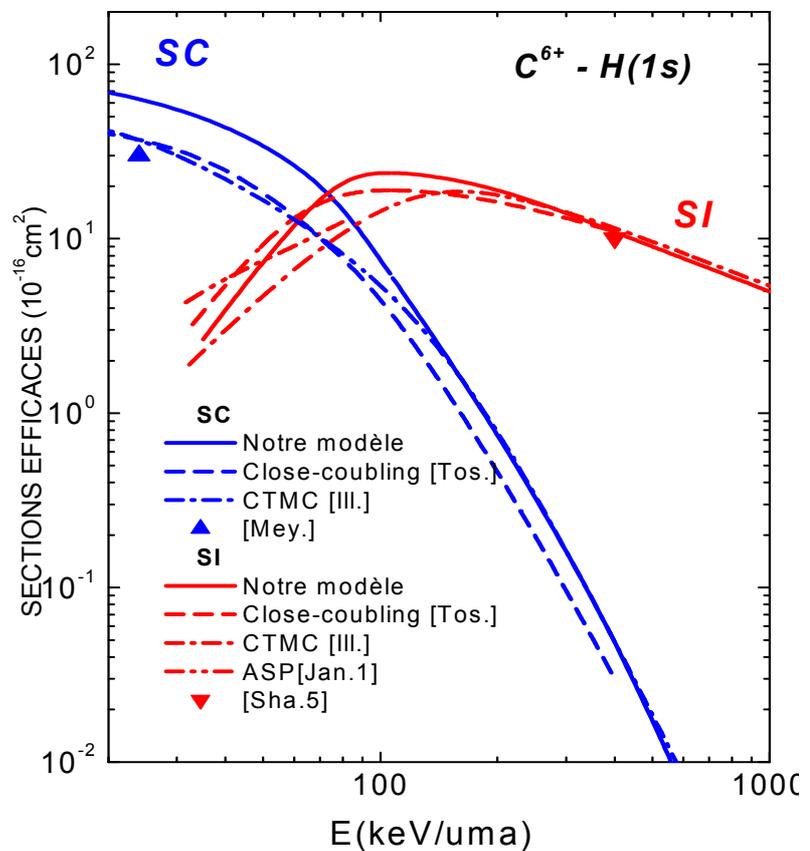


Figure (IV-5) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) (bleue) et d'ionisation (SI) (rouge) pour la collision ( $O^{8+} + H$ ). Notre modèle : (full-line). Données expérimentales (SC) : (triangles) Meyer *et al.* [Mey.]. Résultats théoriques : (dash) Close-Coupling deToshima [Tos.], (dash-dot) CTMC de Illescas et Rierra [Ill.].

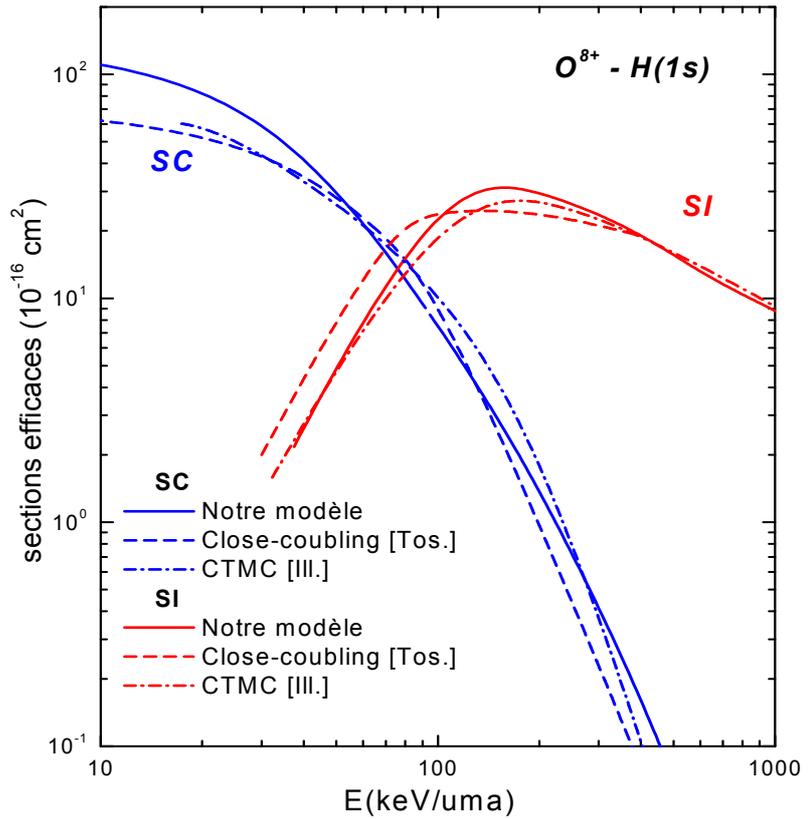
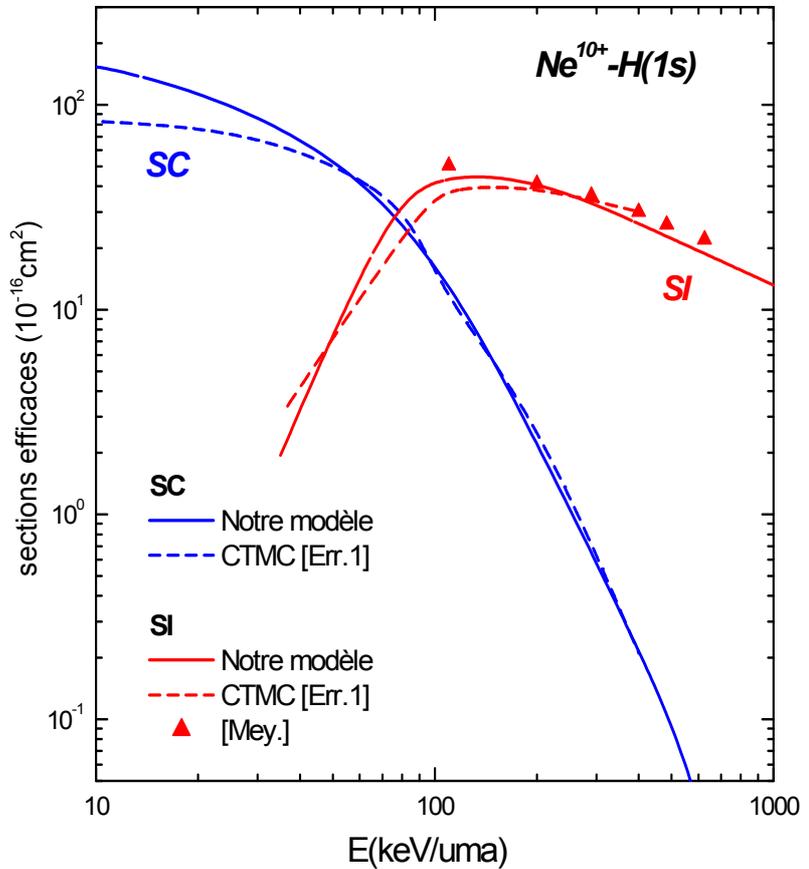


Figure (IV-6) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) (bleue) et d'ionisation (SI) (rouge) pour la collision ( $Ne^{10+} + H$ ). Notre modèle : (full-line). Données expérimentales : (triangles) Meyer *et al.* [Mey.]. Résultats théoriques : (dash) modèle CTMC de Errea *et al.* [Err.1].



## IV.2. Cible d'Hélium :

Pour des cibles d'hélium, nous avons, outre les processus *SC* et *SI*, trois autres processus ionisants possibles : la double capture (*DC*), la double ionisation (*DI*) et le processus de transfert-ionisation (*TI*) (capture + ionisation). Ici, nous ne sommes plus dans un modèle à trois corps.

Dans notre modèle, les deux électrons de la cible sont caractérisés, du point de vue quantique, uniquement par leurs énergies de liaison. Sachant que ces deux électrons sont créés l'un après l'autre, le problème du choix de l'énergie se pose : elle est de  $24.587 \text{ eV}$  pour le premier électron, mais pour la création du deuxième électron nous avons 2 choix : soit  $24.587 \text{ eV}$  qui correspond à une création quasi simultanée, soit  $54.412 \text{ eV}$  qui correspond à la création d'un électron relaxé. Ce que nous pouvons dire sur le choix de l'énergie, c'est que sa valeur réelle doit être comprise entre les deux valeurs.

Ainsi, nous avons réalisé tous les calculs deux fois ; l'un avec deux énergies de liaison identiques ( $E_{11} = E_{12}$ ) ; et l'autre en prenant l'énergie de liaison pour le deuxième électron comme celle de l'ion  $He^+$  ( $E_{11} > E_{12}$ ).

Les résultats que nous présentons dans les *figures (IV-7) à (IV-25)* sont pour plusieurs projectiles : ( $A^{q+} = H^+, He^+, Li^{3+}$  et  $O^{8+}$ ), et pour les deux choix : ( $E_{11} = E_{12}$ ) et ( $E_{11} > E_{12}$ ).

Nous pouvons nous attendre à ce que l'influence des deux choix sur les résultats finaux sera en deux points :

*i)* Il y a une tendance générale pour que les sections efficaces soient plus grande dans le cas ( $E_{11} = E_{12}$ ) que pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). En effet, dans le deuxième cas le deuxième électron est plus lié au noyau de la cible, donc la création des électrons est plus facile dans le premier cas que dans le deuxième.

*ii)* Les résultats obtenus avec le premier choix ( $E_{11} = E_{12}$ ) seraient meilleurs pour les grandes énergies d'impact, inversement le deuxième choix ( $E_{11} > E_{12}$ ), serait plus judicieux pour les énergies d'impact plus faibles. Pour un projectile rapide, le temps de passage dans la

région d'ionisation de la cible est d'autant plus petit que sa vitesse est grande, ce que l'on peut traduire par le fait que la collision peut être interprétée comme un « choc ». Ainsi, la possibilité d'avoir deux processus ionisants serait instantanée. En revanche, quand la vitesse du projectile est plus faible, son temps de passage dans la région de la cible (dans laquelle les processus ionisants sont classiquement possibles) est plus grand, et le deuxième électron aurait le temps de passer à un niveau énergétique plus profond après l'ionisation du premier électron.

## IV.2.1. Cas de processus simples :

### IV.2.1.1. Simple Capture (SC):

Nos résultats [Figures IV-7 à IV-10] sont comparés avec les données expérimentales : (proton+He) : Shah *et al.* [Sha.6] Rudd *et al.* [Rud.1]; (He<sup>2+</sup>+He): Shah et Gilbody [Sha.6] et [Sha.7], Allison [All.2], Theisen et McGuire [The.], DuBois [DuB.] et Hvelplund *et al.* [Hve.1]; (Li<sup>3+</sup>+He): Shah et Gilbody [Sha.6] et Pivovar *et al.* [Piv.1]; (O<sup>8+</sup>+He): Macdonald et Martin [Mac.], Hvelplund *et al.* [Hve.2], Hippler *et al.* [Hip.]. De plus, nous présentons les résultats théoriques : Sidorovich *et al.* (I.E.A. : Independent-Electron-Approximation) [Sid.] pour (proton+He), (He<sup>2+</sup>+He) et (Li<sup>3+</sup>+He); Belkić *et al.* (CDW: Continuum-Distorted-Wave) [Bel.2] pour (proton+He) et (He<sup>2+</sup>+He); Saha *et al.* (CDW) [Sah.], et Suzuki *et al.* (UDWA : Unitarized Distorted-Wave Approximation) [Suz.] pour (Li<sup>3+</sup>+He).

Nous remarquons que bien que les deux choix ( $E_{l1} = E_{l2}$ ) et ( $E_{l1} > E_{l2}$ ) donnent des comportements semblables, les résultats obtenus pour ( $E_{l1} = E_{l2}$ ) sont légèrement supérieurs à ceux de ( $E_{l1} > E_{l2}$ ) à partir d'une certaine énergie dans le domaine des énergies intermédiaires qui diffère suivant le système. L'accord entre nos résultats et les données expérimentales est, en général, meilleur pour les grandes énergies. Pour les énergies les plus faibles, nous avons une surestimation des sections plus ou moins importante qui diffère aussi suivant le système.

Figure (IV-7) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) pour la collision ( $H^+ + He$ ). Notre modèle (courbe contenue noire) pour ( $E_{i1} = E_{i2}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{i1} > E_{i2}$ ). Données expérimentales : (up-triangles) Shah et Gilbody [Sha.6], (down-triangles) Rudd *et al.* [Rud.1]. Résultats théoriques : (dot) modèle I.E.A. [Sid.], (dash-dot-dot) modèle CDW [Bel.2].

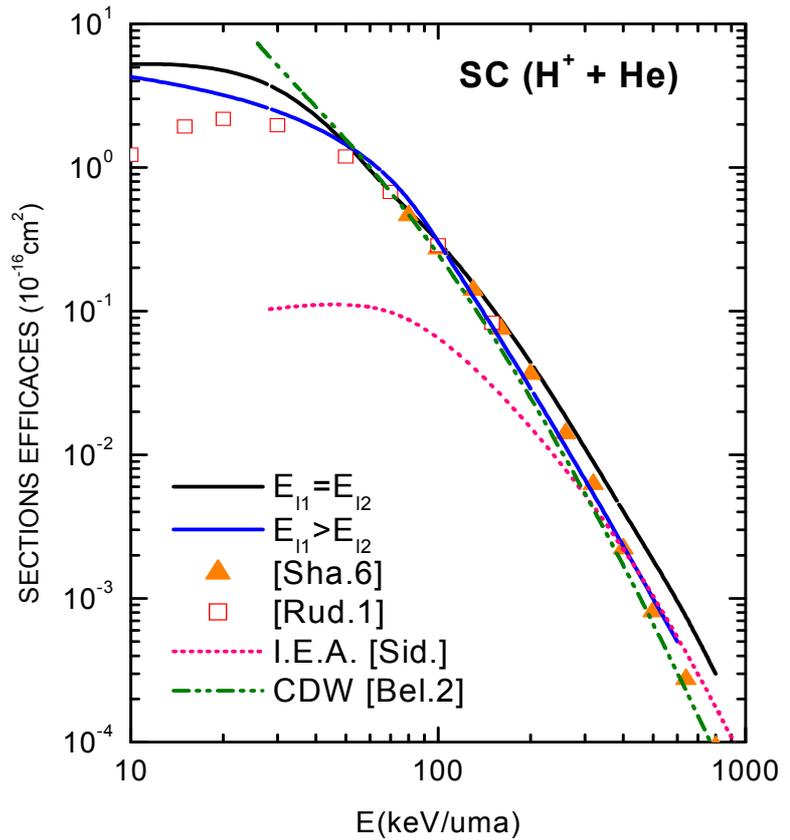


Figure (IV-8) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) pour la collision ( $He^{2+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{i1} = E_{i2}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{i1} > E_{i2}$ ). Données expérimentales : (up-triangles) Allison [All.2], (carrés) Shah et Gilbody [Sha.6], (down-triangles) Shah et Gilbody [Sha.7], (cercles) DuBois [DuB.], (diamants) Theisen et McGuire [The.], (right-triangles) Hvelplund *et al.* [Hve.1]. Résultats théoriques : (dot) modèle I.E.A. [Sid.], (dash-dot-dot) modèle CDW [Bel.2].

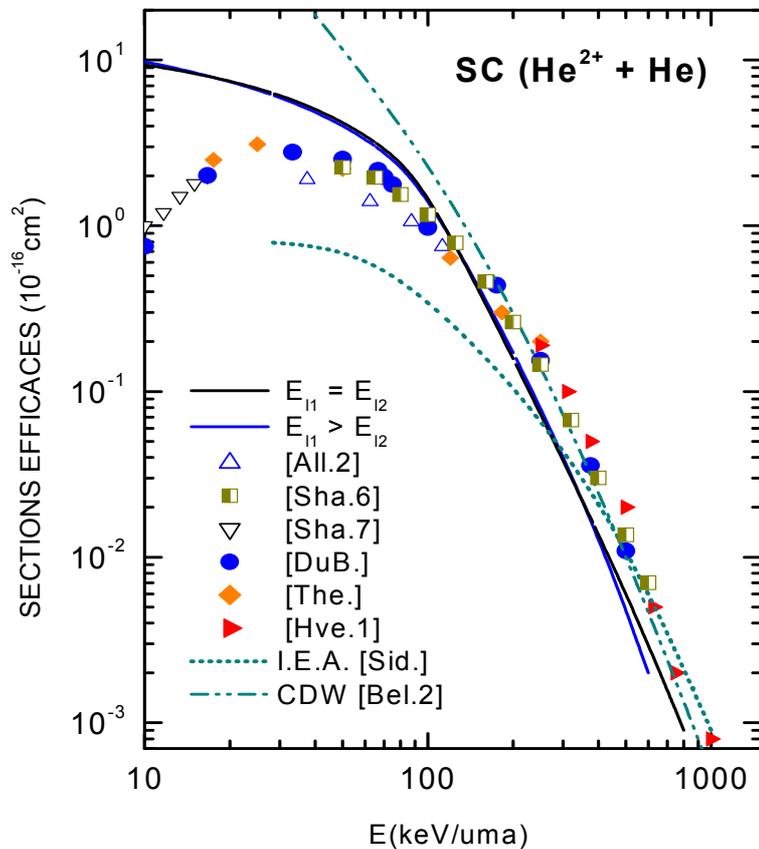


Figure (IV-9) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) pour la collision ( $Li^{3+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (triangles) Shah et Gilbody [Sha.6], (circles) Pivovar *et al.* [Piv.2]. Résultats théoriques : (dot) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.], (dash-dot) CDW Saha *et al.* [Sah.], (dash-dot-dot) UDWA Suzuki *et al.* [Suz.].

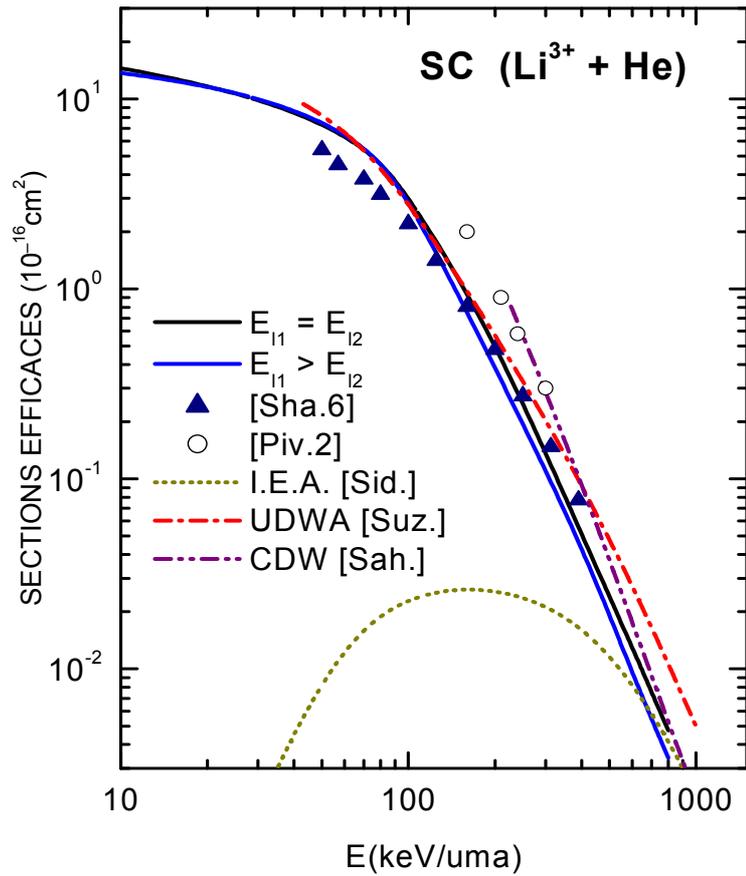
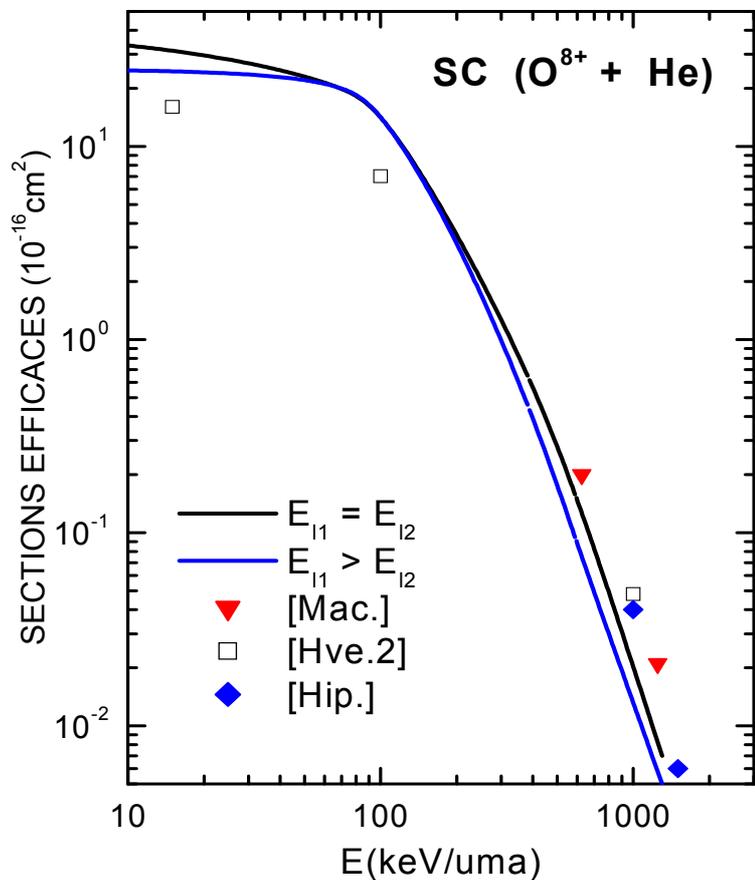


Figure (IV-10) : Sections efficaces totales de simple capture (SC) pour la collision ( $O^{8+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (dash) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (down-triangles) Macdonald et Martin [Mac.], (up-triangles) Hvelplund *et al.* [Hve.2], et (carrées) Hippler *et al.* [Hip.].



#### IV.2.1.2. Simple Ionisation (SI):

Nos résultats [Fig. (IV-11) à (IV-14)] sont comparés avec les données expérimentales : (proton+He) : Shah *et al.* [Sha.6], et Rudd *et al.* [Rud.1]; (He<sup>2+</sup>+He): Shah et Gilbody [Sha.6], et de Puckett *et al.* [Puc.] ; (Li<sup>3+</sup>+He): Pivovar *et al.* [Piv.2], et Knudsen *et al.* [Knu.] ; (O<sup>8+</sup>+He): Hvelplund *et al.* [Hve.2], et Haugen *et al.* [Hau.]. De plus, nous avons les résultats théoriques : Sidorovich *et al.* (I.E.A.) [Sid.] pour (proton+He), (He<sup>2+</sup>+He) et (Li<sup>3+</sup>+He).

Nous remarquons que nos résultats pour le choix ( $E_{11} = E_{12}$ ) sont, en général, plus grands que dans le cas ( $E_{11} > E_{12}$ ). Nos résultats surestiment les autres données, expérimentales ou théoriques pour des énergies d'impact inférieures à quelques centaines de keV/uma (suivant le système), au-delà la situation s'inverse. Autre remarque pour les grandes énergies et dans le cas ( $E_{11} = E_{12}$ ), les résultats sont relativement plus satisfaisants que ceux de ( $E_{11} > E_{12}$ ). Nous pouvons aussi constater que pour : (proton + He) et (He<sup>+</sup> + He) [Fig. (IV-11) et (IV-12), respectivement] nos résultats pour ( $E_{11} = E_{12}$ ) sont, aux grandes énergies, en très bon accord avec ceux du modèle I.E.A. de Sidorovich *et al.*.

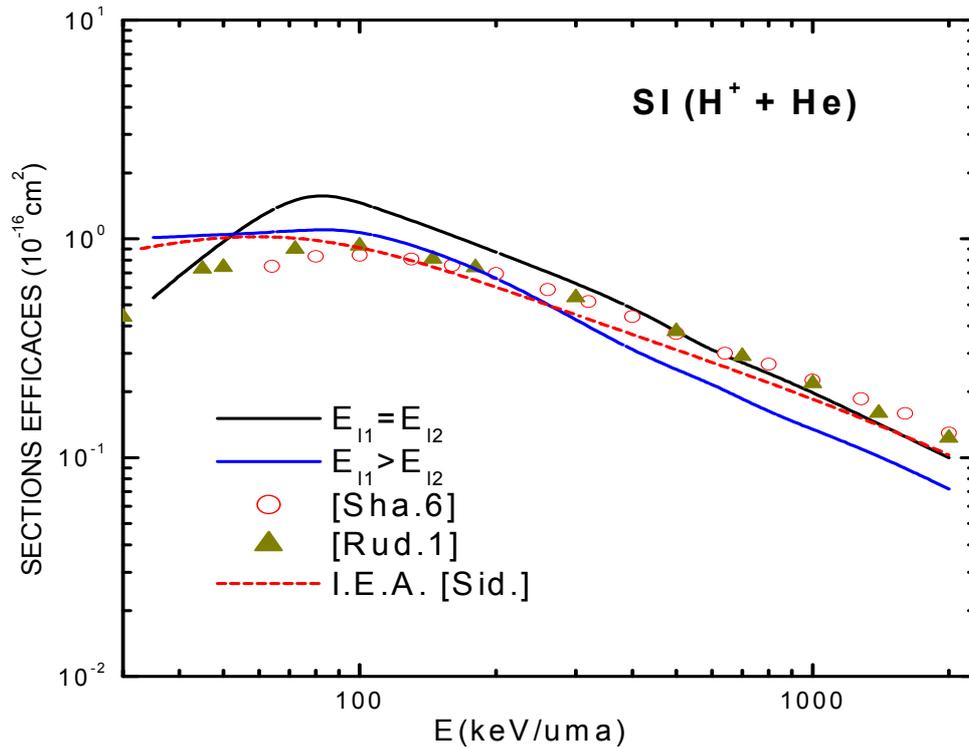


Figure (IV-11) : Sections efficaces totales de simple ionisation (SI) pour la collision ( $H^+ + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (cercles) Shah et Gilbody [Sha.6], (up-triangles) Rudd *et al.* [Rud.1]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. [Sid.].

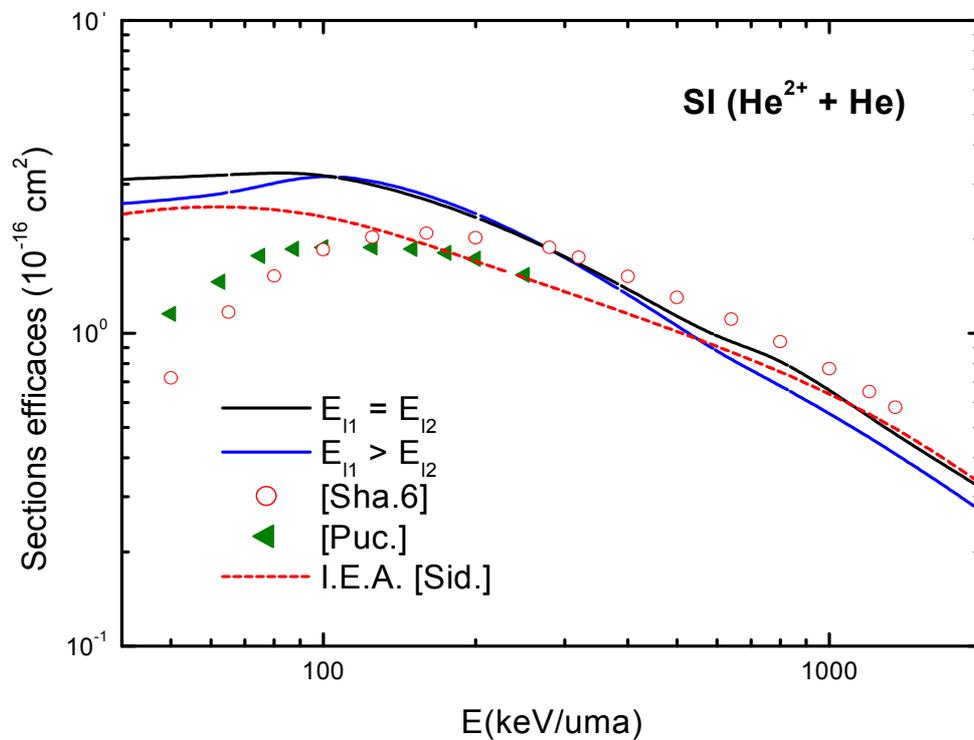


Figure (IV-12) : Sections efficaces totales de simple ionisation (SI) pour la collision ( $He^{2+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (cercles) Shah et Gilbody [Sha.6], (triangles) Puckett *et al.* [Puc.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. [Sid.].

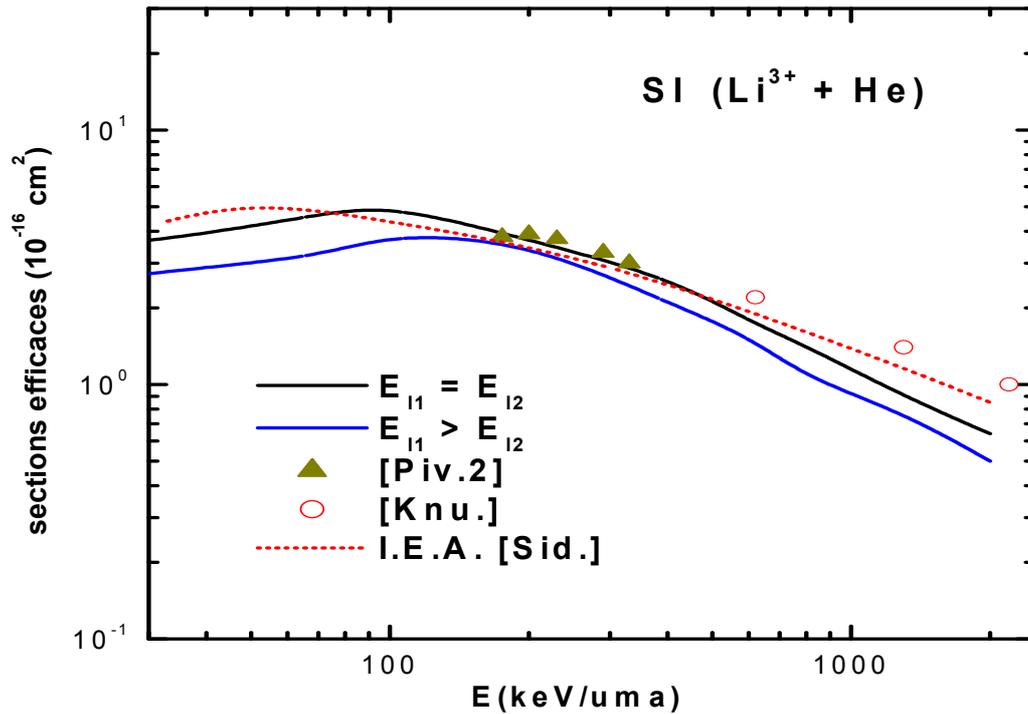


Figure (IV-13) : Sections efficaces totales de simple ionisation (SI) pour la collision ( $Li^{3+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{I1} = E_{I2}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{I1} > E_{I2}$ ). Données expérimentales : (triangles) Pivovar *et al.* [Piv.2], et (cercles) Knudsen *et al.* [Knu.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. [Sid.].

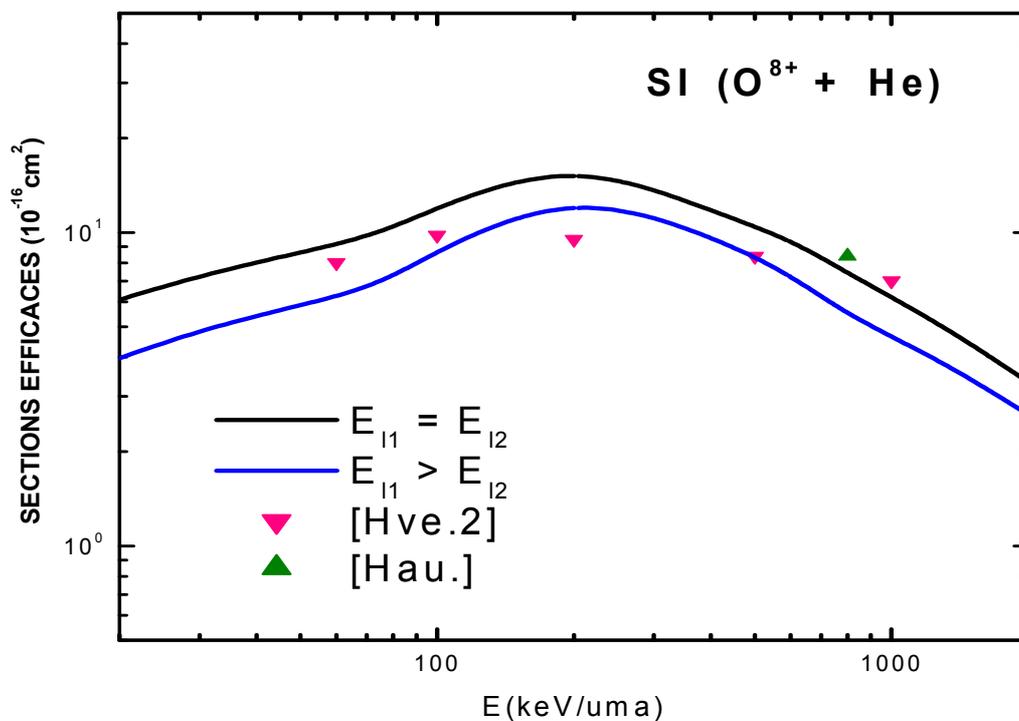


Figure (IV-14) : Sections efficaces totales de simple ionisation (SI) pour la collision ( $O^{8+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{I1} = E_{I2}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{I1} > E_{I2}$ ). Données expérimentales : (down-triangles) Haugen *et al.* [Hau.], et (up-triangles) Hvelplund *et al.* [Hve.2].

## IV.2.2. Cas de processus doubles :

### IV.2.2.1. Transfert Ionisation (*TI*):

Nos résultats [Fig. IV-15 à IV-18] sont comparés avec les données expérimentales : (proton+He) : Shah et Gilbody [Sha.6], Afrosimov *et al.* [Afr.]; (He<sup>2+</sup>+He): Shah et Gilbody [Sha.6], et DuBois [DuB.]; (Li<sup>3+</sup>+He): Shah et Gilbody [Sha.6]; (O<sup>8+</sup>+He): Datz *et al.* [Dat.]. Nous présentons, de plus, les résultats théoriques de: Sidorovich *et al.* (I.E.A. : Independent-Electron-Approximation) [Sid.] pour (proton+He), (He<sup>2+</sup>+He) et (Li<sup>3+</sup>+He).

Nous constatons que les résultats pour ( $E_{11} > E_{12}$ ) sont meilleurs que pour ( $E_{11} = E_{12}$ ) bien qu'ils convergent tous les deux aux grandes énergies. En plus, nous remarquons que nos résultats de ( $E_{11} > E_{12}$ ) sont plutôt satisfaisants même à partir de quelques dizaines de keV/uma. Pour le cas de ( $H^+ + He$ ) les résultats de ( $E_{11} = E_{12}$ ) surestiment largement les autres données (environ 4 fois).

A part le cas de ( $H^+ + He$ ), où les résultats pour ( $E_{11} = E_{12}$ ) sont toujours plus grands que pour ( $E_{11} > E_{12}$ ), nous constatons qu'il se trouve une certaine gamme d'énergies d'impact où le rapport entre les résultats des deux choix s'inverse. En fait, bien que le choix ( $E_{11} = E_{12}$ ) favorise la création des électrons plus que ( $E_{11} > E_{12}$ ), il ne favorise pas, nécessairement un processus ionisant plus que les autres [Voir les remarques à la fin de ce chapitre].

Figure (IV-15) : Sections efficaces totales de transfert-ionisation (TI) pour la collision ( $H^+$  + He). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (diamants) Afrosimov *et al.* [Afr.1], (carrés) Shah et Gilbody [Sha.6]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.].

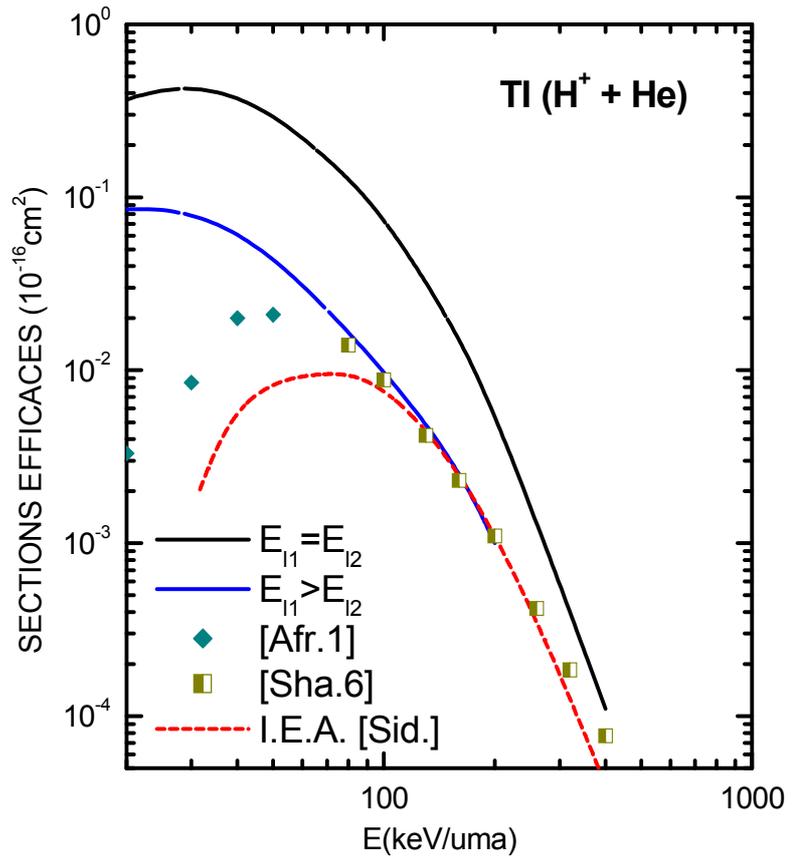


Figure (IV-16) : Sections efficaces totales de transfert-ionisation (TI) pour la collision ( $He^{2+}$  + He). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (triangles) Shah et Gilbody [Sha.6], (cercles) DuBois [DuB.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.].

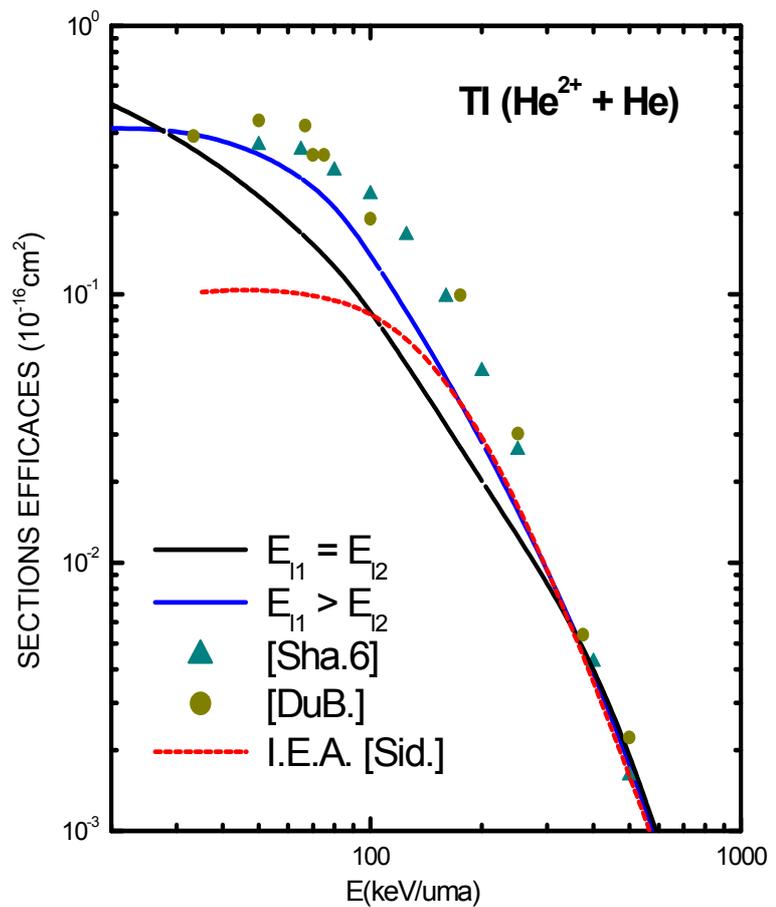


Figure (IV-17) : Sections efficaces totales de transfert-ionisation (TI) pour la collision ( $Li^{3+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales: (triangles) Shah et Gilbody [Sha.6]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. [Sid.].

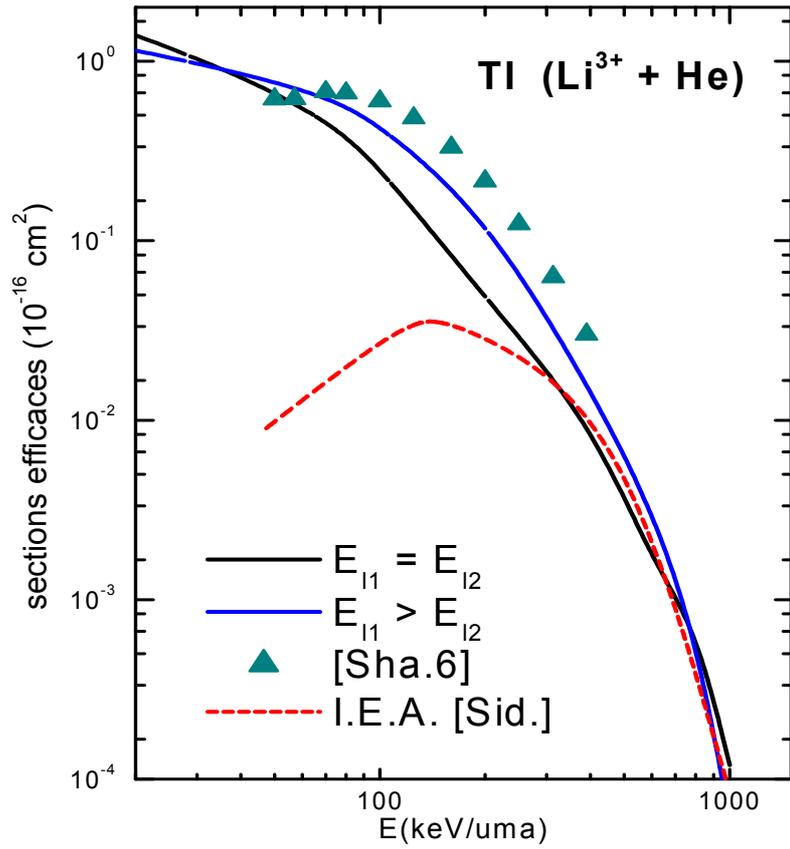
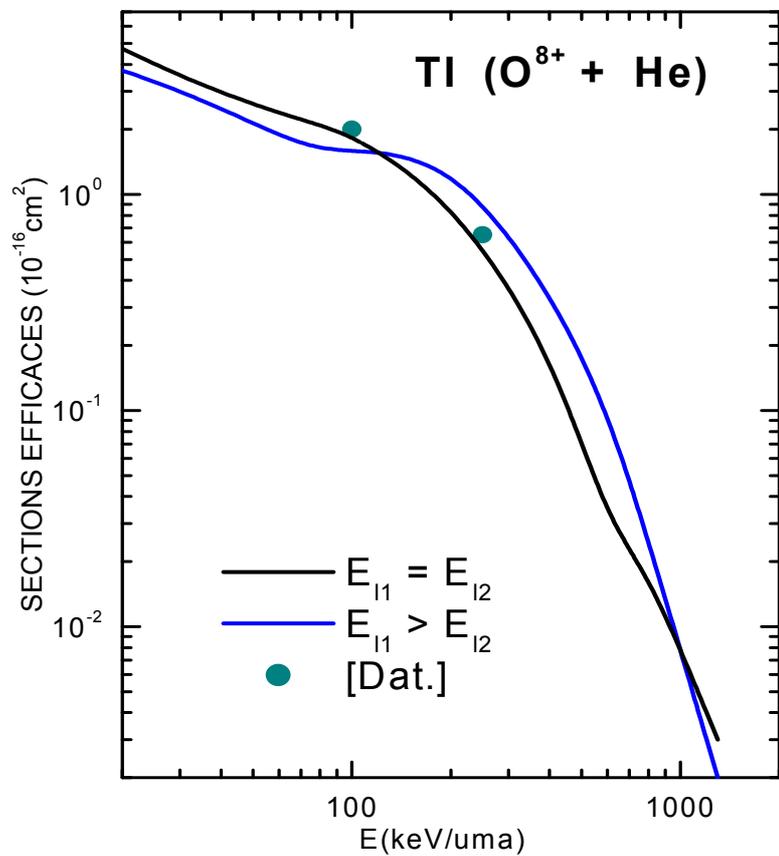


Figure (IV-18) : Sections efficaces totales de transfert-ionisation (TI) pour la collision ( $O^{8+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales: (cercles) Datz et al. [Dat.].



#### IV.2.2.2. Double Capture (DC):

Nos résultats [Fig. IV-19 à IV-21] sont comparés avec les données expérimentales : ( $\text{He}^{2+}+\text{He}$ ): Shah et Gilbody [Sha.7], Theisen et McGuire [The.], et DuBois [DuB.]; ( $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ ): Shah et Gilbody [Sha.6], et Nikolaev *et al.* [Nik.]; ( $\text{O}^{8+}+\text{He}$ ): Macdonald et Martin [Mac.], Hvelplund *et al.* [Hve.2], et Hippler *et al.* [Hip.]. Nous avons pour les cas de ( $\text{He}^{2+}+\text{He}$ ) et ( $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ ) les résultats théoriques de: Sidorovich *et al.* (I.E.A.) [Sid.], Gayet *et al.* (CDW-4B) [Gay.1] et (CDW-IEA) [Gay.2].

Le comportement général de nos résultats est relativement acceptable bien que la magnitude pour le cas de ( $\text{He}^{2+}+\text{He}$ ) soit environ dix fois plus faible que les données expérimentales. Nous pouvons constater que, pour ce dernier cas, même les résultats des modèles (I.E.A.) [Sid.] et (CDW-4B) [Gay.] sous-estiment, eux aussi, largement les données expérimentales. Cela peut être expliqué par la nature quantique très stable de l'hélium (gaz rare) qui favorise la double capture en diminuant la possibilité pour l'électron d'être recapturé par la cible ou d'être ionisé après avoir été capturé. Pour ( $\text{Li}^{3+}+\text{He}^{2+}$ ) et ( $\text{O}^{8+}+\text{He}^{2+}$ ), la magnitude et le comportement de nos résultats sont relativement plus satisfaisants.

Une remarque peut être faite, semblable à celle que nous avons faite pour *TI* concernant l'inversement du rapport entre les résultats des deux choix ( $E_{11} = E_{12}$ ) et ( $E_{11} > E_{12}$ ) [Voir les remarques à la fin de ce chapitre].

Figure (IV-19) : Sections efficaces totales de double capture (DC) pour la collision ( $He^{2+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (down-triangles) Shah et Gilbody [Sha.7], (cercles) DuBois [DuB.], (up-triangles) Theisen et McGuire [The.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.], Gayet *et al.* : (dash-dot) CDW-4B [Gay.1] et (dash-dot-dot) CDW-IEA [Gay.2].

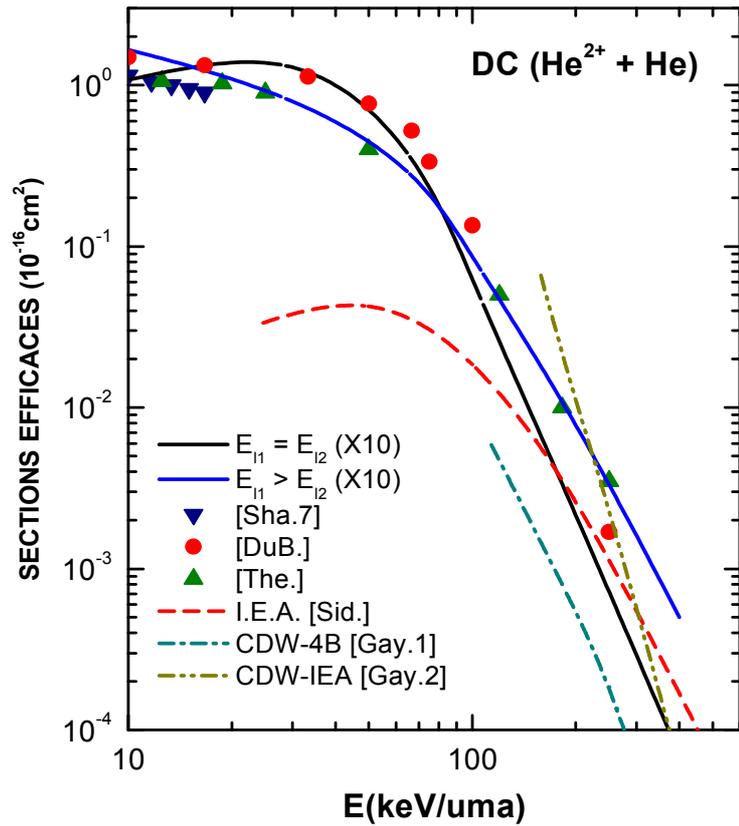


Figure (IV-20) : Sections efficaces totales de double capture (DC) pour la collision ( $Li^{3+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (up-triangles) Shah et Gilbody [Sha.6], (down-triangles) Nikolaev *et al.* [Nik.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.], Gayet *et al.* : (dash-dot) CDW-4B [Gay.1] et (dash-dot-dot) CDW-IEA [Gay.2].

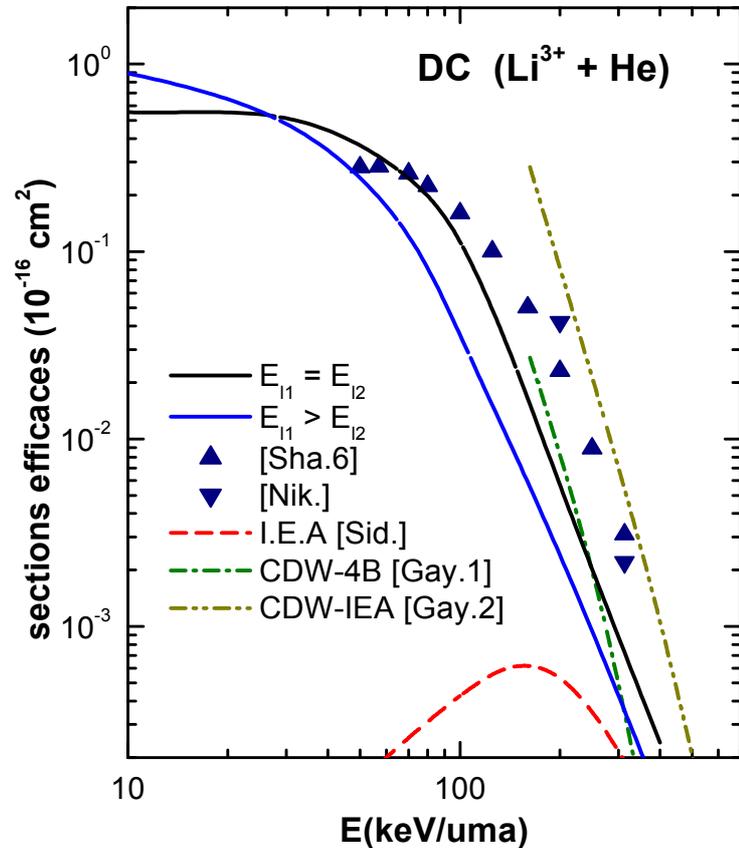
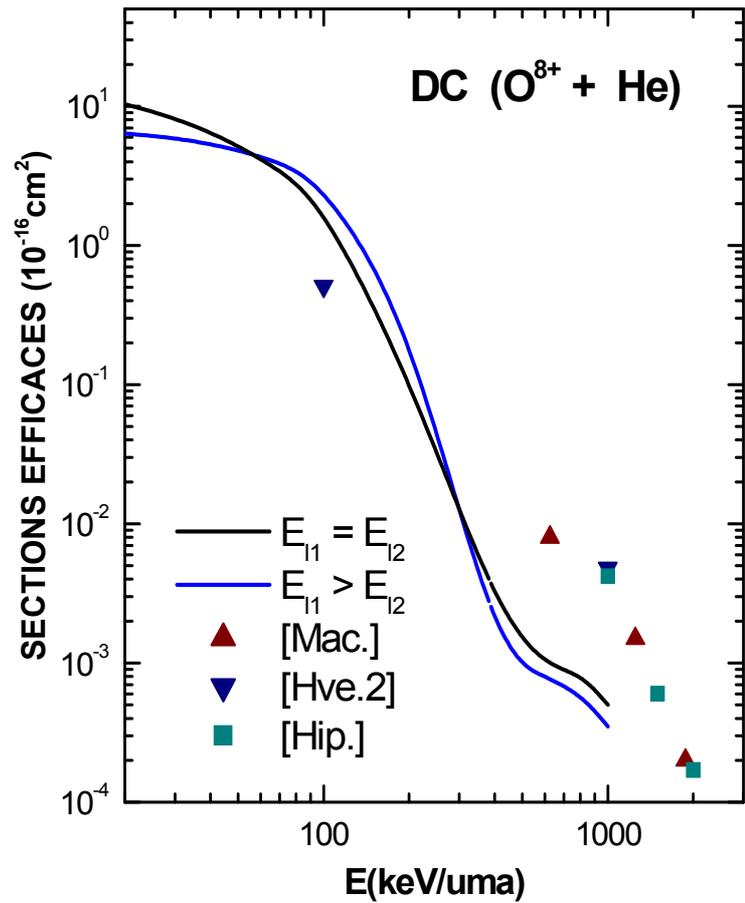


Figure (IV-21) : Sections efficaces totales de double capture (DC) pour la collision ( $O^{8+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (full- courbe contenue line bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (up-triangles) Macdonald et Martin [Mac.], (down-triangles) Hvelplund *et al.* [Hve.2], et (carrées) Hippler *et al.* [Hip.].



**IV.2.2.3. Double Ionisation (DI):**

Nos résultats [Fig. IV-22 à IV-25] sont comparés avec les données expérimentales : (proton+He) : Shah *et al.* [Sha.6], et Afrosimov *et al.* [Afr.]; (He<sup>2+</sup>+He): Shah et Gilbody [Sha.6], et DuBois [DuB.] ; (Li<sup>3+</sup>+He) : Shah et Gilbody [Sha.6], Levchenko [Lev.], et Andersen [And.] ; (O<sup>8+</sup>+He): Hvelplund *et al.* [Hve.2]. Nous présentons aussi les résultats théoriques : Sidorovich *et al.* (I.E.A.) [Sid.] pour (H<sup>+</sup>+He), (He<sup>2+</sup>+He) et (Li<sup>3+</sup>+He).

Pour ce processus double, nous constatons que les résultats pour ( $E_{11} = E_{12}$ ) sont plus satisfaisants que ceux pour ( $E_{11} > E_{12}$ ), et qu'ils convergent vers les données expérimentales pour les grandes énergies, sauf pour le cas de (O<sup>8+</sup>+He) où nos résultats sous-estiment l'expérience d'un facteur 5 pour les grandes énergies. Pour le cas de (H<sup>+</sup>+He) nous n'avons pas pu obtenir de résultats avec ( $E_{11} > E_{12}$ ) que pour quelques faibles énergies d'impact.

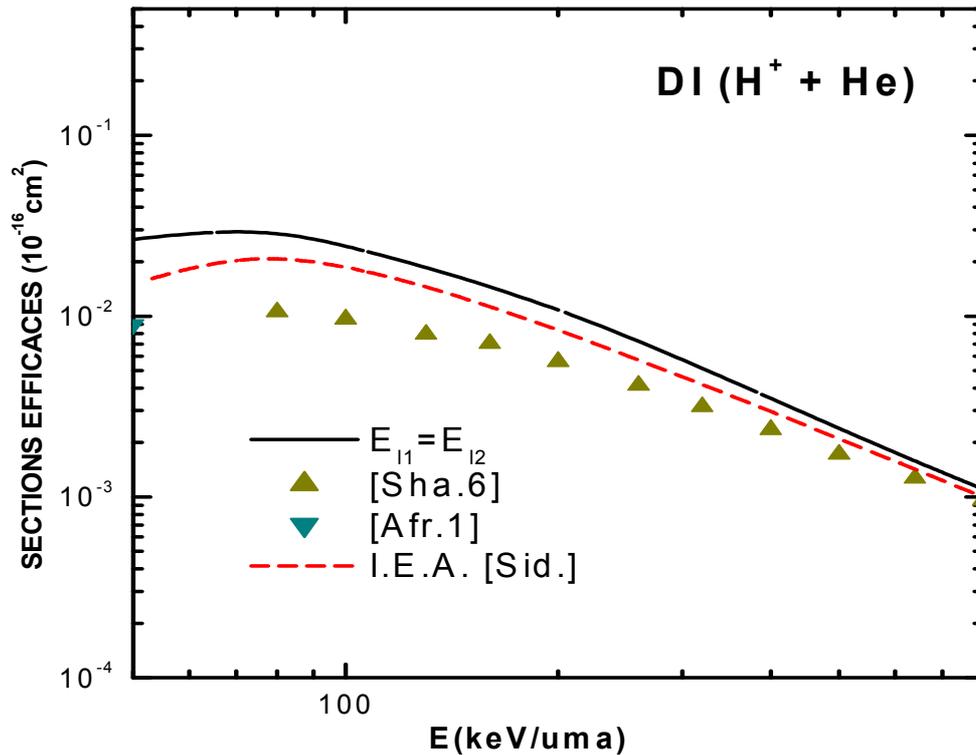


Figure (IV-22) : Sections efficaces totales de double ionisation (DI) pour la collision ( $H^+ + He$ ). Notre modèle : (courbe continue) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ). Données expérimentales : (up-triangles) Shah et Gilbody [Sha.6], (down-triangles) Afrosimov *et al.* [Afr.1]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.].

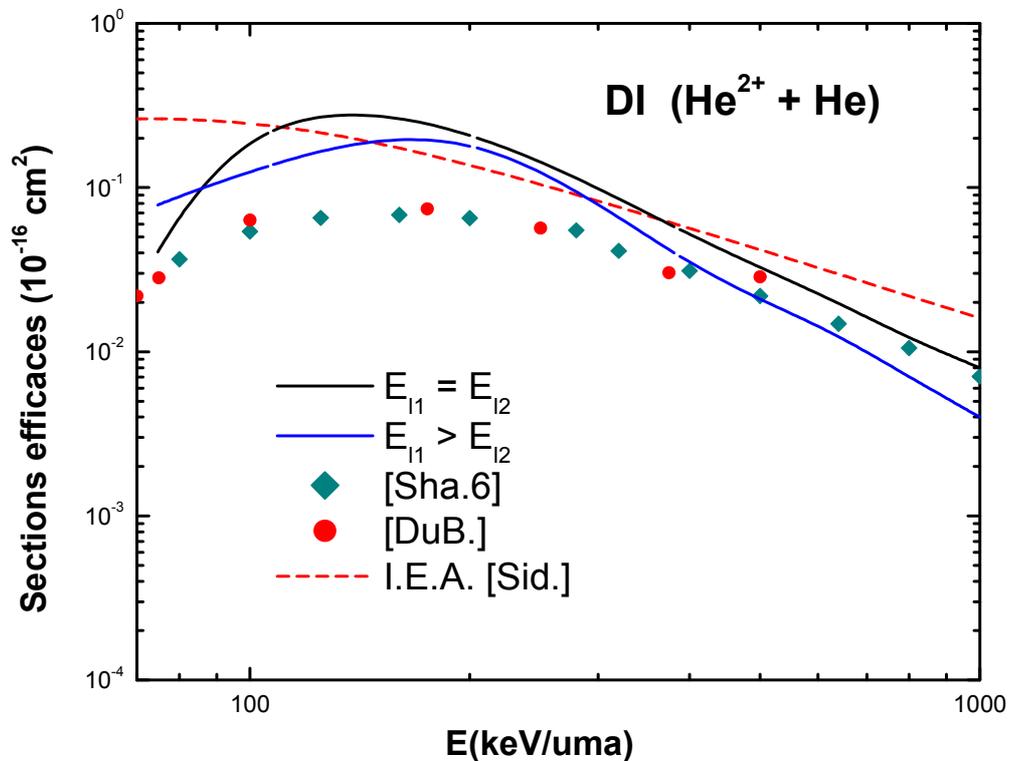


Figure (IV-23) : Sections efficaces totales de double ionisation (DI) pour la collision ( $He^{2+} + He$ ). Notre modèle : (courbe continue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe continue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (diamants) Shah et Gilbody [Sha.6], (cercles) DuBois [DuB.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.* [Sid.].

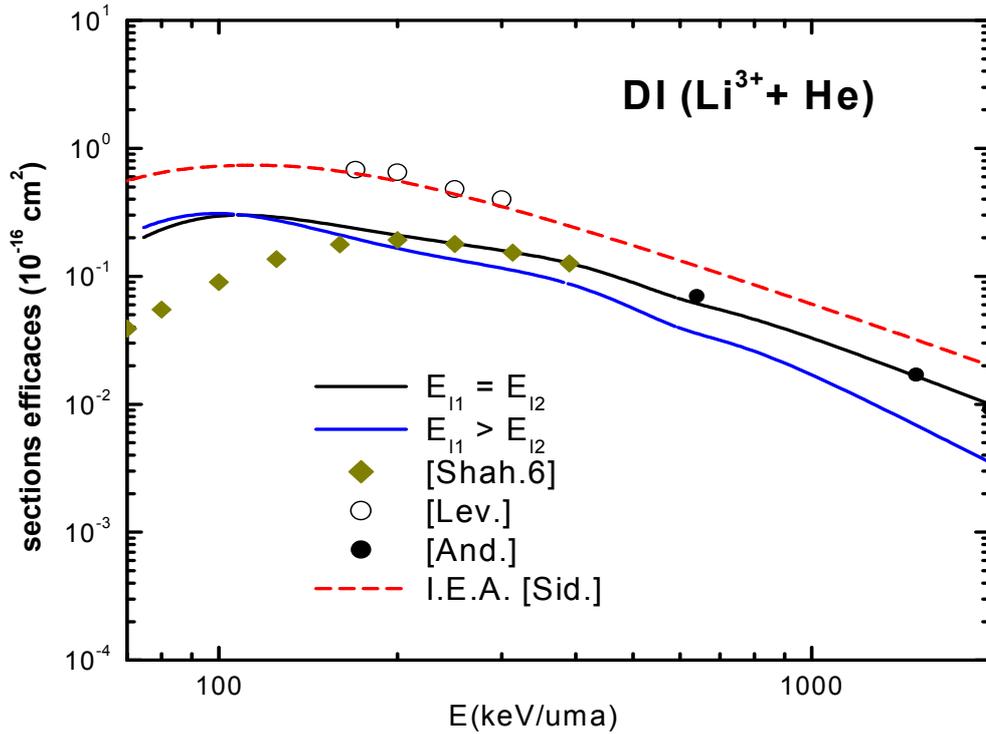


Figure (IV-24) : Sections efficaces totales de double ionisation (DI) pour la collision ( $Li^{3+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : (diamants) Shah et Gilbody [Sha.6], (cercles ouvertes) Levchenko [Lev.], (cercles pleines) Andersen [And.]. Résultats théoriques : (dash) I.E.A. Sidorovich *et al.*[Sid.].

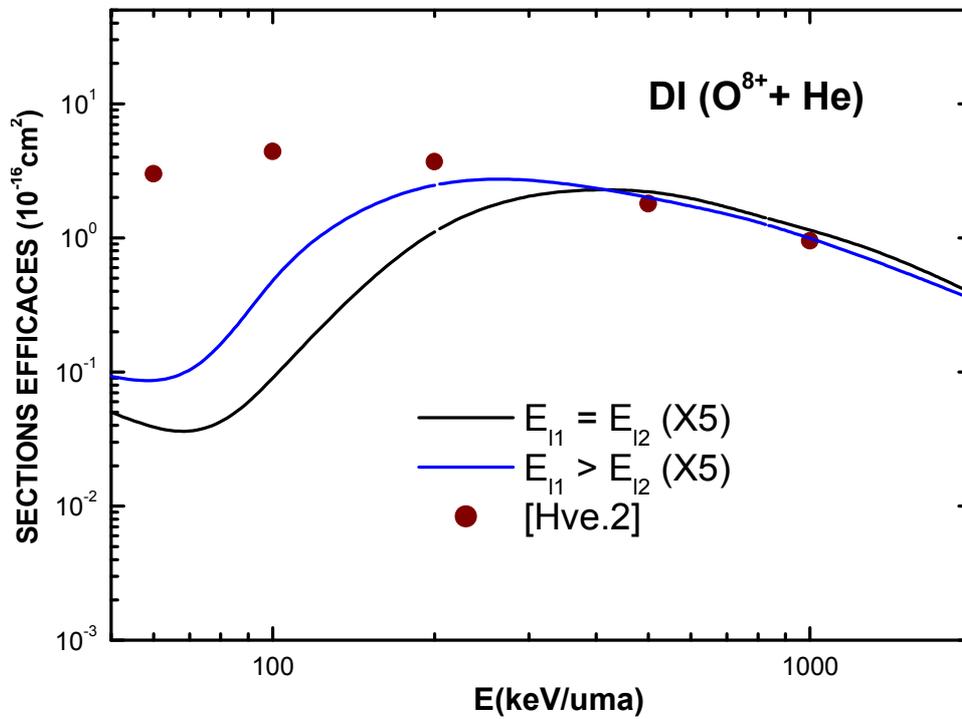


Figure (IV-25) : Sections efficaces totales de simple ionisation (SI) pour la collision ( $O^{8+} + He$ ). Notre modèle : (courbe contenue noire) pour ( $E_{11} = E_{12}$ ), (courbe contenue bleue) pour ( $E_{11} > E_{12}$ ). Données expérimentales : Hvelplund *et al.* [Hve.2].

### IV.2.3. Remarques importantes :

La *figure (IV-26)* présente une comparaison de la somme de nos résultats des sections efficaces totales pour l'ensemble de tous les processus doublement ionisants (*TI*, *DC* et *DI*) pour les collisions (ion + He), et pour les deux choix d'énergie de liaison électronique ( $E_{11} = E_{12}$  et  $E_{11} > E_{12}$ ).

Nous pouvons observer que :

(i) L'inversion du rapport (dont nous avons parlé ci-dessus) entre les résultats obtenus avec les deux choix est beaucoup moins important pour l'ensemble des processus doublement ionisants que pour chaque processus à part, et que les résultats pour ( $E_{11} = E_{12}$ ) surestiment en général ceux de l'autre choix.

(ii) L'écart entre les résultats des deux choix devient de moins en moins important en fonction de la charge du projectile. Cela peut, simplement, être expliqué par le fait que l'influence de la différence d'énergie de liaison entre les deux choix devient de moins en moins importante en comparant avec l'interaction ion-électron qui, elle, devient de plus en plus forte.

(iii) Pour les plus hautes énergies, le rapport entre les résultats des deux choix est, dans tous les cas, en faveur du premier choix.

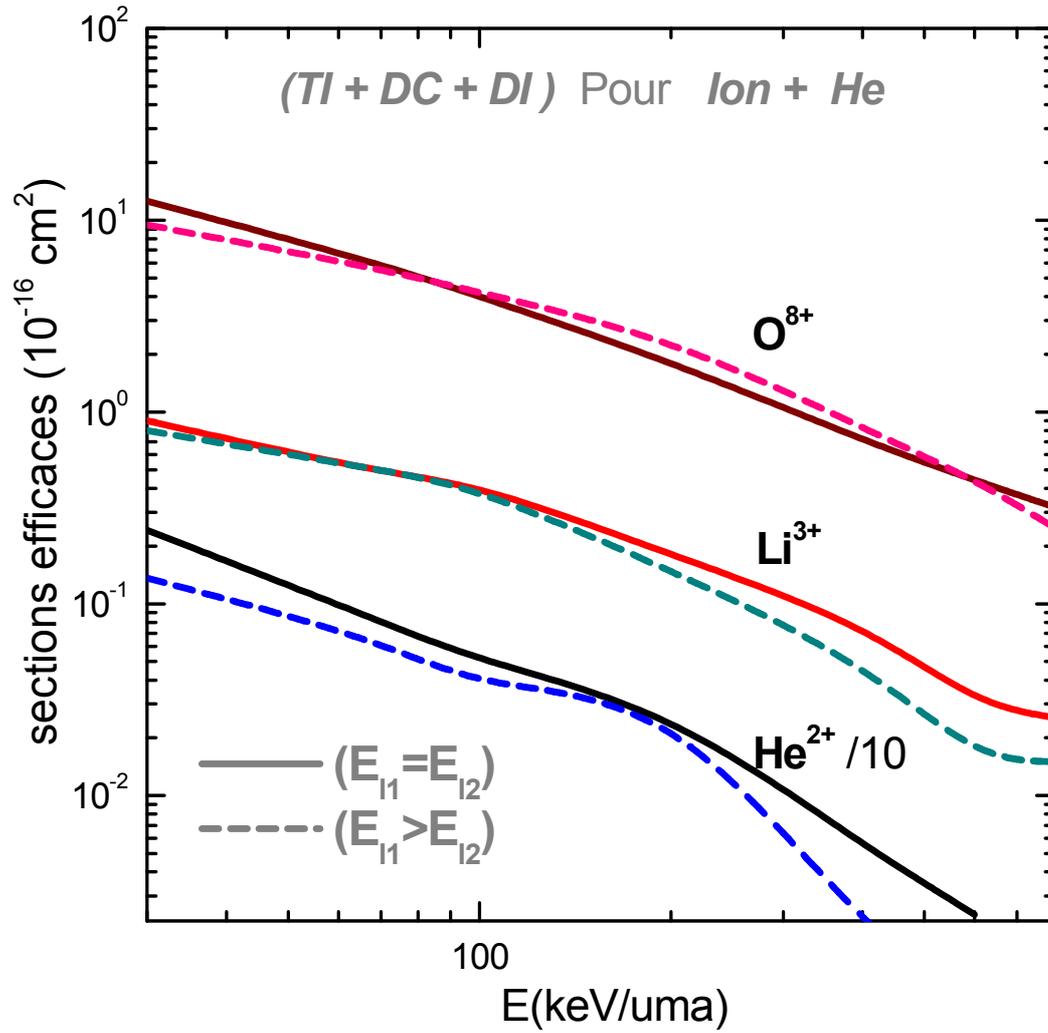


Figure (IV-26) : Comparaison de la somme de nos résultats des sections efficaces totales pour les processus doublement ionisants (TI, DC et DI) pour les collisions (*ion + He*), et pour les deux choix ( $E_{I1} = E_{I2}$  et  $E_{I1} > E_{I2}$ ).



# Chapitre V

## Résultats et Discussions

### « Cas de cibles moléculaires »

Ce chapitre présente nos résultats pour des collisions impliquant des cibles moléculaires comme H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, ainsi que des grosses molécules (Adénine, Cytosine).

#### V.1 Cible Hydrogène moléculaire :

Pour traiter cette simple molécule, nous considérons la cible comme deux atomes d'hydrogène, dans leur état fondamental, séparés par la distance d'équilibre  $1.4 \text{ u.a.}$  ( $7.414 \cdot 10^{-9} \text{ cm}$ ). Le centre de masse de H<sub>2</sub> est au centre de l'axe internucléaire, il est choisi comme à l'origine des coordonnées, et l'orientation de cet axe varie en fonction des angles  $\theta$  et  $\varphi$  (voir *Figure V-1*). Pour chaque paramètre d'impact, nous déterminons les probabilités pour un grand nombre de directions possibles de l'axe internucléaire. Le reste du traitement est similaire au traitement des cibles atomiques.

La section efficace  $\sigma_i$  pour un processus  $i$  est donnée par

$$\sigma_i = \int_0^{b_{\max}} b \cdot db \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} P_i(b, \theta, \varphi) \sin \theta \cdot d\theta, \quad (\text{V-1})$$

Les résultats que nous présentons sont pour les deux projectiles : He<sup>2+</sup> et C<sup>6+</sup>.

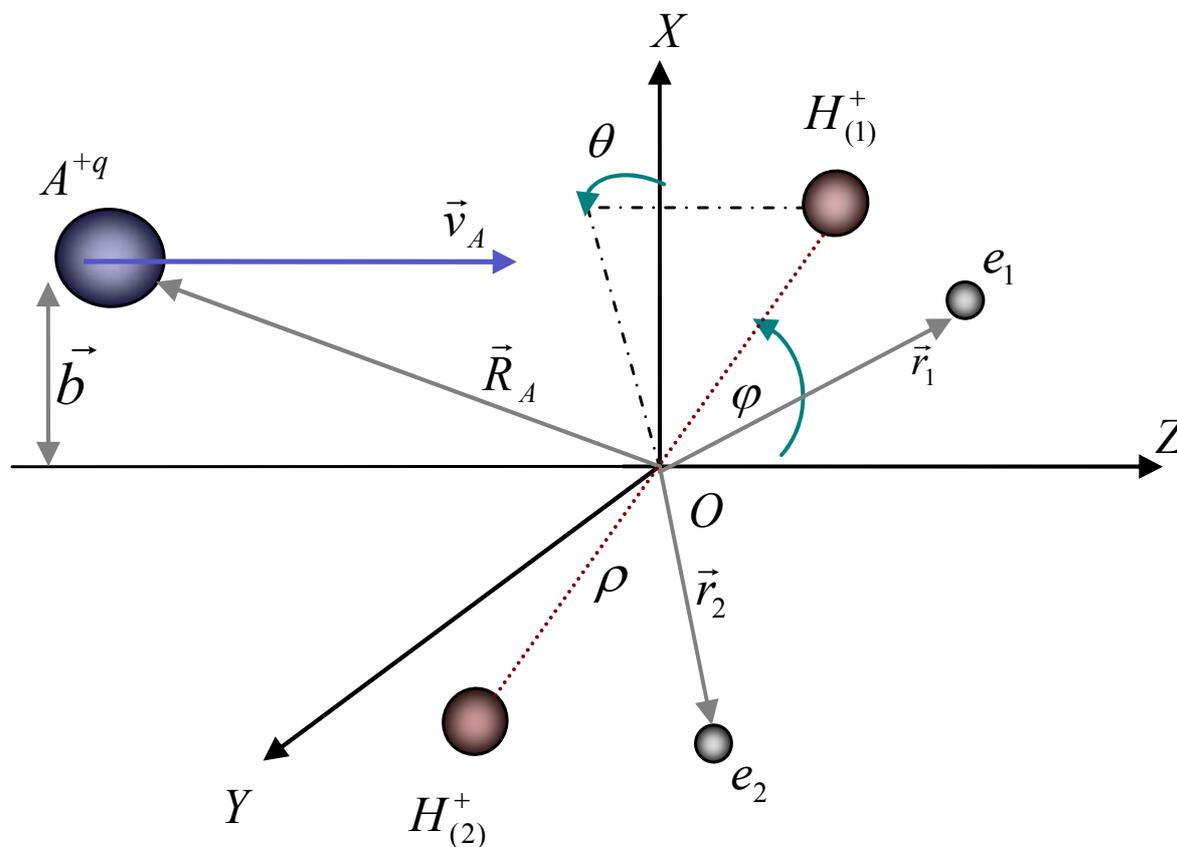


Figure V-1 : géométrie d'une collision ion-H<sub>2</sub>.

## V.1.1 Sections efficaces pour le projectile He<sup>2+</sup>:

### V.1.1.1 Processus Simples :

#### V.1.1.1.1. Simple Capture (SC):

Nos résultats [Fig.(V-2)] sont comparés avec les données expérimentales de : Hvelplund *et al.* [Hve.1], Hvelplund et Andersen [Hvel.3], Bayfield et Khayrallah [Bay.], Shah et Gilbody [Sha.7], Baragiola et Nemirovsky [Bar.], et Pivovar *et al.* [Piv.1]. Nous présentons aussi les résultats théoriques de : Shingal et Lin LCAO (Linear Combination of

Atomic Orbitals) [Shi.], Illescas et Riera CTMC [Ill.], et Busnengo *et al.* CDW-EIS [Bus.].

Nos résultats sont très satisfaisants pour des énergies supérieures à 50 keV/uma. Pour des énergies inférieures, ils surestiment l'expérience.

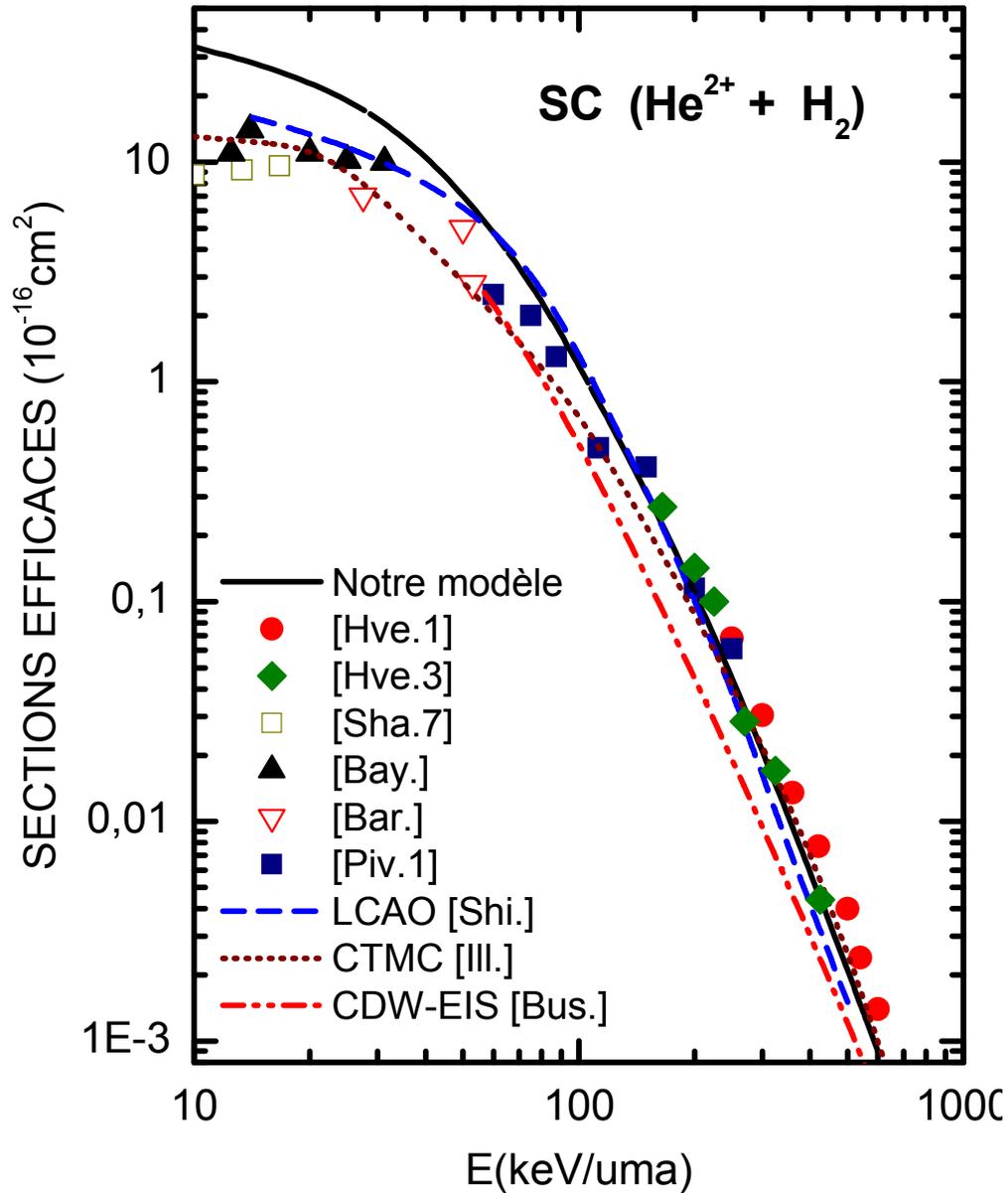


Figure (V-2) : Nos résultats de SC pour la collision ( $He^{2+} + H_2$ ) en comparaison avec les données expérimentales de : Hvelplund *et al.* [Hve.1], Hvelplund et Andersen [Hve.3], Shah et Gilbody [Sha.7], Bayfield et Khayrallah [Bay.], Baragiola et Nemirovsky [Barag.], et Pivovarov *et al.* [Piv.1]. Résultats théoriques : (dash) LCAO Shingal et Lin [Shi.], (dot) CTMC Illescas et Riera [Ill.], (dash-dot-dot) CDW-EIS Busnengo *et al.* [Bus.].

### V.1.1.1.2. Simple Ionisation (SI):

Les données expérimentales auxquelles nous comparons nos résultats [Fig.(V-3)] pour ce processus sont prises de deux sources : celle d'Edwards et Wood [Edw.], et l'autre de Shah et Gilbody [Sha.9]. Nous avons aussi les résultats théoriques IPC (Independent-Parameter Calculations) d'Edwards et Wood [Edw.], et CTMC d'Illescas et Riera [III.]. Shah et Gilbody [Sha.9] ne présentent pas directement les sections efficaces de simple ionisation, mais distinguent entre deux types de simple ionisation : l'ionisation dissociative (di) et l'ionisation non-dissociative (ni), de la molécule d'hydrogène après avoir été ionisée. En fait, la section efficace de SI égale à la somme des sections efficaces de ces deux processus (di et ni).

Nos résultats surestiment l'expérience avec un rapport entre environ 2.5 pour 30 keV/uma et 1.5 pour 750 keV/uma. Le comportement, en général, est plutôt satisfaisant. Nous constatons que les données expérimentales disponibles se situent entre les résultats CTMC de Illescas et Riera et les nôtres, avec une tendance vers la convergence pour les grandes énergies.

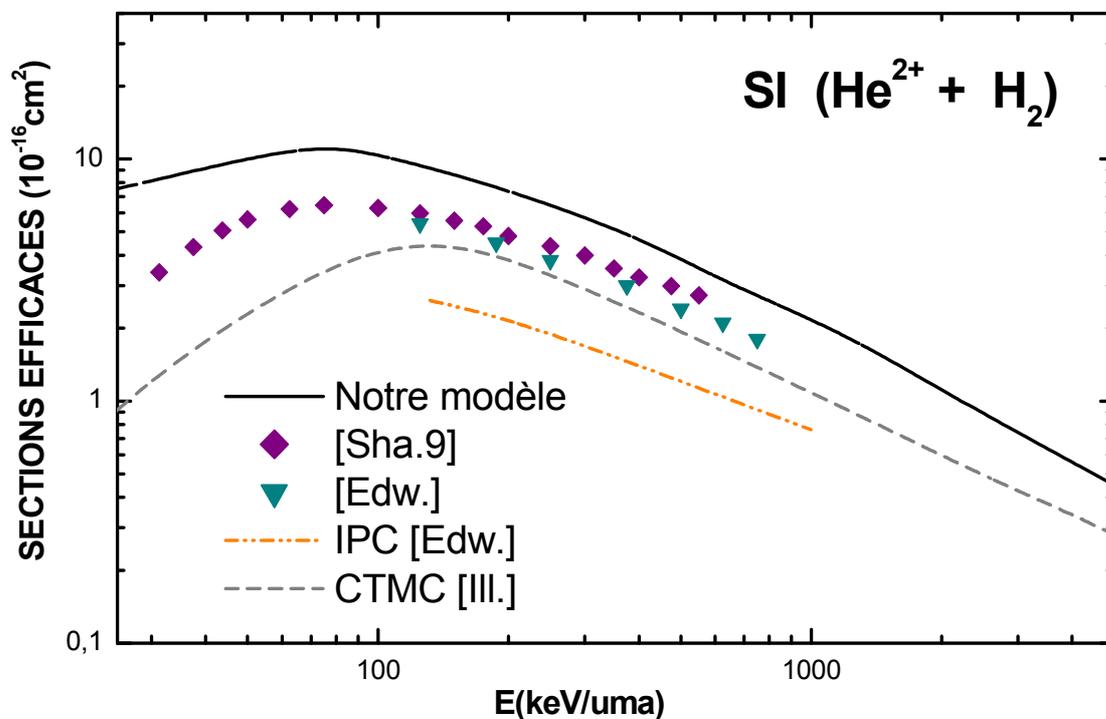


Figure (V-3) : Nos résultats de SI pour la collision ( $He^{2+} + H_2$ ) en comparaison avec les données expérimentales de Shah et Gilbody [Sha.9], et Edwards et Wood [Edw.]. Les résultats théoriques : (dash-dot-dot) d'Edwards et Wood (IPC) (Independent-Parameter Calculations) [Edw.], et (dash) Illescas et Riera (CTMC) [III.].

### V.1.1.2 Processus Doubles :

#### V.1.1.2.1. Transfert Ionisation (TI):

La figure (V-4) montre nos résultats les données expérimentales de : Shah *et al.* [Sha.8], Shah et Gilbody [Sha.9], et Afrosimov *et al.* [Afr.2].

Bien que nos résultats sous-estiment et les données expérimentales disponibles, le comportement de notre courbe est presque identique à celui de l'expérience.

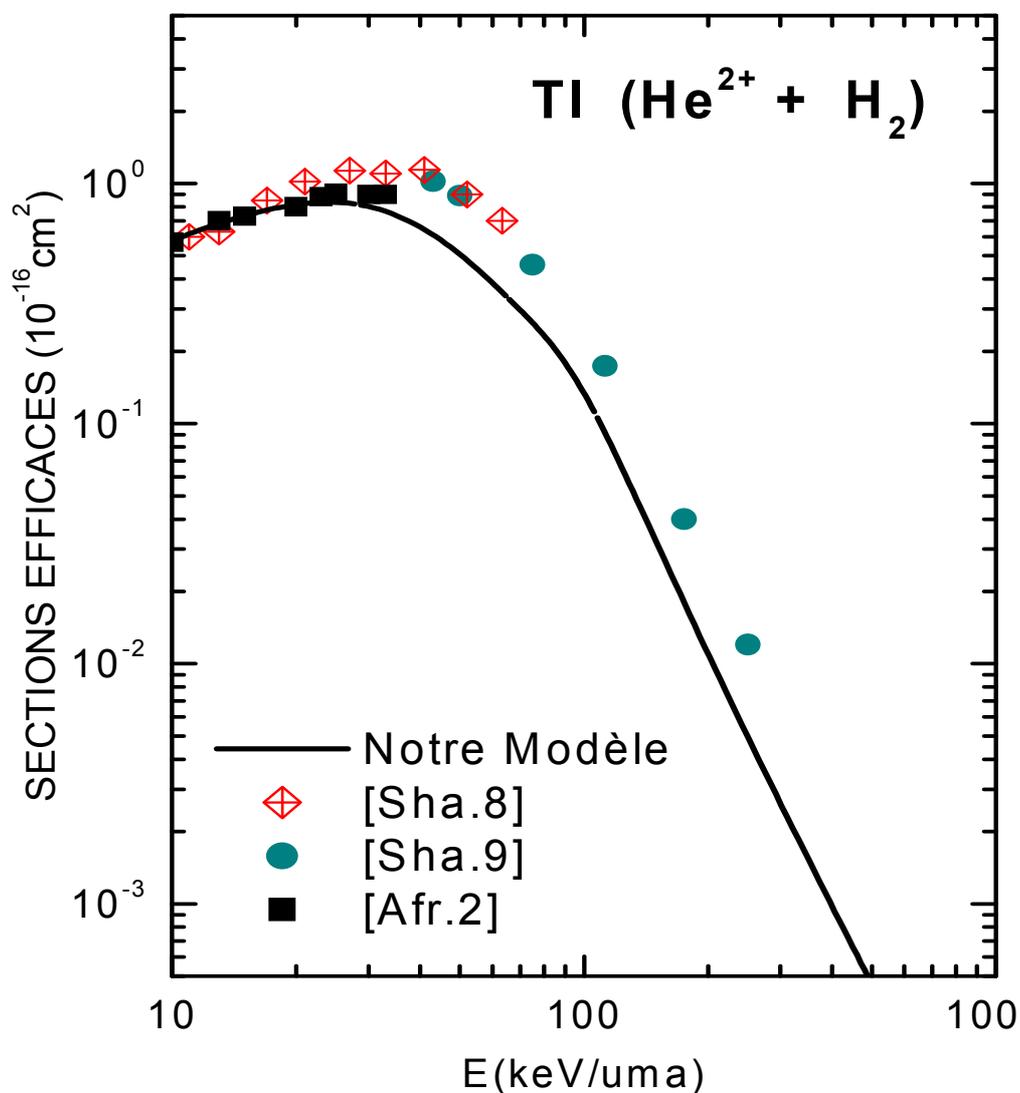


Figure (V-4) : Nos résultats de TI pour la collision ( $\text{He}^{2+} + \text{H}_2$ ) en comparaison avec les données expérimentales de Shah *et al.* [Sha.8], Shah et Gilbody [Sha.9], et Afrosimov *et al.* [Afr.2]. Noter que nos résultats sont multipliés par 2.

### V.1.1.2.2. Double Capture (DC):

Nos résultats pour DC [Fig.(V-5)] sont comparés avec des données expérimentales de : Hvelplund *et al.* [Hve.1], Bayfield et Khayrallah [Bay.], Barnett *et al.* [Barn.], Baragiola et Nemirovsky [Bar.], et Olson *et al.* [Ols.5].

La magnitude et le comportement de nos résultats sont globalement bons bien qu'ils sous-estiment les données expérimentales.

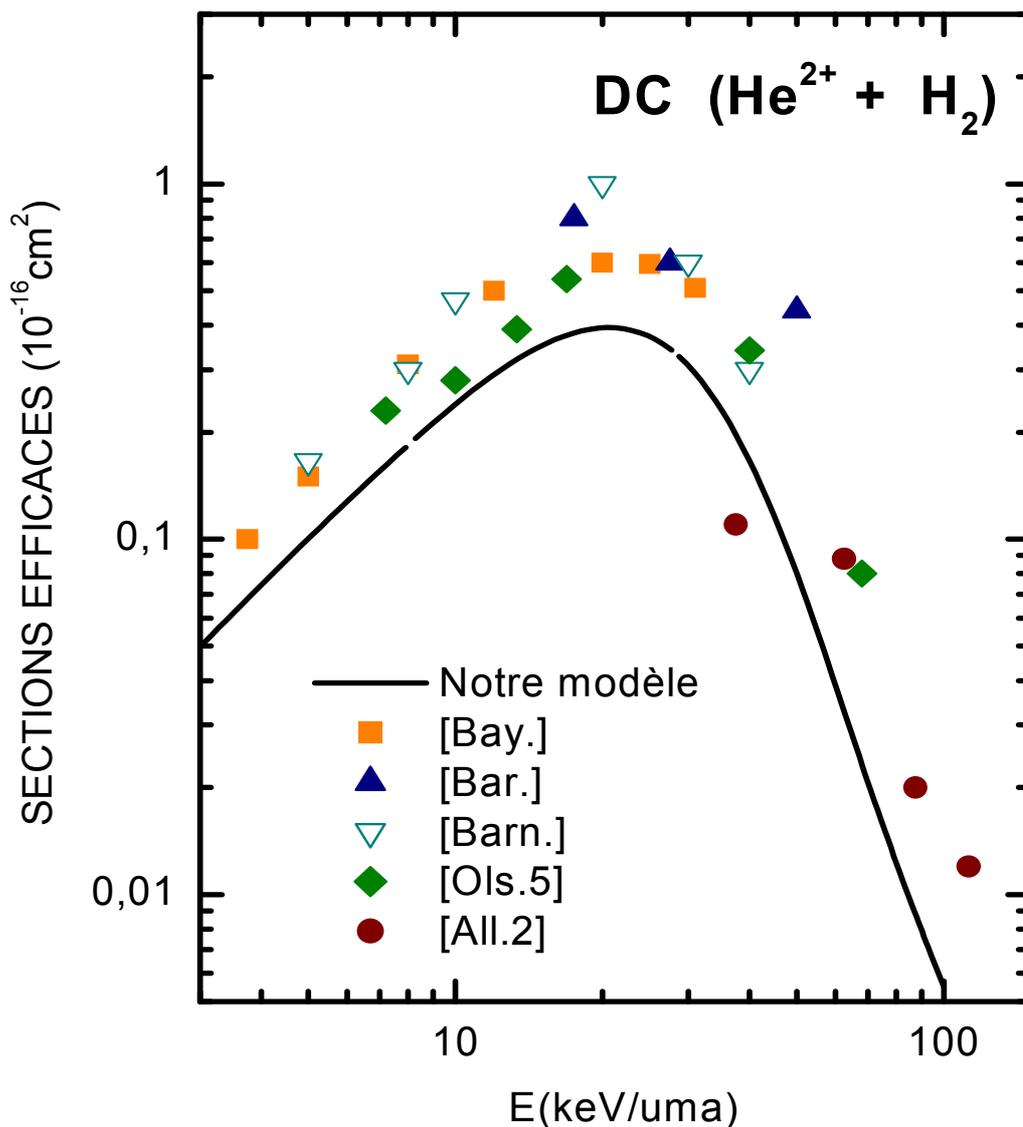


Figure (V-5) : Nos résultats de DC pour la collision  $\text{He}^{2+} + \text{H}_2$  en comparaison avec les données expérimentales de : Bayfield et Khayrallah (carré) [Bay.], Baragiola et Nemirovsky (up-triangle) [Bar.], Barnett *et al.* (down-triangle) [Barn.], Olson *et al.* (diamant) [Ols.5], et Allisson (cercle) [All.2].

**V.1.1.2.3. Double Ionisation (DI):**

Nos résultats pour *DI* [Fig.(V-6)] sont comparés avec les données expérimentales et théoriques IPC (Independent-Parameter Calculations) d' Edwards et Wood [Edw.].

Nous obtenons un très bon accord avec les données expérimentales disponibles.

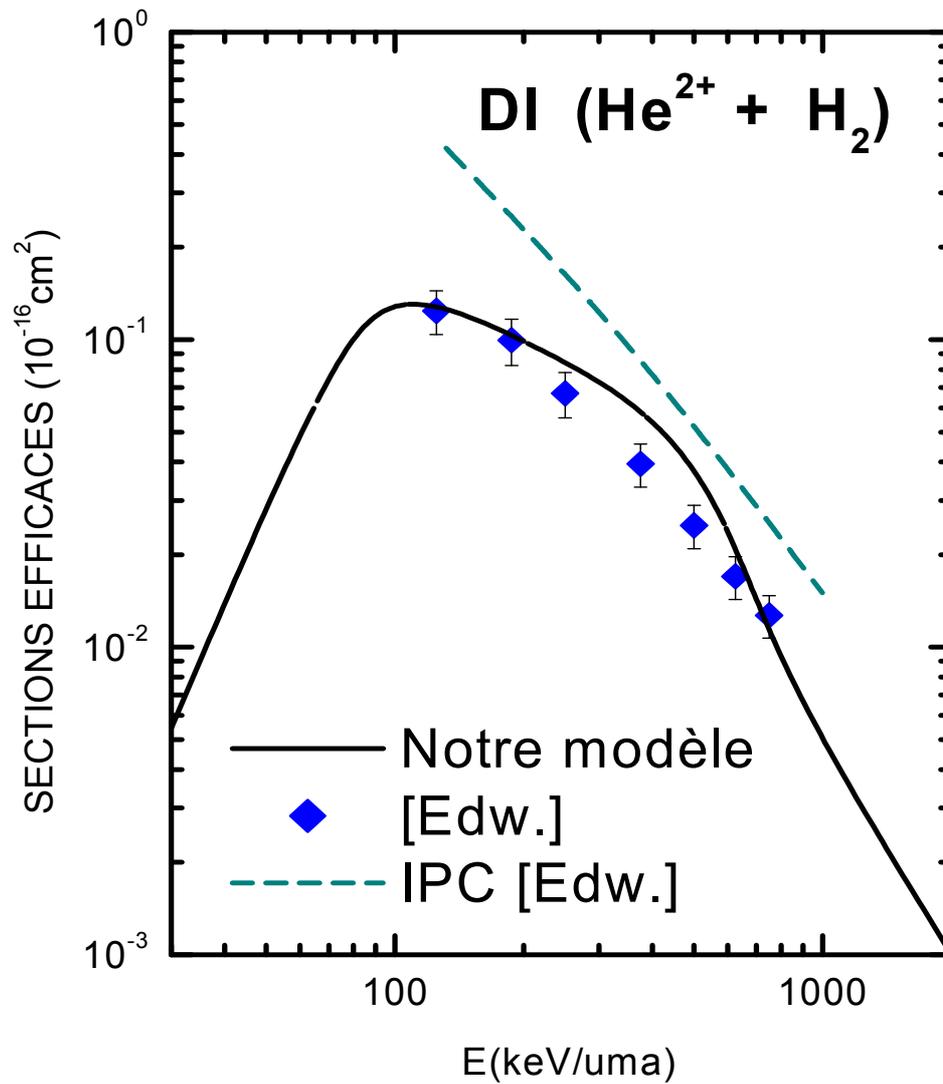


Figure (V-6) : Nos résultats de DI pour la collision  $He^{2+} + H_2$  en comparaison avec les données expérimentales et théoriques IPC (Independent-Parameter Calculations) d'Edwards et Wood [Edw.].

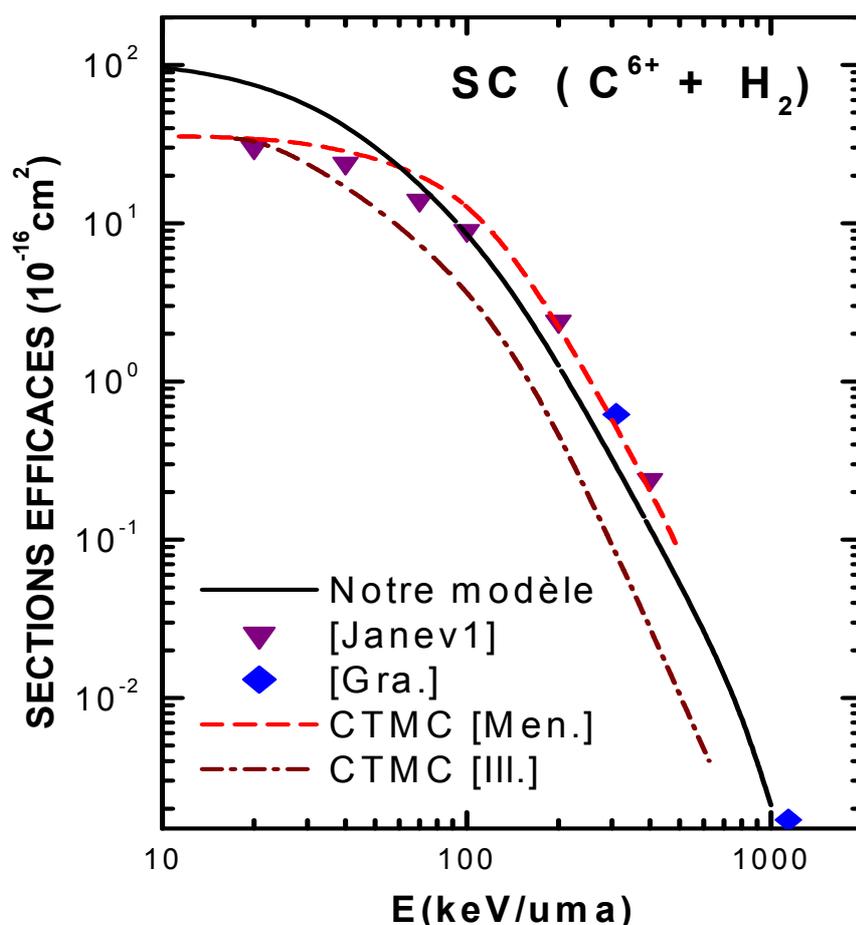
## V.1.2 Sections efficaces pour le projectile $C^{6+}$ :

### V.1.2.1 Processus Simples :

#### V.1.2.1.1. Simple Capture (SC):

La *figure (V-7)* montre nos résultats en comparaison avec les données expérimentales de Janev *et al.* [Jan.2], et de Graham *et al.* [Gra.], et avec les résultats théoriques du modèle CTMC de Meng *et al.* [Men.].

Le comportement général de notre courbe est très satisfaisant à partir d'environ 70 keV/uma, avec une surestimation avant cette énergie-là, et une légère sous-estimation pour les énergies comprises entre 200 et 400 keV/uma. Nous constatons que nos résultats sont nettement meilleurs que ceux du modèle CTMC de Illescas et Riera [Ill.] qui eux sous-estiment les données expérimentales.

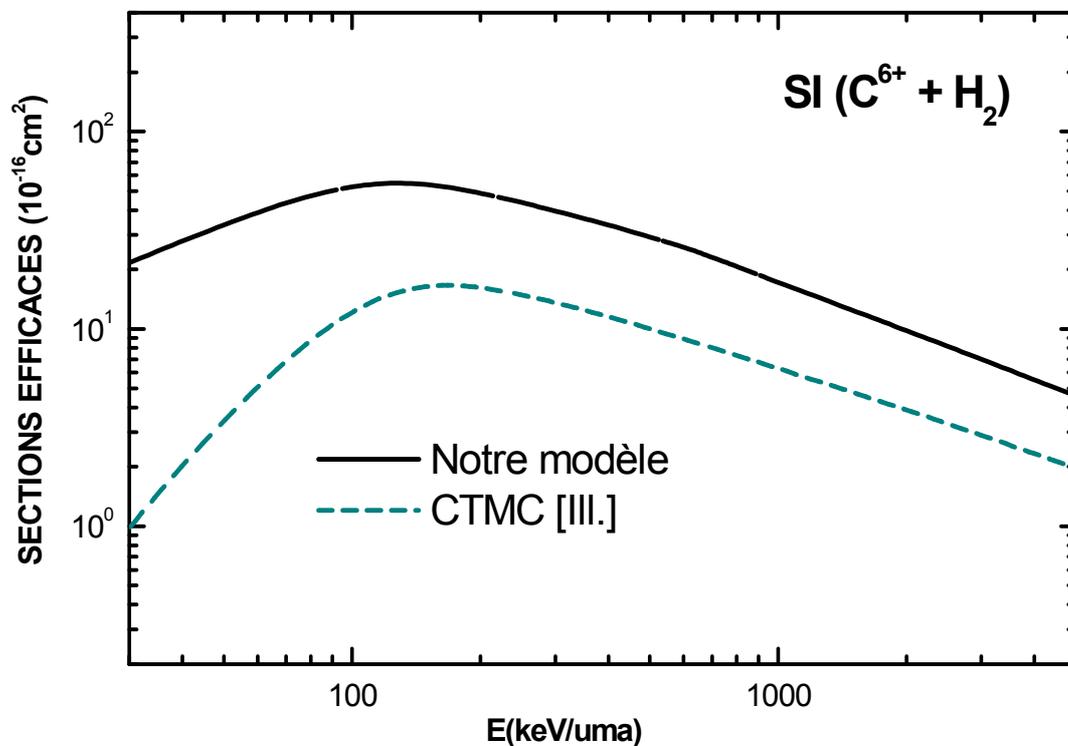


*Figure (V-7)* : Nos résultats de SC pour la collision  $C^{6+} + H_2$  en comparaison avec les données expérimentales de : Janev *et al.* [Jan.2], et de Graham *et al.* [Gra.], et avec les résultats théoriques du modèle CTMC de Meng *et al.* [Men.], et CTMC de Illescas et Riera [Ill.].

### V.1.2.1.2. Simple Ionisation (SI):

Nos résultats présentés en *figure (V-8)* sont comparés avec les résultats du modèle CTMC d'Illescas et Riera [III.], les seules données que nous avons pu trouvé pour ce processus.

En comparant les *figures (V-3) et (V-8)* nous pouvons constater que le comportement général et relatif de nos résultats et de ceux du modèle CTMC d'Illescas et Riera sont ressemblants dans les deux cas.



*Figure (V-8)* : Nos résultats de SI pour la collision  $C^{6+} + H_2$  en comparaison avec les résultats du modèle CTMC d'Illescas et Riera [III.].

### V.1.2.2 Processus Doubles :

Nous présentons nos courbes concernant les processus de *TI*, *DC* et *DI* en une seule *figure (V-9)*, car il n'existe pas d'autres données expérimentales ou théoriques pour chacun d'entre eux.

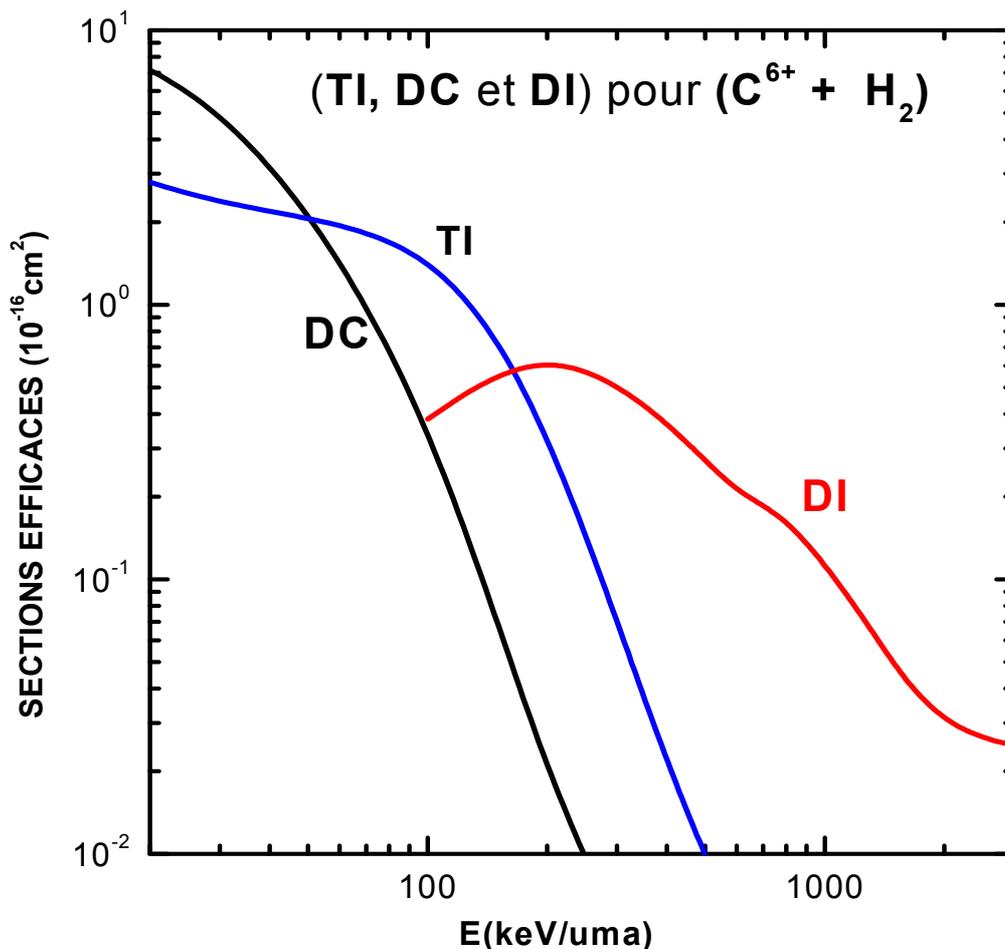
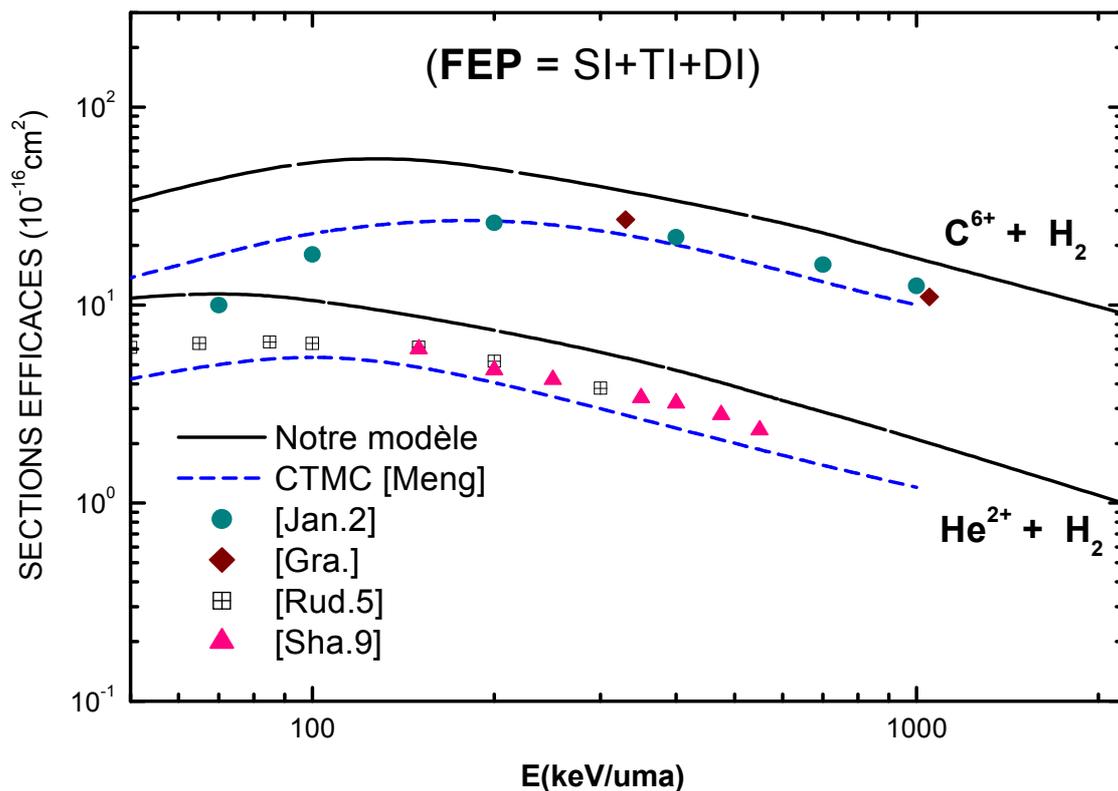


Figure (V-9) : Nos résultats de : TI, DC et DI pour la collision  $C^{6+} + H_2$ .

Mais, en fait, il existe des données expérimentales et théoriques pour ce système ( $C^{6+} + H_2$ ) concernant un processus appelé **FEP** (Free-Electron Production : « Production d'Electron Libre ») - Voir Meng *et al.* [Men.]. **FEP** représente, à la fois, la somme de **SI**,

$DI$  et  $TI$ , donc ne prend pas en compte les processus de capture ( $SC$  et  $DC$ ). *Figure (V-10)* présente nos courbes de FEP comparées avec les données expérimentales de : (**pour  $He^{2+} + H_2$** ) : Janev *et al.* [Jan.2], et Graham *et al.* [Gra.] ; (**pour  $C^{6+} + H_2$** ) : Rudd *et al.* [Rud.5], et Shah et Gilbody [Sha.9]. Nous présentons aussi les résultats théoriques du modèle CTMC de Meng *et al.* [Men.] pour les deux systèmes.

Bien que nos courbes surestiment l'expérience, nous constatons une nette convergence pour les grandes énergies, ce qui est attendu pour notre modèle. Le comportement général de nos résultats est plutôt raisonnable. En fait, la comparaison entre les résultats des deux systèmes peut nous conduire à attribuer cette surestimation, principalement, au processus  $SI$  pour les deux cas comme le montre la *figure (V-3)*.



*Figure (V-10)* : Nos résultats de FEP (Free-Electron Production) en comparaison avec les données expérimentales de : (*pour  $C^{6+} + H_2$* ) : (cercle) Janev *et al.* [Jane.2], et (diamant) Graham *et al.* [Gra.] ; (*pour  $He^{2+} + H_2$* ) : (carré) Rudd *et al.* [Rud.5], et (triangle) Shah et Gilbody [Sha.9]. Les résultats théoriques : (dash) modèle CTMC de Meng *et al.* [Men.] pour les deux systèmes.

## V.2 Cibles biologiques :

Bien que l'application de notre modèle au traitement des collisions avec une cible d'hydrogène moléculaire soit simple, la molécule étant diatomique, son application pour des molécules plus compliquées devient très rapidement lourde. Il faut noter, en effet, que le nombre de degrés de liberté devient très vite important, ce qui alourdi considérablement le calcul. Ceci est le cas des collisions avec une biomolécule.

Les systèmes que nous avons étudiés sont : ( $H^+ + H_2O$ ), ( $He^{2+} + H_2O$ ), ( $He^{2+} + \text{Adénine}$ ) et ( $He^{2+} + \text{Cytosine}$ ).

### V. 2.1 Collisions ion + H<sub>2</sub>O :

Pour la molécule d'eau, nous avons appliqué notre modèle en utilisant les énergies de liaison données par Moccia [Moc.] : -12.63eV, -14.73eV, -18.55eV, -32.20eV et -532.0eV qui correspondent, respectivement, aux orbitales moléculaires :  $^1B_1$ ,  $^3A_1$ ,  $^1B_2$ ,  $^2A_1$  et  $^1A_1$ .

L'énergie de l'orbitale  $^1A_1$  (-532.eV) est largement inférieure aux autres énergies. Nous l'avons enlevée dans les calculs des sections efficaces des processus ionisants, car son importance est réduite aux *très* hautes énergies. Ainsi, nous avons réalisé les calculs des quatre orbitales :  $^1B_1$ ,  $^3A_1$ ,  $^1B_2$  et  $^2A_1$ .

#### V.2.1.1 Processus Simples :

##### V.2.1.1.1 Simple Capture (SC):

Les *figures (V-11) et (V-12)* présentent nos résultats pour les projectiles  $H^+$  et  $He^{2+}$ , respectivement. Nos résultats sont comparés avec les données expérimentales de : (pour  $H^+ + H_2O$ ) : Gobet *et al.* [Gob.], et Rudd *et al.* [Rud.2] ; (pour  $He^{2+} + H_2O$ ) : Rudd *et al.* [Rud.4]. Nous présentons aussi les résultats théoriques d'Errea *et al.* [Err.2] : CTMC et CTMC-IPM (Independent Particle Model) pour  $H^+ + H_2O$ .

Comme nous avons vu précédemment, l'accord entre nos résultats et l'expérience devient satisfaisant, pour le processus  $SC$ , à partir d'une certaine énergie d'impact (ici, environ 70 et 200 keV/uma pour  $H^+ + H_2O$  et  $He^{2+} + H_2O$ , respectivement). Mais, aussi, comme avec des cibles atomiques, nous avons une nette surestimation pour les faibles énergies d'impact. La comparaison avec les résultats théoriques disponibles (pour  $H^+ + H_2O$ ) montre que les deux modèles CTMC et CTMC-IPM d'Errea *et al.* convergent vers nos résultats pour les hautes énergies.

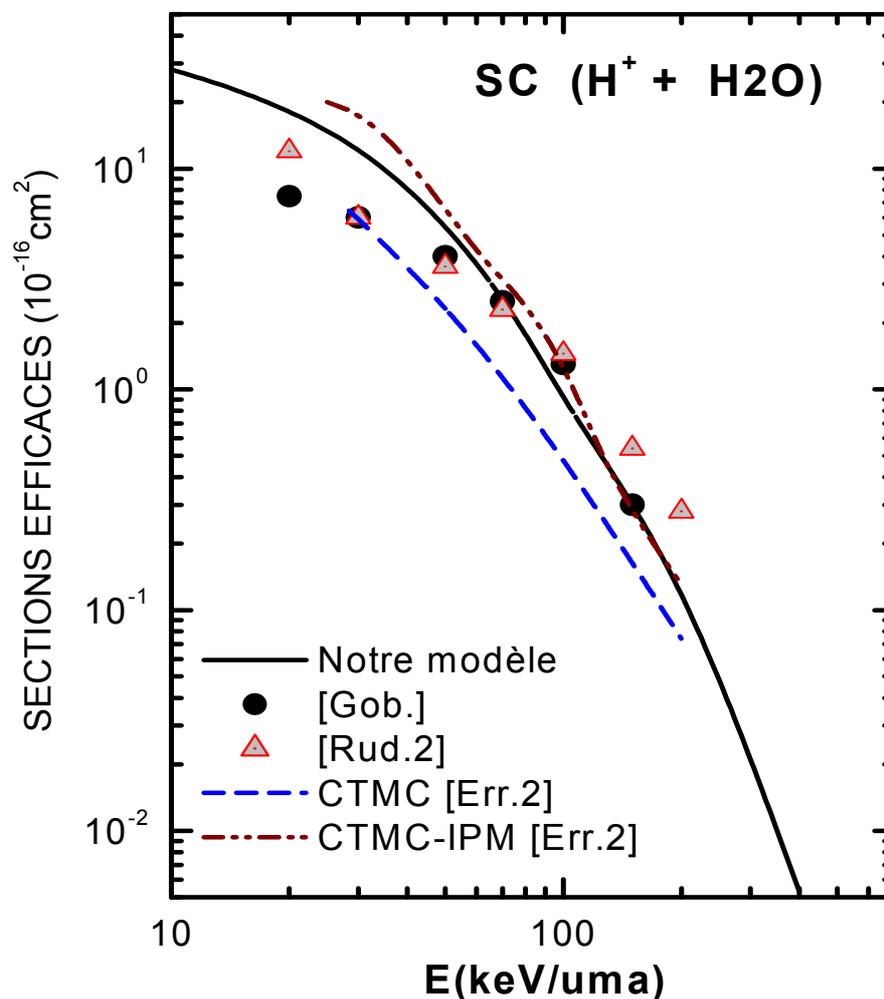


Figure (V-11) : section efficace totale de  $SC$  pour  $H^+ + H_2O$ . (full-line) notre modèle. Données expérimentales : (cercle) Gobet *et al.* ([Gob.], (triangle) Rudd *et al.* [Rud.4]. Résultats théoriques : (dash) CTMC et (dash-dot-dot) CTMC-IPM d'Errea *et al.* [Err.2].

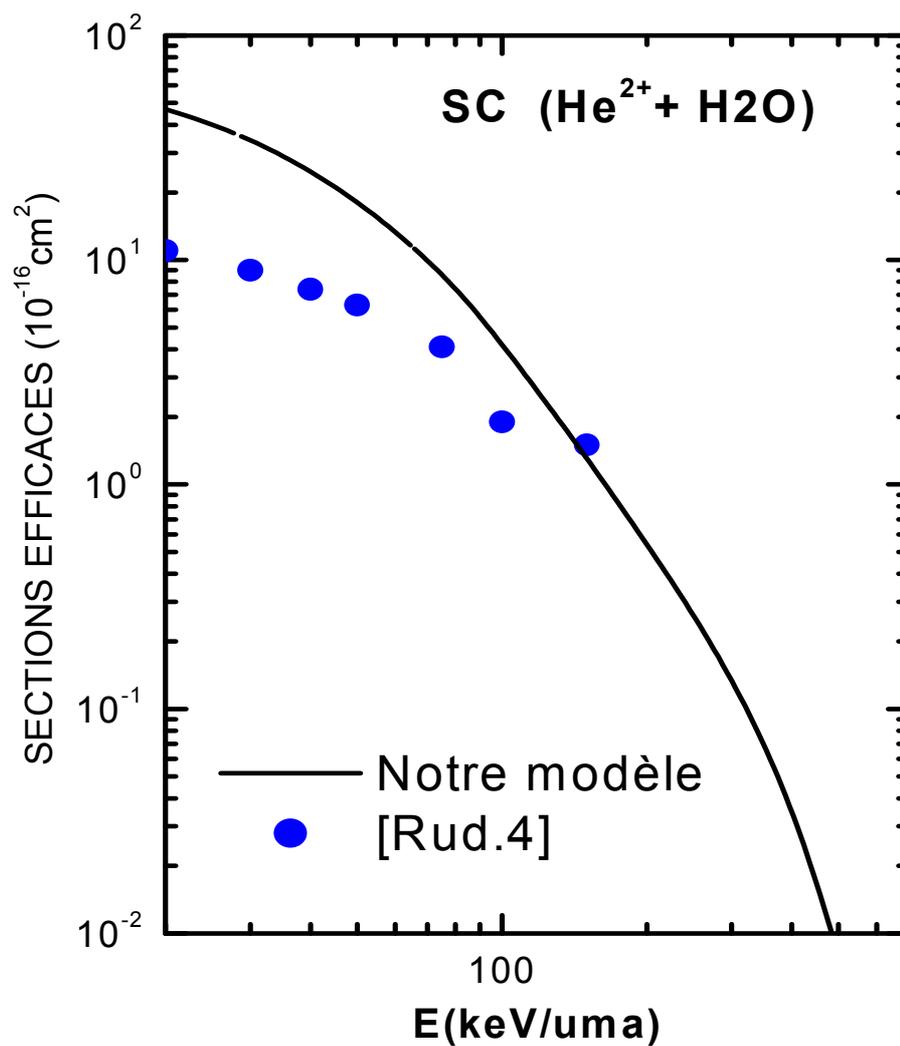


Figure (V-12) : section efficace totale de SC pour  $He^{2+} + H_2O$ . (full-line) notre modèle. Données expérimentales : (cercle) Rudd *et al.* [Rud.4].

**V.2.1.1.2 Simple Ionisation (SI):**

Les figures (V-13) et (V-14) présentent nos résultats pour les projectiles  $H^+$  et  $He^{2+}$ , respectivement. Nous présentons les données expérimentales : (pour  $H^+ + H_2O$ ) : Rudd *et al.* ([Rud.2] et [Rud.3]), et Bolorizadeh et Rudd [Bol.] ; (pour  $He^{2+} + H_2O$ ) : Rudd *et al.* [Rud.4], Toburen *et al.* [Tob.], Rudolph et Melton [Rudo.]. Les résultats théoriques sont : (pour  $H^+ + H_2O$ ) de : Boudrioua *et al.* (FBA-CW) [Bou.], Gervais *et al.* [Ger.], et Errea *et al.* (CTMC) [Err.2] ; (pour  $He^{2+} + H_2O$ ) : de Champion *et al.* (FBA-CW) [Cha.].

Nous avons ici un comportement semblable à ce que nous avons déjà vu, c.-à-d., une nette surestimation pour les faibles énergies, et un comportement satisfaisant aux grandes énergies. Nous constatons que tous les résultats théoriques convergent pour le premier cas, et qu'ils sous-estiment l'expérience.

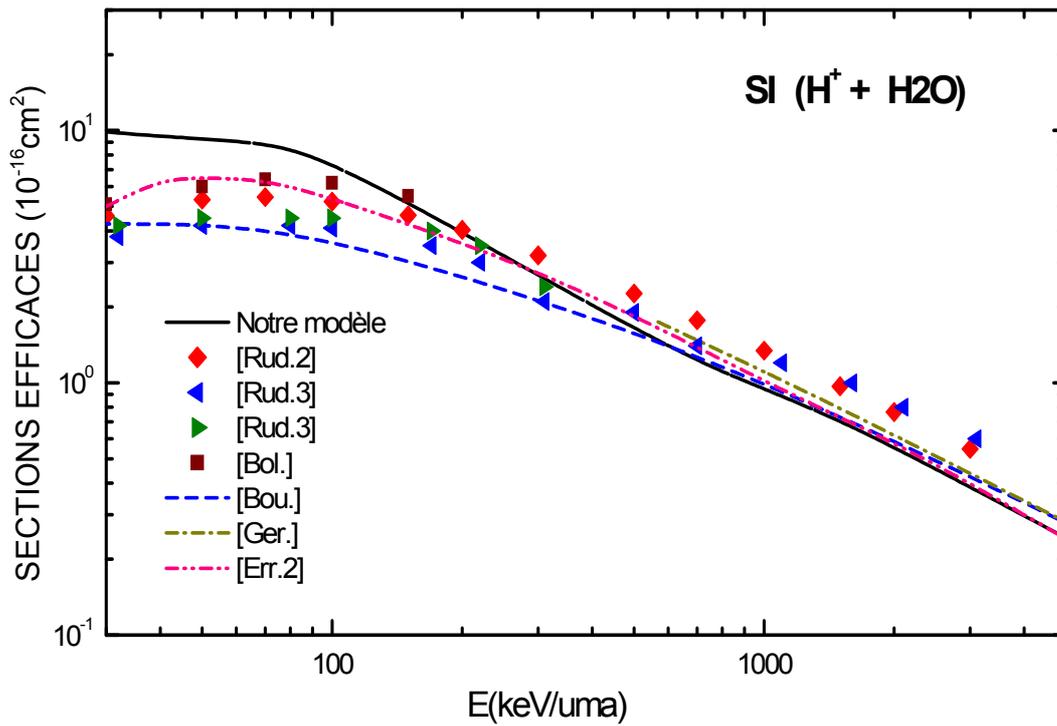


Figure (V-13) : section efficace totale de SI pour  $H^+ + H_2O$ . (full-line) notre modèle. Données expérimentales de : (diamant) Rudd *et al.* [Rud.2], (triangle) Rudd *et al.* [Rud.3], et (carré) Bolorizadeh et Rudd [Bol.]. Les résultats théoriques de : Boudrioua *et al.* (FBA-CW) [Bou.], Gervais *et al.* [Ger.], et (dash-dot-dot) Errea *et al.* (CTMC) [Err.2].

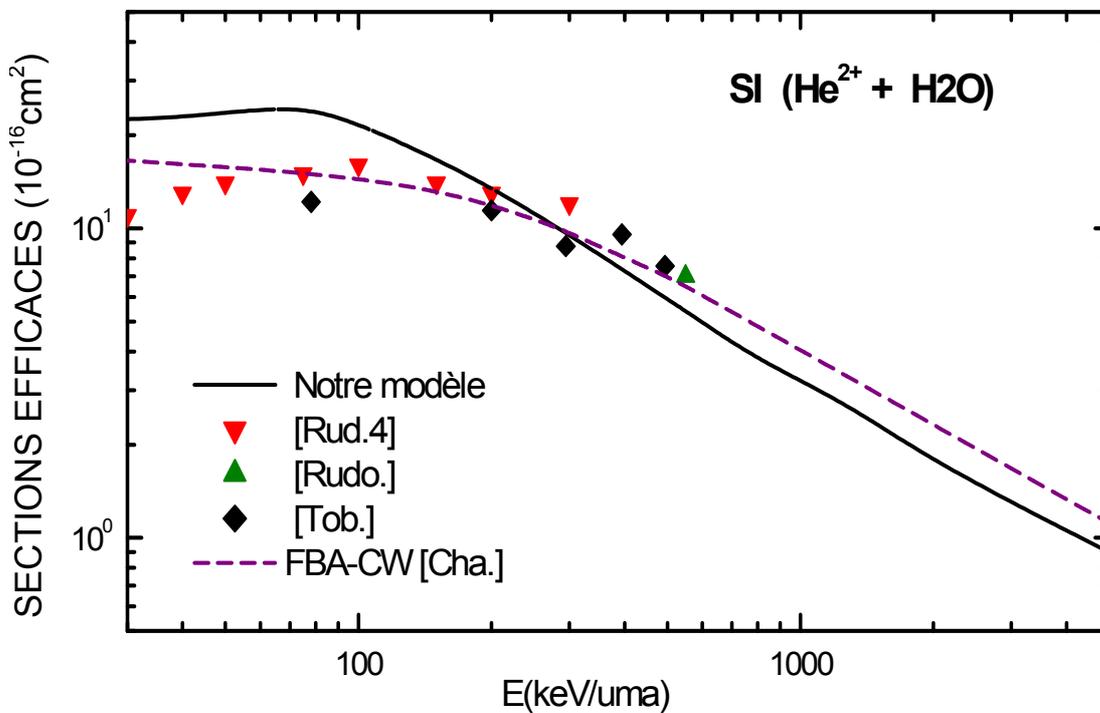


Figure (V-14) : section efficace totale de SI pour  $He^{2+} + H_2O$ . (full-line) notre modèle. Données expérimentales de : (down-triangle) Rudd *et al.* [Rud.4], (up-triangle) Rudolph *et al.* [Rudo.], et (diamant) Toburen *et al.* [Tob.]. Les résultats théoriques de (dash) Champion *et al.* (FBA-CW) [Cha.].

### V.2.1.2 Processus Doubles :

Les seules données expérimentales disponibles, à notre connaissance, sont pour la double capture (DC) pour le cas de  $He^{2+} + H_2O$  (fig. V-15) : Rudd *et al.* [Rud.4].

La comparaison avec l'expérience (pour DC) montre que nos résultats sous-estiment les données expérimentales, bien que le comportement général soit plutôt acceptable.

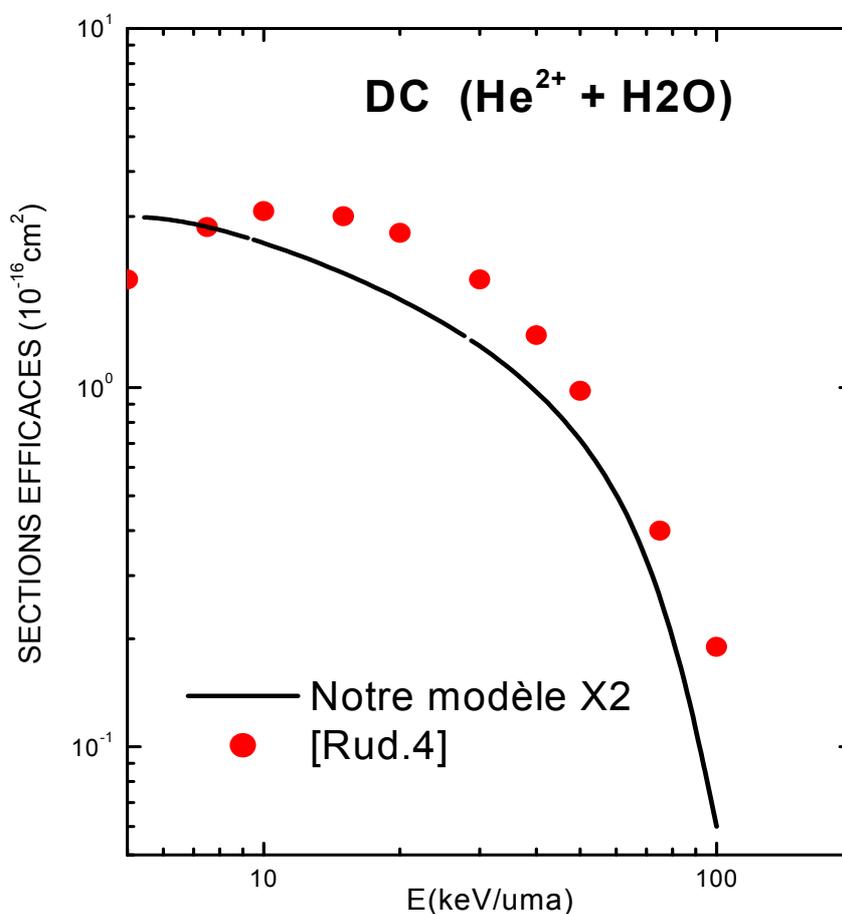


Figure (V-15) : section efficace totale de DC pour  $He^{2+} + H_2O$ . (full-line) notre modèle (X 2). Données expérimentales de : (cercle) Rudd *et al.* [Rud.4].

Les figures (V-16) et (V-17) présentent nos résultats pour les processus *TI* et *DI* pour les deux systèmes collisionnels ( $H^+ + H_2O$ ) et ( $He^{2+} + H_2O$ ), respectivement.

Figure (V-16) : Nos résultats de TI pour les projectiles  $H^+$  et  $He^{2+}$  sur  $H_2O$ . (dash) CTMC d'Errea *et al.* [Err.2] pour  $H^+ + H_2O$  (divisés par 10).

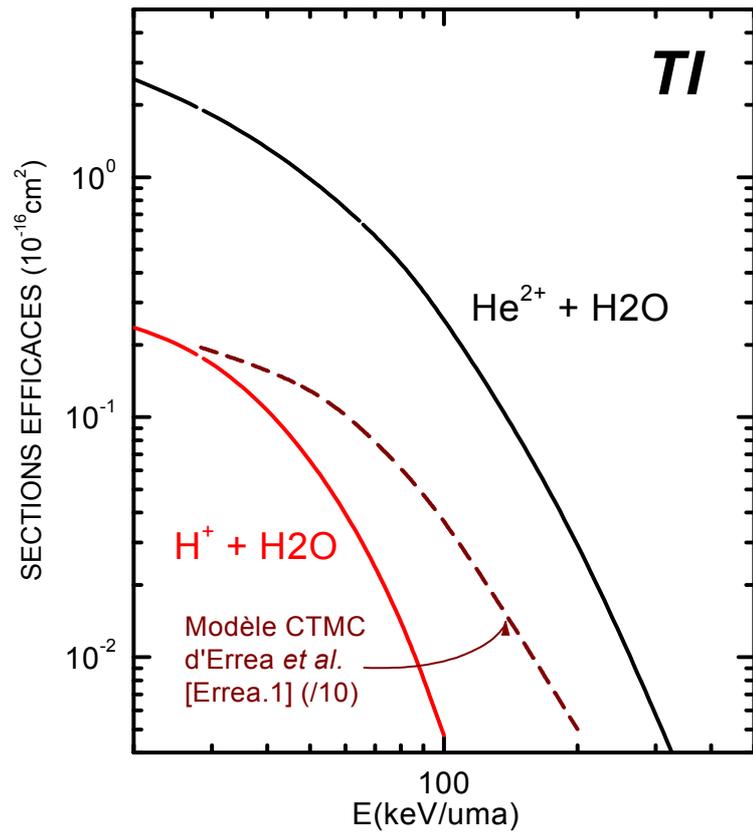
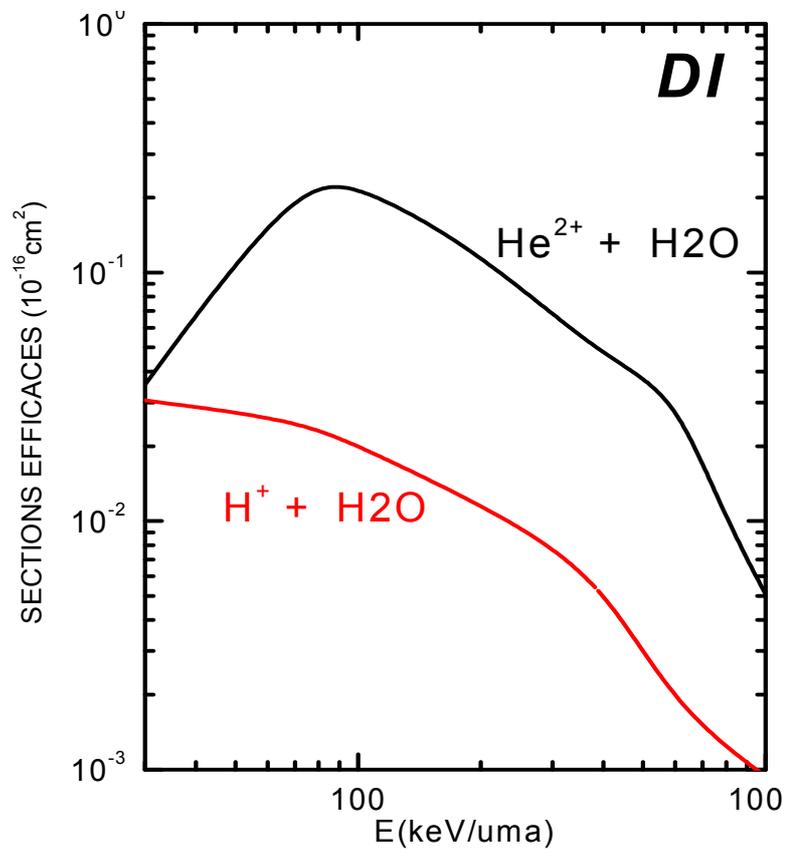


Figure (V-17) : Nos résultats de DI pour les projectiles  $H^+$  et  $He^{2+}$  sur  $H_2O$ .



## V. 2.2 Cibles base ADN:

De manière similaire à la cible d'eau nous avons calculé les sections efficaces des processus ionisants pour des cibles d'*Adénine* et de *Cytosine*.

Dans le tableau (*V-1*) nous donnons les énergies de liaison calculées par Ruiz Lopez [Rui.] pour les deux molécules biologiques étudiées (*Adénine* et *Cytosine*). Nous avons 35 niveaux énergétiques pour l'*Adénine* et 29 pour la *Cytosine*. Parmi ces niveaux, nous avons négligé les dix premiers (*en italique* - voir tableau V-1) pour l'*Adénine*, et les huit premiers pour la *Cytosine*, vu leur niveau très profond par rapport aux autres niveaux.

Dans la *figure (V-18 a et b)* nous montrons pour l'*Adénine* et la *Cytosine* nos sections efficaces totales pour tous les processus ionisants étudiés, soit *SC*, *SI*, *TI*, *DC* et *DI* et pour les deux systèmes collisionnels mentionnés. Nos résultats sont donnés sans comparaison car il n'existe ni données expérimentales ni théoriques pour comparer avec.

Nous pouvons constater la ressemblance du comportement général de nos courbes pour les cibles base ADN avec les résultats obtenus pour la cible d'eau (Comparer fig. V-18 et V-19). En fait, c'est cette ressemblance qui nous donne un minimum de fiabilité de nos résultats pour l'*Adénine* et la *Cytosine*, au moins pour les processus simples qui sont bien décrits par notre modèle.

La comparaison entre les résultats d'*Adénine (fig. V-18-a)* et de *Cytosine (fig. V-18-b)* montre que la magnitude des sections efficaces correspondantes au même processus ionisant sont proches l'une à l'autre pour les deux cas. Ceci peut être expliqué par le fait que les niveaux énergétiques supérieurs sont proches entre eux, aussi, pour les deux cibles (voir *tableau V-1*), car les niveaux les plus profonds ne sont importants que pour des très hautes énergies.

MO n°	Adénine <i>E</i> (- eV)	Cytosine <i>E</i> (- eV)
1	425.37	557.77
2	423.90	425.09
3	423.57	424.18
4	423.31	422.77
5	403.08	309.35
6	308.36	308.78
7	308.10	308.32
8	307.88	305.97
9	307.71	37.49
10	306.10	35.17
11	37.15	34.26
12	35.24	31.70
13	33.78	28.96
14	32.18	24.47
15	31.26	23.73
16	28.04	20.72
17	24.25	20.45
18	23.75	19.33
19	22.97	18.29
20	21.02	16.97
21	19.87	16.83
22	18.88	16.46
23	18.22	15.93
24	17.26	14.43
25	17.06	13.17
26	16.55	11.89
27	15.99	11.22
28	15.01	10.42
29	13.41	9.19
30	13.39	
31	12.20	
32	11.45	
33	11.04	
34	10.02	
35	8.31	

**Tableau (V-1)** : énergies moléculaires orbitales (en -eV) pour l'Adénine et la Cytosine. Données fournies par Ruiz Lopez [Rui.]. Les niveaux dont la valeur est en italique ont été ignorés dans notre calcul.

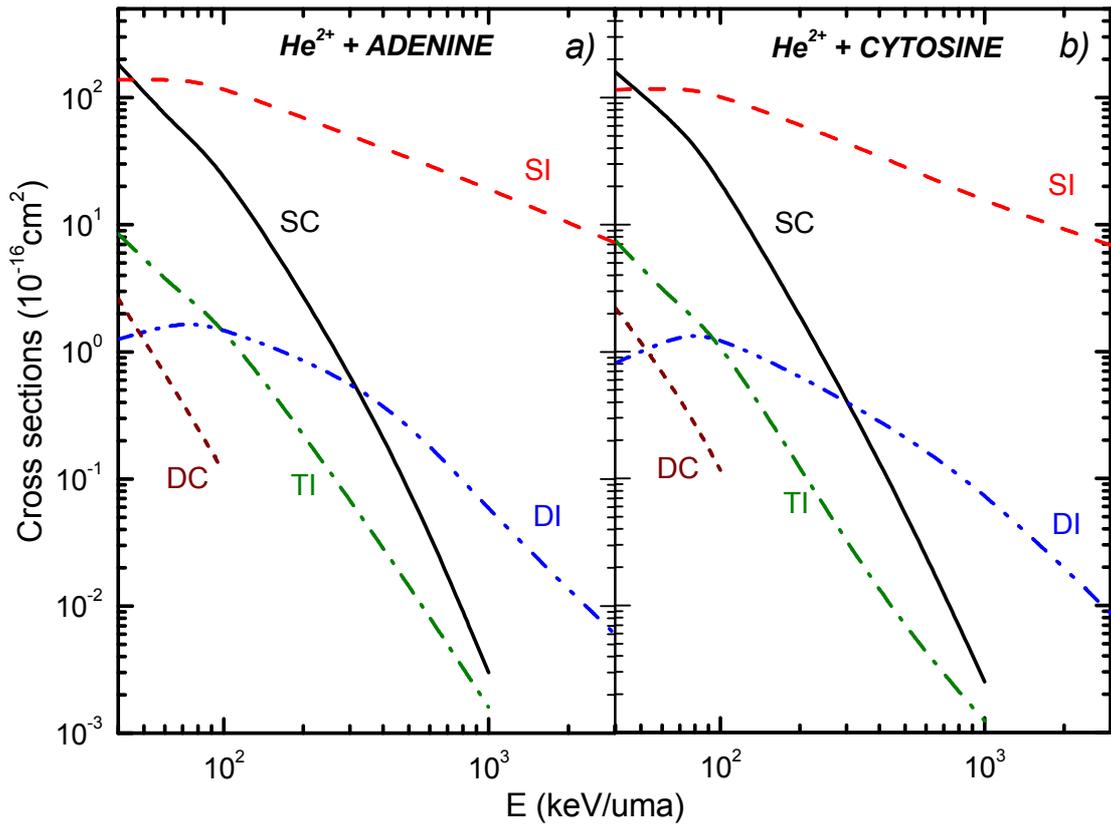


Figure (V-18 ; a et b) : sections efficaces totales pour les deux systèmes collisionnels : ( $\text{He}^{2+} + \text{Adénine}$ ) (a) et ( $\text{He}^{2+} + \text{Cytosine}$ ) (b).

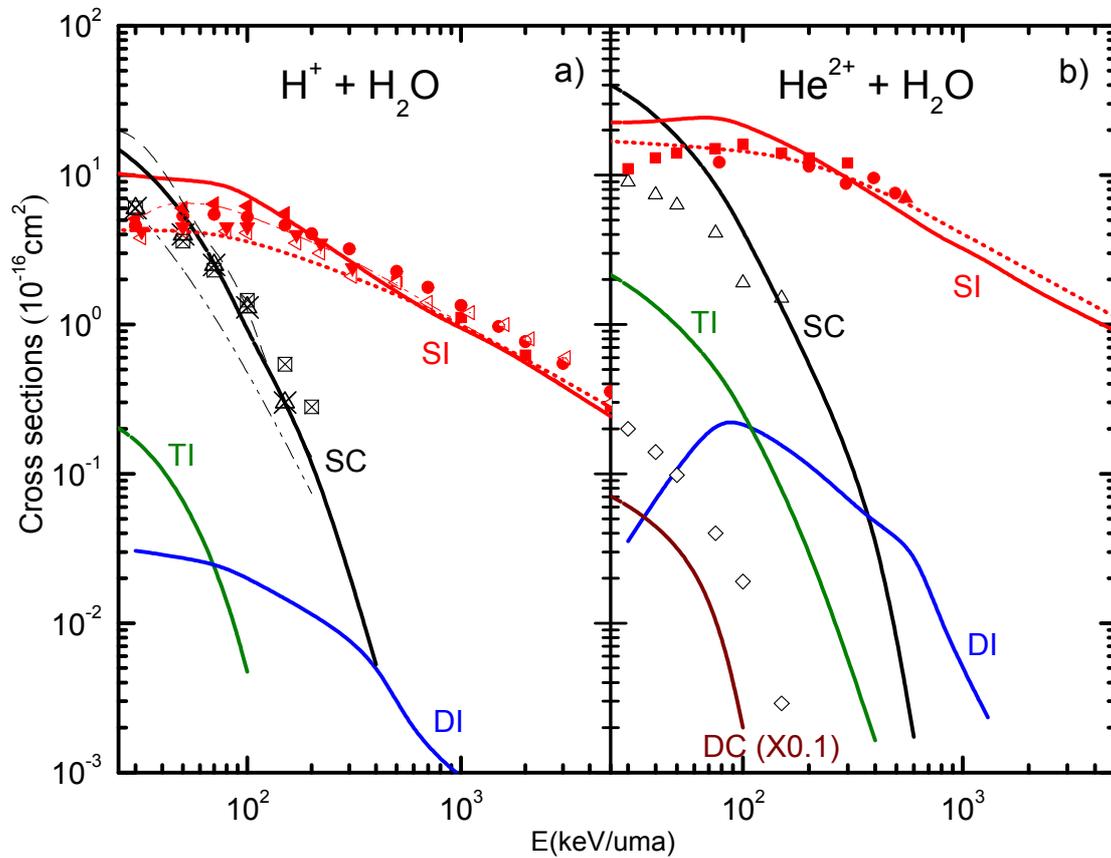


Figure (V-19 ; a et b) : Récapitulatif de nos résultats pour une cible d'eau.



## *Conclusions et perspectives*

Nous avons développé un modèle classique relativement simple pour calculer des sections efficaces totales de différents processus ionisants correspondant à des collisions de type ion-atome ou ion-molécule. Ce modèle, qui était à l'origine inspiré de celui de Zarour et Saalman [Zar.], réunit des aspects pris de deux autres modèles classiques : Classical Over-Barrier (COB) et Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC). Le modèle COB nous a servi à la description des conditions initiales des électrons de la cible et à leur création dans les simulations. Tandis que le modèle CTMC nous a servi dans la construction des aspects statistiques des calculs de sections efficaces des processus ionisants étudiés.

Des modifications fondamentales ont été introduites dans ce modèle, par rapport à la version de Zarour et Saalman [Zar.] : *(i)* les interactions particule-particule ont été décrites par un potentiel Coulombien beaucoup plus proche de la réalité, *(ii)* les conditions initiales dans la cible sont mieux représentées via l'aléatorisation des positions et vitesses initiales des électrons après leur 'création', *(iii)* l'utilisation de critères énergétiques ( au lieu des critères purement géométriques) pour décrire les situations finales entre les électrons créés au cours de la simulation d'un côté, et le projectile et la cible de l'autre côté, ce qui nous a permis de mieux déterminer les types des différents processus ionisants possibles.

Ces améliorations nous ont permis d'un côté d'obtenir, pour les hautes énergies d'impact, de meilleurs résultats pour les collisions de type ion-atome, et d'un autre côté d'appliquer le modèle sur des systèmes plus compliqués comme ceux impliquant des cibles biomoléculaires, ce qui n'est pas possible avec les autres modèles classiques ou quantiques actuellement disponibles.

Notre avons étudié plusieurs systèmes collisionnels entre des particules multichargées ( $H^+$ ,  $He^{2+}$ ,  $Li^{3+}$ ,  $Be^{4+}$ ,  $C^{6+}$ ,  $O^{8+}$  et  $Ne^{10+}$ ) et des atomes ou des molécules ( $H$ ,  $He$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ , Adénine

et *Cytosine*). La gamme d'énergies d'impact utilisée correspond principalement aux hautes énergies (de quelques keV/uma jusqu'à quelques MeV/uma), pour laquelle notre modèle s'est avéré plus performant.

Nous avons montré que nos résultats sont valides, en général, à partir d'énergie d'impact supérieure à 100 keV/uma, c'est-à-dire dans le domaine des hautes énergies pour lequel la collision devient 'plus' classique. Les résultats les plus satisfaisants correspondent principalement aux processus ionisants simples (simple capture et simple ionisation). En effet, la disponibilité (sauf pour les cas des cibles de base ADN) des données expérimentales et théoriques pour ces processus simples nous a permis de vérifier la validité de la méthode. Nous constatons, en général, que nos résultats pour *SC* et *SI* tendent à surestimer l'expérience pour les faibles énergies d'impact, ce qui peut être dû aux effets d'interférences quantiques (qui sont plus importants dans ce domaine d'énergie), interférences que notre modèle ne peut pas prendre en compte.

Par contre, pour les processus multiples (transfert-ionisation, double capture et double ionisation), pour lesquels les données expérimentales ou théoriques sont moins disponibles, nos résultats sont en général satisfaisants pour les cas des cibles d'hélium et d'hydrogène moléculaire, tandis que, pour le cas de la cible d'eau, les sections efficaces de *TI*, *DI* et de *DC* semblent sous-estimer les autres données disponibles.

Des améliorations sont envisagées au niveau de la représentation initiale de la cible et au niveau de traitement des résultats : *(i)* pour encore améliorer les résultats, surtout pour les cibles moléculaires, et *(ii)* pour pouvoir calculer d'autres types de résultats comme les sections efficaces différentielles. Nous nous envisageons aussi de continuer nos calculs pour d'autres cibles biomoléculaires, en commençant par les deux autres constituants d'ADN Thymine et Guanine.

## *Références*

- [Abr.1] : R. Abrines, I.C. Percival, Proc. Phys. Soc. **88**, 861 (1966).
- [Abr.2] : R. Abrines, I.C. Percival, Proc. Phys. Soc. **88**, 873 (1966).
- [Afr.1] : V. V. Afrosimov, Yu. A. Mamaev and M. N. Panov, Sov. Phys. JETP **28**, 52 (1969).
- [Afr.2] : V. V. Afrosimov, Yu. A. Mamaev and M. N. Panov, Sov. Phys. JETP **29**, 648 (1969).
- [All.1] : S. K. Allison, Rev. Mod. Phys. **30**, 1137 (1958).
- [All.2] : S. K. Allison, Phys. Rev. **109**, 76 (1958).
- [And.] : L. H. Andersen, (Ref. 32 de [Sido.]
- [Ban.] : D Banks, K S Barnes and J McB Wilson, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **9**, L141 (1976).
- [Bar.] : R. A. Baragiola and I. B. Nemirovsky, Nucl. Instrm. and Meth. **110**, 511 (1973).
- [Bára.] : A. Bárány, G. Astner, H. Cederquist, H. Danared, S. Huldt, P. Hvelplund, A. Johnson, H. Knudsen, L. Liljeby, K.G. Rensfelt, Nucl. Instr. and Meth. B **9**, 397 (1985).
- [Barn.] : C. F. Barnett, J. A. Ray, E. Ricci, M. I. Wilker, E. W. McDaniel, E. W. Thomas and H. B. Gilbody, Atomic Data for Controlled Fusion Research **1**, ORNL 5206 (1977).
- [Bay.] : J. E. Bayfield and G. A. Khayrallah, Phys. Rev. A **11**, 920 (1975).
- [Bec.] : R. C. Becker, and A. D. MacKellar, , J. Phys. B **17**, 3923 (1984).
- [Bel.1] : Dž. Belkić and R. Gayet, J. Phys. B **10**, 1911 (1977).
- [Bel.2] : Dž. Belkić, R. Gayet, and A. Salin, Phys. Rep. **56(6)**, 279 (1979).

- [Bet.] : H. A. Bethe, Ann. Phys. **5**, 325 (1930).
- [Bol.] : M. A. Bolorizadeh and M. E. Rudd, Phys. Rev. A **33**, 888 (1986).
- [Bou.] : O. Boudrioua, C. Champion, C. Dal Cappello and Y. V. Popov, Phys. Rev. A **75**, 22720 (2007).
- [Bra.1]: B. H. Bransden, Rep. Prog. Phys. **35**, 949-1005 (1972).
- [Bra.2]: B. H. Bransden and M. R. C. McDowell. «*Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions*». Clarendon Press, Oxford, (1992).
- [Bur.] : J. Burgdorfer, R. Morgenstern, and A. Niehaus, Nucl. Instrum. Methods, B **23**, 120 (1987).
- [Bus.] : H. F. Busnengo, S. E. Corchs, and R. D. Rivarola, Phys. Rev. A **57**, 2701 (1998).
- [Cha.] : C. Champion, O. Boudrioua, C. Dal Cappello, Y. Sato and D. Ohsawa Phys. Rev. A **75**, 32724 (2007).
- [Cir.] : D. Ciric, E. Vlieg. A. de Boer and F.J. de Heer, J. Phys. B **18** 4763 (1985).
- [Coh.] : J. S. Cohen, Phys. Rev. A **26**, 3008 (1982).
- [Dat.] : S. Datz, R. Hippler, L. H. Andersen, P. F. Dittner, H. Knudsen, H. F. Krause, P. D. Miller, P. L. Pepmiller, T. Rosseel, R. Schuch, N. Stolterfoht, Y. Yamazaki, and C. R. Vane, Phys. Rev. A **41**, 3559 (1990).
- [DuB.] : R. D. DuBois. Phys. Rev. A **36**, 2585 (1987).
- [Edw.] : A. K. Edwards, R. M. Wood and R. L. Ezell, Phys. Rev. A **42**, 1799 (1990).
- [Err.1] : L. F. Errea, Clara Illescas, L. Méndez, B. Pons, A. Riera, and J. Suárez, Phys. Rev. A **70**, 52713 (2004).
- [Err.2]: L. F. Errea, Clara Illescas, L. Méndez, B. Pons, I. Rabadán and A. Riera, Phys. Rev. A **76**, 40701(R) (2007).
- [Fan.] : U. Fano, Ann. Nucl. Sci. **13**, 1 (1963).
- [Fit.] : W. L. Fite, A. C. H. Smith and R. F. Stebbings, Proc. R. Soc. A **268**, 527 (1962).
- [Fri.] : W. Fritsch and C. D. Lin, Phys. Rev. A **29**, 3039 (1984).

- [Gay.1]:R. Gayet, J. Hanssen, L. Jacqui, A.Martinez and R. Rivarola, *Physica Scripta*. Vol. **53**, 549 (1996).
- [Gay.2]:R. Gayet, J. Hanssen, A.Martinez and R. Rivarola, *Nucl. Instrum. and Meth. B* **86**, 158 (1994).
- [Ger.] : B. Gervais, M. Beuve, G. H. Olivera, and M. E. Galassi, *Radiat. Phys. Chem.* **75** 493 (2006).
- [Gil.] : H. B. Gilbody and G. Ryding, *Proc. R. Soc. A* **291**, 438 (1966).
- [Gob.] : F. Gobet, S. Eden, B. Coupier, J. Tabet, B. Farizon, M. Farizon, M. J. Gaillard, M. Carré, S. Ouaskit, T. D. Märk, and P. Scheier, *Phys. Rev. A* **70**, 62716 (2004).
- [Gra.] : W. G. Graham, K. H. Berkner, R. V. Pyle, A. S. Schlachter, J. W. Stearns, and J. A. Tanis, *Phys. Rev. A* **30**, 722 (1984).
- [Hau.] : H. K. Haugen, L. H. Andersen, P. Hvelplund, and H. Knudsen, *Phys. Rev. A* **26**, 1950 (1982).
- [Hip.] : R. Hippler, S. Datz, P. D. Miller, P. L. Pepmiller, and P. F. Dittner, *Phys. Rev. A* **35**, 585 (1987).
- [Hve.1]:P. Hvelplund, J. Heinemeier, E. Horsdal Pedersen and F. R. Simpson, *J. Phys. B* **9**, 491 (1976).
- [Hve.2]:P. Hvelplund, H. K. Haugen, and H. Knudsen, *Phys. Scr.* **26**, 375 (1982).
- [Hve.3]:P. Hvelplund, and A. Andersen, *Phys. Rev. A* **22**, 1930 (1980).
- [Ill.] : C. Illescas and A. Riera. *Phys. Rev. A* **60**, 4546 (1999).
- [Ino.] : M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.* **43**, 297 (1971).
- [Jan.1]: R. K. Janev, G. Ivanovski, and E. A. Solov'ev, *Phys. Rev. A* **49**, R645 (1994).
- [Jan.2]: R. K. Janev, R. A. Phaneuf, et H. T. Hunter, *At. Data Nucl. Data Tables* **40**, 249 (1988).
- [Joa.] : C. J. Joachain, « *Quantum Collision Theory* », Elsevier Science Publishing Company (February 1984).
- [Kar.] : M. Karplus, R. N. Porter and R. D. Sharma, *J. Chemi. Phys.* **43**, 3259 (1965).
- [Knu.] : H. Knudsen, H. K. Haugen, and P. Hvelplund, *Phys. Rev. A* **23**, 597 (1981).

- [Lan.] : L. Landau & E. Lifchitz. «*Physique théorique – Mécanique*». 5<sup>ème</sup> édition en français : Mir-Ellipses, (1994).
- [Lev.] : Yu. Z. Levchenko, Thesis FTI, Academy of science of the Ukraine SSR, Kharkov, 1974.
- [Mac.] : J. R. Macdonald and F. W. Martin, Phys. Rev. A **4**, 1965 (1971).
- [McC.] : G. W. McClure, Phys. Rev. **148**, 47 (1966).
- [McD.] : E. W. McDaniel, «*Atomic collisions : electron and photon projectiles*», New-York : Wiley-Interscience; 1<sup>st</sup> edition (September 1989).
- [Men.] : L. Meng, C. O. Reinhold, and R. E. Olson, Phys. Rev. A **40**, 3637 (1989).
- [Mey.] : F. W. Meyer, A. M. Howald, C. C. Havener, and R. A. Phaneuf, Phys. Rev. A **32**, 3310 (1985).
- [Moc.] : R. J. Moccia, Chem. Phys. **40**, 2186 (1964).
- [Nak.] : T. Nakano, M. Susuki, A. Abe, Y. Susuki, S. Morita, J. Mizoe, S. Sato, T. Miyamoto, T. Kamada, H. Kato and H. Tsujii, Cancer J. Chem. Phys. **5**(6), 369 (1999).
- [Nie.] : A. Niehaus, J. Phys. B **19**, 2925 (1986).
- [Nik.] : V. S. Nikolaev, L. N. Fateeva, I. S. Dmitriev, and Yu. A. Teeplova, Sov. Phys. JETP **12**, 627 (1967).
- [Ols.1] : R. E. Olson and A. Salop Phys. Rev. A **16**, 531 (1977).
- [Ols.2] : R. E. Olson, J. Phys. B **13**, 483 (1980).
- [Ols.3] : R. E. Olson J. Ullrich and H. Schmidt-Böcking, Phys. Rev. A **39**, 5572 (1989).
- [Ols.4] : R. E. Olson, J. Ph. B **12**, 1843 (1979).
- [Ols.5] : R. E. Olson, A. Salop, R. A. Phaneuf and F. W. Meyer, Phys. Rev. A **16**, 1867 (1977).
- [Ost.] : V. N. Ostrovsky, J. Phys. B **28**, 3901 (1995).
- [Par.] : J. T. Park, J. E. Aldag, J. M. George and J. L. Peacher, Phys. Rev. A **15**, 508 (1977).

- [Pas.] : J. Pascale, R.E. Olson, C.O. Reinhold, Phys. Rev. A **42**, 5305 (1990).
- [Pea.] : G. Peach, S.L. Willis, M.R.C. McDowell, J. Phys. B **18**, 3921 (1985).
- [Per.] : A.N. Perumal, D.N. Tripathi, Phys. Rev. A **64**, 042709 (2001).
- [Piv.1]: L. I. Pivovarov, V. M. Tubaev and M. T. Novicov, Sov. Phys. JETP **15**, 1035 (1962).
- [Piv.2] : L. I. Pivovarov, Yu. Z. Levchenko and G. A. Krivonosov, Sov. Phys. JETP **32**, 11 (1971).
- [Puc.] : L. J. Puckett, G. O. Taylor, and D. W. Martin, Phys. Rev. **178**, 271 (1969).
- [Rud.1]:M. E. Rudd, R. D. DuBois, L. H. Toburen, C. A. Ratcliffe, and T. V. Goffe, Phys. Rev. A **28**, 3244 (1983).
- [Rud.2]:M. E. Rudd, T. V. Goffe, R. D. DuBois and L. H. Toburen, Phys. Rev. A **31**, 492 (1985).
- [Rud.3]:M. E. Rudd, Y. K. Kim, D. H. Madison and T. J. Gay, Rev. Mod. Phys. **64** 441 (1992).
- [Rud.4]:M. E. Rudd, A. Itoh and T. V. Goffe, Phys. Rev. A **32**, 2499 (1985).
- [Rud.5]:M. E. Rudd, T. V. Goffe and A. Itoh, Phys. Rev. A **32**, 2128 (1985).
- [Rudo.]:P. S. Rudolph and C. E. Melton, J. Chem. Phys. **45** 2227 (1966).
- [Rui.] : M. E. Ruiz Lopez, *communication privée*.
- [Ryu.] : H. Ryufuku, K. Sasaki, and T. Watanabe, Phys. Rev. A **21**, 745 (1980).
- [Sah.] : G. C. Saha, S. Datta and S. C. Mukherjee, Phys. Rev. A **34**, 2809 (1986).
- [Sat.1] : F. Sattin, J. Phys. B **33**, 2377 (2000).
- [Sat.2] : F. Sattin, Phys. Rev. A **62**, 42711 (2000).
- [Sat.3] : F. Sattin, Phys. Rev. A **64**, 34704 (2001).
- [Sei.] : W. Seim, A. Muller, I. Wirkner-Bott and E. Salzborn, J. Phys. B **14**, 3475 (1981).
- [Sha.1]: M. B. Shah and H. B. Gilbody, J. Phys. B **14**, 2361 (1981).

- [Sha.2]: M. B. Shah, D. S. Elliott, P. McCallion, and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **21**, 2455 (1988).
- [Sha.3]: M. B. Shah, T. V. Gogge, and H. B. Gilbody. *J. Phys. B* **11**, L233 (1978).
- [Sha.4]: M. B. Shah and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **15**, 413 (1982).
- [Sha.5]: M. B. Shah and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **16**, L449 (1983).
- [Sha.6]: M. B. Shah and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **18**, 899 (1985).
- [Sha.7]: M. B. Shah and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **7**, 256 (1974).
- [Sha.8]: M. B. Shah, P. McCallion and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **22**, 3983 (1989).
- [Sha.9]: M. B. Shah and H. B. Gilbody, *J. Phys. B* **15**, 3441 (1982).
- [Shi.] : R. Shingal and C. D. Lin, *Phys. Rev. A* **40**, 1302 (1989).
- [Sid.] : V. A. Sidorovich, V. S. Nikolaev and J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* **31**, 2193 (1985).
- [Sie.] : C. Siedschlag and J. M. Rost, *Few-Body Systems* **31**, 211 (2002).
- [Sto.] : N. Stolterfoht, R. D. DuBois and R. D. Rivarola, “*Electron emission in heavy ion atom collisions*”, (Springer Series on Atoms and Plasmas) **20** (1997).
- [Suz.] : H. Suzuki, Y. Kajikawa, N. Toshima, H. Ryufuku, and T. Watanabe, *Phys. Rev. A* **29**, 525 (1984).
- [The.] : T. C. Theisen and J. H. McGuire, *Phys. Rev. A* **20**, 1406 (1979).
- [Tob.] : L. H. Toburen, W. E. Wilson and R. J. Popowich, *Radiat. Res.* **82**, 27 (1980).
- [Tos.] : N. Toshima, *Phys. Rev. A* **50**, 3940 (1994).
- [Zar.] : B. Zarour and U. Saalman, *Nucl. Instr. and Meth. B* **205**, 610 (2003).



