



HAL
open science

Transport d'ions hydrogénéoïdes rapides dans les solides : mise en évidence de l'écrantage dynamique

Claude Fourment

► **To cite this version:**

Claude Fourment. Transport d'ions hydrogénéoïdes rapides dans les solides : mise en évidence de l'écrantage dynamique. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2000. Français. NNT : . tel-00002358

HAL Id: tel-00002358

<https://theses.hal.science/tel-00002358>

Submitted on 5 Feb 2003

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

THÈSE

présentée

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR EN SCIENCES

par

Claude FOURMENT

**Sujet : Transport d'ions hydrogénéoïdes rapides dans les solides :
mise en évidence de l'écrantage dynamique**

soutenue le 12 octobre 2000 devant la Commission d'examen

Mme Lucile JULIEN, Présidente

Mr Jean-Pierre GAUYACQ, Rapporteur

Mr Benoît GERVAIS

Mr Fernando MARTIN

Mr Guillaume PETITE, Rapporteur

Mme Dominique VERNHET, Directeur de thèse

Je remercie Jean Klein puis Claudette Lapersonne qui m'ont accueilli au sein du Groupe de Physique des Solides pendant la durée de ma thèse.

Ma reconnaissance va à Dominique Vernhet et Jean-Pierre Rozet. Ils ont su me proposer un sujet à la fois intéressant et vraiment original. Je leur suis gré d'avoir, chacun à leur manière, répondu à toutes mes questions y compris les plus naïves.

Je remercie Jean-Pierre Gauyacq et Guillaume Petite qui ont bien voulu examiner ce manuscrit, ainsi que Lucile Julien, Benoît Gervais et Fernando Martin pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Je suis sincèrement redevable à Louis-Jean Dubé pour son apport décisif sur le plan théorique, et à Benoît Gervais pour les discussions enrichissantes que nous avons échangées.

J'ai réellement apprécié de partager ces quelques années avec des personnes aussi sympathiques que Barbara, Christophe, Marie-Anne, Emily et l'inénarrable Romain. Je salue également Ladislav pour sa constance dans l'effort fourni afin d'élever la conscience footballistique du cancre que je suis.

Un très grand merci à Nicole Dagens, non seulement pour avoir réussi à déchiffrer mon manuscrit avant de le faire subir à son traitement de texte, mais aussi pour son implication dans les étapes qui ont jalonné ces années depuis le faire-part de naissance de ma fille jusqu'au pot de thèse.

Je salue tous ceux que ce travail m'a donné l'occasion de rencontrer, et en particulier l'équipe du CIRIL et ses sympathiques thésards, ainsi que Claude Stéphan, Sandrine Dobosz, Martin Schmidt et nos collaborateurs "américains" Carlos O. Reinhold et Joachim Burgdörfer.

Ce travail n'aurait certes pas vu le jour sans la patience et la persévérance dont ont fait preuve mes parents tout au long de ma scolarité. Qu'ils en soient ici sincèrement remerciés.

Je sais la part de ce travail qui revient aux miens : Stéphanie, qui m'a accordé sa confiance tout au long de ces années, et Ambre qui a le pouvoir, par un sourire ou une main tendue, de reléguer le stress de la rédaction au rang de "simple petit tracasserie à l'importance relative".

Enfin et de manière plus générale, je remercie tous ceux, nombreux, qui ont contribué à ce qu'il existe une vie en dehors du labo - et qui se reconnaîtront.

àStéphanie,
àAmbre.

SOMMAIRE

INTRODUCTION	7
CHAPITRE I : ETUDE THEORIQUE	11
A – Modèles d'équations différentielles	11
I – Définitions des notions employées.....	11
1°) Processus collisionnels élémentaires	11
2°) Classification des collisions en "domaines de vitesses"	13
3°) Opérateur d'évolution.....	15
a) Définition	15
b) Point de vue d'interaction ; Développement en série de $U(t,t_0)$	16
4°) Amplitudes de transition ; Matrice de diffusion.....	18
5°) Matrice densité	20
a) Définition	20
b) Equation de Liouville.....	21
II – Étude des collisions binaires en régime perturbatif.....	22
1°) Processus d'excitation	22
a) Méthode des équations couplées (Close-Coupling) ; Formalisme du paramètre d'impact.....	22
b) Calcul PWBA	27
c) Comparaison entre les deux méthodes.....	39
2°) Processus d'ionisation	44
3°) Processus de capture	46
III – Champ de sillage ; "Effet solide".....	49
1°) Description des électrons de la cible solide en termes de gaz d'électrons libres.....	49

a) Réponse d'un gaz d'électrons libres ; Ecrantage dynamique.....	49
b) Prise en compte des électrons de cœur	51
2°) Action du potentiel de sillage sur les états du projectile.....	53
a) Approximation dipolaire ; Règles de sélection.....	53
b) Extension spatiale des orbitales hydrogénoïdes	54
 IV – Etude quantique du transport ; Evolution de la matrice densité dans le solide	 57
1°) Couplage perturbatif avec un réservoir	58
2°) Le rayonnement quantique décrit comme un réservoir	60
3°) L'effet collisionnel du solide décrit comme celui d'un réservoir	62
4°) Evolution due au champ de sillage.....	63
5°) Approximation des vitesses de variation indépendantes ; Equation pilote	64
 V – Etude des différents termes de l'équation pilote	 65
1°) Le modèle collisionnel	65
a) Présentation et hypothèses	65
b) Système d'équations différentielles ; Version actuelle du programme	67
c) Convergence des résultats quand le niveau n_{\max} des états traités augmente.....	70
d) Dépendance vis à vis des conditions initiales en terme de populations.....	73
e) Acquis du modèle collisionnel.....	75
2°) Le modèle de réponse collective.....	75
a) Système à 2 niveaux	75
b) Exemple particulier d'un projectile krypton ($Z_p = 36$)	76
c) Acquis du modèle collectif.....	82
3°) Résolution de l'équation pilote.....	84
a) Présentation du programme.....	84
b) Convergence des résultats quand n_{\max} augmente.....	87
c) Dépendance vis à vis des conditions initiales	92
d) Dépendance vis à vis de la fréquence plasma de la cible.....	93
e) Dépendance vis à vis de la prise en compte du couplage Stark dans des couches de n croissant	95
4°) Comparaisons des 3 modèles.....	98

a) Evolution des populations absolues np.....	99
b) Evolution des populations absolues $2s_{1/2}$	101
c) Rapports des populations $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ et $3p_{1/2}/3s_{1/2}$	103
B - Modèles de transport basés sur la méthode Monte-Carlo.....	105
I - Introduction ; Principe général.....	105
II - Transport Monte-Carlo dans l'espace des phases classiques.....	106
1°) Transport collisionnel	106
2°) Introduction du champ de sillage.....	109
III - Transport Monte-Carlo dans l'espace des phases quantiques.....	111
1°) Présent ation	111
2°) Similitudes entre les traitements classique et quantique	112
IV – Spécificités de l'approche Monte-Carlo par rapport aux méthodes d'équations différentielles couplées.....	113
C - Cahier des charges d'une étude expérimentale	116
CHAPITRE II : DEMARCHE EXPERIMENTALE	119
I – Choix du système étudié.....	120
1°) Le système est sensible aux phénomènes étudiés.....	121
a) Sensibilité aux conditions initiales	121
b) Etude des libres parcours moyens	122
2°) Le système rentre dans le cadre des modèles théoriques développés.....	127
II – Description des conditions expérimentales.....	128
1°) Caractéristiques du faisceau	129
a) Faisceau arrivant à l'entrée de LISE	129

b) Faisceauologie dans LISE.....	132
2°) Caractéristiques des cibles solides.....	134
3°) Système de détection.....	139
a) Implantation des détecteurs.....	139
b) Nature des X observés.....	142
c) Détecteurs à jonction.....	147
d) Spectromètres cristallins	151
e) Chaîne d'électronique et acquisition.....	168
III- Extraction des résultats	174
1°) Lecture des données et construction des spectres.....	174
a) Généralités.....	174
b) Cas particulier des spectromètres.....	174
2°) Résultats obtenus avec les spectromètres cristallins	179
a) Décomposition des spectres	179
b) Extraction des résultats.....	194
3°) Résultats obtenus avec le détecteur à jonction placé à 120°	199
a) Présentation des spectres bruts.....	199
b) Décomposition des spectres.....	200
c) Extraction des résultats.....	204
CHAPITRE III : RESULTATS ET DISCUSSION.....	207
I – Evolution des populations absolues $n\ell$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée.....	207
1°) Système Kr³⁶⁺ @ C à v = 35,6 u.a. (E = 33,2 MeV/A)	207
a) Présentation des résultats expérimentaux.....	208
b) Comparaison avec les résultats théoriques.....	210
2°) Système Ar¹⁸⁺ @ C à v = 23 u.a. (E = 13,6 MeV/A)	215
a) Présentation des résultats expérimentaux.....	215
b) Comparaison avec les résultats théoriques.....	217
3°) Système Kr³⁵⁺ @ C à v = 46,95 u.a. (E = 60 MeV/A)	223
a) Présentation des résultats expérimentaux.....	223

b) Comparaison avec les résultats théoriques.....	224
II – Evolution des rapports de populations des états de structure fine de n=3 du projectile Kr³⁵⁺ pendant son transport en cible solide.....	227
1°) Système Kr³⁶⁺ @ C à v = 35,6 u.a. (E = 33,2 MeV/A)	227
a) Présentation des résultats expérimentaux.....	227
b) Comparaison avec les différentes approches théoriques.....	231
2°) Système Kr³⁵⁺ @ C à v = 46,95 u.a. (E = 60 MeV/A)	239
a) Comparaison de nos théories avec les résultats expérimentaux.	239
b) Comparaison avec un modèle s'appuyant sur une méthode Monte Carlo.....	248
3°) Système Kr³⁵⁺ @ Al à v=46,95 u.a. (60 MeV/A)	252
a) Discussion des résultats expérimentaux.	253
b) Confrontation des résultats expérimentaux aux modèles théoriques.....	258
CONCLUSION	267
Annexe A : Calcul général des facteurs de forme pour les états liés d'un ion hydrogénoï de	275
Annexe B : Résultats expérimentaux obtenus sur le projectile Kr³⁵⁺ (60MeV/A)	279
Références bibliographiques.....	283
Liste des figures.....	291
Liste des tableaux	301

INTRODUCTION

Ce travail s'inscrit dans le cadre de l'étude de l'interaction ion-matière. Ce thème, très vaste, ne manque pas d'applications potentielles. On peut souhaiter apprendre à se protéger des effets des ions présents dans la nature (voyages spatiaux) ou dans des milieux artificiels (industrie nucléaire), ou même maîtriser ces effets (thérapie du cancer par exemple). Mais cela passe, de façon plus fondamentale, par la caractérisation des phénomènes physiques mis en jeu.

Il n'est bien sûr pas question de couvrir ici l'ensemble du domaine interaction ion-matière. Il convient donc de préciser l'étude à laquelle se restreint cette thèse ; ainsi je me concentrerai sur l'interaction entre des ions lourds ($A \gg 1$) multichargés (généralement hydrogénéoïdes) et rapides, avec un corps pur solide. Ces systèmes mettent en œuvre des excitations électroniques intenses tant au niveau de l'ion que de la cible. Cependant ces excitations sont corrélées, et l'étude d'un des deux partenaires nous apporte aussi des informations sur l'autre. Nous avons fait le choix de suivre le devenir de l'ion dans nos modèles théoriques et dans nos observations expérimentales. Dans ce cas, nous sommes sensibles à la réponse du solide à l'échelle de la durée de la collision et nous avons donc une observation "instantanée" de l'interaction.

Il est communément admis qu'il existe des effets spécifiques à la population d'états excités lors de collisions ion-solide par rapport aux collisions ion-atome isolé (Betz, Rösenthaller and Rothermel, 1983; Can, Maurer, Bandong *et al.*, 1987) et que ces effets ne sont pas seulement dus à la surface du solide (Nicolai, Chabot, Rozet *et al.*, 1990). Par contre, la description des phénomènes physiques responsables de ces effets n'est pas encore très claire. En schématisant à l'extrême l'interaction ion-solide, on peut suivre deux démarches initialement imaginées pour décrire le pouvoir d'arrêt des ions rapides dans la matière condensée.

La première traite le solide comme une assemblée dense d'atomes "individuels", c'est à dire sans que le regroupement au sein du solide ne modifie la structure de chaque atome cible. Cette hypothèse est raisonnable pour les noyaux et les électrons de cœur des atomes cibles, peu sensibles aux atomes voisins. Par contre, on peut s'attendre à ce qu'elle traite mal les couches électroniques externes. Pendant sa traversée du solide, l'ion subit une série de

collisions binaires ion-atome isolé avec les atomes de la cible. En plus du pouvoir d'arrêt, ce type d'approche reproduit de façon très satisfaisante les études expérimentales faites sur plusieurs types d'observables comme par exemple :

- la distribution en état de charge d'un ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée (y compris en condition de pré-équilibre) (Rozet, Chetioui, Piquemal *et al.*, 1989; Rozet, Stéphan and Vernhet, 1996; Blazevic, Bohlen and von Oertzen, 2000)
- les populations d'états de Rydberg en sortie de cible, à l'équilibre de populations et en pré-équilibre (voir par exemple (Lamour, 1997) et (Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 1999)).
- les populations d'états de cœur ($n \leq 4$ typiquement) d'un ion hydrogénéoï de traversant une cible solide, à l'équilibre des populations (Lamour, 1997; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000)

La deuxième démarche privilégie la description des électrons de valence ou de conduction, au détriment de celle des électrons de cœur (Echenique, Flores and Ritchie, 1990). En simplifiant à l'extrême, on considère le solide comme étant un gaz d'électrons libres. Ces électrons répondent collectivement au passage du projectile chargé en créant une onde de densité électronique. A cette densité correspond un potentiel appelé potentiel de sillage, dont le gradient définit un champ électrostatique qui, appliqué sur le projectile chargé, est responsable entre autre de sa perte d'énergie. Ce calcul conduit à la formule de Lindhard et Scharff (Lindhard and Scharff, 1953) pour le pouvoir d'arrêt des ions de grande vitesse non relativiste dans les solides.

Dans le régime des hautes vitesses, le pouvoir d'arrêt a une origine très majoritairement électronique, et la formule de Lindhard donne des résultats très satisfaisants.

Ce type d'approche permet également d'expliquer qualitativement le caractère oscillant de l'évolution des populations relatives des niveaux de structure fine d'un ion krypton hydrogénéoï de en fonction de l'épaisseur de cible traversée (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998; Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999), évolution qu'un modèle collisionnel est incapable de reproduire, même qualitativement.

Il apparaît qu'aucun des deux modèles, pris séparément, ne peut expliquer de façon complète l'interaction ion multichargé rapide-solide. Il faut donc tenir compte des effets collisionnels binaires et collectifs simultanément dans les modèles de transport pour pouvoir prédire le comportement de certaines observables de façon quantitative. C'est par exemple le cas de l'évolution des populations n_p des états de cœur d'un ion Ar^{17+} traversant une cible solide, avant l'équilibre des populations (Reinhold, Arbo, Burgdörfer *et al.*, 2000). Les ions

hydrogénéoï des lourds et rapides constituent des systèmes d'étude privilégiés car d'une part la description de systèmes hydrogénéoï des est bien connue, et d'autre part les collisions peuvent être traitées de façon perturbative. L'étude expérimentale d'observables bien choisies permet à la fois de tester la validité des modèles de transport et (dans l'affirmative) d'obtenir des mesures sur la réponse du solide, comme par exemple l'extension spatiale du champ de sillage autour du noyau du projectile, ou encore le nombre moyen d'électrons par atome cible impliqués dans le sillage.

Dans la première partie, je présenterai de façon détaillée les modèles de transport développés dans l'équipe, en collaboration étroite avec L.J.Dubé de l'Université Laval, Québec. Ces modèles s'appuient sur la résolution de systèmes d'équations différentielles décrivant l'évolution de la matrice densité représentant les états atomiques du projectile hydrogénéoï de. Je présenterai également des modèles basés sur une méthode Monte-Carlo développés par J.Burgdörfer, B.Gervais et C.Reinhold, dans lesquels le projectile peut être décrit dans un espace des phases classique ou quantique. Une brève comparaison entre les deux types de modèles sera présentée.

Dans la deuxième partie, je décrirai une expérience particulière, autour de laquelle j'ai principalement articulé mon travail de thèse. Cette expérience, contrairement aux études précédentes, s'intéressait au transport des états excités d'un ion hydrogénéoï de Kr^{35+} peuplés initialement par excitation plutôt que par capture. En effet la sensibilité des observables étudiées au champ de sillage est alors prévue supérieure, et la confrontation expérience-théorie devrait être facilitée.

Enfin je confronterai dans la troisième partie les théories à toute une série de résultats expérimentaux récents dont nous disposons sur plusieurs systèmes de collision concernant le transport des ions hydrogénéoï des d'états excités peuplés par capture et excitation. Nous étudierons des observables de sensibilité croissante au champ de sillage (populations n_p , puis populations de structure fine). Nous verrons que notre programme décrivant à la fois les phénomènes collisionnels binaires et collectifs reproduit la majorité des observables étudiées sur des gammes d'épaisseurs de cible allant de la condition de collision unique à l'équilibre des populations. Il constitue un net progrès par rapport aux modèles précédemment développés dans l'équipe et autorise des comparaisons quantitatives qui permettent de tester en particulier le rôle des états de nombre quantique principal n supérieur sur un état donné, le rôle du couplage dû au champ sur des états donnés et les conditions initiales de peuplement des états excités.

CHAPITRE I :

ETUDE THEORIQUE

Je décrirai ici les modèles théoriques développés dans notre équipe pour simuler le transport d'un ion lourd hydrogénoïde dans un solide. Ces modèles sont parfois qualifiés de "déterministes" car ils s'appuient sur des équations différentielles qui régissent l'évolution de la matrice densité réduite du petit système (ion hydrogénoïde). A l'opposé, on peut également utiliser des modèles basés sur la résolution stochastique de l'équation de Schrödinger pour la fonction d'onde de l'ion hydrogénoïde (Dalibard, Castin and Molmer, 1992), ou sur la résolution stochastique du transport dans un espace des phases classique, comme par exemple dans (Burgdörfer, 1990). J'aborderai brièvement ce type d'approche avant de terminer le chapitre en discutant du choix de certaines caractéristiques du système pour tester de façon pertinente ces différents modèles.

A – Modèles d'équations différentielles

I – Définitions des notions employées

Dans tout ce chapitre I, l'électron actif est initialement centré sur la cible.

1°) Processus collisionnels élémentaires

L'interaction ion-atome peut être considérée comme le processus élémentaire de l'interaction ion-matière. Expérimentalement, ces processus s'étudient en provoquant des collisions ion-gaz, et de nombreuses théories décrivent de façon satisfaisante les processus monoélectroniques.

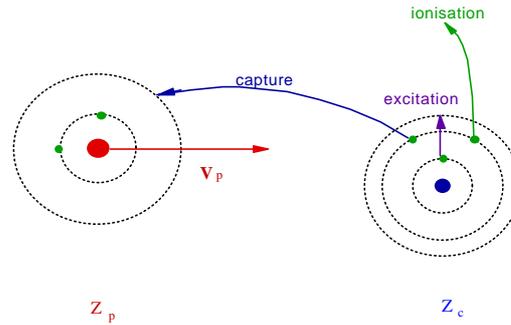


Figure 1. : Les processus atomiques monoélectroniques élémentaires

En marge de ces processus monoélectroniques ou "simples", il existe des processus multiples faisant intervenir plusieurs électrons du projectile et/ou de la cible. Une étude précédente (Adoui, 1995; Vernhet, Adoui, Rozet *et al.*, 1997) a montré que la contribution de ces processus est très petite devant celle des processus simples dans le régime perturbatif (projectile lourd et rapide en collision avec des atomes légers). Par exemple, dans le cas d'un ion Ar^{16+} à $v = 23$ u.a. en collision avec une cible d'azote, les processus multiples mesurés représentaient une faible proportion du processus simple excitation de Ar^{16+} ($1s^2 \rightarrow 1s2p$) : de 0,15% pour le processus triple, Capture Excitation Ionisation ($1s^2 \rightarrow (2s2p+2p^2)$) à 4% pour Excitation Ionisation ($1s^2 \rightarrow 2p$) ou Capture Ionisation ($1s^2 \rightarrow 1s2p$). Cela justifie le fait que dans toute la suite, nous ne parlerons que des processus simples.

A titre d'exemple et dans le but d'indiquer dès à présent les principaux processus intervenant dans les systèmes typiques sur lesquels se porte notre étude, le tableau ci-dessous donne les libres parcours moyens en $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ des processus perturbant la population $3p$ d'un ion Kr^{35+} traversant une cible de carbone à $v = 46,95$ u.a. En plus des libres parcours moyens collisionnels, nous avons indiqué des longueurs caractéristiques du mélange dû au champ de sillage et de la désexcitation radiative de l'état considéré. Pour plus de précisions, on peut se référer au chapitre II§I-1-b.

Processus	Libre parcours moyen ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)
Excitation $1s \rightarrow 3p$	32989
Excitation $3p \rightarrow 3 \sum_{\ell \neq 1} \ell$	61
Excitation $3s \rightarrow 3p$	49
Excitation $3p \rightarrow 4 \sum \ell$	140
Ionisation de $3p$	246
Capture en $3p$	389927
Stark $3s_0 \rightarrow 3p_0$	85
Déclin radiatif	66

2°) Classification des collisions en "domaines de vitesses"

Considérons une collision entre un ion de charge Z_p et une cible ionique ou atomique de charge Z_c . On s'intéresse aux processus simples impliquant un électron initialement centré autour de Z_c . On appelle "électron actif" cet électron.

On distingue trois régimes différents pour ce système collisionnel, selon la valeur du paramètre k (Chetioui, Rozet, Vernhet *et al.*, 1985) :

$$k = \frac{Z_p}{Z_c} \frac{v_e}{v_p}$$

où v_e est la vitesse initiale de l'électron actif sur une orbite liée et v_p est la vitesse relative de la collision.

❖ La région perturbative pour $k \ll 1$: ce régime est atteint lorsque la collision est représentée par une perturbation coulombienne brève ($\frac{v_e}{v_p} \ll 1$) et/ou faible ($\frac{Z_p}{Z_c} \ll 1$) de

l'hamiltonien de la cible. On adopte une méthode perturbative qui consiste à coupler l'état initial et final de l'électron actif par l'intermédiaire d'un nombre fini de diffusions. La dynamique du processus est donc traitée de façon approximative, mais le nombre d'états intermédiaires et finals pris en compte est aussi grand qu'on veut (éventuellement infini si

l'électron actif est couplé au continuum). Dans ce domaine de vitesse, l'excitation ou l'ionisation sont les processus simples majoritaires.

- ❖ La région de forte interaction, pour $k \gg 1$, est également appelée régime "quasi-moléculaire". Dans ce type de collision, le potentiel du projectile est intense ($\frac{Z_p}{Z_c} \gg 1$) et/ou la collision très lente à l'échelle de la vitesse de l'électron actif, et celui-ci s'ajuste adiabatiquement au mouvement des noyaux. On résout alors l'équation de Schrödinger dépendant du temps en la projetant sur une base tronquée d'états moléculaires. Par opposition à la méthode perturbative, on traite ici la diffusion de manière exacte (c'est à dire en incluant une infinité d'interactions), mais dans un domaine limité de l'espace des états. Lors de la collision, le système forme une quasi-molécule et la probabilité pour que l'état final de l'électron actif soit centré sur le projectile peut être très grande. C'est pourquoi la capture est le processus simple majoritaire dans ce domaine de vitesse.
- ❖ La région intermédiaire, pour $k \cong 1$. Dans cette région on essaie généralement d'étendre le domaine de validité des modèles "extrêmes" ($k \ll 1$ ou $k \gg 1$). On peut par exemple se ramener au domaine perturbatif par l'intermédiaire d'un hamiltonien effectif comme dans le formalisme des ondes distordues. On peut également partir du modèle des équations couplées (adapté au régime de forte interaction) en introduisant un très grand nombre d'états de base, en général des orbitales atomiques. Dans cette région, tous les processus simples sont à peu près équiprobables.

La figure 2 montre l'importance relative des sections efficaces des processus simples en fonction de la vitesse de collision pour le système symétrique proton sur hydrogène. Il est à noter que pour des systèmes à plusieurs électrons, les domaines de vitesses peuvent être différents selon l'électron ou même le processus considéré. Dans notre étude aussi bien théorique qu'expérimentale, nous nous sommes placés dans le régime perturbatif pour tous les processus pertinents.

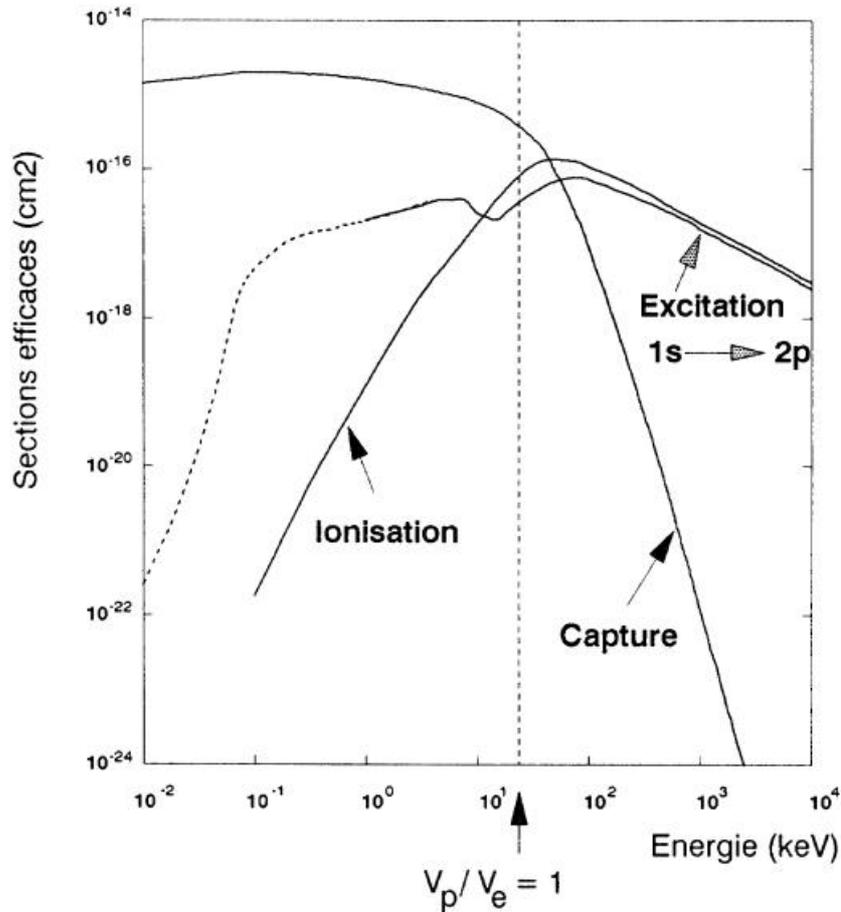


Figure 2. : Sections efficaces des différents processus collisionnels en fonction de l'énergie dans le cas de la collision $p+H$ (Rozet, 1995).

3°) Opérateur d'évolution

a) Définition

La linéarité de l'équation de Schrödinger entraîne qu'il existe un opérateur linéaire permettant de passer de $|\psi(t_0)\rangle$ (vecteur d'état à l'instant t_0) à $|\psi(t)\rangle$ (vecteur d'état à l'instant t) :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad (1)$$

Cet opérateur est appelé opérateur d'évolution. Il vérifie de façon évidente :

$$U(t_0, t_0) = I \quad (2)$$

et puisque $|\psi(t)\rangle$ vérifie l'équation de Schrödinger et que $|\psi(t_0)\rangle$ peut décrire une base de l'espace des états, $U(t, t_0)$ vérifie aussi :

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H(t)U(t, t_0) \quad (3)$$

où $H(t)$ est l'hamiltonien du système.

Les équations (2) et (3) peuvent être condensées sous la forme :

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t')U(t', t_0) dt' \quad (4)$$

De plus, U vérifie les propriétés suivantes :

$$U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0) \quad (5)$$

$$U(t, t_0) = U^{-1}(t_0, t) \quad (6)$$

$$U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) \quad (U \text{ est unitaire si } H \text{ est hermitique}). \quad (7)$$

Compte tenu de ces propriétés, on peut prendre l'hermitique conjugué de (4) et obtenir après transformation :

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U(t, t')H(t') dt' \quad (8)$$

b) Point de vue d'interaction ; Développement en série de $U(t, t_0)$

Supposons que l'hamiltonien H du système se mette sous la forme :

$$H(t) = H_0(t) + V(t) \quad (9)$$

où $H_0(t)$ est l'hamiltonien d'une équation de Schrödinger que l'on sait intégrer. Il est commode de se placer dans le point de vue d'interaction c'est à dire de séparer l'évolution du système due à l'hamiltonien H_0 d'une part et à V d'autre part.

L'évolution due à H_0 est représentée par un opérateur d'évolution $U_0(t, t_0)$ qui est donc unitaire, et le passage au point de vue d'interaction est obtenu en appliquant cette transformation unitaire aux vecteurs d'états et aux opérateurs de la représentation de Schrödinger :

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = U_0^+(t, t_0)|\Psi(t)\rangle \quad (10)$$

$$\tilde{V}(t) = U_0^+(t, t_0) V(t) U_0(t, t_0) \quad (11)$$

L'opérateur total d'évolution s'écrit dans ce point de vue :

$$\tilde{U}(t, t_0) = U_0^+(t, t_0)U(t, t_0) \quad (12)$$

et possède toutes les caractéristiques d'un opérateur d'évolution lié à l'hamiltonien $\tilde{V}(t)$. En particulier :

$$\tilde{U}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{V}(t') \tilde{U}(t', t_0) dt' \quad (13-a)$$

et

$$\tilde{U}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \tilde{U}(t, t') \tilde{V}(t') dt'. \quad (13-b)$$

Et l'on peut finalement obtenir à partir de (12) et (13) :

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_0(t, t') V(t') U(t', t_0) dt' \quad (14-a)$$

et son expression hermitique conjuguée :

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U(t, t') V(t') U_0(t', t_0) dt' \quad (14-b)$$

qui expriment U en fonction de V et U_0 .

Par itérations successives à partir de (14-a) ou (14-b), on obtient le développement en puissance de V de l'opérateur d'évolution :

$$U(t, t_0) = U_0(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U_n(t, t_0) \quad (15)$$

avec

$$U_n(t, t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t \geq t_n \geq \dots \geq t_1 \geq t_0} dt_n \dots dt_2 dt_1 U_0(t, t_n) V(t_n) \dots U_0(t_2, t_1) V(t_1) U_0(t_1, t_0). \quad (16)$$

La convergence de cette série est d'autant plus rapide que H_0 diffère peu de H. C'est pourquoi elle constitue la base de tous les développements (d'ordre fini) perturbatifs.

L'interprétation physique de ce développement est la suivante : le terme d'ordre n $U_n(t, t_0)$ décrit l'évolution du système comme la succession de n diffusions par le potentiel V intervenant aux instants t_1, t_2, \dots, t_n , et l'évolution entre ces diffusions n'est due qu'à l'hamiltonien H_0 ("évolution libre").

4°) Amplitudes de transition ; Matrice de diffusion

L'amplitude de probabilité a_f de trouver un système dans l'état $|\varphi_f\rangle$ à l'instant t_f , alors qu'il était préparé dans l'état $|\varphi_i\rangle$ à l'instant t_i est donnée par :

$$a_{if}(t_f, t_i) = \langle \varphi_f(t_f) | U(t_f, t_i) | \varphi_i(t_i) \rangle. \quad (17)$$

Dans le cadre d'un problème de diffusion, on peut développer l'hamiltonien total H de la même façon que dans l'équation (9), V étant le potentiel de diffusion. En choisissant pour $|\varphi_i\rangle$ et $|\varphi_f\rangle$ des vecteurs propres de H_0 , et en prenant la limite de l'expression (17) pour ($t_i \rightarrow -\infty$, $t_f \rightarrow +\infty$), on obtient un élément S_{if} de la matrice S de diffusion (Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc and Grynberg, 1988). S_{if} est alors directement donné par la double limite ($t_i \rightarrow -\infty$, $t_f \rightarrow +\infty$) de l'élément de matrice de l'opérateur $\tilde{U}(t_f, t_i)$ dans le point de vue d'interaction pris entre les vecteurs $|\tilde{\varphi}_i\rangle$ et $|\tilde{\varphi}_f\rangle$. L'existence de cette double limite est assurée par le fait qu'on s'affranchisse dans ce point de vue de l'évolution temporelle libre de $U(t_f, t_i)$.

Considérons maintenant la collision faisant intervenir un noyau projectile, un noyau cible et un électron. Soient H_p et H_c les hamiltoniens des systèmes atomiques (électron+noyau projectile) et (électron + noyau cible), et V_c et V_p les potentiels perturbateurs correspondants. L'hamiltonien électronique H s'écrit : $H = H_p + V_c = H_c + V_p$. Par exemple, on suppose qu'à $t \rightarrow -\infty$, le système se trouve dans l'état φ_i (e^- centré sur la cible). On admet que la double limite de l'expression (17) existe même quand φ_i et φ_f ne sont pas des vecteurs propres du même hamiltonien (McDowell and Coleman, 1970). C'est le cas par exemple lors des processus de capture. Dans cette double limite, l'expression (17) est équivalente à :

$$a_{if}^+ = \langle \varphi_f(t) | \psi^+(t) \rangle_{t \rightarrow +\infty} \quad (18-a)$$

où $\psi^+(t)$ est la fonction d'onde solution exacte du problème, avec comme conditions aux limites :

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} [\psi^+(t) - \varphi_i(t)] = 0. \quad (19-a)$$

L'exposant "+" indique qu'il s'agit de la forme "post" de l'amplitude de transition. A cause de l'invariance par renversement du temps, cette amplitude peut aussi s'écrire :

$$a_{if}^- = \langle \psi^-(t) | \varphi_i(t) \rangle_{t \rightarrow -\infty} \quad (18-b)$$

où $\psi^-(t)$ est la fonction d'onde solution exacte vérifiant :

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} [\psi^-(t) - \varphi_f(t)] = 0. \quad (19-b)$$

L'équation (18-b) est la forme "prior" de l'amplitude de transition.

Suivant la même idée qu'au paragraphe précédent, on peut mettre formellement en évidence le rôle des potentiels perturbateurs dans a_{if}^+ et a_{if}^- . En effet, prenons l'exemple de l'excitation ; on écrit $H = H_c + V_p$.

$$|\psi^+(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi^+(t_0)\rangle \quad (20)$$

en utilisant (14-a) dans (20) il vient :

$$|\psi^+(t)\rangle = U_c(t, t_0)|\psi^+(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U_c(t, t') V_p(t') |\psi^+(t')\rangle dt' \quad (21)$$

et en prenant la limite $t_0 \rightarrow -\infty$:

$$|\psi^+(t)\rangle = |\varphi_i(t)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t U_c(t, t') V_p(t') |\psi^+(t')\rangle dt' \quad (22)$$

où l'on a utilisé

$$\left\{ \begin{array}{l} |\psi^+(t_0)\rangle \sim |\varphi_i(t_0)\rangle, t_0 \rightarrow -\infty \\ U_c(t, t_0)|\varphi_i(t_0)\rangle = |\varphi_i(t)\rangle \text{ car } \varphi_i \text{ est une fonction d'onde centrée sur la cible} \end{array} \right.$$

Donc

$$\langle \varphi_f(t) | \psi^+(t) \rangle = \langle \varphi_f(t) | \varphi_i(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \varphi_f(t) | U_c(t, t') V_p(t') | \psi^+(t') \rangle dt' \quad (23)$$

et comme dans le cas de l'excitation φ_f est aussi centrée sur la cible, on obtient en prenant la limite $t \rightarrow +\infty$

$$a_{if}^+ = \delta_{if} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi_f(t) | V_p(t) | \psi^+(t) \rangle dt. \quad (24)$$

Dans le processus de capture, $|\varphi_f(t)\rangle$ est centrée sur le projectile, et il faut prendre $H = H_p + V_c$. On a alors :

$$\langle \varphi_f(t) | \psi^+(t) \rangle = \langle \varphi_f(t) | U_p(t, t_0) | \psi^+(t_0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \varphi_f(t) | U_p(t, t_0') V_c(t') | \psi^+(t') \rangle dt' \quad (25)$$

$$\langle \phi_f(t) | \psi^+(t) \rangle = \langle \phi_f(t_0) | \psi^+(t_0) \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \phi_f(t') | V_c(t') | \psi^+(t') \rangle dt'. \quad (26)$$

En prenant les limites $t \rightarrow +\infty$, $t_0 \rightarrow -\infty$

$$a_{if}^+ = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \phi_f(t) | V_c(t) | \psi^+(t) \rangle dt \quad (27)$$

où l'on a utilisé :

$$\left\{ \begin{array}{l} |\psi^+(t_0)\rangle \sim |\phi_i(t_0)\rangle, t_0 \rightarrow -\infty \\ \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \langle \phi_f(t_0) | \phi_i(t_0) \rangle = 0 \text{ car } \phi_i \text{ est centrée sur la cible, } \phi_f \text{ sur le projectile infiniment éloigné.} \end{array} \right.$$

De même, la forme "prior" de a_{if} , identique pour l'excitation et la capture puisque ϕ_i est centrée sur la cible dans les deux cas, est :

$$a_{if}^- = \delta_{if} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi^-(t) | V_p(t) | \phi_i(t) \rangle dt. \quad (28)$$

On peut enfin remarquer que si l'on reporte (22) dans (24), on obtient un développement en puissance de V de a_{if}^+ (le même calcul est possible pour la capture –expression (27)- ou la forme "prior" –expression (28)). Si le potentiel perturbateur est suffisamment petit, on peut tronquer ce développement après quelques termes et trouver ainsi les expressions des approximations de Born (Born 1, 2, ..., n où n est la puissance de V du dernier terme retenu dans le développement).

Avant de présenter en détail le calcul des amplitudes que nous avons utilisé dans nos programmes, je vais exposer les concepts dont nous aurons besoin dans le formalisme de la matrice densité.

5°) Matrice densité

a) Définition

Lorsqu'on ne connaît pas parfaitement l'état d'un système quantique, mais que l'on connaît seulement la distribution de probabilité qu'il soit dans tel ou tel état, on ne peut pas représenter ce système par une fonction d'onde et on utilise un opérateur densité (appelé aussi matrice densité). C'est le cas usuel lorsqu'on traite de collision atomique. Les amplitudes a_{if} du paragraphe précédent dépendent des conditions précises de chaque collision comme par

exemple le paramètre d'impact (cf Chap.I§A-II-1-a) ou le moment transféré (cf Chap.I.§A-II-1-b).

Expérimentalement, on ne peut généralement pas fixer ces paramètres (excepté dans des expériences spécifiques utilisant des techniques de coïncidence ou de canalisation), on ne peut connaître que la probabilité qu'ils aient une valeur donnée. Appelons "k" ce paramètre et p_k la probabilité (discrète pour simplifier la notation) qu'il ait la valeur k. En utilisant la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ orthonormée des états d'arrivée, on peut développer ψ^+ après une collision de paramètre k :

$$|\psi_k^+\rangle = \sum_n a_{i,n}^{+(k)} |\varphi_n\rangle \quad (29)$$

où $a_{i,n}^{+(k)}$ est la forme "post" de l'amplitude de transition d'un état i vers l'état n dans une collision de paramètre "k", et le mélange statistique d'états est représenté, après la collision, par une matrice densité dont les éléments s'écrivent :

$$\rho_{np} = \langle \varphi_n | \rho | \varphi_p \rangle = \sum_k p_k a_{i,n}^{+(k)} \left(a_{ip}^{+(k)} \right)^* \quad (30)$$

Les éléments diagonaux sont appelés "population", tandis que les éléments non-diagonaux sont appelés "cohérence" (Cohen-Tannoudji, Diu and Laloë, 1977). En effet, si l'élément non-diagonal ρ_{np} est nul, cela signifie que le mélange a fait disparaître tout effet d'interférence entre $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_p\rangle$; dans le cas contraire, il subsiste une certaine cohérence entre ces états.

Notons que le formalisme de la matrice densité est très utile également lorsque l'on s'intéresse à un sous-système d'un système plus vaste. Même si le grand système est dans un état pur (et peut être décrit par une fonction d'onde), le sous-système ne peut être décrit que par un opérateur densité obtenu par trace partielle de l'opérateur densité du système global.

b) Equation de Liouville

L'opérateur densité étant hermitique, il existe toujours une base orthonormée $|\psi_n\rangle$ dans laquelle ρ est diagonal, ce qui s'écrit, à l'instant t :

$$\rho(t) = \sum_n |\psi_n(t)\rangle p_n \langle \psi_n(t)| \quad (31)$$

En utilisant (1), on peut donc calculer $\rho(t)$ en fonction de $\rho(t_0)$ la matrice densité du système à l'instant t_0 :

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \sum_n U(t, t_0) |\Psi_n(t_0)\rangle \rho_n \langle \Psi_n(t_0)| U^\dagger(t, t_0) \\ &= U(t, t_0) \rho(t_0) U^\dagger(t, t_0)\end{aligned}\quad (32)$$

ce qui exprime que de t_0 à t , l'opérateur ρ subit la transformation unitaire $U(t, t_0)$. Compte-tenu de l'équation d'évolution de l'opérateur U (eq.3) et de son hermitique conjugué, l'évolution causale de $\rho(t)$ est donnée par l'équation de Liouville :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho(t) = [H(t), \rho(t)]. \quad (33)$$

L'étude quantique du transport des états excités du projectile dans une cible solide (paragraphe IV) repose sur cette équation.

Dans les paragraphes II et III, l'électron actif est supposé initialement centré sur le projectile, excepté dans la partie concernant la capture. De plus, j'utiliserai les unités atomiques partout ($\hbar=m=e=1$), sauf quand précisé.

II – Étude des collisions binaires en régime perturbatif

1°) Processus d'excitation

Nous nous intéresserons ici à l'excitation d'un ion hydrogénoïde lors d'une collision avec une cible éventuellement neutre. L'important est qu'il n'y ait qu'un seul électron actif dans la collision. L'action des autres électrons est alors modélisée par un champ moyen qui peut "écranter" ou au contraire "antiécranter" le potentiel exciteur (voir Chap.I§A-II-1-b). La collision se résume alors à un problème à 3 corps. Je vais présenter deux approches différentes pour traiter ce problème, la première repose sur la méthode d'équations couplées, la seconde étant une approximation de Born au 1^{er} ordre.

a) Méthode des équations couplées (Close-Coupling) ; Formalisme du paramètre d'impact

La méthode des équations couplées a été d'abord développée pour les collisions à basse énergie (voir Chap.I§A-I-2) et repose sur l'idée que l'espace des états du système étudié peut être représenté par un espace de Hilbert de dimension finie. Il faut prendre une base

suffisamment grande pour traiter correctement l'espace des états, mais la plus petite possible pour minimiser le temps de calcul des amplitudes de transition.

La méthode était initialement réservée aux collisions lentes parce qu'alors l'espace des configurations nécessaire est de dimension restreinte. En effet, le principe d'incertitude indique que dans ce cas (temps de collision long) la transition est quasi-résonante. Grâce à l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, on a pu appliquer la méthode au domaine des hautes énergies, qui était auparavant réservé aux méthodes perturbatives.

Dans tous les cas, le calcul se place dans le formalisme du paramètre d'impact, dans lequel les noyaux ont une trajectoire classique. Cela suppose que la collision soit suffisamment énergétique pour que la longueur d'onde de de Broglie associée aux noyaux soit petite devant les dimensions atomiques considérées (i.e. rayons des orbites de Bohr des états atomiques impliqués). D'autre part, on supposera que le mouvement des noyaux n'est pas modifié par la collision : on néglige l'interaction entre les noyaux et leurs trajectoires sont des droites séparées par le paramètre d'impact b (voir figure 3). Cette hypothèse est raisonnable dans la mesure où aux paramètres d'impact pour lesquels les processus d'excitation sont importants (de l'ordre des dimensions atomiques), les effets de l'interaction coulombienne entre les noyaux sur leur cinématique sont très faibles.

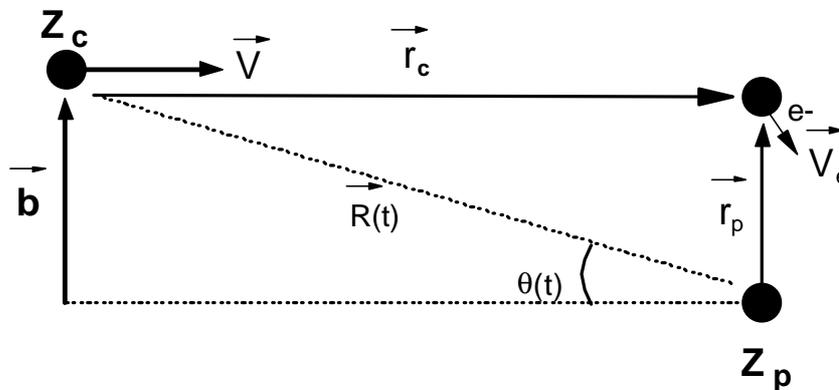


Figure 3 : Système de coordonnées utilisé pour décrire la collision entre un projectile nu de charge Z_p et une cible hydrogénoïde de charge Z_c dans le cadre du formalisme du paramètre d'impact.

Pour un système collisionnel donné (nature des partenaires, vitesse de collision), l'amplitude de transition dépend du paramètre d'impact b . Pour une collision précise (b fixé), la fonction d'onde électronique peut s'écrire, à tout moment, et avec les notations de la figure 3 :

$$\psi(\vec{r}_p, b, t) = \sum_{k=1}^N a_k(b, t) \phi_k(\vec{r}_p, t) \quad (34)$$

N étant la dimension de l'espace de configuration dans lequel on traite le problème. En particulier, la base $\{\phi_k\}$ doit pouvoir décrire tous les états transitoires de l'électron durant la collision.

Les amplitudes $a_k(b, t)$ sont calculées en résolvant l'équation de Schrödinger dans l'espace de configuration (Fritsch, 1993) :

$$\left\langle \phi_j \left| i \frac{\partial}{\partial t} - H(b, t) \right| \psi \right\rangle = 0 \quad j = 1 \dots N \quad (35)$$

ce qui mène à un système d'équations différentielles couplées pour les amplitudes :

$$\sum_{k=1}^N N_{jk}(t) \frac{da_k(b, t)}{dt} = i \sum_{k=1}^N M_{jk}(b, t) a_k(b, t) \quad j = 1 \dots N \quad (36)$$

où $N_{jk}(t)$ est un élément de matrice de recouvrement des fonctions d'ondes, dépendant du temps :

$$N_{jk}(t) = \left\langle \phi_j \left| \phi_k \right\rangle (t) \quad (37)$$

et $M_{jk}(b, t)$ des éléments de couplage :

$$M_{jk}(b, t) = \left\langle \phi_j \left| i \frac{\partial}{\partial t} - H(b, t) \right| \phi_k \right\rangle. \quad (38)$$

Finalement, l'amplitude de transition vers l'état final f est obtenue quand t tend vers l'infini :

$$a_f(b) = \lim_{t \rightarrow +\infty} a_f(b, t). \quad (39)$$

La probabilité de transition correspondante s'écrit :

$$P_f(b) = |a_f(b)|^2. \quad (40)$$

On peut écrire les éléments de la matrice densité décrivant le système collisionnel lorsqu'on ne peut pas imposer b en utilisant la formule (30). P_k est ici la probabilité pour que la collision ait un paramètre d'impact de valeur b ; celle-ci vaut $2\pi b db$ à cause de la symétrie cylindrique de la collision, ce qui donne :

$$\rho_{ff'} = 2\pi \int_0^{\infty} a_f(b) a_{f'}^*(b) b db. \quad (41)$$

La population $\rho_{ff'}$ d'un état est donc la section efficace pour la transition vers cet état.

En plus des critères déjà énoncés, le choix de la base $\{\phi_k\}$ doit aussi être dicté par la facilité avec laquelle les éléments de matrice (37) et (38) peuvent être évalués. Ainsi il est parfois commode d'adopter des états qui n'ont pas de signification physique particulière (bases de "pseudoétats"), comme par exemple des orbitales gaussiennes. Pour une discussion plus détaillée du choix de bases (base à un ou plusieurs centres, bases de pseudoétats, etc...) on peut se référer à (Reading, Ford and Becker, 1981; Fritsch and Lin, 1991; Fritsch, 1993).

Les amplitudes de probabilité pour l'excitation à partir du niveau $1s$ d'un ion krypton hydrogéné de, en collision à $v = 46,95$ avec une cible atomique de carbone ($Z_c = 6$) et d'aluminium ($Z_c = 11$), nous ont été fournies par F. Martin (Martin, 1998). Une base de 199 états était utilisée dans un formalisme à un centre incluant des orbitales atomiques et des états du continuum. Les amplitudes ont été calculées pour des états finals de nombre orbital ℓ compris entre 0 et 5, et de nombre quantique n compris entre 2 et 8.

Ce calcul, bien que très coûteux numériquement, est intéressant d'une part parce que non perturbatif, et d'autre part parce que toutes les amplitudes sont calculées en même temps. En particulier, leurs phases sont calculées de façon cohérente, ce qui est important lorsqu'on s'intéresse à la réponse collective d'un solide sur les états électroniques d'un ion, comme on le verra par la suite (Chap.I§A-V-2 et -3).

Il faut enfin préciser que dans ce calcul, le partenaire exciteur (carbone ou aluminium) était nu. Il semblerait cependant que ce soit une très bonne approximation vis à vis de l'écrantage (cf Chap.I§A-II-1-b-ii) puisque les transitions ont lieu principalement à des paramètres d'impact inférieurs au rayon moyen de la couche K du carbone ou de l'aluminium respectivement (Martin, 1998).

La figure 4 illustre bien cela. On y voit l'évolution du produit $b^*P(b^*)$, c'est à dire l'intégrande intervenant dans les sections efficaces (41) (où $f = f'$), en fonction de b^* le paramètre d'impact. Pour des raisons numériques, b^* est égal à b multiplié par $Z_p = 36$.

$$b^* = 36 \times b. \quad (42)$$

La figure 4-a concerne les transitions dipolaires de $1s$ vers np , n allant de 2 à 8, et la figure 4-b concerne toutes les transitions $1s \rightarrow n\ell$ ($n = 2$ et 3), pour la collision $Kr^{35+} \rightarrow C^{6+}$ à $v = 46,95$. On voit sur ces figures que la contribution principale est atteinte pour b^* variant de 1 à 3,5, ce qui correspond à un paramètre d'impact b variant de 0,03 à 0,1, alors que le rayon moyen de la couche K du carbone est approximativement $1/6 = 0,17$. A l'inverse, 0,03 est très grand devant les dimensions minimales d'approches ($\approx 10^{-6}$) dépendant de la vitesse de

collision et de la répulsion coulombienne projectile-cible, ce qui justifie l'approximation de Born-Oppenheimer utilisée.

La contribution de l'antiécrantage (cf Chap.I§A-II-1-b-ii) est ici négligée. Le calcul Plane Wave Born Approximation (PWBA) présenté plus loin montre que l'effet d'antiécrantage augmente les sections efficaces d'environ 12,5%.

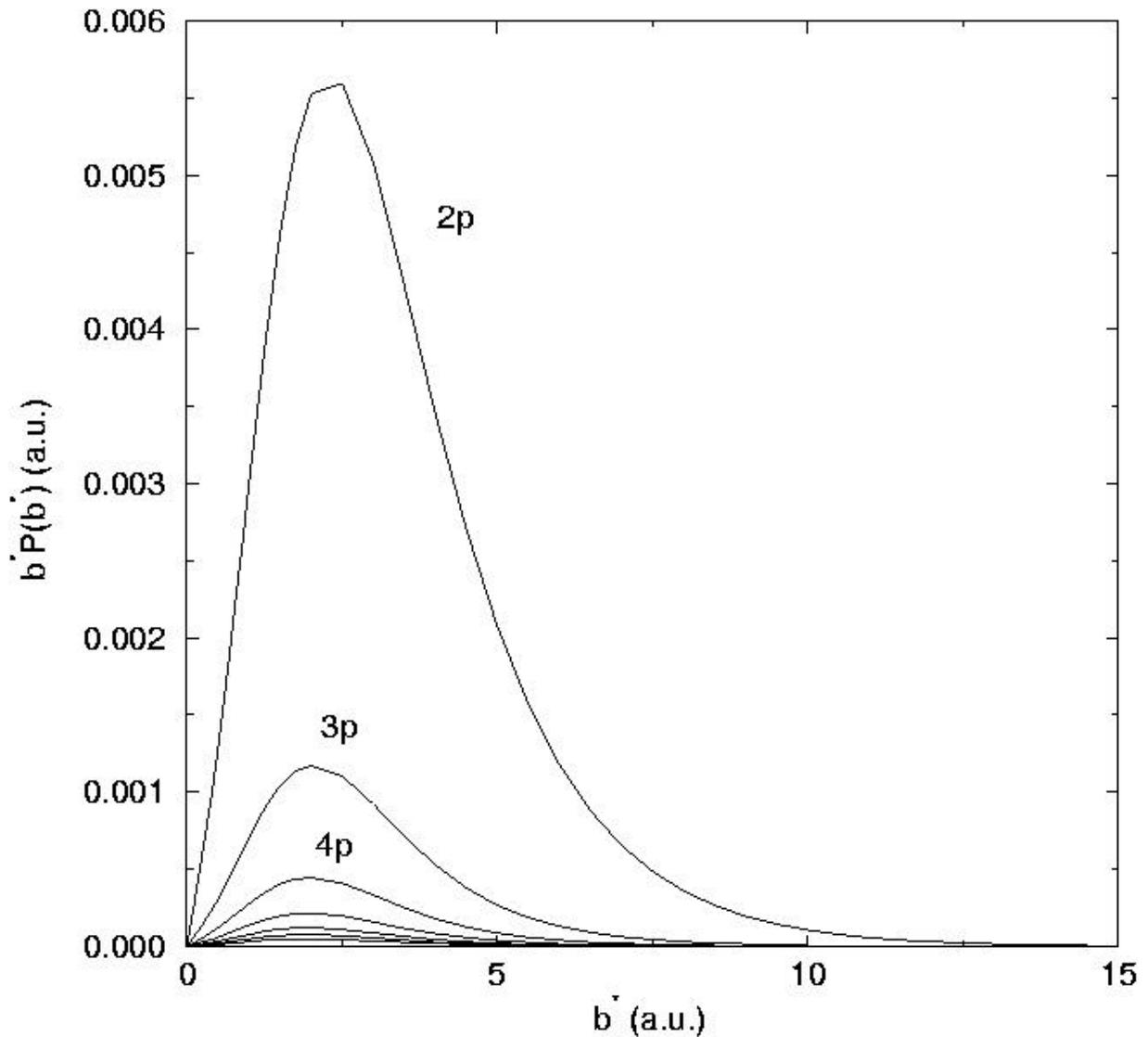


Figure 4-a : Evolution du produit $b^*.P(b^*)$ en fonction de b^* (voir texte), pour les transitions dipolaires $1s @ np$ dans la collision $Kr^{35+} @ C^{6+}$ à $v = 46,95$ u.a. (Martin, 1998).

On peut également remarquer grâce à ces figures que le paramètre d'impact $b(\max)$ correspondant au $b^*P(b^*)$ maximum ne dépend pratiquement pas, pour un ℓ fixé, du nombre quantique principal n de l'état d'arrivée, dans le cadre de cette théorie (figure 4-a). Par contre, pour n fixé, $b(\max)$ augmente avec le nombre quantique orbital ℓ de l'état d'arrivée, ce qui se

comprend bien intuitivement dans une image classique de la collision. A grand paramètre d'impact, le noyau C^{6+} a plus de "bras de levier" pour transmettre un mouvement de rotation à l'électron autour du noyau Kr.

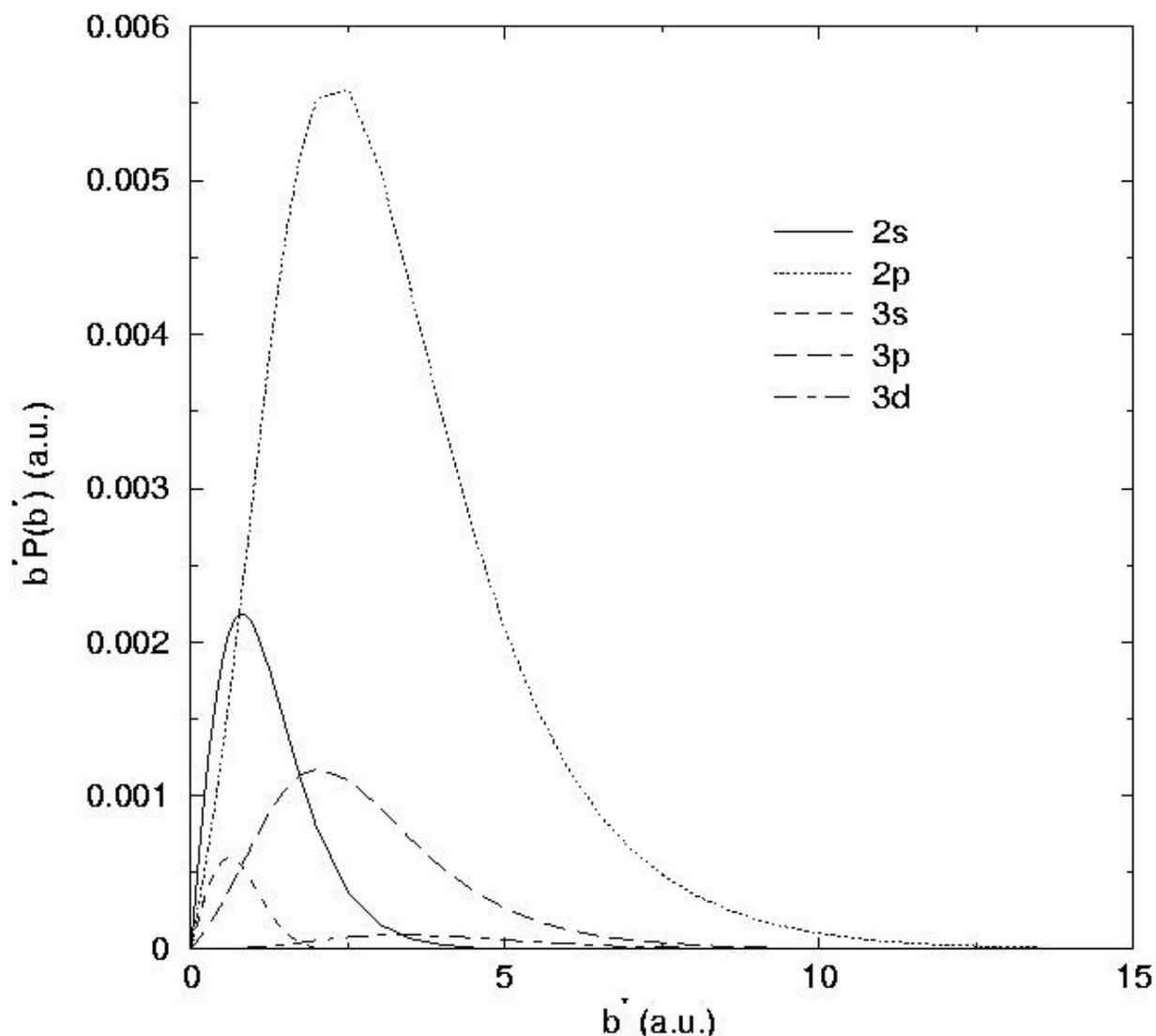


Figure 4-b : Evolution du produit $b^*.P(b^*)$ en fonction de b^* (voir texte), pour les transitions $1s @ nl, n=2$ ou 3 , dans la collision $Kr^{35+} @ C^{6+}$ à $v = 46,95$ u.a. (Martin, 1998).

b) Calcul PWBA

Nous avons également calculé les amplitudes d'excitation dans l'approximation de Born I. Ici aussi nous négligerons l'interaction noyau-noyau. De plus, on décrit leur mouvement par des ondes planes ("Plane Wave Born Approximation", PWBA). Comme les ondes planes $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ne sont pas normalisées, elles représentent en fait un état d'impulsion $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ (dans le Système International) normalisé à densité unité ; elles sont donc adéquates

pour représenter un faisceau de particules monocinétiques de masse m et de flux $\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m}$ (S.I.).

i) Formalisme de moment transféré

On étudie ici l'excitation d'un électron lié au noyau Z_p provoquée par la collision avec un partenaire nu de charge Z_c . Le système de coordonnées utilisées est représenté figure 5.

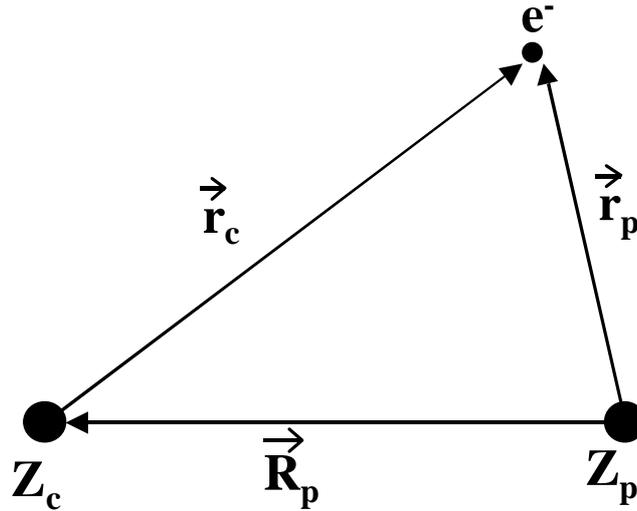


Figure 5 : Système de coordonnées utilisées pour l'étude de l'excitation d'un électron lié à Z_p par Z_c .

Le système est composé de C (charge Z_c , masse M_c) d'une part, et du sous-système e^-+P ; l'électron a une masse m et une charge $-e$, P une masse M_p et une charge Z_p . Comme $m \ll M_p$, on confond le centre de masse du sous-système ($P+e^-$) avec P.

L'hamiltonien du système s'écrit, en négligeant l'interaction noyau-noyau,

$$H = -\frac{1}{2\mu} \nabla_{\vec{R}_p}^2 - \frac{1}{2\mu_e} \nabla_{\vec{r}_p}^2 + V_p(\vec{r}_p) + V_c(\vec{r}_c) = H_p + V_c(\vec{r}_c) \quad (43)$$

où V_p (resp. V_c) est le potentiel coulombien exercé par P (resp. C) sur l'électron,

et où μ_e est la masse réduite du sous-système ($P+e^-$) :

$$\mu_e = \frac{mM_p}{m + M_p} \approx 1 \quad (44)$$

et μ la masse réduite du système $P+C$:

$$\mu = \frac{M_c M_p}{M_c + M_p}. \quad (45)$$

Pour $t \rightarrow \pm \infty$, les fonctions propres de H vérifient :

$$\begin{cases} H_p \psi_i(\vec{r}_p, \vec{R}_p) = E \psi_i(\vec{r}_p, \vec{R}_p) \\ H_p \psi_f(\vec{r}_p, \vec{R}_p) = E \psi_f(\vec{r}_p, \vec{R}_p) \end{cases} \quad (46)$$

On peut écrire ces fonctions d'ondes, dans le cadre de la PWBA :

$$\begin{cases} \psi_i(\vec{r}_p, \vec{R}_p) = e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_p} \phi_i(\vec{r}_p) \text{ d'énergie } E_i = \varepsilon_i + \frac{K_i^2}{2\mu} \\ \psi_f(\vec{r}_p, \vec{R}_p) = e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_p} \phi_f(\vec{r}_p) \text{ d'énergie } E_f = \varepsilon_f + \frac{K_f^2}{2\mu} \end{cases} \quad (47)$$

où $\phi_i(\vec{r}_p)$ (resp. $\phi_f(\vec{r}_p)$) est une fonction d'onde hydrogénoïde centrée sur P, $K_i = |\vec{K}_i|$ et

$K_f = |\vec{K}_f|$ sont la norme du moment initial et final de C, et $\varepsilon_i = \frac{-Z_p^2}{2n_i^2}$, $\varepsilon_f = \frac{-Z_p^2}{2n_f^2}$. \vec{K}_i est

relié à la vitesse de collision \vec{v} (vitesse relative de C par rapport à P) par la relation simple :

$$\vec{K}_i = \mu \vec{v}.$$

Au premier ordre, on couple directement l'état initial ψ_i à l'état final ψ_f dans l'expression de l'amplitude de transition (24) :

$$a_{if} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_f | V_c | \psi_i \rangle dt. \quad (48)$$

L'amplitude n'a pas directement de sens physique : on s'intéresse donc à la probabilité de transition d'un état i à un état f, entre un instant initial $t_0 = 0$ et un instant final t :

$$\begin{aligned} \omega_{if} &= a_{if}(0, t) a_{if}^*(0, t) \\ &= \left| \int_0^t \int_{\vec{R}_p} \int_{\vec{r}_p} e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_p} \phi_f^*(\vec{r}_p) \frac{-Z_c}{|\vec{R}_p - \vec{r}_p|} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_p} \phi_i(\vec{r}_p) d\vec{R}_p d\vec{r}_p e^{-i(E_i - E_f)t} dt' \right|^2 \\ &= \left| \langle \vec{K}_f, \phi_f \left| \frac{-Z_c}{|\vec{R}_p - \vec{r}_p|} \right| \vec{K}_i, \phi_i \rangle \right|^2 g(E_f - E_i, t) \end{aligned} \quad (49)$$

avec

$$g(E_f - E_i, t) = \frac{2\{1 - \cos[(E_f - E_i)t]\}}{(E_f - E_i)^2} \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} 2\pi t \delta(E_f - E_i). \quad (50)$$

Notons que cette expression est établie dans le cas idéal d'une observation au bout d'un temps infini et l'énergie est strictement conservée ($E_f = E_i$). Comme nous le verrons plus loin, l'observation au bout d'un temps fini, qui correspond davantage à la réalité, autorise l'accès à l'énergie finale d'une certaine bande autour de la valeur E_i .

La probabilité de transition par unité de temps lors de l'interaction entre le faisceau incident monocinétique et l'excitateur Z_c vaut :

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_{if} \sim 2\pi V_{fi} V_{fi}^* \delta(E_f - E_i) \\ \text{avec } V_{fi} = \langle \mathbf{K}_f, \varphi_f | \frac{-Z_c}{|\vec{\mathbf{R}}_p - \vec{\mathbf{r}}_p|} | \mathbf{K}_i, \varphi_i \rangle. \end{array} \right. \quad (51)$$

Comme l'état final appartient à un continuum, $\vec{\mathbf{K}}_f$ variant continûment, ω_{if} est proportionnel à la densité d'états $\rho(E_f)$ d'ondes planes autour de E_f . De même, la direction de $\vec{\mathbf{K}}_f$ n'est pas définie parfaitement, mais seulement à un angle solide $d\Omega$ près. La probabilité par unité de temps dans l'angle solide $d\Omega$ devient alors

$$\left\{ \begin{array}{l} \omega_{if} \sim 2\pi V_{fi} V_{fi}^* \rho(E_f) d\Omega \\ \text{avec } \rho(E_f) = \frac{\mu K_f}{8\pi^3} \\ \text{et la contrainte } E_i = E_f. \end{array} \right. \quad (52)$$

ω_{if} est proportionnel à la section efficace différentielle d'excitation, au flux incident près.

Comme $|\mathbf{K}_i\rangle$ représente une onde de flux $v = \frac{K_i}{\mu}$, on a pour la section efficace d'excitation de

i à f :

$$\rho_{i,ff} = \int_{\Omega} \frac{\mu \omega_{if}}{K_i} = \frac{\mu^2 K_f}{4\pi^2 K_i} \int V_{fi} V_{fi}^* d\Omega. \quad (53)$$

L'intégration sur $d\Omega$ donne, en tenant compte de la symétrie cylindrique du système faisceau+cible (McDowell and Coleman, 1970) :

$$\rho_{i,ff} = \frac{\mu^2}{2\pi K_i^2} \int_{K_-}^{K_+} V_{fi} V_{fi}^* K dK \quad (54)$$

avec la même contrainte que pour (52), où K est la norme du moment transféré $\vec{\mathbf{K}} = \vec{\mathbf{K}}_i - \vec{\mathbf{K}}_f$ au cours de la collision. K_- et K_+ sont les valeurs minimales et maximales de K , donc

$$K_- = |\mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f|$$

$$K_+ = \mathbf{K}_i + \mathbf{K}_f.$$

Le résultat (54) est donné en a_0^2 ($a_0 = 5,2917 \cdot 10^{-11}$ m).

La conservation de l'énergie impose :

$$K_i^2 - K_f^2 = 2\mu(\epsilon_f - \epsilon_i) \Rightarrow K_-^2 = K_i^2 + K_f^2 - 2K_i K_f = \mu^2 v^2 \left[1 - \left(1 - \frac{2(\epsilon_f - \epsilon_i)}{\mu v^2} \right)^{1/2} \right]^2.$$

D'où il vient, pour des particules lourdes et rapides :

$$K_- \approx \frac{|\epsilon_f - \epsilon_i|}{v}. \quad (55)$$

Le moment transféré maximum correspond au cas de figure où C rebondit sur P et dans ce cas,

$$K_+ = 2\mu v. \quad (56)$$

Il reste à évaluer les éléments V_{fi} :

$$V_{fi} = \iint e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{R}_p} \varphi_f^*(\vec{r}_p) \frac{-Z_c}{|\vec{R}_p - \vec{r}_p|} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{R}_p} \varphi_i(\vec{r}_p) d\vec{R}_p d\vec{r}_p.$$

En posant $\vec{K} = \vec{K}_i - \vec{K}_f$ et $\vec{R} = \vec{R}_p - \vec{r}_p$ ($= -\vec{r}_c$) (figure 5), il vient :

$$V_{fi}(\vec{K}) = \int \varphi_f^*(\vec{r}_p) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_p} \varphi_i(\vec{r}_p) d\vec{r}_p \int \frac{-Z_c}{R} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} d\vec{R}. \quad (57)$$

La première intégrale est le facteur de forme atomique hydrogénoïde $I_{fi}(\vec{K})$, et la seconde est une transformée de Fourier du potentiel coulombien perturbateur, donc :

$$V_{fi}(\vec{K}) = \frac{-4\pi}{K^2} Z_c I_{fi}(\vec{K}) \quad (58)$$

et l'expression des sections efficaces (54) devient :

$$\rho_{i,ff'} = \frac{8\pi Z_c^2}{v^2} \int_{K_-}^{K_+} I_{fi}(\vec{K}) I_{fi'}^*(\vec{K}) \frac{dK}{K^3}. \quad (59)$$

Par analogie, on peut définir des cohérences pour l'excitation :

$$\rho_{i,ff'} = \frac{8\pi Z_c^2}{v^2} \int_{K_-}^{K_+} I_{fi}(\vec{K}) I_{fi'}^*(\vec{K}) \frac{dK}{K^3} \delta(m_f - m_{f'}) \quad (60)$$

où m_f et $m_{f'}$ sont les nombres quantiques magnétiques des états f et f' . La règle de sélection $\delta(m_f - m_{f'})$ provient de l'intégration sur $d\Omega$ dans l'équation (53), et de la symétrie cylindrique de la collision faisceau-cible (voir Chap.I§A-II-1-b-iii).

Cela suppose qu'une collision donnée est susceptible de peupler à la fois les niveaux f et f' . La conservation de l'énergie imposerait alors à ces niveaux d'être dégénérés, c'est à dire d'appartenir à la même couche $n_f = n_{f'}$. Mais en toute rigueur, la relation (50) implique que

l'énergie E est conservée à $\frac{2\pi\hbar}{t}$ près, où t est le temps caractéristique au bout duquel le système est mesuré. Ce temps caractéristique est très approximativement de l'ordre de quelques $\frac{1}{v}$, et donc l'énergie est conservée à $\Delta E=2\pi v$ près. Par exemple, pour un projectile hydrogénéoï de Kr^{35+} en collision à $v = 47$, $\Delta E = 295 \cong 8 \text{ keV}$, à comparer avec l'écart énergétique maximal dans une couche (atteint pour $n=2$) : $\Delta E_{n=2} \cong 78 \text{ eV}$. Nous voyons donc que pour ce projectile nous pouvons calculer des cohérences d'excitation entre les états d'une couche donnée, malgré les écarts d'énergie de structure fine et les Lamb-Shift. Par contre, la conservation d'énergie impose que les cohérences sont nulles entre états de 2 couches internes différentes. Par exemple pour Kr^{35+} , $\Delta E_{n=2,n=3} \cong 2,5 \text{ keV}$ qui n'est pas très petit devant 8 keV .

ii) Ecrantage – Antiécrantage

Dans le calcul précédent, nous avons considéré que le partenaire exciteur $-Z_c-$ est nu. En réalité, le noyau Z_c est entouré d'un certain nombre d'électrons (Z_c électrons dans le cas d'une collision ion-gaz). Ces électrons jouent un rôle dans la collision de deux façons compétitives :

- ❖ Premièrement, ils écrantent le potentiel créé par Z_c , à grande distance de celui-ci. On parle "d'écrantage".
- ❖ Deuxièmement, ils peuvent contribuer directement à l'excitation de l'électron centré sur Z_p par collision électron-électron. On parle "d'antiécrantage".

Remarquant que les éléments de matrice (59) et (60) s'écrivent sous la forme $\int Z_c^2 F(\vec{K}) dK$, où Z_c décrit le partenaire exciteur et $F(\vec{K})$ ne dépend que du partenaire excité, on peut essayer de conserver cette séparation formelle en introduisant les phénomènes d'écrantage et d'antiécrantage.

J.H. McGuire a montré que dans le cas où Z_c est entouré de 2 électrons, on obtient les sections efficaces PWBA en remplaçant Z_c par une charge effective $Z_c(\vec{K})$ qui ne dépend que du partenaire exciteur (McGuire, Stolterfoht and Simony, 1981). R. Anholt (Anholt, 1985) a généralisé ce résultat pour un atome neutre C :

$$Z_c^2(\vec{K}) = \left| Z_c - \sum_{i=1}^{Z_c} \langle \psi_i | e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} | \psi_i \rangle \right|^2 + Z_c - \sum_{i=1}^{Z_c} \left| \langle \psi_i | e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} | \psi_i \rangle \right|^2 \quad (61)$$

où ψ_i représente l'orbitale atomique du $i^{\text{ème}}$ électron de C et $\sum_{i=1}^{Z_c} \langle \psi_i | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi_i \rangle = F_c(\vec{K})$ est le facteur de forme de la transition considérée (ces derniers sont tabulés par (Hubbell, Veigle, Briggs *et al.*, 1975)).

Le premier terme à droite de (61) représente l'écrantage : pour un petit moment transféré \vec{K} (qui correspond à une collision à grand paramètre d'impact), $F_c(\vec{K}) \cong Z_c$, et ce terme s'annule : Z_c est complètement écraté. A l'inverse, pour un grand moment transféré (qui correspond à un petit paramètre d'impact), $F_c(\vec{K}) \cong 0$: près du noyau, Z_c n'est pas du tout écraté.

Les second et troisième termes représentent l'antiécrantage : si \vec{K} est grand, cette somme vaut à peu près Z_c , ce qui correspond à la contribution de Z_c interactions électron-électron séparées. A grand paramètre d'impact (\vec{K} petit), ce terme s'annule aussi.

On remarque que le terme d'écrantage est la transformée de Fourier de la distribution de charge ρ_K de C, elle-même reliée à la transformée de Fourier du potentiel V_K par l'équation de Poisson (Kittel, 1983) :

$$K^2 V_K = 4\pi\rho_K. \quad (62)$$

Dans l'approximation de Thomas-Fermi, ρ_K s'exprime :

$$\rho_K = \frac{Z_c K^2}{K^2 + d^{-2}} \quad (63)$$

avec $d = 0,885Z_c^{-1/3}$ la longueur de Thomas-Fermi (Drepper and Briggs, 1976).

C'est également le résultat auquel on peut arriver en utilisant le fait bien connu que les sections efficaces PWBA font intervenir le module au carré de la transformée de Fourier du potentiel perturbateur (cf expressions (57) et (59)) (Cohen-Tannoudji, Diu and Laloë, 1977; Röschenhaler, Betz, Rothermel *et al.*, 1983).

D'autre part, le terme $\sum_{i=1}^{Z_c} \left| \langle \psi_i | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi_i \rangle \right|^2$ est compris entre $\frac{F_c^2(\vec{K})}{Z_c}$ et $F_c(\vec{K})$. Anholt (Anholt, 1985) a montré qu'on commet une erreur de l'ordre de 5%, dans les cas les plus défavorables selon qu'on remplace $\sum_{i=1}^{Z_c} \left| \langle \psi_i | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \psi_i \rangle \right|^2$ par l'une ou l'autre de ces bornes. De plus, un calcul effectué en prenant des orbitales atomiques hydrogénoïdes pour $|\psi_i\rangle$ dans le

cas de Be ($1s^2 2s^2$), montre que l'erreur faite sur la somme est minime quand on la remplace par $\frac{F^2(\vec{K})}{Z_c}$ pour les moments transférés grands (excitations intercouches).

Enfin, des études précédentes tant expérimentales (Adoui, 1995) que théoriques (Montenegro and Zouros, 1994; Reading, Hall, Neves *et al.*, 1996) ont montré que l'effet d'antiécranage est généralement correctement estimé pour les transitions $1s \rightarrow np$ dans le domaine perturbatif, en maximisant le terme d'antiécranage :

$$Z_c^2(\vec{K}) = \left| Z_c - F_c(\vec{K}) \right|^2 + Z_c - \frac{|F_c(\vec{K})|^2}{Z_c}. \quad (64)$$

Ecrivant, dans l'approximation de Thomas-Fermi (63), $Z_c - F_c(\vec{K}) = \frac{Z_c K^2}{K^2 + d^{-2}}$, on en déduit

$$F_c(\vec{K}) = \frac{Z_c d^{-2}}{K^2 + d^{-2}} \text{ et enfin :}$$

$$\frac{Z_c^2(\vec{K})}{Z_c^2} = \left(\frac{K^2}{K^2 + d^{-2}} \right)^2 + \frac{1}{Z_c} \left[1 - \left(\frac{d^{-2}}{K^2 + d^{-2}} \right)^2 \right]. \quad (65)$$

Afin de minimiser l'erreur faite en utilisant l'approximation de Thomas-Fermi, nous avons inclus dans notre programme un facteur correctif permettant de reproduire au mieux les facteurs de forme atomiques tabulés de Hubell *et al* (Hubbell, Veigele, Briggs *et al.*, 1975). Ce facteur correctif $F_{sc}(Z_c)$ s'applique sur la longueur de Thomas-Fermi :

$$d = \frac{0,885 Z_c^{\frac{1}{3}}}{F_{sc}(Z_c)}. \quad (66)$$

Le tableau I donne les valeurs de $F_{sc}(Z_c)$ que nous avons utilisées et la figure 6 donne un exemple de la correction effectuée dans le cas du carbone.

Elément	H	He	C	N	Ne	Al	Si	Ar	Cu	Kr	Xe
Z_c	1	2	6	7	10	13	14	18	29	36	54
$F_{sc}(Z_c)$	1,23	1,526	0,780	0,850	1,04	0,580	0,590	0,680	0,672	0,610	0,535

Tableau I : Valeurs du coefficient correctif sur la longueur de Thomas-Fermi en fonction de la nature de la cible.

Reading *et al.* (Reading, Hall, Neves *et al.*, 1996) ont montré que l'on surestime l'antiécrantage si on s'éloigne de la limite très haute vitesse. On peut corriger cet écart en imposant une condition aux électrons de C vraiment impliqués dans l'antiécrantage. Dans le cadre de la "Response Theory", les électrons de C ne participent à l'antiécrantage que si la vitesse de collision vérifie :

$$v^2 > 2\Delta E \quad (67)$$

avec ΔE l'énergie d'excitation d'un électron de P.

Cette condition de seuil est précisément celle que l'on obtient si on considère les électrons de C comme appartenant à un faisceau d'électrons libres ayant une vitesse v dans le référentiel de P, et la condition (67) exprime la conservation de l'énergie. La figure 7 montre la fonction de seuil correspondante sur le terme d'antiécrantage (pointillés).

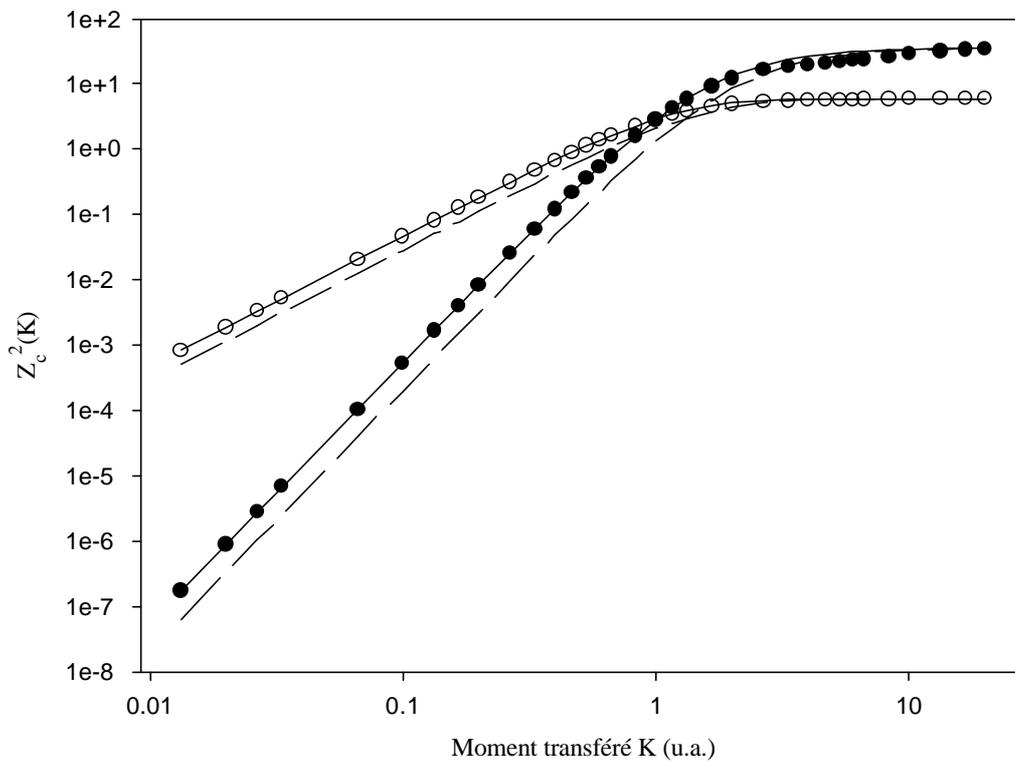


Figure 6 : Variation de $Z_c^2(K)$ en fonction du moment transféré, pour une cible de carbone : les points sont les termes d'écrantage et d'antiécrantage de l'expression (64), calculés avec les facteurs tabulés de Hubbell *et al.* (Hubbell, Veigle, Briggs *et al.*, 1975) ; les pointillés : idem avec les facteurs Thomas-Fermi ; le trait plein : idem avec des facteurs Thomas-Fermi corrigés.

Pour tenir compte du fait que les électrons de C sont en fait liés, on introduit leur profil Compton (voir par exemple (Montenegro and Zouros, 1994)). Cela a pour effet d'adoucir la fonction de "Heavyside" qui décrit le seuil en vitesse (Reading, Hall, Neves *et al.*, 1996). Une

étude effectuée précédemment dans notre équipe, sur l'excitation à partir de 1s d'un projectile Ar^{17+} (dans le domaine perturbatif) par des atomes neutres allant de l'hélium à l'azote, a montré qu'on peut atteindre un bon compromis entre la simplicité et la représentation correcte de ce caractère en prenant pour fonction de seuil :

$$H_s(v) = \frac{v^2 - \left(\frac{\Delta E}{v}\right)^2}{v^2} \quad (68)$$

qui est représentée figure 7 en trait plein.

C'est cette fonction de seuil que nous avons incluse dans le programme de calcul des sections efficaces d'excitation.

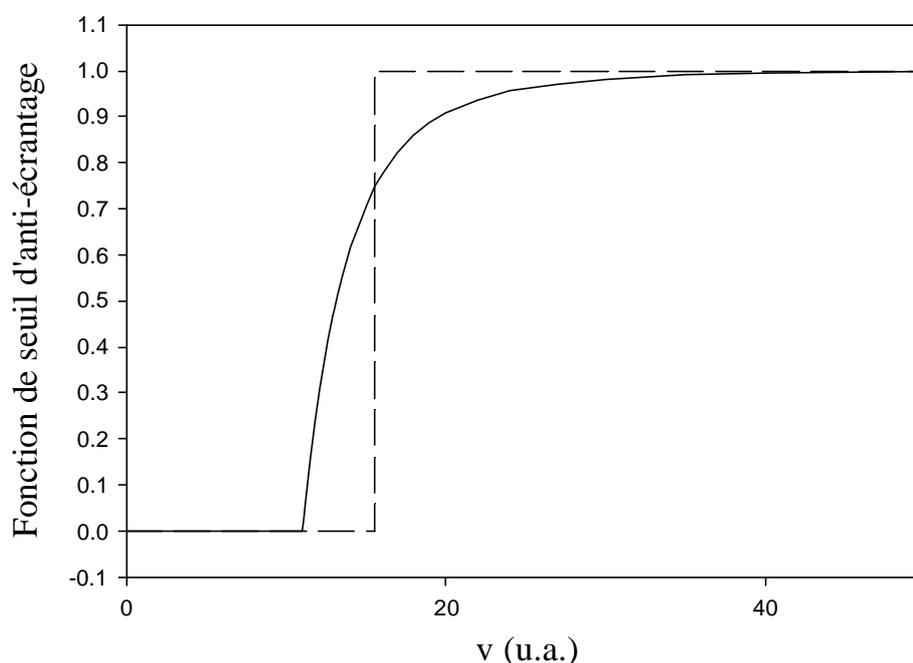


Figure 7 : Fonction de seuil sur l'anti-écrantage : Pointillés : pour un faisceau monocinétique d'électrons libres. Trait plein : fonction approchée pour tenir compte de la distribution de moments. Exemple de l'excitation de $n=1$ vers $n=2$ pour un projectile Ar^{17+} ($\Delta E = 121,5$ u.a.)

iii) Calcul des facteurs de forme hydrogénoïdes

Les expressions (59) et (60) des sections efficaces et des cohérences font intervenir les facteurs de forme hydrogénoïdes du partenaire excité P. Ces quantités sont des objets mathématiques d'une importance fondamentale ; en effet, ils représentent l'amplitude de transition d'un système hydrogénoïde sous l'effet d'une perturbation impulsive.

Soit une perturbation qui transfère le moment \vec{k} au système à l'instant t_0 . L'hamiltonien correspondant s'écrit : $-\delta(t - t_0)\vec{k} \cdot \vec{r}$. L'opérateur d'évolution du système vérifie :

$$\frac{\partial U(t_f, t_i)}{\partial t} = -\frac{1}{i} \delta(t - t_0) \vec{k} \cdot \vec{r} U(t_f, t_i)$$

qui s'intègre pour donner :

$$U(t_f, t_i) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad \text{pour } t_i < t_0 < t_f$$

et l'amplitude de transition entre t_i et t_f s'écrit :

$$\langle \varphi_f | U(t_f, t_i) | \varphi_i \rangle = \int d^3\vec{r} \varphi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \varphi_i(\vec{r}) \quad (69)$$

qui n'est autre que le facteur de forme $I_{fi}(\vec{k})$.

Comme toute interaction peut être décomposée par transformée de Fourier en une série d'interactions impulsives, on peut se ramener à des intégrales du facteur de forme multiplié par des facteurs pondérants caractéristiques de l'interaction. C'est précisément ce que j'ai fait dans les parties précédentes i) et ii).

Récemment, Vrinceanu and Flannery (1999) ont défini et calculé des facteurs de forme hydrogénéoï des classiques. L'intérêt de ce calcul classique est en particulier de faire paraître explicitement les dépendances en fonction des variables (comme les nombres quantiques de départ et d'arrivée par exemple).

Par contre, l'accord avec un calcul quantique est seulement qualitatif pour des transitions $n, \ell \rightarrow n', \ell'$ ce qui rend un tel calcul (quantique) impératif à l'heure actuelle.

❖ Calcul dans le référentiel "tournant".

La méthode appliquée jusqu'à présent consistait à effectuer les calculs dans un référentiel (OXYZ) ayant son axe de quantification Z le long de \vec{K} , le moment transféré. Soit $I(K; n\ell\mu \rightarrow n'\ell'\mu')$ le facteur de forme dans ce référentiel. Si le passage du référentiel "fixe" (Oxyz) au référentiel (OXYZ) est une simple rotation d'angle d'Euler la partie radiale des fonctions propres hydrogénéoï des est inchangée, et les harmoniques sphériques s'écrivent (Messiah, 1962) :

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \sum_{\mu=-\ell}^{+\ell} Y_\ell^\mu(\Theta, \Phi) R_{\mu m}^\ell(0, \theta_K, \varphi_K) \quad (70)$$

où $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ est une harmonique sphérique dans (Oxyz) et $Y_\ell^\mu(\Theta, \Phi)$ est exprimée dans (OXYZ). On peut donc exprimer les facteurs de forme dans (Oxyz) en fonction de ceux calculés dans (OXYZ) :

$$I(\vec{K}, n\ell m \rightarrow n'\ell' m') = e^{i\varphi_K(m-m')} \sum_{\mu=-\ell}^{+\ell} r_{\mu m'}^{\ell'}(\theta_K) r_{\mu m}^\ell(\theta_K) I(K, n\ell\mu \rightarrow n'\ell'\mu) \quad (71)$$

où θ_K et φ_K sont la colatitude et l'azimut de \vec{K} dans (Oxyz), $r_{\mu m}^\ell(\theta_K)$ est une matrice de rotation réduite (Messiah, 1962), et on a utilisé le fait que dans (OXYZ) les seuls facteurs de forme non nuls sont ceux pour lesquels $\mu = \mu'$.

Enfin, le système de collision faisceau sur atome est à symétrie cylindrique suivant l'axe du faisceau (qui est aussi l'axe de quantification Oz choisi). Puisque les cohérences font intervenir des termes du type : $I(\vec{K}; n\ell m, n'\ell' m')$ $I^*(\vec{K}; n\ell m, n''\ell'' m'')$ qui contiennent $e^{i\varphi_K(m''-m')}$, l'intégration sur φ_K implique que seules les cohérences avec $m' = m''$ sont non nulles. C'est un résultat général qui découle des propriétés de la matrice densité de systèmes symétriques (Blum, 1981). Nous sommes donc ramenés au calcul de

$$I(K; n\ell \mu, n' \ell' \mu) = \int F_{n' \ell'}^\mu(r) Y_{\ell'}^{\mu*}(\theta, \varphi) e^{i(\vec{K} \cdot \vec{r})} F_{n\ell}^\mu(r) Y_{\ell}^\mu(\theta, \varphi) d\vec{r} \quad (72)$$

Nous avons effectué ces calculs analytiquement à l'aide du logiciel Mathematica pour les transitions suivantes : de $1s$ vers $n\ell$ avec n allant de 2 à 10, pour les transitions intracouches avec $\Delta\ell = \pm 1$ jusqu'à $n=10$, et pour les transitions intracouches avec $\Delta\ell \geq 2$ ou intercouches avec $\Delta n = 1$ jusqu'à $n=6$. A titre d'exemple, la formule (73) donne le terme intervenant dans la section efficace $4p \rightarrow 5f$ (somme sur les nombres quantiques magnétiques de $5f$ et moyenne sur ceux de $4p$) :

$$\begin{aligned} I(K; 4p, 5f) = & 2^{49} 5^{10} 3K^4 (6458881069783989 - 516959023574822400K^2 \\ & + 19113928769761920000K^4 - 366370425603072000000K^6 \\ & + 3759150921062400000000K^8 - 20720340172800000000000K^{10} \\ & + 59871019008000000000000K^{12} - 801374208000000000000000K^{14} \\ & + 399769600000000000000000K^{16}) / (400K^2 + 81)^{18}. \end{aligned} \quad (73)$$

La complexité de telles formules constitue une source d'erreurs lors de leur manipulation, et devant la volonté d'étendre nos calculs au moins jusqu'à $n=10$, j'ai participé au développement, en collaboration avec L.J. Dubé, d'un programme de calcul des facteurs de forme hydrogénéoïdes. Ce programme est basé sur une expression analytique des facteurs de forme après un développement des fonctions d'ondes hydrogénéoïdes en coordonnées paraboliques. Les étapes principales du calcul sont exposées en annexe A (Dubé, 1998).

Nous avons effectué plusieurs tests pour évaluer la précision numérique des résultats donnés par le calcul. Tout d'abord, nous avons comparé les valeurs données par ce calcul avec les valeurs que l'on avait précédemment (jusqu'à $n=6$) et constaté qu'on avait les mêmes résultats à mieux que 10^{-10} près. Nous avons également calculé la norme pour certains états, et comparé à la valeur 1. En effet,

$$I(\vec{0}, n\ell m \rightarrow n\ell m) = \|\varphi_{n\ell m}\|^2 = 1.$$

Là encore, la précision est de l'ordre de 10^{-10} jusqu'à $n=10$, 10^{-6} pour $n=14$ et 10^{-3} pour $n=20$. Cela est déjà tout à fait acceptable dans le cadre que l'on se fixe, c'est à dire pour des couches n variant entre 1 et 10.

Nous avons également inclus dans le programme un calcul des facteurs de forme passant par le référentiel tournant. Dans ce référentiel, l'expression analytique à laquelle on arrive est beaucoup plus compacte parce que l'axe de quantification est suivant \vec{K} , et les étapes du calcul numérique sont tout à fait différentes. La comparaison des résultats donnés par les deux méthodes constitue donc un test pertinent de la précision numérique. Cette confrontation confirme les valeurs données ci-dessus.

iv) Expression dans la base $(n\ell j m_j)$

Dans certains de nos modèles, les expressions sont projetées dans la base $(n\ell j m_j)$ parce qu'elle correspond plus directement aux observables étudiées plutôt que $(n\ell m)$; nous avons donc besoin des sections efficaces et des cohérences dans cette nouvelle base, c'est à dire de calculer les "nouveaux" facteurs de forme. Utilisant la règle de composition des moments cinétiques et la notation habituelle pour les coefficients de Clebsch-Gordan, on peut écrire

$$I(\vec{K}; n\ell s j m_j, n'\ell' s' j' m_{j'}) = \sum_{m_\ell, m'_\ell, m_s, m'_s} \langle \ell' s m_\ell m'_s | j' m_{j'} \rangle^* \langle \ell s m_\ell m_s | j m_j \rangle \times I(\vec{K}; n \ell s m_\ell m_s, n' \ell' s m'_\ell m'_s) \quad (74)$$

avec

$$I(\vec{K}; n \ell s m_\ell m_s, n' \ell' s m'_\ell m'_s) = I(K; n \ell m_\ell, n' \ell' m_{\ell'}) \delta_{m_s, m'_s}. \quad (75)$$

Pour un système hydrogénoïde, $s=1/2$ et la somme (74) se réduit à 1 ou 2 termes. Dans ce dernier cas, les 2 termes interfèrent et il faut donc opérer le changement de base (74) avant de procéder à l'intégration sur K pour évaluer les expressions (59) et (60).

c) Comparaison entre les deux méthodes

Nous sommes en mesure de calculer toutes les sections efficaces d'excitation (intercouche et intracouche) grâce à notre programme mais les résultats par la méthode des équations couplées à notre disposition pour l'instant concernent l'excitation à partir de 1s.

Nous ferons donc une comparaison sur ces transitions. La figure 8 montre les distributions en ℓ données par le calcul PWBA décrit précédemment et par la méthode des équations couplées, pour l'excitation de $1s$ vers $n\ell$ de Kr^{35+} ($v = 46,95$) $\rightarrow C$, n variant de 2 à 5.

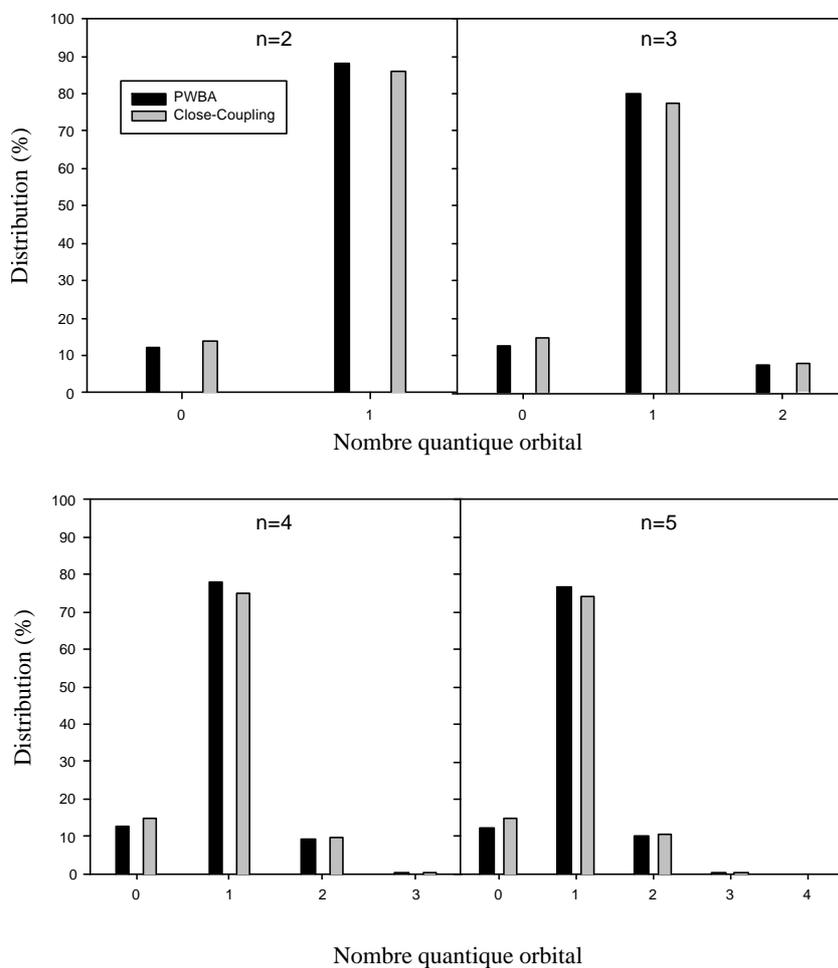


Figure 8 : Distributions en fonction du nombre quantique orbital des populations calculées par PWBA et "close-coupling" pour l'excitation à partir de $1s$ d'un ion Kr^{35+} pour un atome de carbone.

Le tableau II donne les valeurs de ces sections efficaces ainsi que des sections efficaces totales $1s \rightarrow n$.

Nous pouvons voir que le calcul PWBA privilégie les transitions dipolaires $\Delta\ell=1$ par rapport au calcul par la méthode des équations couplées au détriment en particulier des transitions $1s \rightarrow ns$. Il semblerait que ce soit une tendance générale des calculs de type Born I.

De plus, la comparaison des sections efficaces totales montre que les valeurs données par la méthode des équations couplées sont systématiquement inférieures à celles fournies par

PWBA d'environ 10%. On peut dès lors vouloir estimer la part de l'écrantage et de l'antiécrantage dans le calcul PWBA (Tableau III)

	PWBA écrantage + antiécrantage (10^{-22} cm ²)	PWBA écrantage + antiécrantage (%)	Méthode des équations couplées (10^{-22} cm ²)	Méthode des équations couplées (%)
2s	4,71	12,0	4,85	14,0
2p	34,4	88,0	29,7	86,0
2	39,1		34,6	
3s	$9,36 \cdot 10^{-1}$	12,4	1,00	14,7
3p	6,04	80,2	5,28	77,5
3d	$5,51 \cdot 10^{-1}$	7,3	$5,37 \cdot 10^{-1}$	7,9
3	7,53		6,82	
4s	$3,48 \cdot 10^{-1}$	12,6	$3,76 \cdot 10^{-1}$	14,7
4p	2,16	78,0	1,92	75,1
4d	$2,61 \cdot 10^{-1}$	9,4	$2,54 \cdot 10^{-1}$	9,9
4f	$5,28 \cdot 10^{-3}$	0,2	$6,52 \cdot 10^{-3}$	0,3
4	2,77		2,56	
5s	$1,68 \cdot 10^{-1}$	12,5	$1,82 \cdot 10^{-1}$	14,7
5p	1,03	76,9	$9,15 \cdot 10^{-1}$	74,0
5d	$1,38 \cdot 10^{-1}$	10,3	$1,34 \cdot 10^{-1}$	10,8
5f	$4,05 \cdot 10^{-3}$	0,3	$5,06 \cdot 10^{-3}$	0,4
5g	$3,19 \cdot 10^{-5}$	0,0	$6,00 \cdot 10^{-5}$	0,0
5	1,34		1,24	

Tableau II : Valeurs des sections efficaces partielles et totales et distributions pour l'excitation à partir de 1s d'un ion Kr^{35+} par un atome de carbone à $v = 46,95$. Calculs PWBA (écrantage + antiécrantage) et par la méthode des équations couplées.

	PWBA avec écranage + antiécranage (10^{-22} cm²)	PWBA sans écranage ni antiécranage (10^{-22} cm²)	Ecart relatif (%)
2s	4,71	4,11	12,7
2p	34,4	30,2	12,0
2	39,1	34,3	12,3
3s	$9,36 \cdot 10^{-1}$	$8,17 \cdot 10^{-1}$	12,7
3p	6,04	5,30	12,2
3d	$5,51 \cdot 10^{-1}$	$4,83 \cdot 10^{-1}$	12,4
3	7,53	6,60	12,4
4s	$3,48 \cdot 10^{-1}$	$3,04 \cdot 10^{-1}$	12,7
4p	2,16	1,90	12,3
4d	$2,61 \cdot 10^{-1}$	$2,29 \cdot 10^{-1}$	12,4
4f	$5,28 \cdot 10^{-3}$	$4,62 \cdot 10^{-3}$	12,5
4	2,77	2,43	12,3
5s	$1,68 \cdot 10^{-1}$	$1,47 \cdot 10^{-1}$	12,7
5p	1,03	$9,03 \cdot 10^{-1}$	12,3
5d	$1,38 \cdot 10^{-1}$	$1,21 \cdot 10^{-1}$	12,5
5f	$4,05 \cdot 10^{-3}$	$3,54 \cdot 10^{-3}$	12,5
5g	$3,19 \cdot 10^{-5}$	$2,79 \cdot 10^{-5}$	12,5
5	1,34	1,17	12,7

Tableau III : Sections efficaces d'excitation PWBA $1s \rightarrow n\ell$ de Kr^{35+} ($v = 46,95$ u.a.) @ C avec et sans antiécranage.

Sans les contributions d'écranage et d'antiécranage, les sections efficaces PWBA sont diminuées d'environ 12,5% pour toutes les sous-couches. Il est néanmoins important de noter que toutes les sections efficaces étant affectées d'autant, la distribution en ℓ n'est pas modifiée. Enfin, j'ai vérifié que la contribution de l'écranage seul est négligeable (~2%) sur ces sections efficaces, ce qui est en accord avec la discussion du Chap.I§A-II-1-a à propos du calcul par la méthode des équations couplées. Cette similitude sur l'importance de l'écranage dans les deux approches différentes laisse supposer la similitude des contributions d'antiécranage, et on peut donc penser que la prise en compte des électrons de la cible dans la théorie des équations couplées mènerait à une augmentation de toutes les sections efficaces d'environ 12,5%.

Nous pouvons également comparer les résultats donnés par ces deux calculs pour quelques valeurs de cohérences :

	PWBA écranage + antiécranage 10^{-22} cm^2		Modèle d'équations couplées 10^{-22} cm^2		
	Re	Im	Re	Im	$\varphi = \tan^{-1}\left(\frac{\text{Im}}{\text{Re}}\right)$
2sp0	0	- 6,58	- 7,66 10^{-1}	- 6,23	- 97°
3sp0	0	- 1,26	- 1,68 10^{-1}	- 1,22	- 98°
3pd0	0	- 3,15 10^{-1}	- 2,43 10^{-1}	- 2,97 10^{-1}	- 129°
3pd+1	0	- 4,81 10^{-1}	- 1,10 10^{-1}	- 4,26 10^{-1}	- 104°

Tableau IV : Cohérences d'excitation $1s \text{ @ } n\ell$ de Kr^{35+} ($v = 46,95 \text{ u.a.}$) @ C données par les méthodes PWBA et d'équations couplées.

Le calcul PWBA prévoit des cohérences purement imaginaires entre des états tels que $(\ell+\ell')$ est impair, et purement réelles entre états $(\ell+\ell')$ pairs. Dans le tableau IV, les phases de cohérences PWBA valent -90° . Si la partie imaginaire des cohérences du modèle des équations couplées est assez proche de celle du calcul PWBA (écart de l'ordre de 5% à 15%) les phases peuvent être très différentes, en particulier la phase de ρ_{3pd0} . A ce jour, aucune mesure de la phase des cohérences d'excitation n'a été faite.

Remarque : Dans ce tableau IV, les cohérences sont calculées pour un axe de quantification porté par $\overline{Z_c Z_p}$. Il faut noter cependant que la phase dépend du sens de l'axe de quantification : dans le système de coordonnées utilisées figure 5, qui peut se ramener à l'image Z_c mobile et Z_p fixe, l'axe de quantification est porté par $\overline{Z_c Z_p}$, et les cohérences sont données par (60). Si au contraire on choisit un axe de quantification porté par $\overline{Z_p Z_c}$, cela revient à changer \vec{K} en $-\vec{K}$ dans le calcul des facteurs de forme impliqués, compte tenu de la symétrie cylindrique, et il faut multiplier les cohérences de l'expression (60) par $(-1)^{\ell_f + \ell_{f'}}$, où ℓ_f et $\ell_{f'}$ sont les nombres quantiques orbitaux des états f et f' .

2°) Processus d'ionisation

L'ionisation d'un ion hydrogénoïde lors d'une collision avec une particule sans structure interne peut être considérée comme une excitation vers un état du continuum de l'ion. La fonction d'onde finale peut être écrite sous la forme du produit d'une onde plane (pour le partenaire exciteur) et d'une fonction d'onde coulombienne $\psi_{k_e}^{(-)}$ qui décrit le mouvement de l'électron éjecté dans le potentiel coulombien du noyau auquel il était lié.

La section efficace d'ionisation est obtenue en intégrant la section efficace pour une seule ionisation, sur toutes les directions et grandeurs possibles de \vec{k}_e , le moment de l'électron éjecté. En tenant compte de la densité d'états du continuum, la section efficace totale d'ionisation s'écrit (McDowell and Coleman, 1970), avec les mêmes notations que dans les paragraphes précédents :

$$\rho_i = \frac{\mu^2}{(2\pi)^4 K_i^2} \int_0^{k_{e \max}} k_e^2 dk_e \int d\Omega \int_{K_-}^{K_+} |V_{if}|^2 K dK \quad (76)$$

où $k_{e \max}$ est donné par $k_{e \max}^2 = \frac{K_i^2}{\mu} - 2I$, I étant l'énergie de liaison de l'électron, et

$$K_- = \frac{k_e^2 + I}{v}$$

Dans le cas de l'ionisation de l'atome d'hydrogène, $\psi_{k_e}^-$ s'écrit :

$$\psi_{k_e}^-(\mathbf{r}) = e^{\frac{\pi}{2k_e}} \Gamma\left(1 + \frac{i}{k_e}\right) e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} {}_1F_1\left[-\frac{i}{k_e}, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \cdot \vec{r})\right] \quad (77)$$

où ${}_1F_1$ représente la série hypergéométrique confluyente. La section efficace d'ionisation à partir de $1s$ par une particule de charge Z_c :

$$\rho_{1s} = \frac{2^{11} \pi Z_c^2}{v^2} \int_0^{k_{e \max}} \frac{k_e}{1 - \exp(-2\pi/k_e)} \times \int_{K_-}^{K_+} \frac{K^2 + \frac{1}{3}(1 + k_e^2)}{K[(K^2 - k_e^2 + 1)^2 + 4k_e^2]^3} \exp\left[-\frac{2}{k_e} \arctan\left(\frac{2k_e}{K^2 - k_e^2 + 1}\right)\right] dk_e dK. \quad (78)$$

Nous disposons d'un programme capable de calculer ces sections efficaces, ainsi que celles pour un électron appartenant à une couche $n > 1$, ρ_n , grâce à une loi d'échelle :

$$\rho_n(Z_p) \approx \rho_{1s} \left(\frac{Z_p}{n} \right). \quad (79)$$

Nous avons également calculé les sections efficaces d'ionisation à partir des sous-couches n, ℓ (c'est à dire conservant une dépendance en ℓ), pour n variant de 1 à 3, grâce à des expressions analytiques exactes des facteurs de forme intervenant dans (76). Les résultats sont alors en accord, à 10% près, avec ceux donnés par l'expression (79). Compte-tenu du fait qu'il s'agit de sections efficaces absolues, cette erreur relative est acceptable, mais dans un souci de cohérence, l'uniformisation du calcul d'ionisation pourrait être l'objet d'un développement futur.

Notons que nos sections efficaces sont calculées en tenant compte de l'effet d'écrantage et d'antiécrantage dans l'approximation Thomas-Fermi, en incluant les facteurs correctifs du tableau I.

La figure 9 présente l'évolution de la section efficace d'ionisation avec le nombre quantique n (jusqu'à $n=10$) pour le système Kr^{35+} en collision avec du carbone ($Z_c = 6$) à $v = 46,95$, ainsi que la contribution des deux effets cités précédemment. On remarque que l'effet d'antiécrantage ne contribue pratiquement pas au processus, mais que l'effet d'écrantage joue un rôle important.

Dans nos modèles l'effet de l'ionisation est seulement de diminuer les populations et les cohérences des états hydrogénoïdes liés. Nous ne suivons pas le devenir des états du continuum. Cette simplification entraîne, entre autre, que l'on n'a pas besoin de calculer des cohérences d'ionisation.

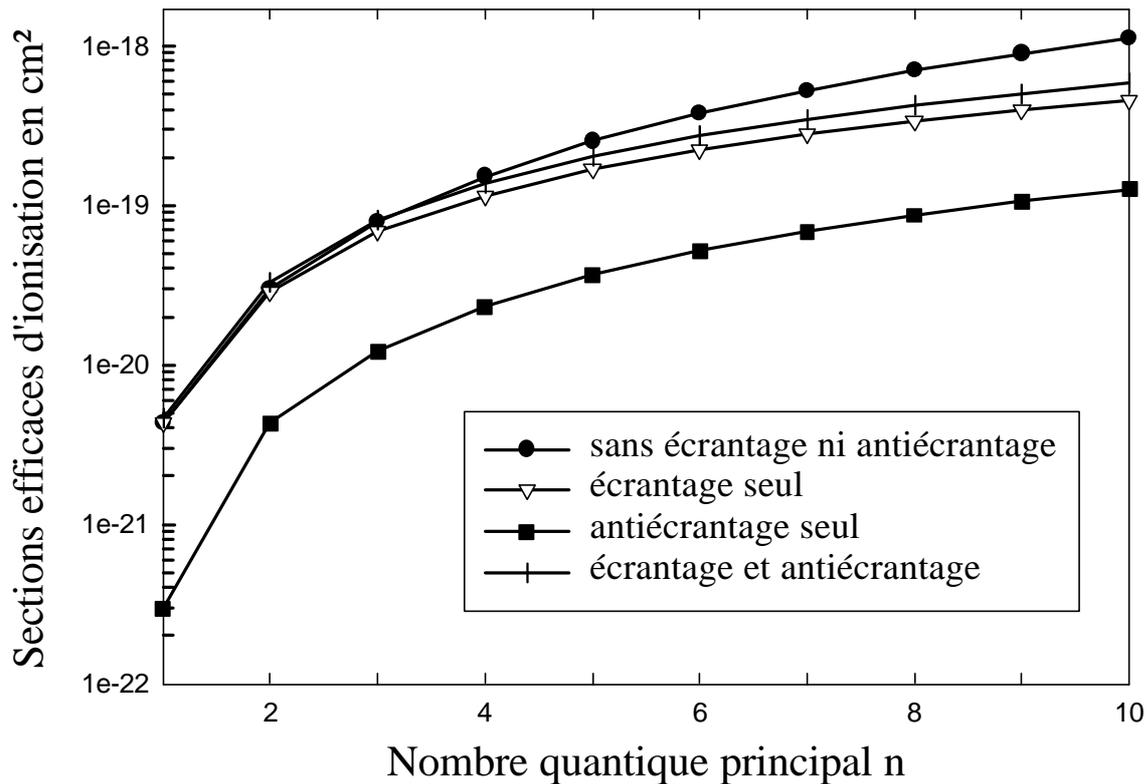


Figure 9 : Sections efficaces d'ionisation des couches jusqu'à $n=10$ de l'ion Kr^{35+} ($v=46,95$ u.a.) par du carbone.

3)° Processus de capture

Dans ce paragraphe, l'électron est initialement centré sur Z_c .

On distingue essentiellement 2 processus d'échange de charge lors d'une collision ion/atome :

- Un électron transite de l'atome cible vers le projectile en émettant simultanément un photon permettant d'assurer la conservation énergie-impulsion au cours de la collision. Ce processus est appelé capture électronique radiative (REC).
- Un électron transite de l'atome cible vers le projectile sans émission de lumière. Ce processus est appelé capture électronique mécanique (MEC).

La prédominance d'un processus par rapport à l'autre dépend de la vitesse du projectile et de la charge de l'atome cible. Aux vitesses asymptotiquement grandes, pour lesquelles en particulier la section efficace de capture d'un électron donné de la cible varie en Z_c^5 tandis que celle de la REC est indépendante de Z_c , la capture radiative devient le mécanisme dominant quand (Briggs and Dettmann, 1974; Nicolai , 1990) :

$$v > 19.15 Z_c^{5/7} \quad (80)$$

Notons qu'aux vitesses asymptotiquement grandes, la dépendance en Z_p des deux processus est la même ($\sim Z_p^5$) et que cette condition (80) est en première approximation indépendante de Z_p .

Nous nous placerons à des vitesses très inférieures à cette limite, et négligerons dans la suite la contribution du processus REC par rapport à la MEC.

Un mécanisme en une étape, du type Born I, qui reflète le recouvrement entre distributions de moments de l'état initial et de l'état final décalées de v conduit à une probabilité de transition faible, alors que les mécanismes en plusieurs étapes, en particulier celui passant par des états intermédiaires d'ionisation d'énergie voisine de v^2 , peuvent devenir plus probables (cf. figure 10).

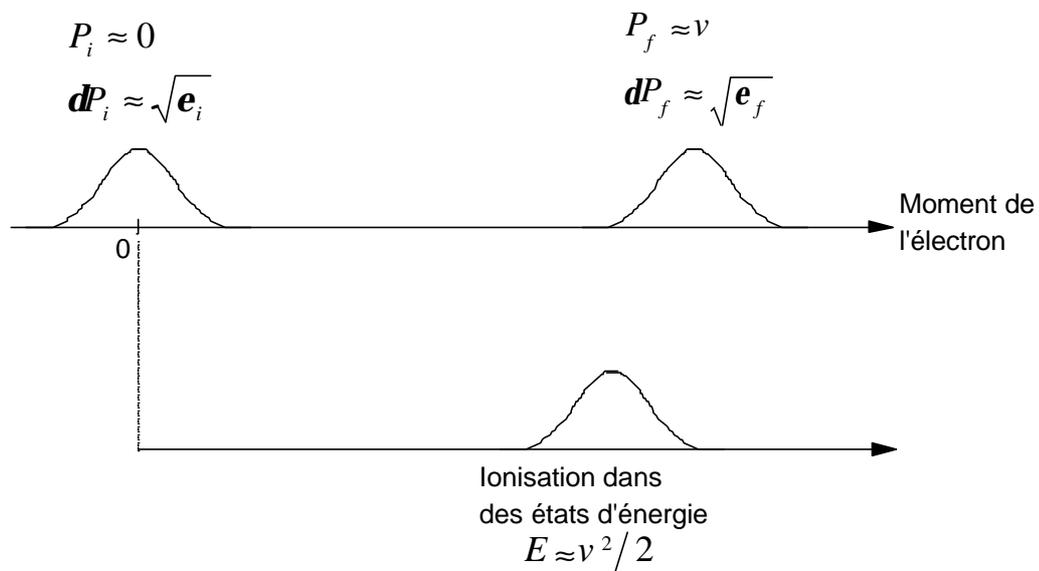


Figure 10 : Représentation des états initial et final dans l'espace des moments.

Plusieurs théories à multiples diffusions ont été développées et ont été trouvées en bon accord avec les résultats expérimentaux (Chetioui, Wohrer, Rozet *et al.*, 1983). Nous avons utilisé les résultats de la théorie Continuum Distorted Wave CDW (Cheshire, 1964; Belkic, Gayet and Salin, 1979; Crothers and Dubé, 1992) qui semble être une des meilleures. L'accord avec les valeurs expérimentales pour les sections efficaces **absolues** de capture totale, vers une couche n donnée, ou une sous-couche np donnée est de 20% environ (Chetioui, Wohrer, Rozet *et al.*, 1983; Jolly, Wohrer, Chetioui *et al.*, 1984; Piquemal, 1984;

Wohrer, 1984; Bouisset, 1986). Les sections efficaces relatives $\frac{\sigma_{3p}}{\sigma_{3d}}$ et $\frac{\sigma_{4p}}{\sigma_{4d}}$ sont également trouvées en bon accord (Wohrer, 1984). Enfin la variation des sections efficaces de capture dans les sous-couches np en fonction de n ($n \leq 10$) est bien prédite par la théorie CDW (Rozet, Chevallier, Legagneux-Piquemal *et al.*, 1985). De façon générale, il semble néanmoins que CDW décrit bien la capture vers les états ns et sous-estime légèrement celle vers les états np. N'ayant pas pris part à ces calculs, je me contenterai d'exposer très brièvement son principe.

Partant de l'expression (28) de l'amplitude de transition, on suppose qu'on sait résoudre exactement le problème de diffusion avec un potentiel proche de V_p , U_p , et on appelle $\chi^+(t)$ la solution correspondante. On montre alors (McDowell and Coleman, 1970) que a_{if}^- s'écrit de la manière exacte :

$$a_{if}^- = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi^-(t) | W_p(t) | \chi^+(t) \rangle dt - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \phi_f(t) | V_c(t) - W_p(t) | \chi^+(t) \rangle dt \quad (81)$$

avec $W_p(t) = V_p(t) - U_p(t)$.

En pratique, le choix de $|\chi^+(t)\rangle$ détermine U_p donc W_p . Un choix judicieux peut rendre le 2^{ème} terme de (81) négligeable devant le 1^{er}. L'approximation CDW vérifie cette condition en prenant l'onde distordue χ^+ sous la forme du produit de la fonction d'onde initiale $\phi_i(\vec{r}_c, t)$ par la fonction d'onde :

$$L^+(\vec{r}_p, t) = \exp\left(\frac{\pi}{2v}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{v}\right) F_1\left[\frac{iZ}{v}; 1; i(\vec{v} \cdot \vec{r}_p - v \cdot r_p)\right] \quad (82)$$

qui constitue une partie de la fonction d'onde de Coulomb de l'électron dans le champ du projectile.

De plus, la fonction d'onde ψ^- est approximée par l'onde distordue χ^- symétrique de χ^+ , soit $\chi^-(\vec{r}_p, t) = \phi_f(\vec{r}_p, t) L^-(\vec{r}_c, t)$. L'amplitude de probabilité se met alors sous la forme symétrique suivante :

$$a_{if}^{CDW} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \chi^-(t) | W_p(t) | \chi^+(t) \rangle dt \quad (83)$$

où l'action de $W_p(t)$ sur $\chi^+(t)$ est définie par (Cheshire, 1964; Crothers and Dubé, 1992) :

$$W_p(t) |\chi^+(t)\rangle = \frac{\vec{r}_c}{r_c} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}_p} L^+(\vec{r}_p, t) |\phi_i(t)\rangle. \quad (84)$$

Cette théorie mène à une expression symétrique des amplitudes de transition et elle est donc adaptée aux collisions tant symétriques qu'asymétriques (pas de restriction sur le rapport $\frac{Z_c}{Z_p}$). Son domaine de validité, établi sur une confrontation avec les résultats expérimentaux,

est donné par une condition sur l'énergie de collision :

$$E \text{ (keV / A)} \geq 80 \sup\{|\epsilon_i|, |\epsilon_f|\} \quad (85)$$

où ϵ_i et ϵ_f sont les énergies de l'électron actif sur son orbite initiale et finale.

III – Champ de sillage ; "Effet solide"

Au sein d'un solide, les atomes voient leur structure électronique modifiée du fait de la proximité de leurs voisins. Le principe d'exclusion de Pauli oblige les électrons externes à occuper des bandes d'énergies dites de valence et éventuellement de conduction. Ces électrons sont faiblement liés et on peut les traiter en première approximation comme un gaz d'électrons libres. Nous verrons aussi comment, le cas échéant, on peut étendre cette description aux électrons internes de la cible qui sont éventuellement impliqués quand on approche un ion lourd.

1°) Description des électrons de la cible solide en termes de gaz d'électrons libres

a) Réponse d'un gaz d'électrons libres ; Ecrantage dynamique.

Lorsqu'une charge ponctuelle immobile est placée dans un gaz d'électrons libres, la distribution des électrons est modifiée et prend une symétrie sphérique autour de la charge introduite Z_p . Le potentiel de celle-ci est écranté, et dans l'approximation la plus simple, c'est à dire de Thomas-Fermi linéaire, il prend une forme type Yukawa $-\frac{Z_p}{r} e^{-\lambda r}$ (Kittel, 1983) où λ est le paramètre d'écrantage. Lorsque la charge Z_p est mise en mouvement, le potentiel écranté perd sa symétrie sphérique, et une force de freinage responsable du pouvoir d'arrêt apparaît.

Suivant le travail pionnier de Neufeld et Ritchie (Neufeld and Ritchie, 1955) de nombreuses études ont été entreprises pour calculer cette réponse dynamique (voir par exemple (Echenique, Flores and Ritchie, 1990) pour une revue complète).

Dans le cadre de la limite haute vitesse ($v > Z_p$ la charge du projectile traversant le gaz d'électrons libres), on peut traiter le problème au premier ordre de perturbation (Echenique, Garcia de Abajo, Ponce *et al.*, 1995). Le potentiel induit prend la forme d'une onde de polarisation, de longueur d'onde $\lambda \approx \frac{2\pi v}{\omega_p}$ avec ω_p la fréquence plasma du milieu ($\omega_p = \sqrt{4\pi n}$, et n la densité électronique). L'onde de polarisation est contenue dans un cône de type Tcherenkov, d'ouverture $\theta \approx \frac{v_F}{v}$ où v_F est la vitesse de Fermi du milieu. Le potentiel induit au niveau de l'ion vaut :

$$\Phi^{\text{ind}}(0) = -\frac{\pi Z_p \omega_p}{2v} \quad (86)$$

et le champ électrique induit au niveau de l'ion :

$$F^{\text{ind}}(0) = -\frac{Z_p \omega_p^2}{v^2} \ln \left(\frac{2v^2}{\omega_p} \right). \quad (87)$$

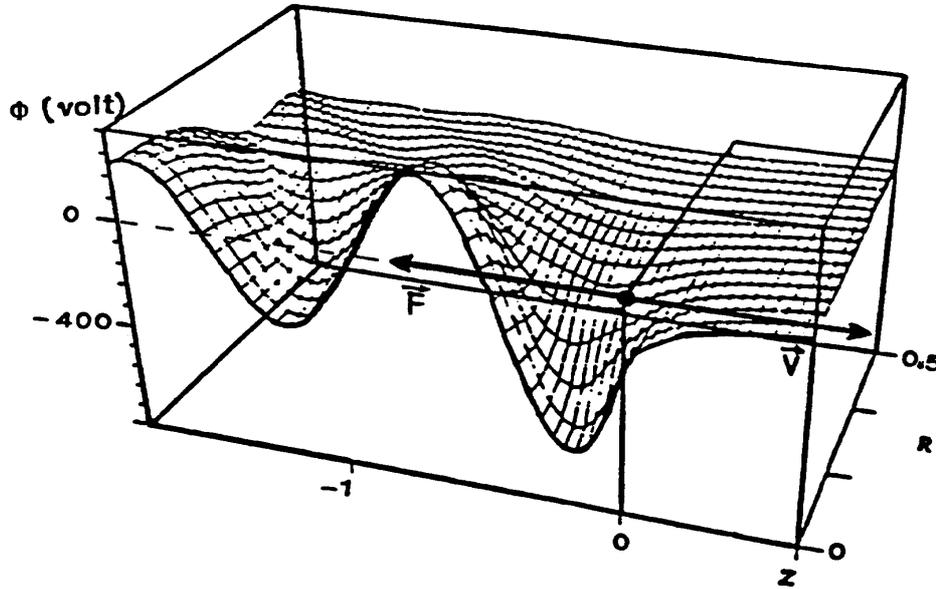


Figure 11 : Distribution spatiale du potentiel de sillage pour le krypton à 33 MeV/A ($v = 35$ u.a.) dans le carbone. Les distances Z et R sont en unité de $\lambda = \frac{2\pi v}{\omega_p}$

Le pouvoir d'arrêt peut être considéré comme résultant de l'action de F^{ind} sur la charge du projectile (Echenique, Flores and Ritchie, 1990) :

$$\frac{dE}{dx} = -Z_p F_{\text{ind}}(0). \quad (88)$$

Notons que le pouvoir d'arrêt varie donc en Z_p^2 dans le cadre de la réponse linéaire, et qu'il faut utiliser une approximation d'ordre plus élevé pour introduire une correction en Z_p^3 .

b) Prise en compte des électrons de cœur

L'approximation consistant à "geler" les électrons de cœur des atomes du solide et à ignorer leur implication est en général mise en défaut lorsque le projectile est un ion lourd. Dans ce cas, le projectile peut céder suffisamment d'énergie et d'impulsion pour les exciter. Une étude expérimentale (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998) a montré que c'est le cas pour l'établissement du champ de sillage induit dans une cible de cuivre par un ion Kr^{35+} la traversant à $v = 35,6$. La fréquence plasma effective, calculée dans le cadre de la réponse linéaire, correspondant à un tel champ de sillage est d'environ 48 eV pour ce système. Par comparaison, la fréquence plasma effective vaut $\omega_p = 10,8$ eV si 1 électron libre par atome participe à l'écrantage dynamique. Celle déduite à partir du ralentissement des électrons vaut 19,9 eV et correspond à 3,15 électrons libres par atome, alors que le pouvoir d'arrêt mesuré par Gauvin *et al.* (Gauvin, Bimbot, Herault *et al.*, 1987) pour des ions oxygène à $v \approx 33$ correspond à une fréquence plasma effective de 50 eV et à 22 électrons libres (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998).

La prise en compte de ces électrons de cœur constitue un problème à n corps que l'on peut par exemple simplifier en considérant que leur réponse est identique à celle d'un gaz d'électrons ayant la même distribution de moment (voir par exemple (Moneta, Gwizdalla, Czerniak *et al.*, 1992)). On peut aussi s'appuyer sur le fait que le temps d'interaction avec le projectile étant court devant le temps de réponse des électrons concernés, ces derniers n'ont pas le temps durant la collision de ressentir la "force de rappel" du noyau auquel ils sont liés. On suppose alors qu'en chaque point de l'espace, les électrons liés réagissent comme un gaz d'électrons libres de densité égale à la densité locale de l'état auquel ils appartiennent. C'est dans le cadre de cette dernière approximation (Local Plasma Approximation ; LPA) que se placent les seuls résultats disponibles, à ma connaissance, pour un projectile que nous avons étudié expérimentalement : Kr^{35+} à $v = 36$ (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998; Ponce, 1998). Les auteurs de ce calcul ont exprimé le potentiel induit dans le solide par :

$$\bar{\Phi}_{\text{ind}}(\vec{r}) = \frac{3}{R_{\text{ws}}^3} \int_0^{R_{\text{ws}}} R^2 \Phi_{\text{ind}}(\vec{r}, n(R)) dR \quad (89)$$

où \vec{r} est repéré par rapport à l'ion et R_{ws} est le rayon de la sphère de Wigner-Seitz du milieu. $n(R)$ est la densité électronique de la cible, et $\Phi_{ind}(\vec{r}, n(R))$ est le potentiel induit dans un gaz d'électrons libres de densité $n(R)$, donné par :

$$\Phi_{ind}[\vec{r}, n(R)] = Z_p \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{8\pi^2}{q^2} \delta(\omega - \vec{q} \cdot \vec{v}) \left\{ \frac{1}{\epsilon[q, \omega, n(R)]} - 1 \right\} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\omega t) \quad (90)$$

avec $\epsilon[q, \omega, n(R)]$, la fonction diélectrique du gaz d'électrons (voir par exemple (Burgdörfer, 1993)) dans l'approximation de phase aléatoire (RPA).

On peut alors extraire un nombre effectif d'électrons par atome pour que les expressions (86) et (87) produisent les mêmes résultats que (89) avec $\vec{r} = \vec{0}$, et (91) :

$$\bar{F}_{ind}(0) = -\nabla_r \bar{\Phi}_{ind}(\vec{r}) \Big|_0. \quad (91)$$

Les principaux résultats sont :

- ❖ le nombre effectif d'électrons par atome varie suivant l'effet observé : il est plus grand (les couches internes sont plus actives) pour le champ induit que pour le potentiel induit.
- ❖ les effets induits par un ion lourd rapide correspondent à une fréquence plasma supérieure à celle mesurée par diffusion d'électrons ou de photons.
- ❖ l'accord avec les données expérimentales de pouvoir d'arrêt relié à $F_{ind}(0)$ par la relation (88) est excellent tant que $v > Z_c$. Lorsque la cible est composée d'éléments trop lourds, la vitesse des électrons de cœur n'est plus petite par rapport à la vitesse de collision, et on ne peut plus les considérer comme un gaz inhomogène d'électrons libres.

Les mesures de pouvoir d'arrêt permettent de connaître l'action du champ induit au niveau du noyau du projectile. Pour étudier l'extension spatiale du potentiel de sillage, on peut observer son effet sur les états des électrons liés à un projectile non nu. C'est ce qui a été fait dans l'équipe (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998) pour un projectile hydrogénéoï de Kr^{35+} à $v = 35,6$ en collision avec des cibles de carbone et de cuivre. Dans le paragraphe suivant, je vais présenter le traitement théorique de l'action du potentiel de sillage sur les états électroniques du projectile.

2°) Action du potentiel de sillage sur les états du projectile

a) Approximation dipolaire ; Règles de sélection

Le potentiel induit par le passage de l'ion agit en retour sur les états électroniques de celui-ci, par l'intermédiaire de l'hamiltonien d'interaction - Φ_{ind} .

Dans la base $\{|\varphi_\gamma\rangle\}$ des états propres du projectile hydrogénoïde, l'hamiltonien est décrit par les termes :

$$\omega_s(\gamma, \gamma') = \langle \varphi_\gamma | -\Phi_{\text{ind}}(\vec{r}) | \varphi_{\gamma'} \rangle \quad (92)$$

qui ont été calculés à des degrés divers d'approximation (Echenique, Flores and Ritchie, 1990; Minchole, Ugalde and Echenique, 1990; Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998).

En première approximation, on peut considérer que le déplacement d'énergie des niveaux est donné par :

$$\langle \varphi_\gamma | -\Phi_{\text{ind},0} | \varphi_\gamma \rangle = \text{cste} \quad (93)$$

et que les éléments de couplages entre états différents peuvent être écrits dans l'approximation dipolaire. Celle-ci considère que l'ion se déplace dans un champ de sillage uniforme. On a alors :

$$\omega_s(\gamma, \gamma') = \langle \varphi_\gamma | \vec{F}_{\text{ind},0} \cdot \vec{r} | \varphi_{\gamma'} \rangle \quad (94)$$

qui correspond à l'hamiltonien d'interaction du moment dipolaire de l'atome avec le champ $\vec{F}_{\text{ind},0}$. Dans (93), $\Phi_{\text{ind},0} \equiv \Phi_{\text{ind}}(\vec{0})$ est le potentiel induit au niveau du noyau projectile et dans (94), $\vec{F}_{\text{ind},0}$ est le champ induit à ce point.

Si $\vec{F}_{\text{ind},0}$ est suivant l'axe Z de quantification,

$$\omega_s(\gamma, \gamma') = \langle \varphi_\gamma | F_{\text{ind},0}^Z \cdot Z | \varphi_{\gamma'} \rangle . \quad (95)$$

On choisit de se placer dans la base d'états hydrogénoïdes des $\{|n, \ell, m\rangle\}$. L'opérateur Z étant proportionnel à l'harmonique $Y_1^0(\theta, \varphi)$, seuls les éléments de matrice :

$$\int Y_{\ell'}^{*m'}(\theta, \varphi) Y_1^0(\theta, \varphi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) d\Omega \quad (96)$$

tels que $m = m'$, $\ell = \ell' \pm 1$ sont non nuls.

On suppose aussi que le champ induit n'est pas assez grand pour coupler des états de nombre quantique principal n différent. La supposition faite est justifiée pour des états suffisamment profonds de projectiles lourds. En effet, pour les systèmes que nous étudions, le

champ induit est de l'ordre de $1 (= 5, 142 \cdot 10^9 \text{ V.cm}^{-1})$ alors que le champ coulombien moyen du noyau projectile sur une couche donnée est proportionnel à Z_p^3 (avec $Z_p = 18$ ou $Z_p = 36$).

On peut dès lors calculer les éléments de couplage dipolaire ($\Delta\ell=\pm 1$) en utilisant les expressions des fonctions d'ondes hydrogénoïdes, et il vient :

$$\langle n, \ell - 1, m | \vec{F} \cdot \vec{r} | n, \ell, m \rangle = -\frac{3}{2} \frac{F}{Z_p} n \sqrt{n^2 - \ell^2} \sqrt{\frac{\ell^2 - m^2}{(2\ell + 1)(2\ell - 1)}} \quad (97)$$

où F est la valeur algébrique du champ \vec{F} ($F < 0$ si \vec{F} pointé vers les Z décroissants).

b) Extension spatiale des orbitales hydrogénoïdes

Fuhr *et al.* (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998) ont montré que dans le cas d'un projectile Kr^{35+} à $v = 36$ dans un gaz d'électrons défini par $r_s = 2$ (r_s représente la distance moyenne entre 2 électrons), les éléments diagonaux simplifiés (93) sont très proches de ceux donnés par un calcul complet (92). Par contre, les éléments non diagonaux peuvent différer notablement de ceux donnés par l'approximation dipolaire (94). En effet, le champ électrique induit n'est pas uniforme à l'échelle des orbitales électroniques.

Afin de prendre en compte cette non-uniformité du champ, tout en conservant la simplicité formelle de l'effet Stark linéaire, nous introduisons un champ effectif $\tilde{F}_{\gamma, \gamma'}$ défini par :

$$\langle n, \ell - 1, m | \tilde{F}_{(n, \ell - 1, m), (n, \ell, m)} \cdot Z | n, \ell, m \rangle \equiv \langle n, \ell - 1, m | \Phi_{\text{ind}}(\vec{r}) | n, \ell, m \rangle. \quad (98)$$

Etant donné la cause physique de ce champ effectif, on peut s'attendre à ce qu'il dépende d'un paramètre sans dimension construit à partir du rapport de la valeur moyenne du rayon de l'orbitale, $r_n = \frac{n^2}{Z_p}$, sur une longueur caractéristique de la variation du champ de sillage.

L'enveloppe du champ étant de forme conique avec une ouverture $\theta \approx \frac{v_F}{v}$ (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998), on prend pour longueur caractéristique $\lambda\theta$, λ étant la longueur d'onde du champ de sillage $\lambda = \frac{2\pi v}{\omega_p}$. Le paramètre recherché est donc (Rozet, Vernhet,

Bailly-Despiney *et al.*, 1999) :

$$\frac{r_n}{\lambda\theta} \propto \frac{n^2\omega_p}{v_F Z_p} \propto \frac{n^2\omega_p^3}{Z_p} \quad (99)$$

Dans le régime des hautes vitesses, nous pouvons déduire le champ F_0 appliqué au noyau du projectile par une formule analogue à (88), à partir du pouvoir d'arrêt mesuré ou tabulé (Ziegler, Biersach and Littmark, 1985; Hubert, Bimbot and Gauvin, 1990) par :

$$\frac{dE}{dx} = \bar{Q}F_0 \quad (100)$$

avec \bar{Q} l'état de charge à l'équilibre d'un projectile Z_p à la vitesse v dans le matériau considéré. Nous utilisons l'état de charge calculé par le code ETACHA (Rozet, Stéphan and Vernhet, 1996).

Toujours dans le cadre de la limite haute vitesse, la fréquence plasma correspondant à F_0 , ω_p^0 , vérifie la relation (87) :

$$F_0 = -\frac{Z_p\omega_p^{02}}{v^2} \ln\left(\frac{2v^2}{\omega_p^0}\right)$$

et on cherche donc une fonction g telle que :

$$\tilde{F} = F_0 g\left(\frac{n^2\omega_p^{0/3}}{Z_p}\right) \quad (101)$$

Nous avons réussi à reproduire les résultats provenant d'un calcul complet effectué dans le cadre de la LPA (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998; Ponce, 1998) pour les éléments de couplage dipolaire en utilisant :

$$\tilde{F} = F_0 \exp\left(-\alpha_{\ell_>|m|} n \sqrt{\frac{\omega_p^{01/3}}{Z_p}}\right) \quad \ell_> = \max(\ell, \ell') \quad (102)$$

avec $\alpha_{10} = 0,73$ $\alpha_{20} = 0,58$ $\alpha_{21} = 0,98$.

Dans notre programme, nous avons pris $\alpha_{\ell_>|m|} = 0,73$ pour les autres valeurs de $\ell_>$ et $|m|$.

Cela correspond en effet à la valeur moyenne de α_{10} , α_{20} et α_{21} , que nous avons déterminée par notre ajustement. Nous verrons plus loin (Chap.I§A-V-3-e) que les observables que nous calculons ne dépendent que très peu des autres valeurs $\alpha_{\ell_>|m|}$, $\ell_> \geq 3$ et il nous a semblé inutile de déterminer plus précisément ces coefficients.

La figure 12 illustre l'ajustement effectué (ligne continue) sur un exemple des données de (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998) et de (Ponce, 1998) (points), pour un système modèle $Z_p = 36$, $v = 35$ et $F_0 = 0,091$ ($\omega_p = 0,61$), ainsi que le champ effectif calculé par (102) dans un cas d'intérêt expérimental pour un ion Kr^{35+} à $v = 35,6$ et une cible de carbone amorphe ($F_0 = 0,25$; $\omega_p^0 = 1,07$) (en traits interrompus, pour 3 couples de valeurs ($\ell_{>|m|}$)). Les valeurs retenues pour le paramètre $\alpha_{\ell_{>|m|}}$ sont celles permettant de reproduire au mieux et simultanément l'ensemble des données disponibles.

L'effet de réduction du champ (figure 12) est loin d'être négligeable. Par exemple la valeur moyenne du champ électrique en $n = 3$ est à peu près 30% inférieure à la valeur au niveau du noyau projectile.

Nous avons également essayé cette procédure d'ajustement en fonction du paramètre sans dimension $\frac{r_n}{\lambda}$ plutôt que $\frac{r_n}{\lambda\theta}$, mais nous n'avons pas réussi à ajuster l'ensemble des données. La signification physique que nous pouvons en retirer est que la modification du champ effectif est due principalement à la forme latérale du sillage et non à sa variation longitudinale comme on pourrait le penser de prime abord.

On peut enfin s'interroger sur la validité de l'approximation dipolaire : en effet, même si on introduit un champ effectif pour tenir compte de la dépendance spatiale du champ sur les éléments de matrice dipolaires, l'expression exacte des éléments de matrice, donnée par leur développement de Taylor, s'écrit :

$$\langle \varphi_\gamma | -\Phi_{\text{ind}}(\vec{r}) | \varphi_{\gamma'} \rangle = -\langle \varphi_\gamma | \Phi_{\text{ind},0} - \vec{F}_0 \cdot \vec{r} + \frac{1}{2} (\vec{\nabla}_r \Phi_{\text{ind},0} \cdot \vec{r})^2 + \dots | \varphi_{\gamma'} \rangle. \quad (103)$$

Les termes d'ordre ≥ 2 expriment la variation spatiale du champ (et les ordres impairs du développement ont effectivement une influence sur les éléments de couplage dipolaires), mais ils autorisent aussi des transitions de $\Delta\ell \geq 2$, artificiellement interdites par l'utilisation de l'approximation dipolaire. Cependant, les calculs fournis par Ponce (1998) montrent que les éléments de matrice relatifs aux transition de $\Delta\ell = 2$ sont déjà 1 à 2 ordres de grandeur inférieurs à ceux des transitions dipolaires. Il nous a donc semblé légitime dans une première approche de les négliger.

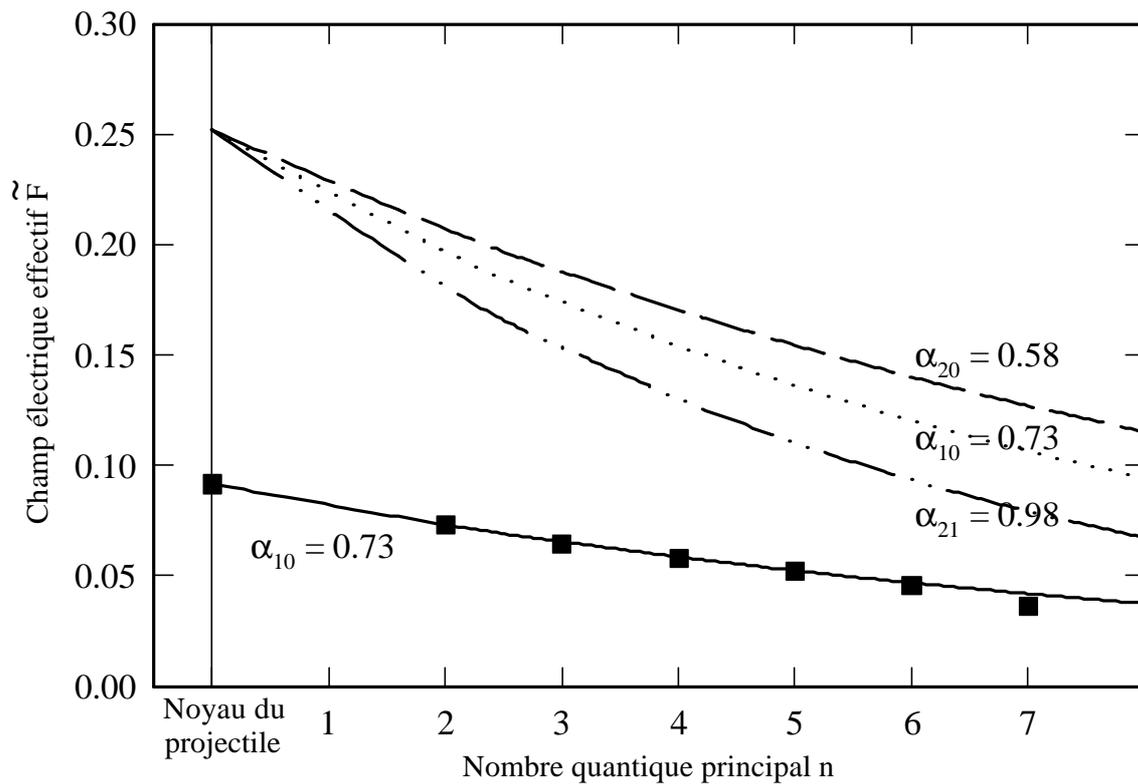


Figure 12 : Variation du champ effectif avec n (voir texte).

IV – Etude quantique du transport ; Evolution de la matrice densité dans le solide

Trois types d'interaction apparaissent lorsqu'on s'intéresse à l'évolution des populations des états internes d'un ion lourd et rapide dans un solide : les collisions binaires entre l'ion et les atomes d'un solide (Chap.I§A-II), les interactions collectives avec les électrons du solide (Chap.1§A-III) et la désexcitation radiative des états excités de l'ion (interaction avec le champ électromagnétique du vide). Le but de cette partie est d'établir l'équation d'évolution générale de l'ion lourd rapide hydrogénoïde sous l'effet de ces trois interactions. Nous suivrons pour cela la démarche qui permet d'établir l'équation pilote d'un système à 2 niveaux couplé avec le rayonnement quantique (Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc and Grynberg, 1988). L'ion hydrogénoïde (ou "petit système", par opposition au réservoir) est décrit par sa matrice densité réduite. L'appellation "réservoir" désigne un système ayant un très grand nombre de degrés de liberté. Il n'y a donc pas de modification macroscopique de son état sous l'effet du couplage avec le petit système.

Le raisonnement repose sur l'existence de 2 échelles de temps très différentes : la première est définie par le temps très court τ_c caractéristique des fluctuations de la perturbation exercée par le réservoir R sur le petit système A . Le deuxième est un temps beaucoup plus long T_R caractérisant la vitesse de variation de A . De plus, l'effet du couplage entre A et R est supposé faible pendant le temps τ_c (condition de "rétrécissement par le mouvement").

L'équation pilote exprime la vitesse de variation "à gros grains" de l'opérateur densité de A , c'est à dire la moyenne sur un temps Δt tel que $\tau_c \ll \Delta t \ll T_R$ de l'équation de Liouville (33).

1°) Couplage perturbatif avec un réservoir

Soit un système global $A + R$ d'hamiltonien

$$H = H_A + H_R + V. \quad (104)$$

H_A est l'hamiltonien du petit système A , H_R celui du réservoir R et V l'interaction entre A et R .

On appelle ρ l'opérateur densité du système global, σ l'opérateur densité réduit de A et σ_R l'opérateur densité réduit de R , obtenus par trace partielle à partir de ρ :

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= \text{Tr}_R \rho(t) \\ \sigma_R(t) &= \text{Tr}_A \rho(t). \end{aligned} \quad (105)$$

La variation de l'état du réservoir due au couplage avec A est négligeable, ce qui s'écrit $\tilde{\sigma}_R(t) = \tilde{\sigma}_R(0)$ en représentation d'interaction par rapport à $H_A + H_R$. Nous supposons de plus que σ_R est un mélange statistique des états propres de H_R avec des poids p_μ :

$$\sigma_R = \sum_{\mu} p_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu|. \quad (106)$$

Enfin, on suppose que V peut se mettre sous la forme d'une somme de produits d'observables de A et de R : cette hypothèse est nécessaire afin de séparer les contributions de R et de A au potentiel d'interaction lorsque l'on calcule la trace partielle (sur R) de la matrice densité totale. Pour plus de détails, voir (Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc and Grynberg, 1988)

$$V = -\sum_i A_i R_i. \quad (107)$$

Moyennant ces hypothèses et les conditions d'existence des 2 échelles de temps et de "rétrécissement par le mouvement", on peut montrer (Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc and Grynberg, 1988) à partir de l'équation de Liouville (33) prise pour l'hamiltonien (104) que la vitesse de variation à gros grains des éléments de σ exprimée dans une base d'états propres de H_A est donnée par :

$$\frac{d}{dt}\sigma_{ab}(t) \approx -i\omega_{ab}\sigma_{ab}(t) + \sum_{c,d}^{(sec)} R_{abcd}\sigma_{cd}(t) \quad (108)$$

où $\omega_{ab} = E_a - E_b$ avec E_a et E_b les énergies des états propres $|a\rangle$ et $|b\rangle$. $\sum_{c,d}^{(sec)}$ signifie que la

somme est restreinte aux termes "séculaires", c'est à dire aux états c, d tels que

$|\omega_{ab} - \omega_{cd}| \ll \frac{1}{dt}$, et R_{abcd} sont des coefficients constants décrivant l'effet du couplage entre

A et R :

❖ Quand $a \neq c, b \neq d$:

$$R_{abcd} = 2\pi \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} \langle \nu, a | V | \mu, c \rangle \langle \nu, b | V | \mu, d \rangle^* \delta(E_{\mu} + E_c - E_{\nu} - E_a) \quad (109)$$

où μ et ν décrivent les états du réservoir.

Dans le cas particulier où $a = b, c = d$ et $a \neq c$, (109) devient :

$$R_{aacc} = \Gamma_{ca} = 2\pi \sum_{\mu} p_{\mu} \sum_{\nu} |\langle \nu, a | V | \mu, c \rangle|^2 \delta(E_{\mu} + E_c - E_{\nu} - E_a) \quad (110)$$

qui exprime la probabilité par unité de temps pour que le système A effectue sous l'effet de couplage avec R une transition du niveau $|c\rangle$ vers le niveau $|a\rangle$ (règle d'or de Fermi).

❖ Quand $a = b = c = d$

$$R_{aaaa} = - \sum_{n \neq a} \Gamma_{an} \quad (111)$$

Ce terme exprime que la population de $|a\rangle$ diminue par suite des transitions effectuées de $|a\rangle$ vers les autres niveaux $|n\rangle$.

❖ Quand $a = c, b = d, a \neq b$:

$$R_{abab} = -\Gamma_{ab} - i\Delta_{ab} \quad (112)$$

où Δ_{ab} représente un déplacement de la fréquence ω_{ab} d'évolution libre de la cohérence σ_{ab} , et Γ_{ab} représente un taux d'amortissement de la cohérence σ_{ab} , dus au couplage entre A et R .

Γ_{ab} peut être décomposé en 2 termes :

- le premier, $\Gamma_{ab}^{\text{nonad.}}$, est dit "non adiabatique" car il exprime l'amortissement de la cohérence à cause d'un processus arrachant le système de l'état $|a\rangle$ ou de l'état $|b\rangle$:

$$\Gamma_{ab}^{\text{nonad.}} = \frac{1}{2} \left(\sum_{n \neq a} \Gamma_{an} + \sum_{n \neq b} \Gamma_{bn} \right). \quad (113)$$

- le deuxième, $\Gamma_{ab}^{\text{ad.}}$ est dit "adiabatique" car relatif à des processus où A ne change pas d'état tandis que R subit des transitions entre états dégénérés.

2°) Le rayonnement quantique décrit comme un réservoir

Considérons l'interaction d'un atome ou d'un ion hydrogénoï de A avec l'état vide du rayonnement R . Le processus physique correspondant à cette interaction est l'émission spontanée. Le vide possède une infinité de modes du champ électromagnétique, et son couplage avec un ion n'entraîne pas de modification notable de R au cours du temps.

Le rayonnement dans l'état vide peut donc être considéré comme un réservoir. Le temps de corrélation des fluctuations du champ dans le vide est plus court que l'inverse des fréquences de Bohr des transitions atomiques, lui-même beaucoup plus court que la durée de vie des états atomiques qui caractérise l'évolution de l'atome (Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc and Grynberg, 1988). On voit donc apparaître 2 échelles de temps qui permettent dans ce cas de calculer la vitesse de variation à gros grains.

Les longueurs d'onde des rayonnements mis en jeu (quelques Å) sont très grandes devant les dimensions atomiques (10^{-3} à 10^{-2} Å dans notre cas) et il est donc légitime d'adopter l'approximation dipolaire. L'hamiltonien d'interaction s'écrit alors :

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E}_{\perp}(\vec{0}) = -i\vec{d} \cdot \sum_n A_n \vec{e}_n (a_n - a_n^\dagger) \quad (114)$$

où A_n est un coefficient dépendant du mode "n", \vec{d} est le moment dipolaire de l'ion et l'opérateur champ est évalué au noyau de l'ion. Cette expression est bien de la forme (107) et l'évolution de la matrice densité réduite des états internes de l'ion due à l'émission spontanée est donnée par (108).

❖ évolution des populations :

Pour la population σ_{aa} , la fréquence ω_{aa} est nulle et la condition séculaire veut que seuls les états tels que $\omega_{cd} \approx 0$ peuvent être couplés avec elle (c'est à dire les autres populations ou bien les cohérences entre états dégénérés avant la prise en compte du Lamb-Shift).

Les états dégénérés d'un ion hydrogénoïde sont ceux de mêmes nombres quantiques n et j et dont le nombre quantique orbital est égal ou différent de 1. Comme V est un opérateur impair, les produits

$$\langle v, a | V | \mu, c \rangle \langle v, a | V | \mu, d \rangle^* \quad (115)$$

où les états $|c\rangle$ et $|d\rangle$ ont des parités différentes sont nuls. Il s'en suit que seuls les termes dégénérés en m_j (nombre quantique magnétique) sont couplés avec les populations.

Considérons un mode de champ électromagnétique v particulier. Les termes de (115) font intervenir les quantités :

$$\langle v, a | -i \vec{d} \cdot \vec{A}_n \vec{e}_n (a_n - a_n^\dagger) | \mu, c \rangle. \quad (116)$$

On peut à l'aide de matrices de rotation, se placer dans un repère où l'axe de quantification est suivant \vec{e}_n . L'expression (116) est alors de même type que l'expression (71) des facteurs de forme, avec conservation du nombre quantique magnétique dans le nouveau référentiel puisque dans ce référentiel, $\vec{d} \cdot \vec{e}_n$ est proportionnel à $Y_1^0(\Theta, \Phi)$. La somme sur $|v\rangle$ dans (109) et le fait que l'émission spontanée soit isotrope impliquent, en suivant le raisonnement développé lors du calcul des facteurs de forme Chap.I§A-II-1-b-iii, que seuls les termes de même nombre quantique magnétique ont des contributions non nulles. Les populations ne sont donc couplées qu'à elles-mêmes.

L'évolution des populations s'écrit donc :

$$\frac{d\sigma_{aa}}{dt} = \sum_{c \neq a} (\sigma_{cc} \Gamma_{ca} - \sigma_{aa} \Gamma_{ac}) \quad (117)$$

ce qui a la forme des équations d'Einstein pour l'émission spontanée.

❖ évolution des cohérences

La désexcitation radiative, qui entraîne l'émission d'un photon, peut être vue comme un processus de mesure, plaçant le système dans un état propre. Les cohérences de la matrice densité exprimée dans une base d'états propres sont donc perdues, et seuls les termes de diminution des cohérences sont à prendre en compte :

$$\frac{d\sigma_{ba}}{dt} = -i(\omega_{ba} + \Delta_{ba})\sigma_{ba} - \frac{\Gamma_{ba}}{2}\sigma_{ba} \quad (118)$$

avec les notations du paragraphe précédent. Δ_{ba} est la différence des déplacements radiatifs des niveaux $|a\rangle$ et $|b\rangle$ (Lamb shift).

Dans Γ_{ba} , la contribution adiabatique est nulle car V est impair et n'a donc pas d'éléments diagonaux dans l'état $|a\rangle$ ou $|b\rangle$. Il reste donc :

$$\frac{\Gamma_{ba}}{2} = \frac{1}{2} \left(\sum_{n \neq a} \Gamma_{an} + \sum_{n \neq b} \Gamma_{bn} \right). \quad (119)$$

3°) L'effet collisionnel du solide décrit comme celui d'un réservoir

Un solide disposant d'un très grand nombre de degrés de liberté peut être considéré comme un réservoir par rapport au petit système qu'est l'ion hydrogénéoï de. En effet, le nombre de collisions binaires entre l'ion et les atomes du solide est complètement négligeable devant ce nombre de degrés de liberté. Il n'est question ici que d'interactions collisionnelles, et la modification du solide due à l'induction du champ de sillage n'est donc pas à considérer. Cela est justifié dans le cadre de l'approximation des vitesses indépendantes (Chap.I§A-IV-5).

Il faudrait que le potentiel d'interaction entre le solide et le petit système se mette sous la forme (107) pour établir rigoureusement que l'équation d'évolution de la matrice densité réduite de l'ion hydrogénéoï de soumis aux collisions avec les atomes du solide est de la forme (108). Mais des considérations physiques permettent aussi de le postuler phénoménologiquement. On peut en effet définir, à partir des sections efficaces collisionnelles $\sigma^{(col)}$, les probabilités de transition par unité de temps $\Gamma^{(col)}$:

$$R_{aacc} = \Gamma_{ca}^{(col)} = \sigma_{ca}^{(col)} \cdot n \cdot v \quad (120)$$

où n est le nombre d'atomes cible par unité de volume et v la vitesse de collision. On notera d'ailleurs la similitude formelle entre R_{aacc} de l'expression (110) et ω_{if} de l'expression (51).

On a également :

$$R_{aaaa} = - \sum_{c \neq a} \Gamma_{ac} \quad (121)$$

Les équations couplées entre les populations peuvent alors s'écrire :

$$\frac{d}{dt} \sigma_{aa} = \sum_{c \neq a} \left(\Gamma_{ca}^{(col)} \sigma_{cc} - \Gamma_{ac}^{(col)} \sigma_{aa} \right). \quad (122)$$

De même les cohérences collisionnelles $\sigma_{c,ab}^{(col)}$ correspondent aux termes $R_{abcc}^{(col)}$ couplant la cohérence σ_{ab} à la population σ_{cc} :

$$R_{abcc}^{(col)} = \sigma_{c,ab}^{(col)} n_v. \quad (123)$$

On pourrait ensuite, par analogie avec les expressions du Chap.I§A-IV-1, étendre la définition aux termes :

$$R_{abcd} = \int p(x) a_{ca}(x) a_{db}^*(x) dx, a \neq c, b \neq d, c \neq d \quad (124)$$

x représentant l'ensemble des variables dont peuvent dépendre les amplitudes de probabilité de transition $a_{ca}(x)$ et $p(x)$ la probabilité pour obtenir la réalisation " x ".

Ces termes décrivent le transfert de cohérence par suite des collisions. Même si les processus collisionnels ne peuvent pas être considérés, *a priori*, comme des processus de mesure, nous avons décidé dans un premier temps et dans un souci de simplicité de fixer tous les termes (124) égaux à 0.

$$R_{abcd}^{(col)} = 0, a \neq c, b \neq d, c \neq d. \quad (125)$$

Finalement, seuls les termes de relaxation des cohérences σ_{ab} dus au fait qu'un processus collisionnel arrache le système de l'état $|a\rangle$ ou $|b\rangle$ (termes "non adiabatiques", expression (113)) sont pris en compte, dans l'état actuel de notre modèle, pendant le transport des états excités de l'ion hydrogénéoï de dans le solide :

$$R_{abab}^{(col)} = -\frac{1}{2} \left(\sum_{n \neq a} \Gamma_{an}^{(col)} + \sum_{n \neq b} \Gamma_{bn}^{(col)} \right) = -\frac{1}{2} \Gamma_{ab}^{(col)}. \quad (126)$$

4°) Evolution due au champ de sillage

L'évolution de la matrice densité réduite σ sous l'effet du champ de sillage seul et dans le cadre de l'approximation dipolaire, est donnée par l'équation de Liouville :

$$\frac{d\sigma}{dt} = -i \left[-\vec{d} \cdot \vec{\tilde{F}}, \sigma \right] \quad (127)$$

avec $\vec{\tilde{F}}$ le champ de sillage donné par (102) et \vec{d} le moment dipolaire électrique de l'ion.

Projetée dans la base d'états propres, cette équation mène au système différentiel :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\sigma_{bb}}{dt} = \sum_c i\omega_s(c,b)(\sigma_{bc} - \sigma_{cb}) \\ \frac{d\sigma_{ab}}{dt} = i\omega_s(a,b)(\sigma_{aa} - \sigma_{bb}) \quad \text{pour } a \neq b \end{array} \right. \quad (128)$$

où $\omega_s(c,b)$ (resp. $\omega_s(a,b)$) sont les éléments de matrice de l'opérateur $-\vec{d} \cdot \vec{E}$ pris entre les états $|b\rangle$ et $|c\rangle$ (resp. $|b\rangle$ et $|a\rangle$), donnés par l'expression (98).

5°) Approximation des vitesses de variation indépendantes ; Equation pilote

Nous avons calculé dans les 3 paragraphes précédents la vitesse de variation de σ due à la désexcitation radiative, aux processus collisionnels, et au couplage avec le champ de sillage et dans chaque cas nous avons considéré uniquement un couplage particulier.

Quand tous ces processus sont présents simultanément, nous additionnons simplement les vitesses de variations individuelles. Cela constitue l'approximation des vitesses de variations indépendantes. Elle est valable si chaque processus n'affecte pas le couplage du petit système avec les autres processus.

On peut montrer (Cohen-Tannoudji, Dupont-Roc and Grynberg, 1988) que c'est le cas si ω_s est très petit devant l'inverse des temps de corrélation des fluctuations du vide τ^{-1} et des processus collisionnels, c'est à dire :

$$\omega_s(a,b) \ll \omega_{ab} \ll \frac{1}{\tau} \quad (129-a)$$

$$\omega_s(a,b) \ll \frac{1}{\tau_c} \quad (129-b)$$

où ω_{ab} est la fréquence de la transition $a \leftrightarrow b$ (très inférieure à τ^{-1}), et τ_c le temps moyen de collision, relié à l'inverse de la vitesse de collision.

Dès lors que ces conditions sont vérifiées, on peut donc écrire, pour l'évolution de la matrice densité réduite de l'ion hydrogénoïde, avec les notations utilisées dans ce chapitre:

$$\frac{d}{dt}\sigma_{ab}(t)=\left\{-i(\omega_{ab}+\Delta_{ab})\sigma_{ab}(t)-\frac{\Gamma_{ab}}{2}\sigma_{ab}(t)\right\} \quad (130)$$

$$+\left\{\sum_c R_{abcc}^{(col)}\sigma_{cc}(t)-\frac{\Gamma_{ab}^{(col)}}{2}\sigma_{ab}(t)\right\}+\left\{i\omega_s(a,b)[\sigma_{aa}(t)-\sigma_{bb}(t)]\right\} \text{ pour } a\neq b$$

$$\frac{d}{dt}\sigma_{aa}(t)=\left\{\sum_{c\neq a}[\Gamma_{ca}\sigma_{cc}(t)-\Gamma_{ac}\sigma_{aa}(t)]\right\}+\left\{\sum_{c\neq a}[\Gamma_{ca}^{(col)}\sigma_{cc}(t)-\Gamma_{ac}^{(col)}\sigma_{aa}(t)]\right\} \quad (131)$$

$$+\left\{i\sum_c\omega_s(c,a)[\sigma_{ac}(t)-\sigma_{ca}(t)]\right\}.$$

Dans la prochaine partie, je vais présenter les programmes réalisés dans le but d'étudier l'importance relative des différents termes des expressions (130) et (131) dans l'étude de systèmes particuliers.

V – Etude des différents termes de l'équation pilote

1°) Le modèle collisionnel

a) Présentation et hypothèses

i) Équations d'évolution

Ce modèle a été développé pour étudier l'évolution des populations électroniques des états excités de l'ion hydrogénéoï de projectile sous l'effet des désexcitations radiatives et des collisions binaires de haute fréquence avec les atomes de la cible, en excluant le couplage avec le champ de sillage.

Il consiste donc à ne prendre en compte que les 2 premiers termes à droite de l'expression (131), puisque tous les termes de couplage Stark $\omega_s(c,a)$ sont nuls. La condition de validité (129-a) est bien sûr vérifiée.

On remarque que l'équation ainsi obtenue est identique à celle que l'on aurait, à partir de (131), en se plaçant dans le cadre de la Random Phase Approximation (RPA), qui consiste à fixer toutes les cohérences à 0.

ii) Sections efficaces collisionnelles

Outre l'absence d'écrantage dynamique, **on fait l'hypothèse que la structure solide de la cible ne modifie pas les sections efficaces collisionnelles**, et l'on prend celles-ci égales à celles calculées en gaz (c'est à dire celles présentées au Chap.I§A-II). Puisque la condensation en phase solide modifie de façon sensible seulement les couches électroniques externes, cette hypothèse a peu de conséquence pour les processus survenant à petit paramètre d'impact, c'est à dire pour un projectile lourd et un atome cible léger, la capture à partir d'une couche interne de la cible, l'ionisation à partir d'une couche interne du projectile, et l'excitation intercouche ($\Delta n \geq 1$) du projectile pour des n pas trop grands ($n \leq 5$). Par contre, on peut émettre des doutes sur la validité de cette approximation pour l'excitation intracouche ($\Delta n=0$).

La figure 13 montre l'influence d'un atome voisin sur le potentiel atomique écranté. Outre la modification apportée sur la densité électronique, la portée du potentiel d'un atome particulier est limitée à r_m . L'évaluation des effets combinés de ces modifications sur les sections efficaces n'est pas simple. Les sections efficaces extraites d'un calcul CTMC (Classical Trajectory Monte-Carlo) prenant en compte le potentiel de la figure 13, pour le système $Ar^{17+} \rightarrow C$ à $v = 23$, sont inférieures à celles données par PWBA et cette différence est en partie expliquée par l'effet géométrique sur la portée du potentiel. Pour les sections efficaces d'excitation intracouche $n_s \rightarrow n_p$, cela est visible dès $n = 3$, tandis qu'il faut aller jusqu'à $n = 5$ pour commencer à voir une différence sur les sections efficaces d'excitation intercouche (Lamour, 1997).

Globalement, les deux théories donnent des résultats du même ordre de grandeur, ce qui valide *a priori* l'utilisation des sections efficaces de collision binaire présentées au chap.I§A-II.

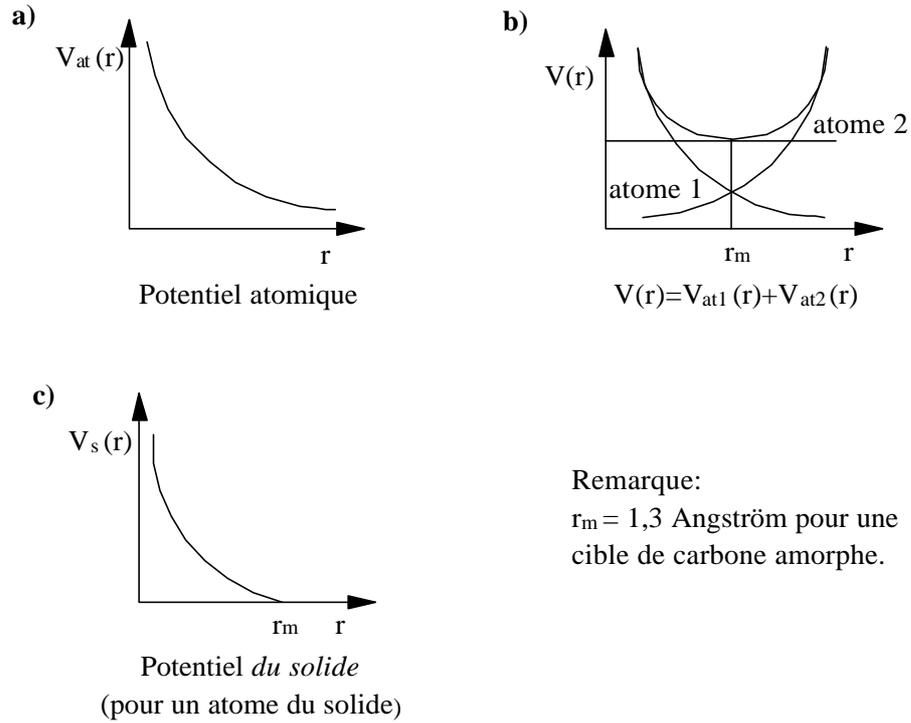


Figure 13 : Influence d'un atome voisin sur un potentiel atomique, et potentiel du solide.

b) Système d'équations différentielles ; Version actuelle du programme

Le programme décrit les populations des états $n\ell$ de l'ion projectile (la trace étant prise sur les spins et les états magnétiques). Soit $\sigma_{n\ell}(x)$ la population d'ions à un électron dans un état $n\ell$ à une distance x dans la cible. Les différentes populations sont solutions des équations différentielles d'évolution (131) avec $\omega_s(c,a)=0$. En explicitant les coefficients $R_{abcd}^{(col)}$, la forme générale du système d'équations différentielles couplées est :

$$\frac{1}{N} \frac{d\sigma_{n\ell}(x)}{dx} = P_{n\ell} \sigma_{init}(x) - \left[I_n + R_{n\ell} + \sum_{\ell' \neq \ell} E_{n\ell \rightarrow n\ell'} + \sum_{\substack{n'\ell' \\ n'=n\pm 1}} E_{n\ell \rightarrow n'\ell'} \right] \sigma_{n\ell}(x) \quad (132)$$

$$+ \sum_{\ell' \neq \ell} E_{n\ell' \rightarrow n\ell} \sigma_{n\ell'}(x) + \sum_{\substack{n'\ell' \\ n'=n\pm 1}} E_{n'\ell' \rightarrow n\ell} \sigma_{n'\ell'}(x) + \sum_{n'\ell'} R_{n'\ell'}^{n\ell} \sigma_{n'\ell'}(x)$$

avec N : la densité de la cible (atomes/unité de volume)

$P_{n\ell}$: section efficace de peuplement de l'état $n\ell$ du projectile

$\sigma_{init}(x)$: population des ions sur lesquels a lieu le processus de peuplement, à l'épaisseur x ($\sigma_{init}(x) \approx 1$)

I_n : section efficace d'ionisation de la couche n du projectile

$E_{n\ell \rightarrow n'\ell'}$: section efficace d'excitation intracouche (dipolaire ou non dipolaire)

$E_{n\ell \rightarrow n'\ell'}$: section efficace d'excitation intercouche dipolaire et non dipolaire

$R_{n\ell} = \sum_{n'\ell'} R_{n\ell}^{n'\ell'}$ et $R_{n\ell}^{n'\ell'}$: sections efficaces respectivement totale et partielle

de désexcitation radiative de l'état $n\ell$ (Bethe and Salpeter, 1977; Omidvar, 1983).

En effet, on obtient $\frac{1}{N} \frac{d\sigma_{n\ell}(x)}{dx}$ en multipliant l'équation (131) par $\frac{1}{Nv}$ et en posant

$\sigma_{n\ell}(x) = \sigma_{n\ell}(t)$ avec $t = \frac{x}{v}$. Les probabilités de transitions par unité de temps Γ et $\Gamma^{(col)}$ sont

alors transformées en sections efficaces (voir l'expression (120)). Le premier terme entre accolades de (131) est relatif au processus radiatif et s'écrit donc avec les notations ci-dessus :

$$\frac{1}{Nv} \left\{ \sum_{n',\ell'} [\Gamma_{n'\ell' \rightarrow n\ell} \sigma_{n'\ell'}(x) - \Gamma_{n\ell \rightarrow n'\ell'} \sigma_{n\ell}(x)] \right\} = \sum_{n',\ell'} R_{n\ell}^{n'\ell'} \sigma_{n'\ell'}(x) - R_{n\ell} \sigma_{n\ell}(x).$$

Le second terme entre accolades dans (131) décrit les processus collisionnels. Ceux qui peuplent l'état $n\ell$ sont le processus de peuplement initial dans $n\ell$ et les excitations intracouches ($n\ell' \rightarrow n\ell$) et intercouches ($n'\ell' \rightarrow n\ell$). Ceux qui dépeuplent l'état $n\ell$ sont l'ionisation et les excitations intracouches ($n\ell \rightarrow n\ell'$) et intercouches ($n\ell \rightarrow n'\ell'$). On peut donc écrire :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Nv} \left\{ \sum_{n',\ell'} [\Gamma_{n'\ell' \rightarrow n\ell}^{(col)} \sigma_{n'\ell'}(x) - \Gamma_{n\ell \rightarrow n'\ell'}^{(col)} \sigma_{n\ell}(x)] \right\} \\ &= P_{n\ell} \sigma_{init}(x) + \sum_{\ell' \neq \ell} E_{n\ell' \rightarrow n\ell} \sigma_{n\ell'}(x) + \sum_{n',\ell'} E_{n'\ell' \rightarrow n\ell} \sigma_{n'\ell'}(x) \\ & - \left[I_n + \sum_{\ell' \neq \ell} E_{n\ell \rightarrow n\ell'} + \sum_{n',\ell'} E_{n\ell \rightarrow n'\ell'} \right] \sigma_{n\ell}(x) \end{aligned}$$

Enfin, le 3^{ème} terme entre accolades de (131) concerne la réponse collective des électrons de la cible et n'est pas pris en compte dans ce modèle. En rassemblant tous ces termes, avec les restrictions précisées ci-dessous, on obtient bien l'expression (132).

Le processus de peuplement initial dépend de l'expérience que l'on veut modéliser. Il peut s'agir par exemple de la capture à partir d'ions nus (dans ce cas $\sigma_{init}(x)$ est la population d'ions nus à l'épaisseur x), ou de l'excitation à partir du niveau fondamental d'un ion hydrogénoïde (dans ce cas $\sigma_{init}(x) = \sigma_{1s}(x)$).

Précisons enfin que les processus d'excitation intercouche sont restreints (hormis pour le processus de peuplement initial le cas échéant) aux transitions $\Delta n = 1$. Les transitions de $\Delta n \geq 2$ sont en effet négligeables devant les autres processus (Lamour, 1997) et ne sont donc pas prises en compte, sauf bien sûr quand elles doivent "construire" la matrice densité initiale.

Jusqu'à maintenant, le modèle développé dans l'équipe contenait tous les processus cités précédemment jusqu'à $n = 10$, excepté pour les excitations intracouches non dipolaires et intercouches qui étaient prises jusqu'à $n = 6$ (Lamour, 1997). Grâce au calcul automatique des facteurs de formes hydrogénéoïdes (Chap.I§AII-1-b) le programme contient maintenant tous ces processus jusqu'à $n = 10$. Cette modification est importante si l'on s'intéresse aux populations des états "externes" ($n \geq 6$), mais n'influe pas sur les évolutions des populations des états internes. La contribution de l'état $1s$ avait été estimée négligeable lors d'un premier développement du programme pour le cas $Kr^{36+} \rightarrow C$ à $v = 35,6$ (Despiney, 1994). Cela avait été abusivement reporté lors de l'adaptation ultérieure au système $Ar^{18+} \rightarrow C$ à $v = 23$ (Lamour, 1997). Cet état est maintenant correctement pris en compte quel que soit le système de collision.

Par contre, comme cela était fait dans la version précédente (Lamour, 1997), nous avons pris en compte le peuplement des états $n\ell$ du projectile de $n > 10$ en multipliant la population de chaque état 10ℓ par un facteur égal à 5,52, facteur basé sur le fait qu'on peut appliquer une loi en $1/n^3$ à partir de $n = 10$ pour déduire la population par capture d'un état de $n > 10$; en effet :

$$5,52 \approx 10^3 \sum_{n=10}^{\infty} 1/n^3$$

Chaque population 10ℓ multipliée par ce facteur revient à considérer que la section efficace d'ionisation de $n > 10$ est égale à celle de $n = 10$. On sous-estime donc la perte d'ions hydrogénéoïdes.

Pour tenir compte du fait que les états de $n > 10$ ont des durées de vie plus grandes que celle des états de $n = 10$, on a multiplié les sections efficaces de désexcitation radiative $R_{10\ell}^{n'\ell'}$ de l'état $(10, \ell)$ par le facteur :

$$0,4 \approx \frac{\sum_{n=10}^{\infty} R_{n\ell}^{n'\ell'} \times \frac{1}{n^3}}{R_{10\ell}^{n'\ell'} \sum_{n=10}^{\infty} \frac{1}{n^3}}$$

la durée de vie d'un état hydrogénoïde variant en n^3 (Bethe and Salpeter, 1977) et en appliquant une loi d'échelle sur les populations des états de $n > 10$ en $1/n^3$ (comme expliqué précédemment).

La résolution du système d'équations différentielles (132) permet d'obtenir les populations des différents états $n\ell$ quelle que soit l'épaisseur de cible traversée. A partir de ces populations, il est possible de calculer le nombre d'X total émis par projectile, noté $N_{\text{tot}}(n\ell)$, à partir du niveau $n\ell$ vers n'importe quel autre niveau. Ce nombre, directement comparable aux résultats expérimentaux, correspond à la somme des X émis à l'intérieur de la cible, $N_{\text{int}}(n\ell)$, et ceux émis hors de la cible, $N_{\text{ext}}(n\ell)$. On a : $N_{\text{tot}}(n\ell) = N_{\text{int}}(n\ell) + N_{\text{ext}}(n\ell)$ avec

$$N_{\text{int}}(n\ell) = N \int_0^d R_{n\ell} \sigma_{n\ell}(x) dx \quad \text{où } d \text{ est l'épaisseur de cible.}$$

$$N_{\text{ext}}(n\ell) = \tilde{\sigma}_{n\ell}(d) = \sigma_{n\ell}(d) + \sum_{\substack{n' > n \\ \ell' = \ell \pm 1}} \tilde{\sigma}_{n'\ell'}(d) \frac{R_{n'\ell'}^{n\ell}}{R_{n'\ell'}} \quad \text{où } \sigma_{n\ell}(d) \text{ est la population de l'état } n\ell$$

en sortie de cible, $\tilde{\sigma}_{n\ell}(d)$ la population de l'état $n\ell$ après la série de cascades successives provenant d'états plus excités et $\frac{R_{n'\ell'}^{n\ell}}{R_{n'\ell'}}$ le rapport de branchement de la transition radiative $n'\ell' \rightarrow n\ell$.

c) Convergence des résultats quand le niveau n_{max} des états traités augmente

Nous venons de voir que le programme traite à présent explicitement tous les états $n\ell$ jusqu'à $n_{\text{max}} = 10$. Il est intéressant de savoir quelle est l'incidence du nombre de niveaux traités lorsqu'on s'intéresse aux populations d'états de cor . C'est pourquoi j'ai étudié l'influence d'une limitation en n_{max} du nombre d'états traités, sur le système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$, $v = 23$, où le peuplement par capture est décrit par CDW et tous les autres processus collisionnels par PWBA. Tout d'abord, nous devons nous assurer que nous sommes dans les domaines de validité des théories.

Pour l'état $1s$ de Ar^{17+} , la condition de validité (85) s'écrit : $E \text{ (keV/A)} \geq 12960$. La vitesse de collision $v = 23$ correspond à l'énergie $E = 13,6 \text{ MeV/A}$ donc la condition de validité de CDW est respectée. Pour les états plus excités de Ar^{17+} et pour l'état $1s$ du carbone, la condition est bien sûr plus largement vérifiée.

Nous devons également nous assurer que nous pouvons négliger la capture radiative. Pour une cible de carbone, la condition (80) impose comme limite supérieure à la vitesse de collision :

$$v < 68,9 \text{ u.a.} \quad (133)$$

ce qui est respecté.

La figure 14 montre les résultats de cette étude pour n_{\max} variant de 2 à 6, ainsi que les populations obtenues pour le programme "complet" ($n_{\max} = 10$, plus loi d'échelle en $1/n^3$ décrite précédemment). Nous voyons que, de façon générale, l'essentiel de la population d'un état appartenant à la couche "n" est décrit lorsqu'on traite les états jusqu'à $n+1$. Le fait que les résultats ne dépendent pas tellement des états $n+2$, $n+3$, etc... se comprend bien puisque les seules excitations intercouches introduites sont telles que $\Delta n = \pm 1$. Donc l'introduction d'une couche n donnée ne peut dépeupler directement que la couche $n-1$. Le dépeuplement de la couche $n-2$ est un processus en 2 étapes. Par exemple, la prise en compte de $n = 5$ ne dépeuple la couche $n = 3$ que via la succession de 2 processus : une excitation de $n = 3 \rightarrow n = 4$, puis une deuxième de $n = 4 \rightarrow n = 5$. Comme le niveau $3p$ reçoit très peu de cascades de $n = 4$, son évolution dépend peu de celle de $n = 4$ et la deuxième excitation $n = 4 \rightarrow n = 5$ est sans conséquence notable.

L'influence des niveaux supérieurs se manifeste par deux effets :

- Premièrement, l'introduction d'un plus grand nombre d'états implique une capture totale plus grande lors du processus primaire. La désexcitation radiative des états excités vers des états plus profonds (processus de cascade) entraîne une augmentation de la valeur initiale des populations représentées.
- Deuxièmement, la phase de transport entraîne l'excitation vers les niveaux supérieurs et ce transfert se fait au détriment des états de cœur n entraînant une diminution de leur population.

Ainsi l'introduction de niveaux supérieurs a un effet de peuplement des niveaux inférieurs via les cascades, et un effet de dépeuplement via les voies d'excitation. Au bout d'un certain temps de transit, ce deuxième effet devient prépondérant, et l'on voit que les courbes correspondant à différents n_{\max} se croisent à $T \approx 300$ pour $2p$, T entre 50 et 100 pour $3p$ et $4p$, et $T \approx 200$ pour $2s$.

Enfin les courbes correspondant à $n_{\max} = 10$ et tenant artificiellement compte des états $n > 10$ se comportent comme une "limite" des couches précédentes ($n_{\max} = 2$ à 6), et montrent l'erreur faite lorsqu'on limite le modèle à un nombre d'états inférieur. Je reviendrai sur cette

remarque lorsque nous confronterons le modèle collisionnel et le modèle d'équation pilote, qui est limité à $n_{\max} = 6$.

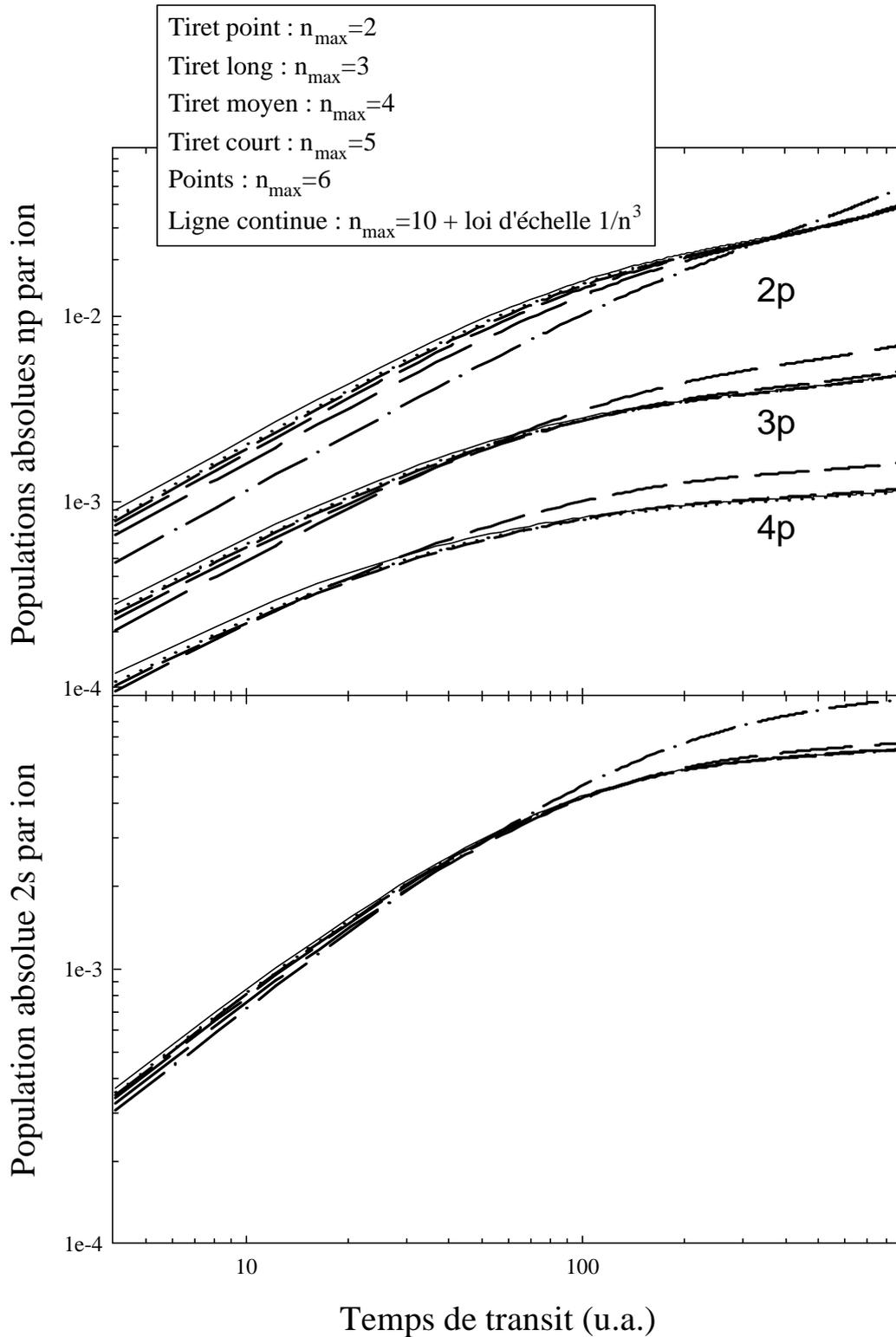


Figure 14 : Variation des populations np et $2s$ du système Ar^{18+} @ C ($v = 23$ u.a.) en fonction du niveau maximum n_{\max} des couches traitées, dans le cadre du modèle collisionnel.

d) Dépendance vis à vis des conditions initiales en termes de populations

Les sections efficaces absolues ne sont pas calculées à mieux que 20% près, et nous nous sommes interrogés sur la sensibilité de nos résultats aux valeurs des sections efficaces du processus de peuplement. Afin d'avoir une idée de cette dépendance, nous avons effectué une simulation du transport d'ions Ar^{17+} peuplés par capture dans des cibles de carbone, à $v = 23$. Tout restant égal par ailleurs, nous avons utilisé les sections efficaces de capture CDW (voir Chap.I§A-II-3), puis CTMC (Gervais, 2000). Remarquons que la théorie CTMC est considérée comme valide tant que $1 \leq \frac{v}{v_e} \leq 4$ (Bransden and McDowell, 1992), où v_e est la vitesse initiale de l'électron actif, ce qui est vérifié ici pour les couches internes de C.

La figure 15 montre les simulations de l'évolution des populations absolues n_p ($n = 2, 3, 4$) ainsi que $2s$. Il faut préciser que cette comparaison a été faite en prenant des sections efficaces non nulles seulement pour n entre 1 et 4 et prises à 0 pour $n > 4$. Cela est sans conséquence pour ce que je discute ici.

Nous retiendrons que pour une épaisseur donnée de cible, la population absolue dépend du calcul du processus primaire, mais que l'évolution, et en particulier la "pente" des courbes des populations n_p est la même avec les sections efficaces initiales CDW ou CTMC. Ceci est vrai dans une moindre mesure pour la population $2s$. Nous voyons donc que ce type d'observable prédite par ce modèle est sensible aux valeurs des sections efficaces initiales. La comparaison avec des résultats expérimentaux constituera donc un test de ces sections efficaces.

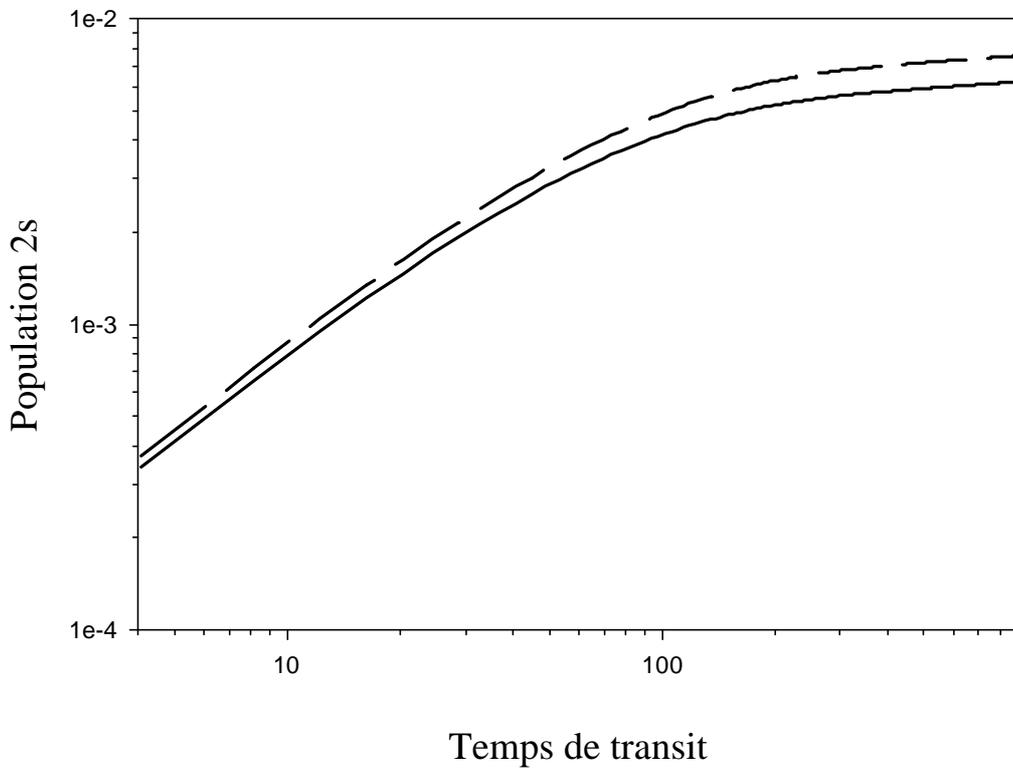
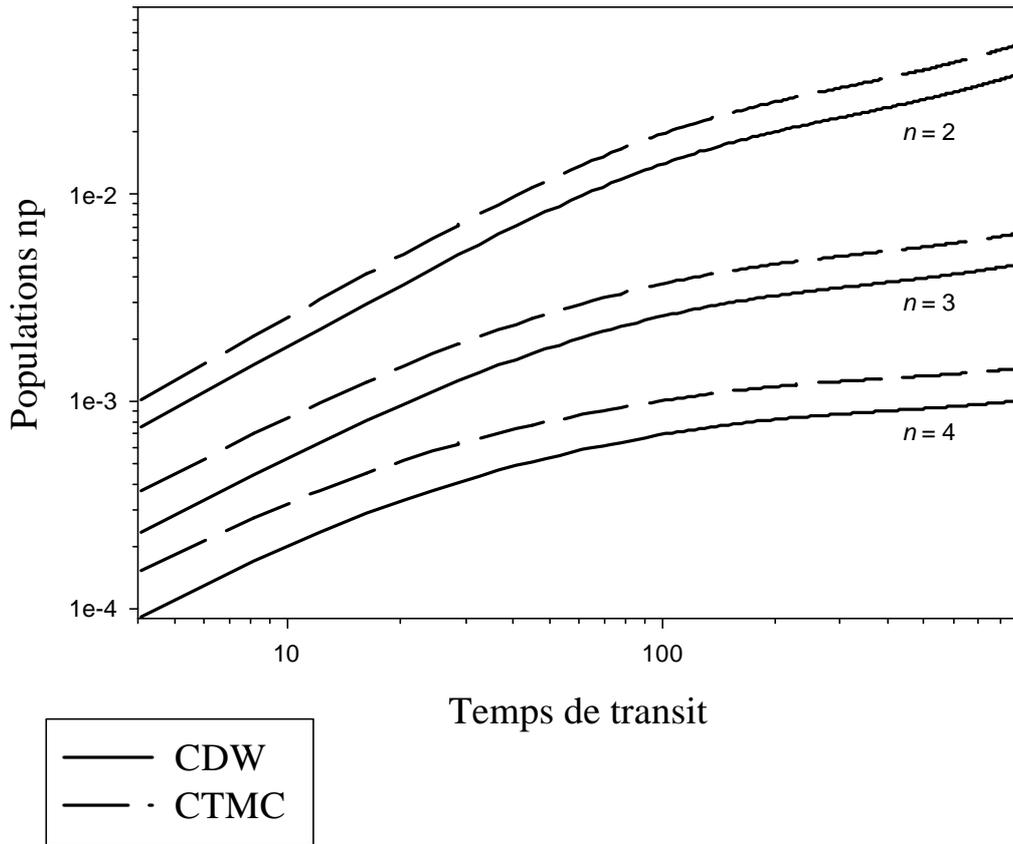


Figure 15 : Evolution des intensités absolues des transitions Lyman émises par Ar^{17+} ($v = 23$ u.a.) avec l'épaisseur de carbone traversée.

e) Acquis du modèle collisionnel

Il faut rappeler ici que ce modèle, bien que négligeant le couplage au champ de sillage induit, a permis de reproduire nombre de résultats expérimentaux, comme par exemple :

- La distribution en états de charge d'un ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée (y compris en condition de pré-équilibre) (Rozet, Chetioui, Piquemal *et al.*, 1989; Rozet, Stéphan and Vernhet, 1996; Blazevic, Bohlen and von Oertzen, 2000)
- La population d'états de cn ($n \leq 4$ typiquement) et $2s$ d'un ion hydrogénoïde traversant une cible solide, à l'équilibre des populations (Lamour, 1997; Reinhold, Arbo, Burgdörfer *et al.*, 2000), et explique la majeure partie de l'évolution de ces états dans la cible tant qu'on ne distingue pas la structure fine.
- La population d'états de Rydberg en sortie de cible, à l'équilibre des populations et en pré-équilibre (Lamour, 1997; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 1999; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000)

Dans ce dernier cas, la limitation du modèle n'est pas intrinsèque ; elle ne dépend que du nombre d'états que l'on introduit dans le programme (Lamour, 1997).

2°) Le modèle de réponse collective

Après un premier type d'effet (collisionnel) présenté au paragraphe précédent, nous allons maintenant étudier l'effet de la réponse collective des électrons de la cible, présenté au Chap.I§A-III.

Tous les processus collisionnels hormis celui "construisant" la matrice densité (c'est à dire le processus initial de peuplement) sont négligés. A la suite de ce processus initial, le transport de la matrice densité réduite de l'ion hydrogénoïde n'obéit qu'à l'hamiltonien atomique, la désexcitation radiative et le couplage au champ de sillage.

a) Système à 2 niveaux

Le but de cette étude étant de définir l'action du champ de sillage et la sensibilité d'une observable aux variations de paramètres pertinents, nous avons simplifié le problème au cas d'un système à 2 niveaux. Nous avons écrit un programme résolvant les équations (130) et (131) dans ce cadre simplifié.

Nous avons également conçu un autre programme totalement différent, basé sur le fait que l'évolution de la matrice densité réduite peut également être décrite, en l'absence de collision, par l'équation de Liouville pour un hamiltonien complexe H :

$$\frac{d\sigma(t)}{dt} = -i[H\sigma(t) - \sigma(t)H^+] \quad (134)$$

où H contient l'hamiltonien atomique, le couplage au champ de sillage, et les pertes radiatives de façon phénoménologique dans l'approximation de Bethe-Lamb (Havener, Rouze, Westerveld *et al.*, 1986). Pour le système à deux niveaux, H peut s'écrire dans l'approximation dipolaire :

$$H = \begin{pmatrix} E_1 - \frac{i\Gamma_1}{2} & \omega_s \\ \omega_s & E_2 - \frac{i\Gamma_2}{2} \end{pmatrix} \quad (135)$$

où Γ_1 et Γ_2 sont les largeurs radiatives des niveaux et E_1 et E_2 sont les sommes des énergies des états propres de l'hamiltonien atomique et des énergies de couplage radiatif (Lamb Shift). En toute rigueur, les décalages d'énergie dus au potentiel de sillage devraient intervenir dans E_1 et E_2 . Cependant nous avons vu au Chap.I§A-III-2-a et b que ceux-ci sont identiques pour les deux états du projectile et sont donnés par l'expression (93). Comme c'est la différence d'énergie $E_1 - E_2$ qui intervient pour décrire l'évolution des cohérences (voir (130)), nous pouvons ignorer ce terme. Dans le cadre de ce formalisme, nous pouvons calculer analytiquement l'évolution au cours du temps de la matrice densité réduite, en passant par la diagonalisation de H. Pour plus de détails, on pourra se référer à (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999).

Les deux programmes, bien que structurellement très différents, sont en accord avec une précision relative meilleure que 10^{-4} , ce qui donne l'ordre de grandeur de la précision de la routine d'intégration utilisée pour résoudre les équations (130) et (131).

b) Exemple particulier d'un projectile krypton ($Z_p = 36$)

Je vais présenter les résultats donnés par le modèle collectif dans un cas particulier. Les états étudiés sont les états $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ du krypton ($Z_p = 36$). Ceci fixe les énergies E_1 et E_2 ainsi que les largeurs Γ_1 et Γ_2 de H (voir figure 16). Les rapports de branchement utilisés dans nos programmes sont également notés sur cette figure. Ces valeurs sont obtenues par un calcul non relativiste (Bethe and Salpeter, 1977). Voici la justification de ce choix : le krypton étant un projectile lourd, nous nous sommes interrogés sur l'importance des effets relativistes

sur les rapports de branchement. Nous avons donc comparé ces valeurs à celles obtenues par Pal'Chikov par un calcul relativiste (Pal'chikov, 1998). L'écart le plus important observé concerne les rapports de branchement des transitions désexcitant $3s_{1/2}$. Celui de la transition $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ passe de 66,7% (valeur non relativiste) à 69,3% (valeur relativiste) tandis que simultanément le rapport de branchement de la transition $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ passe de 33,3% à 30,3%. Cette variation n'influe pratiquement pas sur les résultats du programme de transport. De plus le modèle collisionnel présenté dans la partie précédente ne traite pas la structure fine des niveaux et ne prend en compte aucun effet relativiste. La volonté d'obtenir des résultats cohérents entre nos modèles nous a donc poussé à utiliser les valeurs **non relativistes des rapports de branchement dans nos modèles théoriques**.

i) Évolution de la matrice densité au cours du temps

Afin de fixer les paramètres restants (ω_s et σ_0 la matrice densité initiale), nous prendrons les valeurs théoriques dans le cas où le projectile, initialement nu, pénètre dans une cible de carbone à $v = 35,6$. Le processus de peuplement est alors la capture et σ_0 est donnée par la théorie CDW (Chap.I§A-II-3). ω_s est donné par la procédure décrite au Chap.I§A-III.

Il convient de s'assurer que ce système vérifie l'ensemble des hypothèses faites jusqu'ici.

Assurons nous déjà de la validité du calcul CDW : ici encore, $|\epsilon_f| \leq 18$, et ϵ_f est l'énergie de la couche $n = 3$ de Kr^{35+} (avec $\epsilon \approx \frac{Z^2}{2n^2}$), donc : $|\epsilon_f| \approx \frac{1296}{2 \times 9} = 72$.

La condition (85) s'écrit $E \text{ (keV/A)} \geq 5760$. La vitesse $v = 35,6$ correspond à $E = 33 \text{ MeV/A}$ donc nous sommes largement dans le domaine de validité de CDW. La condition (133) relative au processus REC est également remplie. Enfin, le critère (129-a) est vérifié car s'il existe des désexcitations radiatives de $3s_{1/2}$ ou $3p_{1/2}$ vers les niveaux inférieurs, on néglige les transitions radiatives de $3s_{1/2}$ vers $3p_{1/2}$. En effet, bien que l'élément de matrice de couplage avec le rayonnement entre ces 2 états ne soit pas nul, le gain en énergie d'une telle transition est tellement faible devant les autres désexcitations radiatives que la force d'oscillateur associée est assimilable à 0 (Bethe and Salpeter, 1977).

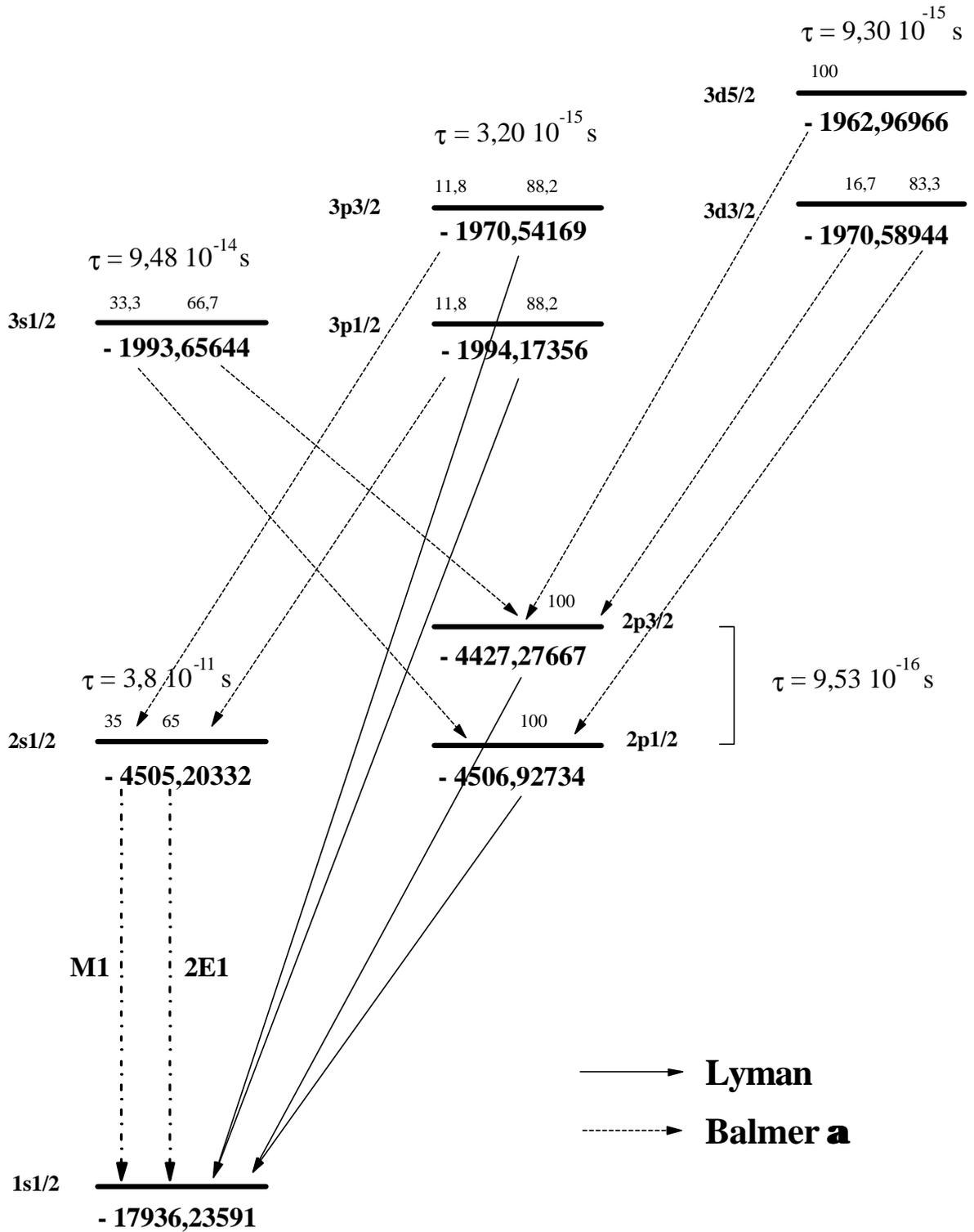


Figure 16 : Niveaux d'énergie et schéma de désexcitation de l'ion hydrogénéoï de Kr^{35+} jusqu'à $n=3$. Les énergies sont en eV (Desclaux, 1991). Les rapports de branchement sont non relativistes.

Nous avons décidé de nous intéresser à l'évolution temporelle des populations et de la cohérence entre les 2 niveaux, ainsi que de 2 grandeurs définies par Ashburn *et al.* (Ashburn, Cline, van der Burgt *et al.*, 1990) pour relier les cohérences aux populations, c'est à dire ("i" désigne $3s_{1/2}$ et "j" désigne $3p_{1/2}$) :

- Le paramètre de cohérence

$$R_{ij} = \frac{|\sigma_{ij}|}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}}, \quad 0 \leq R_{ij} \leq 1 \quad (136-a)$$

- La phase de la cohérence

$$\varphi_{ij} = \tan^{-1} \left[\frac{\text{Im}(\sigma_{ij})}{\text{Re}(\sigma_{ij})} \right], \quad \varphi_{ij} \in [0, 2\pi[\quad (136-b)$$

Plus exactement, nous avons effectué la somme sur l'orientation des spins, ce qui revient simplement, pour le système considéré ici, à multiplier les populations et les cohérences par un facteur 2 (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999).

La figure 17 représente les résultats donnés par le modèle collectif pour une valeur de champ couplant les niveaux $3s_0$ et $3p_0$: $\tilde{F}_{3p_0} = 0,178$ (voir Chap.I§A-III-2-b), sachant que $1 \text{ u.a.} = 5,142 \cdot 10^9 \text{ V.cm}^{-1}$. L'origine du temps est le moment où l'électron est capturé et l'axe de temps est gradué en u.a. ($1 \text{ u.a.} = 2,419 \cdot 10^{-17} \text{ s}$).

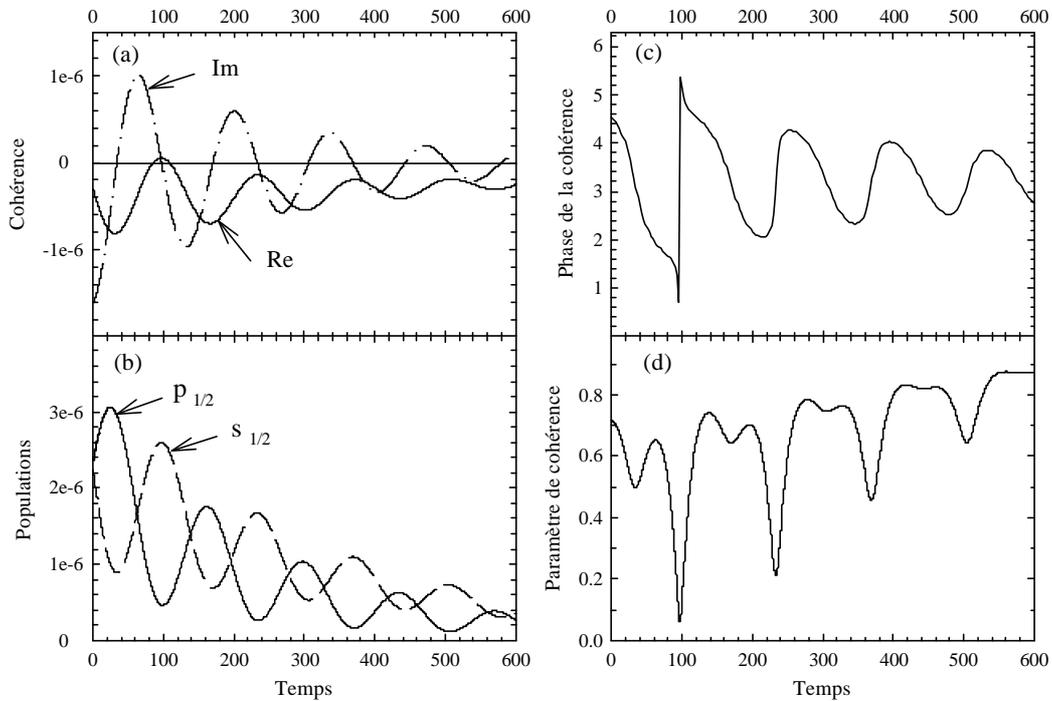


Figure 17 : Evolution dans le temps des populations $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ ainsi que de la cohérence entre ces états pour un projectile Kr^{35+} à $v=35,6 \text{ u.a.}$ soumis à un champ égal à $0,178 \text{ u.a.}$ dans le cadre du modèle à 2 niveaux.

En plus du caractère décroissant lié à la désexcitation radiative, les populations et la cohérence oscillent à la même fréquence (figures 17-a et 17-b). Cette fréquence dépend -pour un Lamb Shift donné- du couplage Stark ω_s . L'effet radiatif se traduit par une perte de cohérence (figure 17-a) ou l'atténuation progressive des structures périodiques du paramètre de cohérence (figure 17-d). La phase de la cohérence, en accord avec la valeur des parties réelle et imaginaire de la figure 17-a, part d'une valeur située dans le 3^{ème} quadrant puis diminue, traverse la valeur 0 pour finir par osciller autour de π .

Nous retiendrons donc que toutes ces variables ont un caractère pseudo-périodique dont la fréquence dépend du couplage Stark ω_s , et l'atténuation est due à la désexcitation radiative.

ii) Évolution de la matrice densité intégrée

Expérimentalement, nous n'avons pas accès aux variables décrites précédemment. Nous pouvons mesurer les populations via leur désexcitation radiative, par spectroscopie X de haute résolution. Le nombre de photons émis est donné par les éléments diagonaux intégrés et moyennés de la matrice densité (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999). Par exemple, pour l'état "i" :

$$\tilde{\sigma}_{ii}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T dt_1 \left[\Gamma_i \int_0^{t_1} dt \sigma_{ii}^I(t) + \Gamma_i \int_{t_1}^{\infty} dt \sigma_{ii}^E(t) \right] \quad (137)$$

où T est le temps de transit à travers la cible et dépend donc de l'épaisseur de celle-ci, et les exposants "I" et "E" signifient que la matrice densité est alors celle du projectile à l'intérieur de la cible ou bien à l'extérieur (et dans ce dernier cas, il n'y a plus de couplage au champ de sillage pour décrire son évolution).

L'évolution en fonction du temps de transit dans la cible de ces quantités est donnée par la figure 18. On notera que la somme des populations $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ est constante puisque ce sont précisément les photons issus des désexcitations que nous comptons ici. Nous pouvons voir que les procédures de moyennage et d'intégration ont considérablement amorti les structures périodiques de la figure 17-b mais que le caractère oscillant persiste pour les faibles temps de transit.

Ces oscillations, visibles sur des observables (population des états $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ dans cet exemple) sont caractéristiques de la réponse collective des électrons de la cible solide. Il est intéressant d'étudier leur sensibilité aux variations du champ et des conditions initiales.

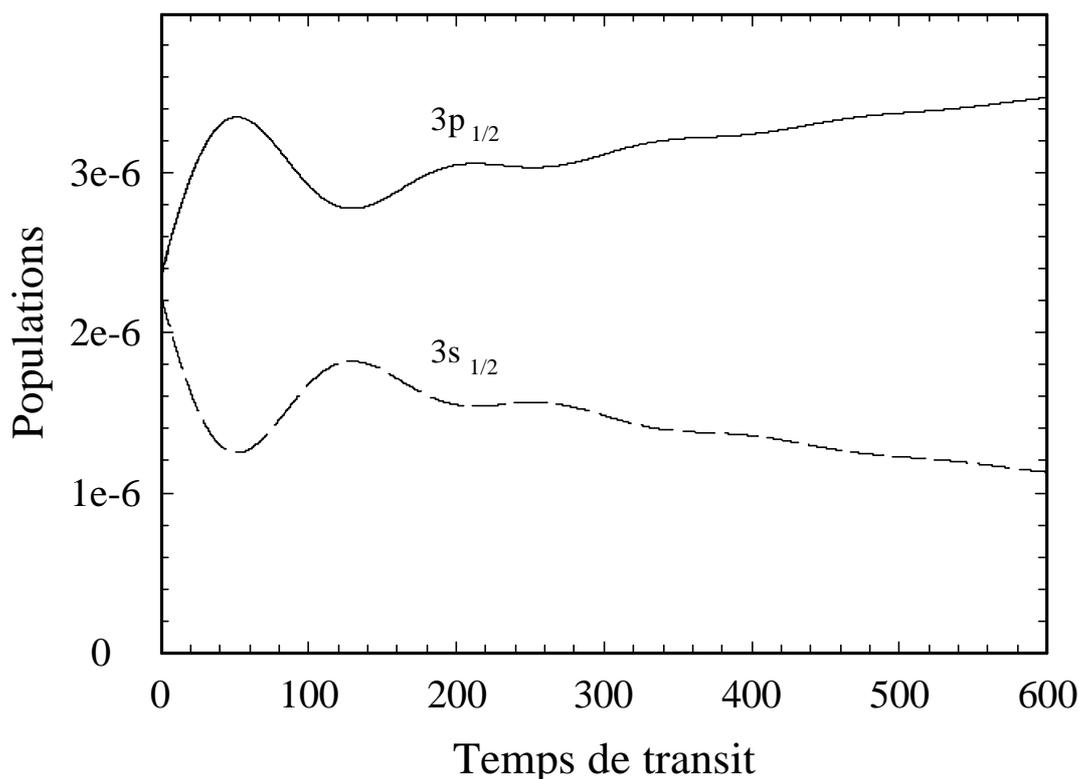


Figure 18 : Populations $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ intégrées, pour un projectile Kr^{35+} à $v = 35,6$ u.a., soumis à un champ égal à $0,178$ u.a. dans le cadre du modèle à 2 niveaux.

ii) Sensibilité aux conditions initiales en terme de cohérence et aux variations du champ

Nous avons choisi d'étudier la sensibilité du rapport des populations $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ plutôt que de chacune des populations en valeur absolue, car expérimentalement cela permet de s'affranchir de certaines sources d'incertitude.

Les sections efficaces du processus de peuplement (CDW), bien qu'imparfaitement connues ($\sim 20\%$ d'erreur relative) ont été fixées à leur valeur théorique, en tenant compte des cascades provenant de la désexcitation radiative des niveaux supérieurs, eux-mêmes peuplés par les sections efficaces CDW jusqu'à $n = 10$, et suivant une loi de décroissance en $1/n^3$ au delà. Pour fixer les idées, les cascades provenant des niveaux de $n > 3$ augmentent les populations de $3s$ et $3p$ de 18% et 33% respectivement.

Par contre, des mesures précédentes des cohérences en $n = 3$ sur $H^+ \rightarrow He$ à des énergies de collision variant de 20 à 100 keV (Ashburn, Cline, van der Burgt *et al.*, 1990) ont montré de nets désaccords avec les valeurs CDW. Nous avons donc choisi de faire varier la

cohérence ou plus exactement le paramètre de cohérence et la phase (expression (136)). La figure 19 montre l'effet de ces variations, ainsi que celles du champ. Pour plus de clarté, un seul de ces 3 paramètres varie dans chacune des figures 19-a, 19-b, 19-c.

Cette étude montre que ces 3 paramètres ont des effets spécifiques sur l'évolution du rapport :

- la phase de la cohérence joue à la fois sur l'amplitude des battements, la pente à l'origine et la valeur asymptotique du rapport
- le paramètre de cohérence est impliqué dans l'amplitude du battement et la valeur asymptotique du rapport
- enfin, le champ électrique agit principalement sur la période des battements.

Nous voyons donc que dans le cadre de ce modèle, le type d'observable "rapport des populations des niveaux de structure fine" possède une certaine sensibilité au processus de peuplement et à la réponse collective du milieu. Dans le paragraphe suivant, je vais présenter les principaux résultats déjà obtenus dans le passé grâce à ce modèle très simple.

c) Acquis du modèle collectif

Une comparaison du modèle avec des résultats expérimentaux a été faite dans l'équipe (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998) pour le projectile Kr^{35+} à $v = 35,6$ peuplés par capture dans des cibles de carbone et de cuivre.

La trop grande simplicité du modèle à 2 niveaux nous empêche d'être conclusif quant aux valeurs de cohérence CDW, mais par contre le fait que la fréquence des battements ne dépende que du champ a permis d'extraire des valeurs de fréquence plasma pour chacune des cibles.

Pour le carbone, la fréquence plasma effective extraite ($\omega_p = 24$ eV) est en accord avec les mesures de pouvoir d'arrêt et les calculs (Echenique, Garcia de Abajo, Ponce *et al.*, 1995) effectués en prenant en compte seulement les électrons de valence de la cible.

Dans le cas du cuivre, la fréquence plasma effective extraite est de 48 eV, ce qui correspond là encore à la valeur du pouvoir d'arrêt des projectiles dans le cuivre, mais qui est bien supérieure à la valeur correspondant aux seuls électrons de valence : 19,9 eV (Powell, 1960). Les calculs postérieurs de Fuhr et Ponce (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998) (voir Chap.I§A-III) qui prennent en compte les électrons internes de la cible mènent à une valeur de 46,4 eV, en accord avec celle extraite à partir du modèle à 2 niveaux.

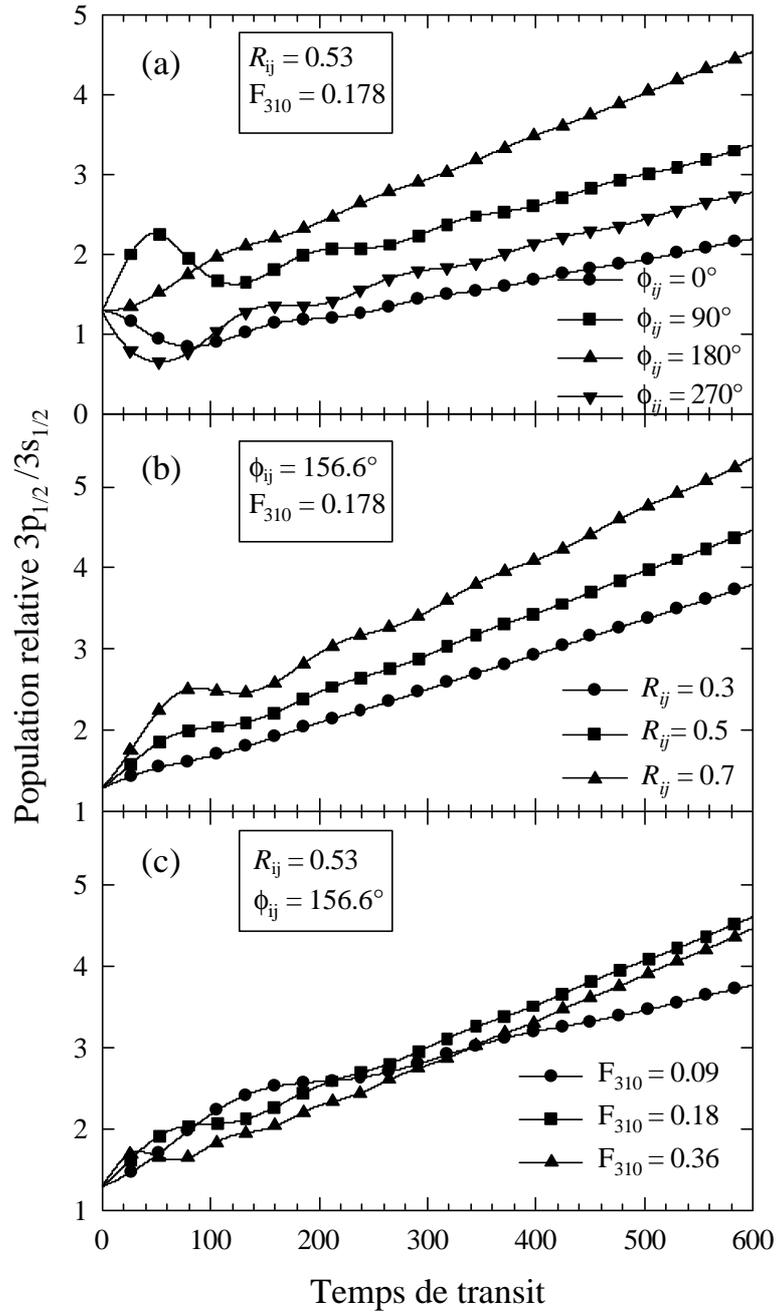


Figure 19 : Sensibilité aux conditions initiales et au champ de l'évolution avec le temps de transit du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ pour un projectile Kr^{35+} à $v = 35,6$ u.a., dans le cadre du modèle à 2 niveaux.

3°) Résolution de l'équation pilote

a) Présentation du programme

J'ai collaboré au développement d'un programme résolvant le système d'équations (130) et (131). Dans sa version actuelle, le programme traite tous les états $|n, \ell, j, m_j\rangle$ jusqu'à $n = 6$,

soit 91 populations ($\sum_{n=1}^N n^2 = \frac{N(N+1)(2N+1)}{6}$, $N = 6$) et 110 cohérences complexes **non**

nulles correspondant aux règles de sélection $\Delta n = 0$ et $\Delta m_j = 0$. On résout donc numériquement un système de 622 équations différentielles couplées : 2 x 91 pour les populations intégrées ou non intégrées plus 2 x 220 pour les parties réelles et imaginaires des cohérences intégrées ou non intégrées.

Examinons la pertinence des règles de sélection $\Delta n = \Delta m_j = 0$ pour les cohérences. Dans le but de comparer les résultats théoriques et expérimentaux, nous nous intéressons principalement à l'évolution des populations (131). Or le terme de couplage de l'évolution de la population σ_{aa} avec la cohérence σ_{ac} , $c \neq a$, est égal à $i\omega_s(c,a)[\sigma_{ac}(t) - \sigma_{ca}(t)]$. Donc ce terme est négligeable si $\omega_s(c,a)$ ou $(\sigma_{ac} - \sigma_{ca})$ est très petit. Dans l'approximation dipolaire, nous avons vu que $\omega_s(c,a) = 0$ si $\Delta m_\ell \neq 0$ et $\Delta \ell \neq \pm 1$. Or l'hamiltonien dipolaire est indépendant du spin et impose donc $\Delta m_s = 0$. Cela conduit à la règle de sélection $\Delta m_j = 0$.

De plus, nous avons vu lors du calcul des processus collisionnels par une méthode perturbative (voir par exemple l'expression (51) et la discussion du Chap.I§A-II-1-b-i) que les cohérences du processus de peuplement sont nulles entre des niveaux non quasi-dégénérés. Cela implique que pour les couches internes, les cohérences $\sigma_{ab}(0)$ entre niveaux a et b de nombres quantiques principaux n différents sont nulles.

A ce stade, nous faisons deux hypothèses supplémentaires :

- cette proposition reste vraie jusqu'à $n = 6$.
- l'évolution des cohérences dans la cible est telle que pour ces états on a $\sigma_{ab}(t) = 0$ à tout instant t.

Ces hypothèses sont supportées par des considérations physiques : le champ de sillage peut coupler 2 états de façon significative seulement si l'élément de couplage $\omega_s(a,b)$ est au moins du même ordre de grandeur que leur écart énergétique ω_{ab} . Le couplage Stark est nul si (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999) :

$$|\omega_s(a, b)| \ll \frac{\omega_{ab}}{2}. \quad (138)$$

Or nous avons déjà vu (Chap.I§A-V-2-b) que la condition de validité (129-a) de l'approximation des vitesses indépendantes implique cette condition (138) pour des états de n différents. Donc en nous plaçant dans le cadre de l'approximation des vitesses indépendantes, nous fixons obligatoirement à 0 les cohérences entre états **de n différents**, ce qui valide la règle de sélection $\Delta n = 0$ sur les cohérences.

L'étude des résultats théoriques de ce modèle va faire l'objet des paragraphes suivants. Le modèle sera alors appliqué à des systèmes ayant déjà fait l'objet d'études expérimentales, c'est à dire $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$ (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998) et $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$ (Lamour, 1997; Lamour, Vernhet, Rozet *et al.*, 2001). Les résultats relatifs au système faisant l'objet du travail expérimental de ma thèse ($\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$, $v = 46,95$) seront exposés avec les résultats expérimentaux au chapitre III.

Il convient de s'assurer ici que la condition de validité (138) (qui est aussi la condition (129-a)) est vérifiée pour les états de n différents des systèmes typiques que l'on sera amené à traiter : krypton hydrogénéoï de dans carbone à $v = 35,6$ et $v = 46,95$, et argon hydrogénéoï de dans carbone à $v = 23$. Dans le tableau V, je compare les ordres de grandeur des éléments de couplage Stark linéaire dans une couche de n donné, avec celui de l'écart énergétique entre 2 couches consécutives pour ces systèmes.

Il faut préciser que l'ordre de grandeur de l'élément de couplage Stark linéaire pour un nombre quantique n d'un projectile Z_p est donné par la moitié de l'écart maximum au sein de la couche n entre les énergies propres de l'ion hydrogénéoï de en présence du champ électrique F . Cet écart est donné par (Bethe and Salpeter, 1977) :

$$2\omega_s \approx \frac{3F n(n-1)}{Z_p}. \quad (139)$$

On prendra ici comme valeur de F la valeur F_0 du champ au niveau du noyau projectile calculé par la relation (100). Cela tend à surestimer le terme $2\omega_s$ (voir figure 12). $F_0 = 0,197$ et $F_0 = 0,130$ pour Kr^{35+} à $v = 35,6$ et $v = 46,95$ dans le carbone et $F_0 = 0,207$ pour Ar^{17+} à $v = 23$ dans le carbone. L'ordre de grandeur de l'écart énergétique entre 2 couches consécutives d'un ion hydrogénéoï de de nombre de charge Z_p est donné par :

$$|\Delta E_n| = |E_n - E_{n+1}| = \frac{Z_p^2}{2} \frac{2n+1}{n^2(n+1)^2}. \quad (140)$$

n	Kr – C v = 35,6		Kr – C v = 46,95		Ar – C v = 23	
	$ \Delta E_n $	$2\omega_s$	$ \Delta E_n $	$2\omega_s$	$ \Delta E_n $	$2\omega_s$
2	90	0,03	90	0,02	22,5	0,07
3	31,5	0,1	31,5	0,07	7,9	0,2
4	14,6	0,2	14,6	0,1	3,6	0,4
5	7,9	0,3	7,9	0,2	2,0	0,7
6	4,8	0,5	4,8	0,3	1,2	1,0

Tableau V : Comparaison des couplages Stark et des écarts énergétiques en u.a. entre couches de n différents, pour le krypton hydrogénoï de $v = 35,6$ u.a. et 46,95 u.a. et l'argon hydrogénoï de $v = 23$ u.a. dans le carbone.

Nous voyons que les systèmes krypton-carbone sont tout à fait dans le domaine de validité jusqu'à $n = 6$.

Cela est vrai pour l'argon jusqu'à $n = 5$ (en pratique, la différence de Z_p entre Kr et Ar se manifeste par un décalage de $n = 1$ sur les effets auxquels on s'intéresse entre ces 2 projectiles) et pour $n = 6$ dans une moindre mesure.

Nous pouvons donc considérer que le modèle respecte les conditions de validité jusqu'à $n = 6$ pour les systèmes étudiés. Nous verrons au paragraphe suivant qu'une convergence acceptable des résultats est atteinte si on inclut tous les états jusqu'à $n_{\max} = 6$ en ce qui concerne l'étude des états internes ($n \leq 3$) de ces systèmes de collisions. Nous avons donc choisi de ne pas introduire les couches $n > 6$.

Enfin, il faut préciser qu'aucune cohérence collisionnelle $R_{abcc}^{(col)}$ n'est prise en compte dans (130) hormis pour le processus primaire de peuplement. Mis à part ce processus, donc, le seul rôle "cohérent" des collisions est le dépeuplement via $\Gamma_{ab}^{(col)}$. Par contre toutes les sections efficaces d'excitation sont introduites jusqu'à $n = 6$, quels que soient Δn , $\Delta \ell$, Δj et Δm_j mis en jeu.

Les sections efficaces collisionnelles sont ici aussi calculées dans le cas ion/atome plutôt que ion/solide, et on peut avoir la même discussion qu'au Chap.I§A-V-1-a-ii. On peut simplement ajouter ici que les électrons externes des atomes cibles sont impliqués dans le potentiel de sillage et qu'en plus du problème du "potentiel solide" statique discuté dans ce paragraphe, il apparaît le problème d'écrantage dynamique. Il est par exemple possible de compter artificiellement deux fois la contribution des électrons externes de la cible : une

première fois lors du calcul des sections efficaces (principalement d'excitation intracouche où l'antiécranage est prépondérant), et une deuxième fois lors de la prise en compte du champ de sillage. En l'absence d'arguments quantitatifs, la discussion reste ouverte.

Signalons pour finir que le programme calcule tous les rapports de branchement non relativistes et toutes les largeurs radiatives des niveaux dans la base $\{n\ell jm_j\}$.

b) Convergence des résultats quand n_{\max} augmente

La figure 20 montre les résultats obtenus pour les populations np ($n = 2, 3, 4$) et $2s$ en traitant tous les états jusqu'à $n = n_{\max}$ pour le système $Ar^{18+} \rightarrow C$, $v = 23$, le processus primaire étant la capture (valeurs CDW), la fréquence plasma du carbone est prise égale à 1,07, et l'extension spatiale du champ est prise en compte. Cette figure est équivalente à la figure 14 qui avait été faite pour le modèle collisionnel. Le comportement est sensiblement le même que celui qu'on avait observé alors. Notons que la prise en compte de tous les processus collisionnels (pas seulement limités à $\Delta n = 1$ pour l'excitation intercouche en particulier) et du couplage avec le champ de sillage augmente l'influence des états de n supérieur à celui qu'on observe. Disons que de façon générale, l'essentiel de l'évolution d'un état d'une couche n particulière est donné lorsqu'on traite les états jusqu'à $n+2$.

La figure 21 montre les mêmes observables, ainsi que la population $5p$, pour le système $Kr^{36+} \rightarrow C$, $v = 35,6$, le processus primaire étant la capture (valeurs CDW), la fréquence plasma du carbone est prise égale à 1,07, et l'extension spatiale du champ est prise en compte. On peut ici observer le même comportement général que sur la figure 20, relative à l'argon. On notera néanmoins deux faits intéressants qui l'en distinguent : premièrement, la dynamique du transport pour ce système est plus lente car le projectile est plus lourd et donc les écarts entre les niveaux d'énergie sont plus grands alors que les grandeurs caractéristiques du mélange restent du même ordre de grandeur (voir par exemple les comparaisons de $2\omega_s$ dans le tableau V). Deuxièmement, la forme de l'évolution de la population $2s$ ressemble beaucoup à celle observée sur la figure 14 qui montre une courbe caractéristique (système $Ar^{18+} \rightarrow C$), où seuls les effets collisionnels sont pris en compte. Ce deuxième point s'explique bien puisque, d'une part, le champ ne couple pratiquement pas les états de $n = 2$ dans le cas du krypton (voir tableau V, et le paragraphe e) de ce chapitre), et d'autre part, l'état $2s$ ne reçoit pas suffisamment de cascades pour ressentir l'effet du champ de sillage sur les états de n supérieurs.

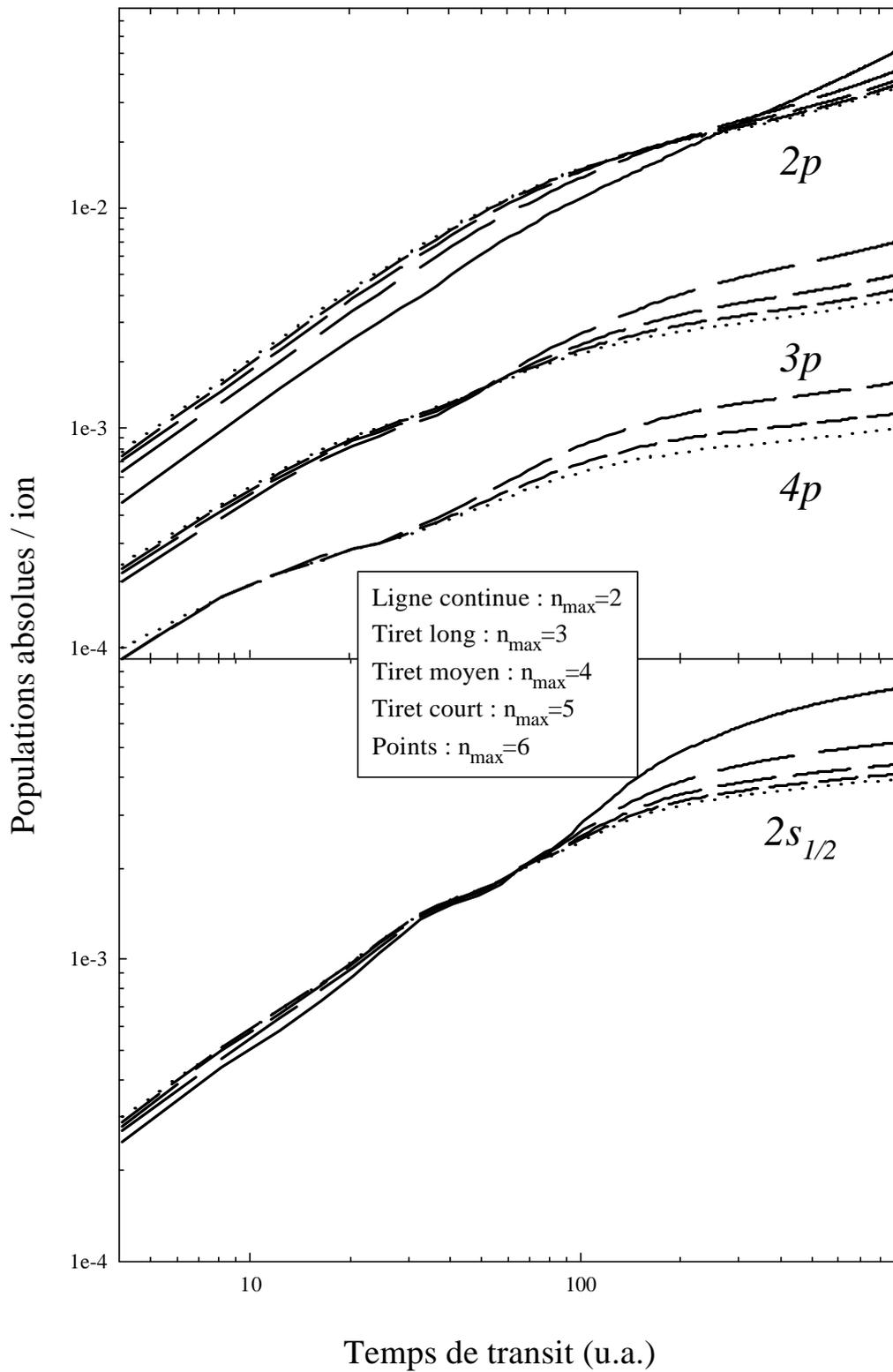


Figure 20 : Variation des populations np et $2s$ du système Ar^{18+} @ C ($v = 23$ u.a.), en fonction du niveau maximum n_{\max} des couches traitées dans le cadre du modèle d'équation pilote.

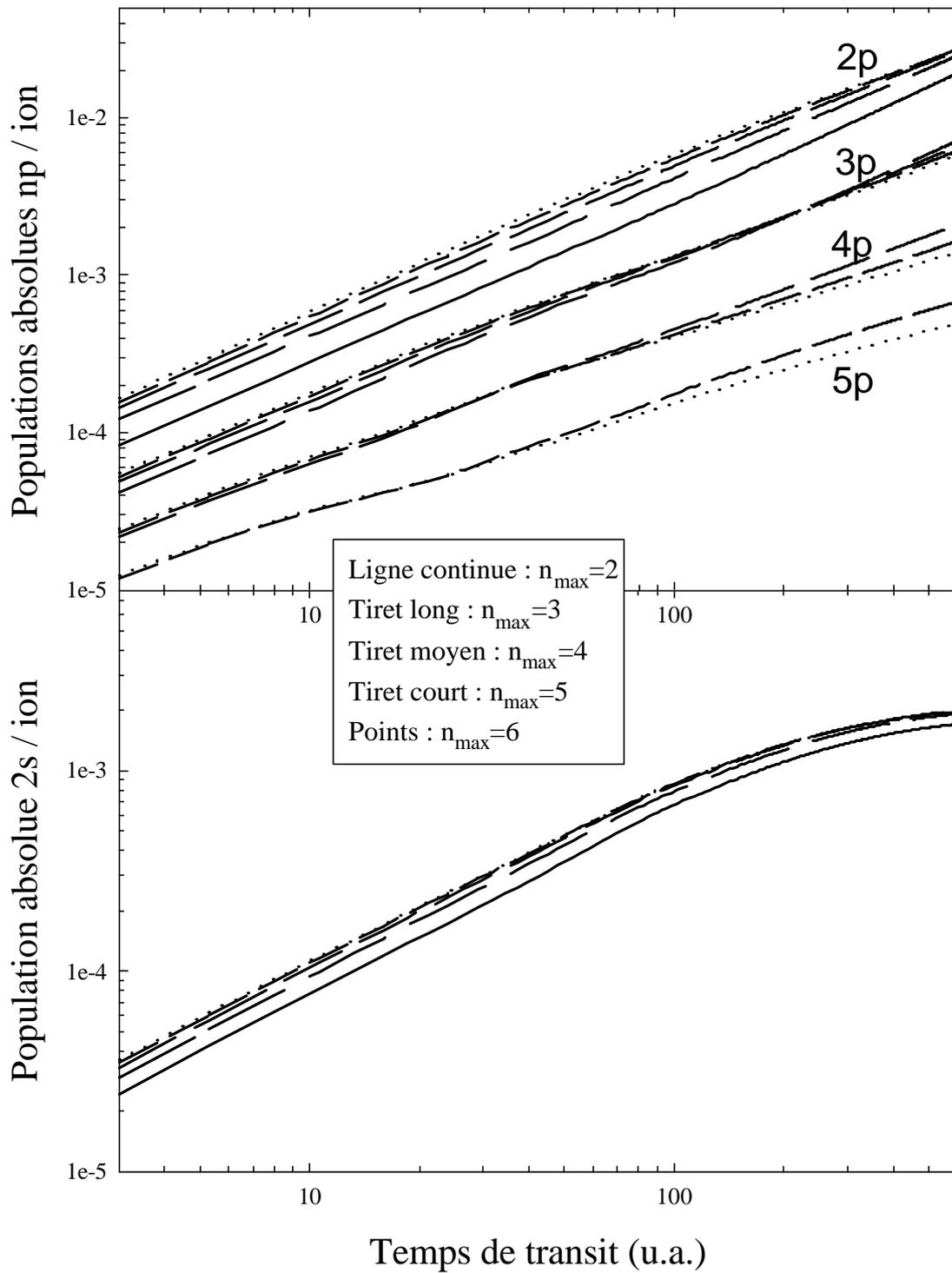


Figure 21 : Evolution des populations absolues np ($n = 2, 3, 4, 5$) et $2s$ prédites par le modèle d'équation pilote pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35, 6$ u.a. en fonction du niveau n_{max} des couches traitées.

Notons aussi que l'influence des états supérieurs est différente suivant le nombre quantique n de l'état considéré n_p : pour $n=2$ et 3 , cette influence est surtout marquée aux faibles temps de transit, tandis que pour $n=4$ et 5 elle est principalement visible aux grands temps de transit. Ce comportement illustre l'intervention de 2 contributions différentes, les cascades radiatives d'une part, et l'excitation intercouche et l'ionisation d'autre part:

- La contribution des cascades est visible essentiellement aux faibles temps de transit, comme nous le verrons lors de l'étude plus détaillée faite au Chap.III§I. De plus la proportion de cascades sur l'état n_p diminue quand n augmente, jusqu'à devenir négligeable sur l'état $5p$. C'est pourquoi cette population est quasiment insensible à l'introduction de la couche $n=6$ aux faibles temps de transit.

- L'ionisation et l'excitation intercouche par contre ont des effets sensibles principalement aux grands temps de transit. Lorsque n augmente, les niveaux sont de plus en plus proches et l'excitation intercouche de plus en plus intense. Par conséquent, l'introduction de niveaux supérieurs dans le programme ouvre des voies de dépeuplement d'un niveau n_p d'autant plus efficaces que n est grand. C'est pourquoi une variation de n_{\max} influe davantage sur les niveaux $4p$ et $5p$ que sur $2p$ et $3p$ aux grands temps de transit.

A la lumière des figures 20 et 21, nous voyons que de façon générale, ces observables sont moins sensibles aux états supérieurs pour le projectile krypton que pour le projectile argon.

Enfin la figure 22 montre les résultats obtenus pour le même système, mais en ce qui concerne les populations relatives $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$. Ici encore, on voit qu'il est important, pour les observables de la couche $n = 3$, de prendre en compte au minimum les couches $n = 4$ et $n = 5$. Dans le cas du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, nous voyons que le gain obtenu en ajoutant la couche $n = 6$ est sensible particulièrement pour les grands temps de transit et a pour effet d'augmenter la pente de la courbe dans cette région, alors qu'aux faibles valeurs de temps de transit, cela n'a aucune incidence. Nous pourrions donc faire des comparaisons quantitatives avec l'expérience dans cette région des faibles temps de transit. Dans le cas du rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, l'effet le plus visible se situe au maximum de la courbe ($T \sim 170$) et le passage de n_{\max} de 3 à 4, 4 à 5, et 5 à 6 entraîne un abaissement de ce maximum d'environ 10%, 5% et 2% respectivement.

Notons qu'une série "d'interrupteurs" nous permet de contrôler les termes intervenant effectivement dans le programme. On peut par exemple annuler artificiellement les processus

collisionnels, tous ou certains couplages Stark, et la désexcitation radiative. En plus de l'étude précédente, cela nous a par exemple permis de voir que la première oscillation très rapide du rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ provient des couplages Stark entre états tels que $\Delta j = 1$.

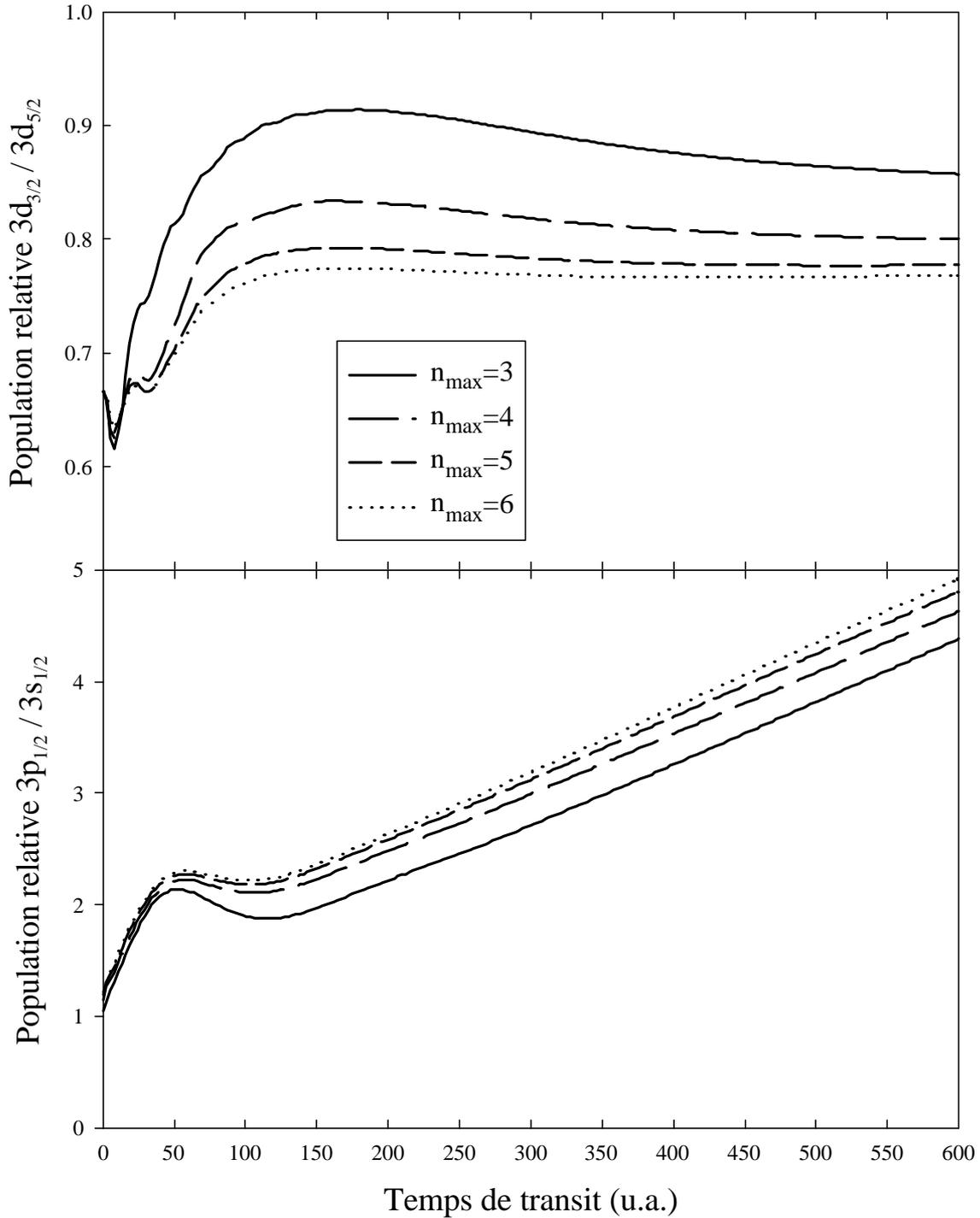


Figure 22 : Evolution des populations des sous-états de structure fine prédites par le modèle d'équation pilote pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. en fonction du niveau maximum n_{max} des couches traitées.

c) Dépendance vis à vis des conditions initiales

i) Dépendance vis à vis des populations

Le modèle purement collisionnel présenté au Chap.I§A-V-1 est sensible aux populations initiales, et le modèle d'équation pilote doit vraisemblablement conserver cette dépendance. Cependant, nous ne disposons de plusieurs jeux complets de conditions initiales que dans le cas du système $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$, $v = 46,95$, et nous discuterons donc cette dépendance lors de l'étude de ce système, au chapitre III.

ii) Dépendance vis à vis de la phase des cohérences

La figure 23 illustre la variation des résultats concernant le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ du krypton sur carbone à $v = 35,6$ lorsqu'on fait varier la phase de la cohérence de peuplement entre états $|3s0\rangle$ et $|3p0\rangle$ (en base $n\ell m$), alors que les populations de peuplement et les autres cohérences sont celles données par CDW. Dans ce calcul $n_{\max} = 6$, et la dépendance spatiale du champ discutée au Chap.I§A-III-2-b a été prise en compte. La fréquence plasma du milieu vaut 29,1 eV (1,07).

On retrouve le même comportement que celui observé par le modèle collectif appliqué au système à 2 niveaux (fig. 19-a). Même si l'ajout des processus collisionnels brouille considérablement les oscillations observées sur le modèle simplifié (seule la première subsiste), l'évolution des populations des états de structure fine ainsi que la valeur asymptotique du rapport restent sensibles aux valeurs initiales de la phase.

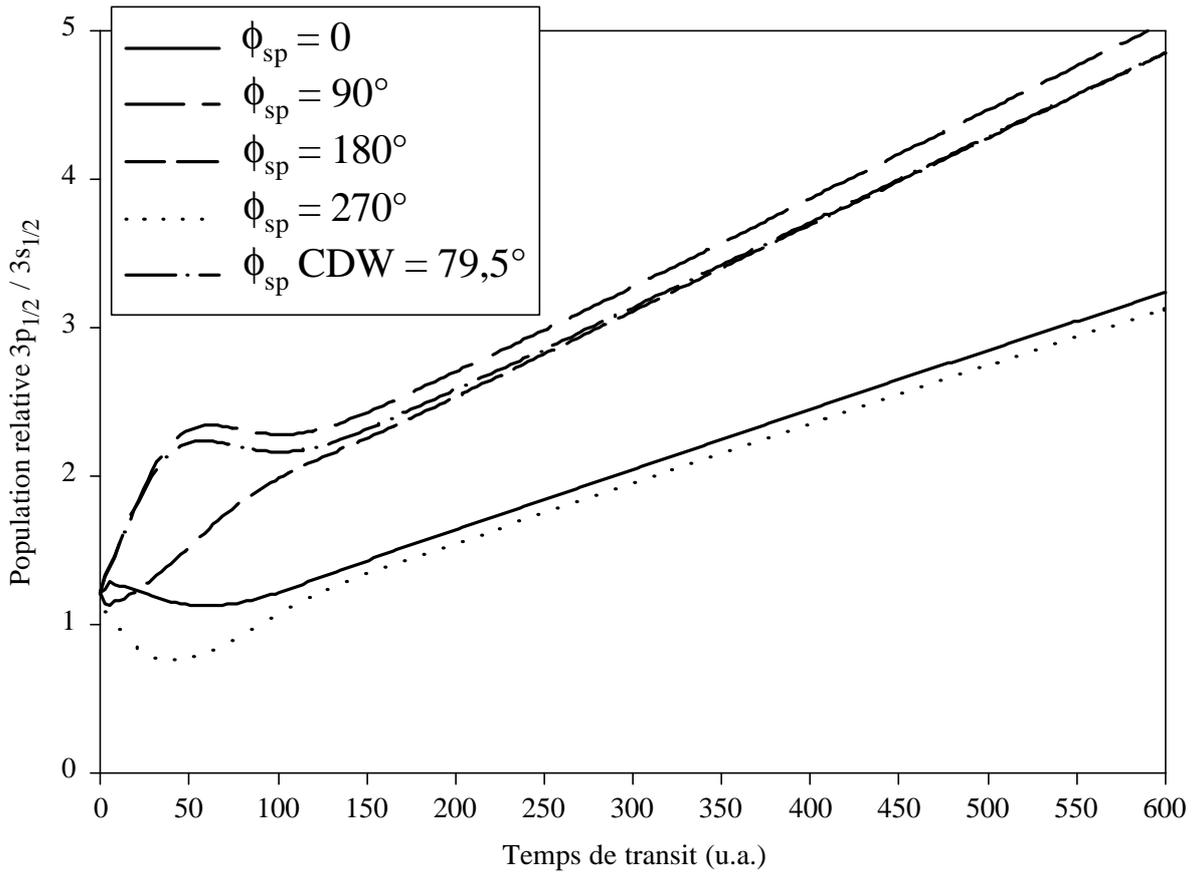


Figure 23 : Evolution des rapports de population $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ prédite par le modèle d'équation pilote pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a., en fonction de la phase de cohérence $3\phi_0$.

d) Dépendance vis à vis de la fréquence plasma de la cible

La figure 24 montre l'évolution des mêmes observables que celles de la figure 22, mais en faisant varier la fréquence plasma entre la valeur représentative d'une cible de carbone 29,1 eV (1,07) comme sur les figures 21 et 22, et 42 eV (1,54) choisie ici arbitrairement. La première valeur correspond à un champ de 0,25 au niveau du projectile, et 0,50 pour la deuxième. La dépendance spatiale du champ est prise en compte, et les conditions initiales sont celles données par CDW. Nous voyons, comme dans le cas du modèle simplifié à 2 niveaux, que la fréquence plasma influe sur la dynamique de l'oscillation. Il est difficile ici de parler en termes de pseudo-période car l'introduction de tous les niveaux jusqu'à $n = 6$ et des processus collisionnels "écrase" les oscillations. Par contre le maximum de $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ est atteint beaucoup plus rapidement quand le champ augmente. De même cette dynamique élevée "donne le temps" au rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ d'atteindre un maximum bien marqué.

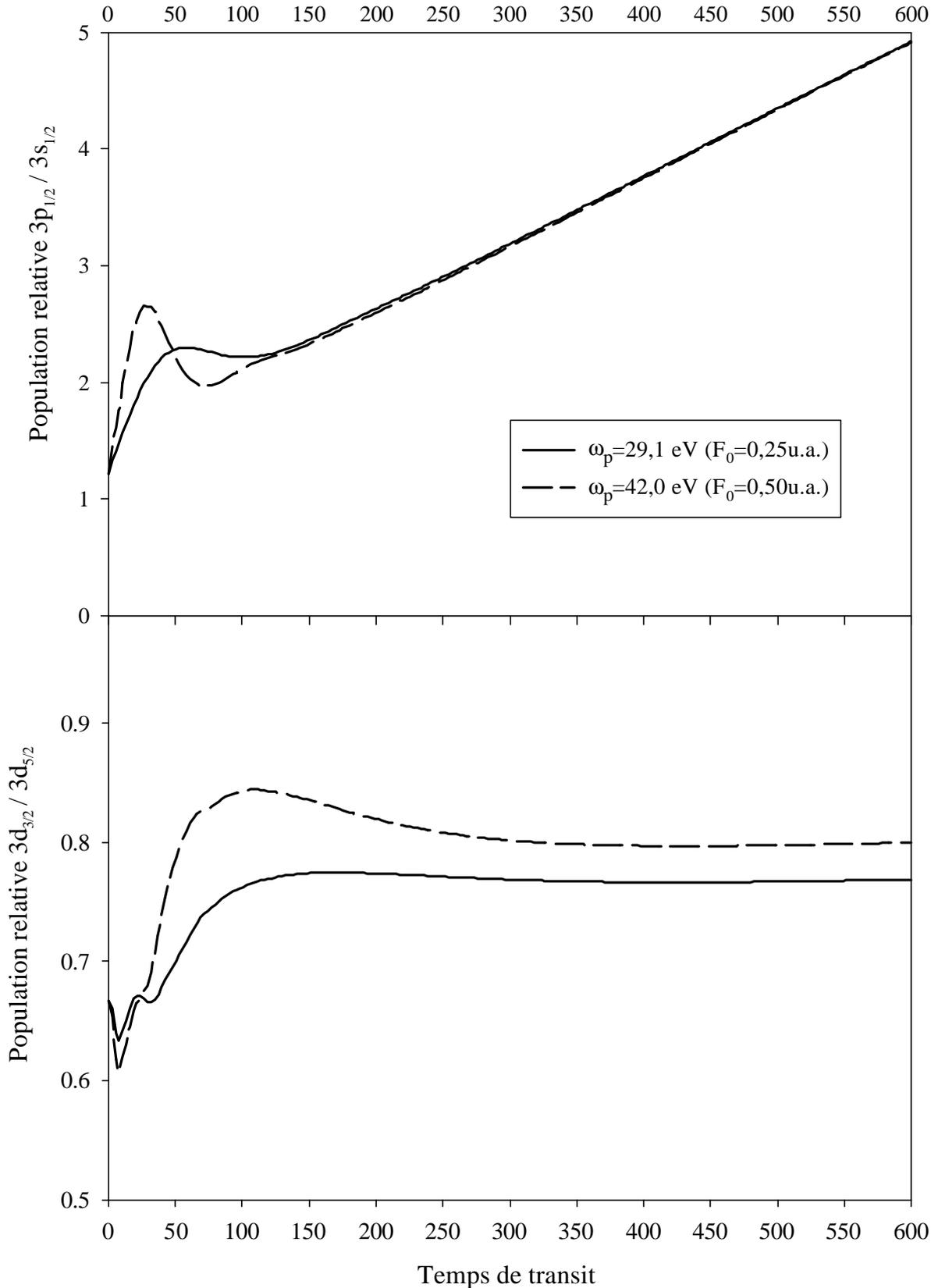


Figure 24 : Evolution des populations des sous-états de structure fine prédite par le modèle d'équation pilote pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. en fonction de la fréquence plasma du milieu.

Remarquons enfin que pour ce rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, contrairement à $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, la valeur asymptotique dépend aussi du champ.

e) Dépendance vis à vis de la prise en compte du couplage Stark dans des couches de n croissant

Sur les figures 25 et 26 on montre encore les mêmes observables mais cette fois-ci nous gardons $n_{\max}=6$ et branchons artificiellement le champ de sillage sur des états appartenant à des couches de plus en plus élevées. Pour $NSta = 0$ aucun état n'est soumis au champ de sillage ce qui correspond à l'évolution purement collisionnelle, pour $NSta = 2$ le champ est introduit pour les états des couches $n = 1$ et $n = 2$, et ainsi de suite jusqu'à $NSta = 6$. Les conditions initiales sont celles données par CDW, la dépendance spatiale du champ est incluse et la fréquence plasma, qui s'avère peu différente pour les deux systèmes collisionnels lorsqu'on la calcule avec l'expression (100) du Chap.I§A-III-2-b, est fixée à 1,07.

Sur la figure 25 concernant le système $Kr^{36+} \rightarrow C$ nous voyons que l'introduction de $NSta = 2$ ne change pratiquement rien par rapport à $NSta = 0$. En effet les courbes correspondantes sont très proches pour le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, et confondues pour le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$. L'écart énergétique minimum en $n = 2$ pour le krypton hydrogénoïde est le Lamb-Shift égal à 0,063 tandis que le couplage Stark est de l'ordre de 0,03 (Tableau V), donc inférieur. Nous comprenons donc pourquoi l'effet du champ de sillage est négligeable en $n = 2$. Par contre l'effet est visible en $n = 3$, puisque l'écart énergétique entre $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ vaut 0,019 et celui entre $3p_{3/2}$ et $3d_{3/2}$ vaut 0,002, à comparer à $2\omega_s \approx 0,1$. Nous remarquons aussi que les observables de $n = 3$ sont principalement décrites dès que l'on prend $NSta = 3$. L'évolution du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ ne dépend que très peu des effets du champ de sillage sur les états de n supérieur, alors que le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ montre une dépendance plus marquée. En effet les niveaux $3dj$ reçoivent 100% des cascades Yraast (du type $n, n-1 \rightarrow n-1, n-2$) et dépendent donc plus de l'évolution des niveaux supérieurs que les états $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$. Néanmoins, le fait que ces observables soient surtout sensibles au couplage Stark dans la couche $n = 3$ peut permettre de tester les cohérences et le champ de sillage dans cette couche.

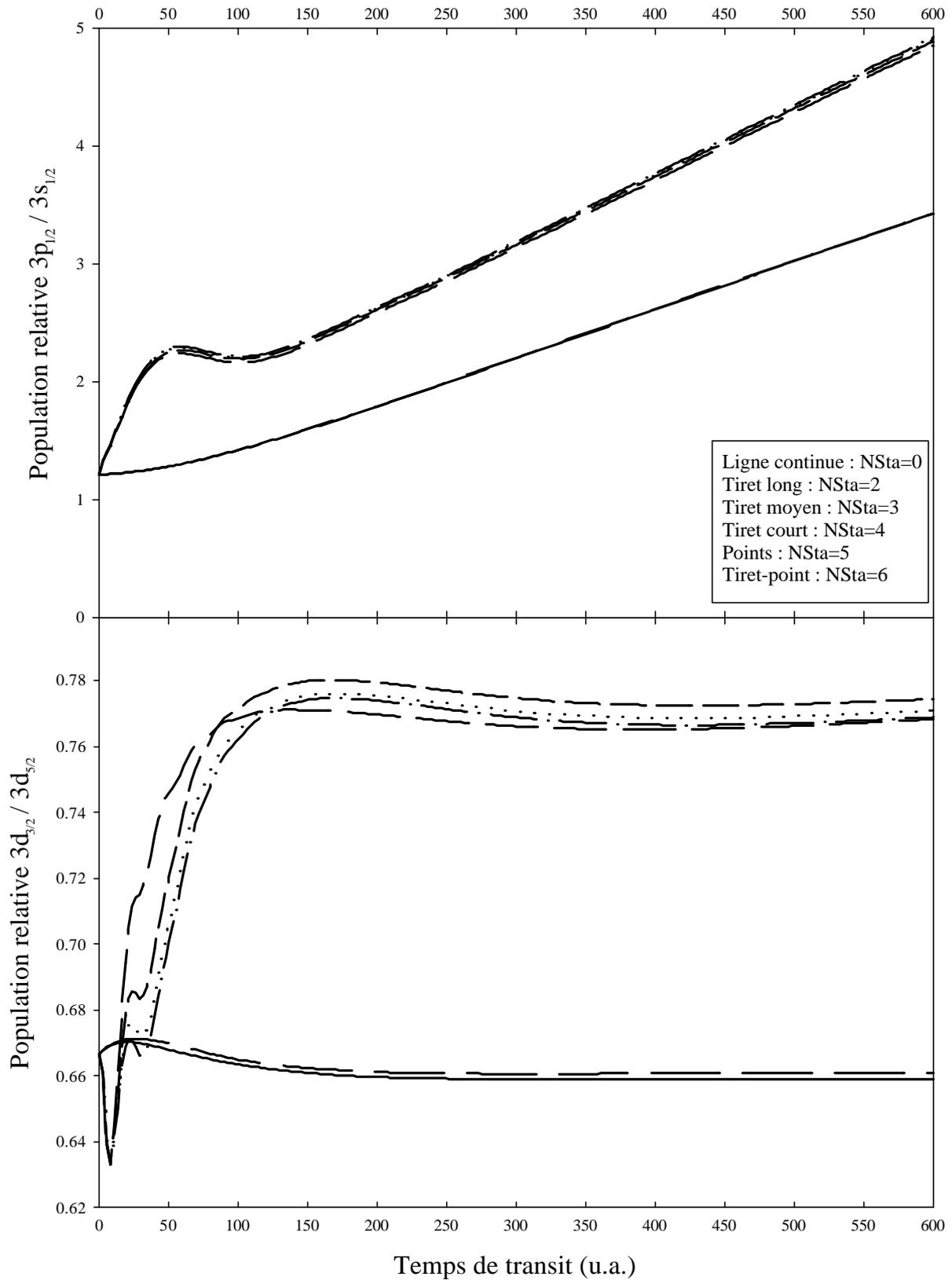


Figure 25 : Evolution des populations des sous-états de structure fine prédite par le modèle d'équation pilote pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. en fonction de NSta (voir texte).

La figure 26 concerne les populations absolues np et $2s$ pour le système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$, $v = 23$.

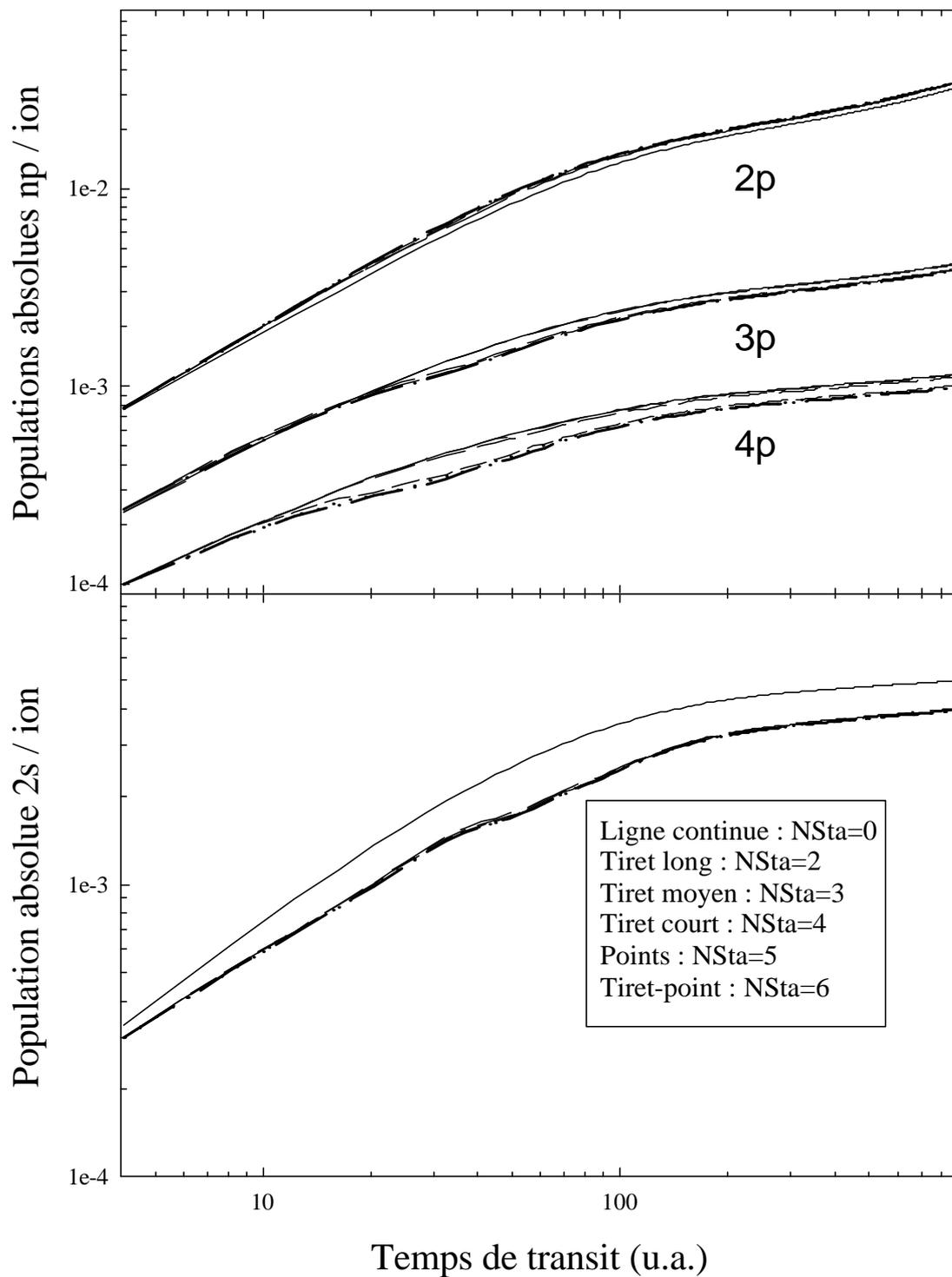


Figure 26 : Evolution des populations absolues np et $2s$ prédite par le modèle d'équation pilote pour le système $\text{Ar}^{18+} @ \text{C}$ à $v = 23$ u.a. en fonction de $N\text{Sta}$ (voir texte).

En ce qui concerne la population $2s$, qui est un état de structure fine, on remarque que la prise en compte du champ de sillage ($N_{Sta} \geq 2$) entraîne une nette différence sur l'évolution par rapport au cas sans champ ($N_{Sta} = 0$). Par contre, la convergence est très vite atteinte. Les courbes correspondant à $N_{Sta} = 2, 3, 4, 5$ et 6 sont presque confondues sur ce graphe en échelles logarithmiques.

Les populations np qui sont des sommes d'états de structure fine ($np_{1/2} + np_{3/2}$) sont moins sensibles au champ. De plus, l'effet principal sur l'évolution de la population " np " est décrit dès lors que l'on "branche" le couplage Stark sur le niveau " n " observé. Le fait de le brancher sur des couches de n inférieur ou supérieur n'influe pratiquement pas. Enfin, l'effet du couplage Stark augmente avec le nombre de sous-états d'une couche de n donné, donc avec n : en effet le mélange tend à répartir (statistiquement) les populations d'une couche n entre les états n, ℓ . Par exemple, en $n = 3$, la répartition se fait entre 3 sous-couches $3s, 3p$ et $3d$ et entraîne une certaine diminution de la population $3p$, alors qu'en $n = 4$, la répartition a lieu entre 4 sous-couches $4s, 4p, 4d$ et $4f$ et entraîne une diminution plus importante de la population $4p$.

4°) Comparaisons des 3 modèles

Avant de comparer les modèles, je rappelle leurs principales caractéristiques, exposées en détail dans chacune des parties qui leur est spécifiquement dédiée.

Le modèle collisionnel traite explicitement les états n, ℓ jusqu'à $n = 10$, et approximativement pour $n > 10$ grâce à des lois d'échelles de peuplement primaire et de désexcitation radiative. Cependant, les processus collisionnels ne sont pas tous présents (en particulier, l'excitation intercouche se limite aux transitions $\Delta n = \pm 1$) et le champ de sillage n'est pas pris en compte.

Le modèle collectif ou "à 2 niveaux" contient le processus primaire de peuplement (collisionnel), mais le transport n'est dû qu'au couplage avec le champ de sillage, traité dans l'approximation dipolaire et prenant en compte les variations spatiales du champ, ainsi que le déclin radiatif des niveaux considérés.

Le modèle d'équation pilote contient tous les processus collisionnels et dus au champ de sillage (traité dans l'approximation dipolaire et prenant en compte les variations spatiales du champ) agissant sur tous les niveaux de structure fine jusqu'à $n = 6$.

a) Evolution des populations absolues n_p

Je fais la comparaison de l'évolution des populations absolues n_p des systèmes $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$, et $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$, prédite par les modèles collisionnels et d'équation pilote. Le modèle à 2 niveaux a été spécifiquement développé pour étudier les rapports de population de structure fine et n'a bien sûr pas lieu d'apparaître ici.

Pour ces deux systèmes, le processus primaire est la capture (conditions initiales CDW) et la fréquence plasma du milieu vaut 1,07. La figure 27 montre cette comparaison.

Nous voyons que la sensibilité au champ pour les populations n_p existe mais reste très faible. Nous avons vu que ces observables sont plutôt sensibles aux conditions initiales des populations, qui sont plus ou moins bien décrites actuellement. Enfin, l'écart sur les valeurs absolues initiales des populations donne une idée de l'importance des cascades depuis les niveaux supérieurs, puisque le modèle collisionnel prend en compte explicitement tous les niveaux jusqu'à $n = 10$, et ceux de $n > 10$ via une loi d'échelle en $1/n^3$ pour le peuplement et en n^3 pour la durée de vie radiative, alors que le modèle d'équation pilote est limité à $n=6$.

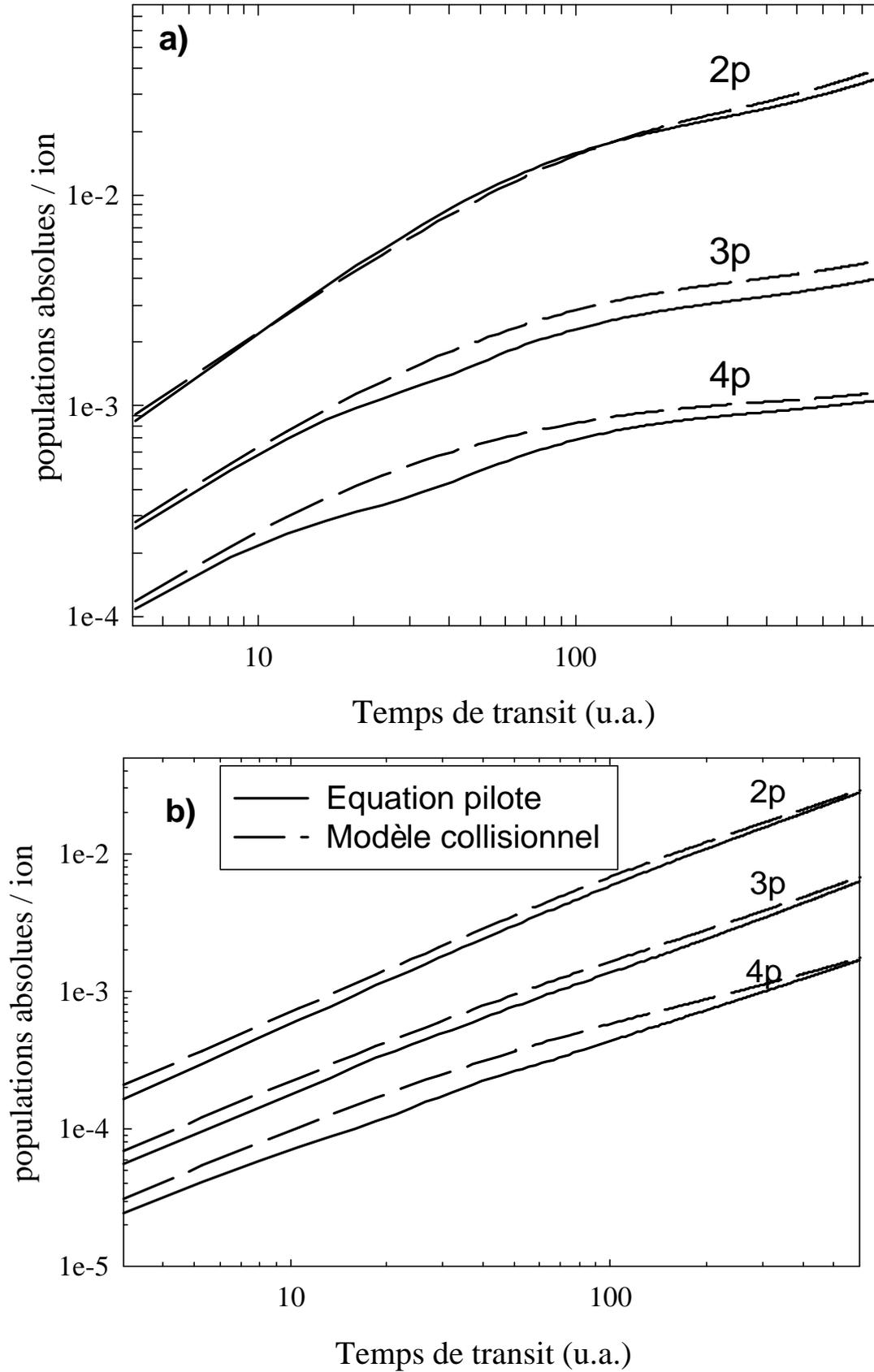


Figure 27 : Comparaison de l'évolution des populations absolues n_p prédites par les modèles d'équation pilote et collisionnel. a) – Système Ar^{18+} @ C, $v = 23$ u.a.. b) – Système Kr^{36+} @ C, $v = 35,6$ u.a..

b) Evolution des populations absolues $2s_{1/2}$

La figure 28 montre la même comparaison que la figure 27 mais sur les populations absolues $2s_{1/2}$. Nous voyons que pour le système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ (figure 28-a), le champ de sillage mélange les états $2s_{1/2}$ et $2p$ et joue un rôle sur l'évolution de $2s_{1/2}$ plus important que sur celle des états np (figure 27-a), qui sont la somme d'états de structure fine $np_{1/2}$ et $np_{3/2}$. Notons que les cascades sur $2s_{1/2}$ provenant d'états de $n > 6$ sont très faibles (elles représentent 4% de la population $2s_{1/2}$ avant transport, et deviennent très vite inférieures à 1%). Par contre, pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ (figure 28-b), la forme des évolutions données pour les deux modèles est sensiblement identique (ligne continue et tirets). Afin de mettre en valeur les rôles joués respectivement par les cascades provenant des états de $n > 6$ et par le champ de sillage, nous avons également porté sur ce graphe les résultats du modèle d'équation pilote, mais sans prendre en compte les termes de couplage Stark (points) :

- Les cascades radiatives arrivant sur $2s_{1/2}$ sont plus importantes dans le cas du krypton que dans le cas de l'argon étudié ci-dessus : 41% de la population de $2s_{1/2}$ provient des états supérieurs, et 12% de $2s_{1/2}$ vient des états de $n > 6$. Cette proportion représente l'écart initial entre les courbes en tiret et en points de la figure 28-b. Nous voyons que l'écart diminue progressivement à mesure que le rôle de l'ionisation des niveaux de $n > 6$ dû au transport augmente.

- Le mélange Stark entre les états $2s$ et $2p$ du krypton, dont on mesure l'effet par comparaison entre les courbes en points et en trait continu sur la figure 28-b, est très faible pour ce système collisionnel, car les termes de couplages sont inférieurs au Lamb-shift. Il ne se manifeste pas avant un temps de transit de l'ordre de 10 et son effet maximum observé, pour des temps de transit asymptotiquement grands représente 8% de la population $2s_{1/2}$. De plus, nous avons vérifié que c'est bien le mélange des états $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ qui est responsable de l'écart visible entre ces courbes, et non pas celui d'états supérieurs qui se manifesterait *via* les cascades sur l'état $2s_{1/2}$.

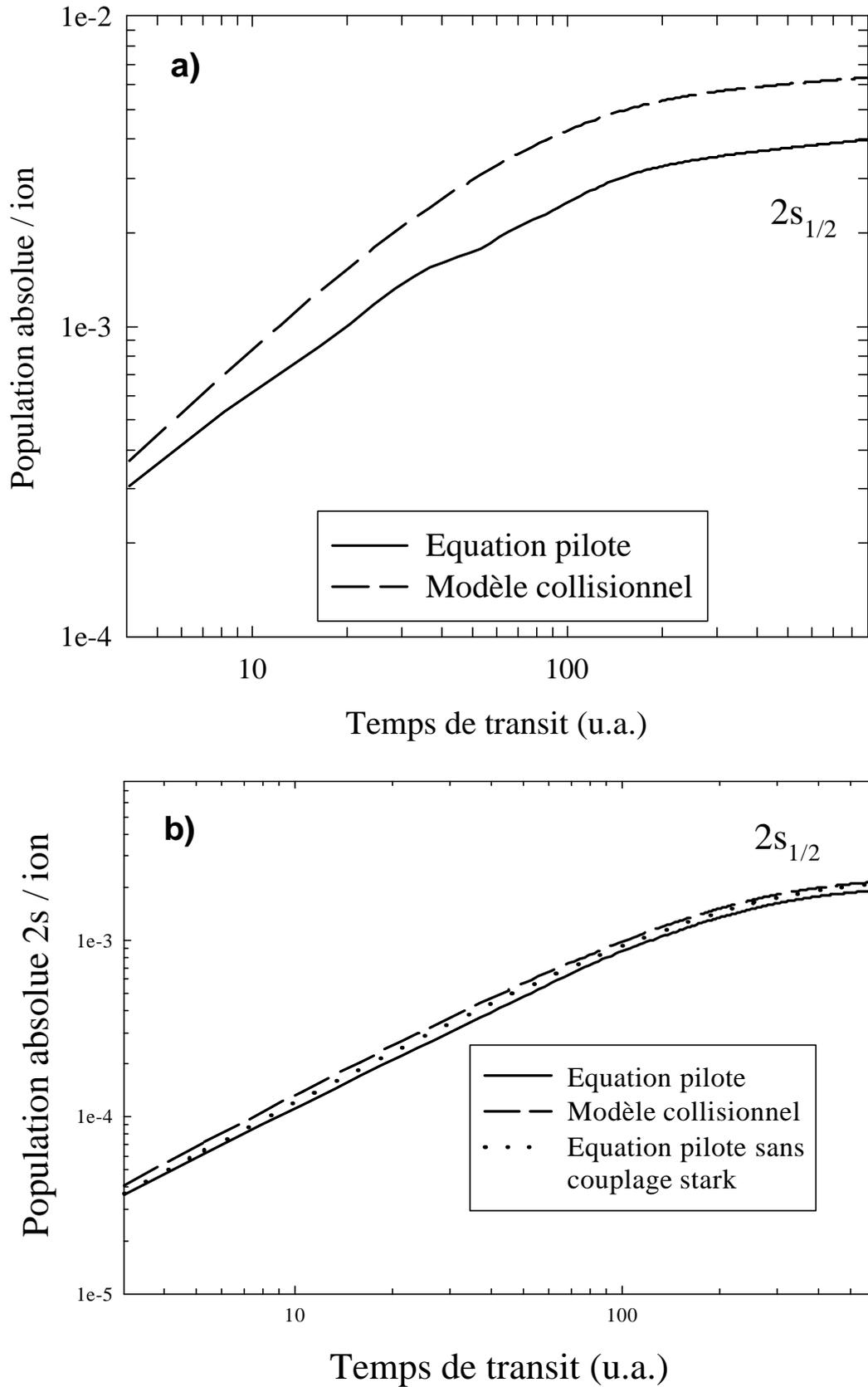


Figure 28 : Comparaison de l'évolution des populations absolues $2s_{1/2}$ prédites par les modèles d'équation pilote et collisionnel. a) – Système Ar^{18+} @ C, $v = 23$ u.a.. b) – Système Kr^{36+} @ C, $v = 35,6$ u.a..

c) Rapports des populations $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ et $3p_{1/2}/3s_{1/2}$

Sur la figure 29 sont portés ces rapports dans le cas du système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$. La fréquence plasma du milieu $\omega_p^0 = 1,07$ et la dépendance spatiale du champ sont prises en compte. Le processus initial de peuplement est la capture traitée par la théorie CDW. On voit sur cette figure que les deux rapports montrent une sensibilité certaine au champ de sillage, même si les processus collisionnels pris en compte dans le modèle d'équation pilote amortissent considérablement les battements dus au couplage avec le champ, bien visibles sur la courbe du modèle collectif.

En conclusion, à la lumière des comparaisons faites sur les figures 27, 28 et 29, on peut dire que les populations de structure fine ($2s_{1/2}$ et les rapports $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ et $3p_{1/2}/3s_{1/2}$) montrent une sensibilité au champ de sillage et donc aux conditions initiales en termes de cohérences dès lors que le couplage est assez intense pour coupler les niveaux concernés (ce qui n'est pas le cas de l'état $2s_{1/2}$ de $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$, $v = 35,6$). Par contre les populations np , qui sont des sommes d'états de structure fine ($np_{1/2} + np_{3/2}$) voient leur sensibilité au champ de sillage très amoindrie (sensibilité qui augmente néanmoins quand n augmente). Elles restent aussi sensibles aux conditions initiales en termes de populations, prédites avec plus ou moins de précision encore à l'heure actuelle. La population $2s_{1/2}$ et le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ sont eux aussi sensibles à ces conditions initiales, contrairement au rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ entre deux populations d'états ayant le même moment orbital. La comparaison des simulations numériques à l'expérience pour toutes ces observables nous permettra d'avoir des informations sur l'importance relative des processus, et sur les paramètres tels que les conditions initiales de peuplement (en termes de populations et de cohérences), et le champ de sillage.

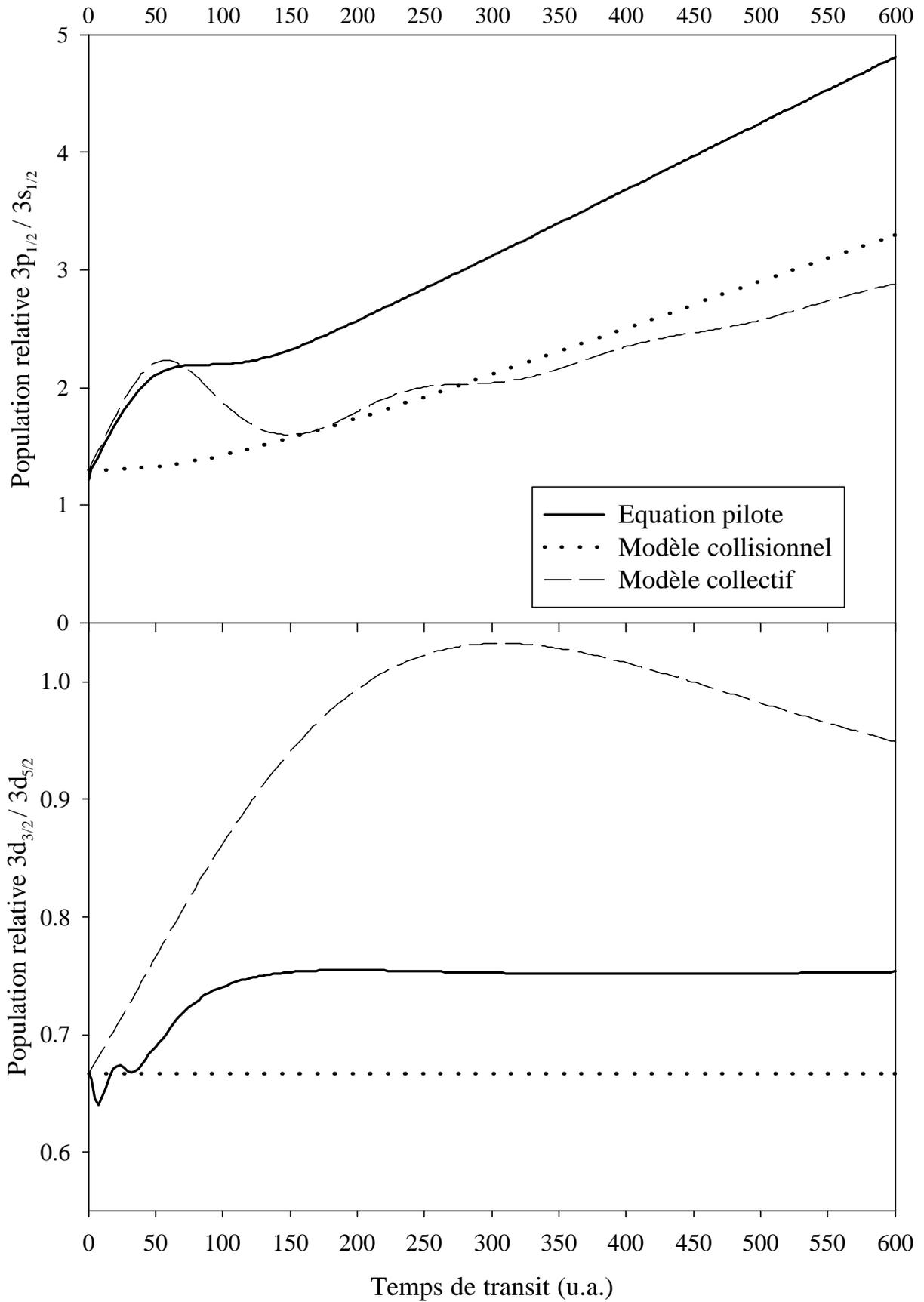


Figure 29 : Evolution des rapports de population $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ et $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. pour les modèles d'équation pilote, collisionnel et collectif.

B - Modèles de transport basés sur la méthode Monte-Carlo

I - Introduction ; Principe général

Parallèlement à la méthode calquée sur des équations pilotes du Chap.I§A, il existe des modèles basés sur la résolution explicitement stochastique du problème de transport. Une comparaison avec nos résultats théoriques et expérimentaux sera présentée dans la troisième partie de cette thèse. Je n'ai cependant pas pris part au développement de ces modèles et j'en ferai donc une description très brève, renvoyant le lecteur à des références plus complètes.

Le principe général de ces méthodes "stochastiques" est de suivre l'évolution temporelle particulière d'un système test. L'histoire de ce système consiste en une série d'intervalles d'évolution déterministe interrompus par des sauts discrets représentant les collisions. Ces interactions successives sont donc traitées en terme de probabilités reliées aux sections efficaces. La méthode Monte-Carlo consiste à déterminer à partir de générateurs de nombres aléatoires la séquence d'événements subis par le système test en respectant les lois de probabilités de chaque événement. Chaque séquence ainsi déterminée s'appelle une "réalisation" et la valeur d'une observable est donnée par la moyenne sur toutes les réalisations de la valeur obtenue pour une réalisation particulière. Nous voyons donc immédiatement que la précision atteinte dépend du nombre de réalisations effectuées.

La méthode a été utilisée avec succès (Dalibard, Castin and Molmer, 1992) pour décrire le couplage aux fluctuations (aléatoires) du vide d'un atome à 2 ou 3 niveaux également couplé à un laser. L'évolution de la fonction d'onde du système est déterminée par une méthode Monte-Carlo (méthode "Wave Function Monte Carlo ; WFMC"), et l'évolution temporelle de l'opérateur densité moyennée sur l'ensemble des réalisations est identique à celle décrite par les équations de Bloch optiques.

Dans le passé une méthode Monte-Carlo basée sur la description classique du système (CTMC) a été développée pour traiter le transport d'un ion dans un solide (Burgdörfer, 1990) et récemment l'équivalent quantique a été développé (Arbo, Reinhold, Kürpick *et al.*, 1999) pour des projectiles légers H et H⁻.

II - Transport Monte-Carlo dans l'espace des phases classiques

1°) Transport collisionnel

Comme dans le modèle collisionnel présenté dans la partie A, nous considérons ici les processus collisionnels binaires avec les ions et électrons du solide, mais pas l'effet du champ de sillage.

L'intérêt d'une description classique est qu'alors l'espace des phases est continu (le principe d'incertitude n'est plus vérifié) et on n'a plus à raisonner en termes de nombre d'états.

Durant la phase de transport, la particule test est l'électron de l'ion hydrogénéoï de dans le potentiel coulombien du noyau V et soumis à une force de Langevin $\vec{F}(t)$ représentant les collisions avec les constituants du solide.

L'équation du mouvement est donc l'équation de Langevin :

$$\frac{d\vec{p}_e}{dt} = -\vec{\nabla}V + \vec{F}(t) \quad (141)$$

où \vec{p}_e est le vecteur quantité de mouvement de l'électron non relativiste.

Puisque V est un potentiel central (dans le référentiel du projectile), les trajectoires de l'électron sont des orbites de Kepler (ellipses pour les états liés, paraboles à la limite d'ionisation et hyperboles pour les états du continuum).

La force stochastique qui perturbe ces trajectoires est décrite par une séquence de transferts d'impulsion instantanés au cours des collisions. Elle est donnée par :

$$\vec{F}(t) = \sum_{\alpha=1,2} \sum_i \Delta\vec{p}_i^\alpha \delta(t - t_i^\alpha) \quad (142)$$

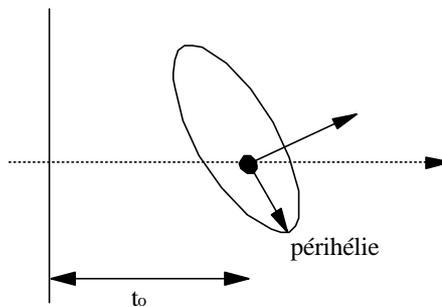
où $\Delta\vec{p}_i^\alpha$ est l'impulsion transférée par la collision intervenant au temps t_i^α .

La détermination de $\vec{F}(t)$ est ainsi réduite à une séquence stochastique de paires $(\Delta\vec{p}_i^\alpha, t_i^\alpha)$, chaque séquence correspondant à une réalisation. La somme portant sur l'indice α sépare les diffusions élastiques ($\alpha = 1$, interaction électron projectile - noyau cible écranté) des diffusions inélastiques ($\alpha = 2$, interaction électron projectile - électron cible). L'approximation d'une quantité de mouvement transférée instantanément repose sur le fait que le temps de collision t_c est petit devant la période d'une orbite (approximation de haute vitesse). Les valeurs de $\Delta\vec{p}_i^\alpha$ et t_i^α sont déterminées par la dynamique des collisions. Je ne rentrerai

pas dans le détail, le lecteur pourra se référer à (Burgdörfer, 1990; Lamour, 1997; Gervais, Lamour, Rozet *et al.*, 2001).

La phase de transport collisionnel classique est illustrée figure 30. Notons que dans le cas particulier où l'ion hydrogénéoï de est peuplé par capture, un processus non descriptible par ce système, la phase de transport est précédée par une première phase de peuplement.

a) Phase n°1: Capture d'un électron sur une orbite classique



b) Phase n°2: Transport de l'électron capturé
(Les deux figures ci dessous sont équivalentes)

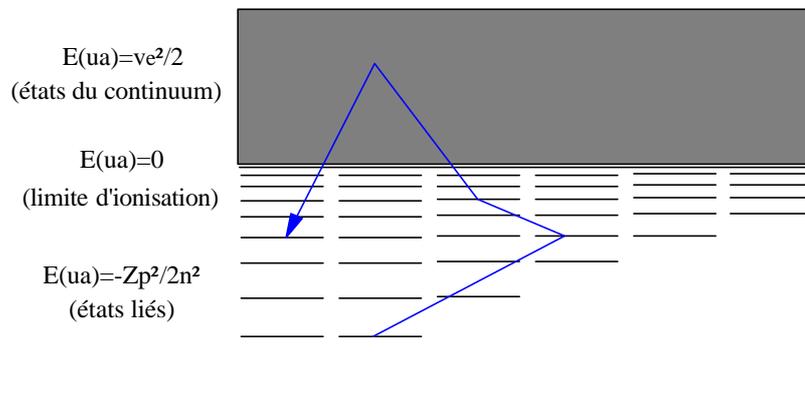
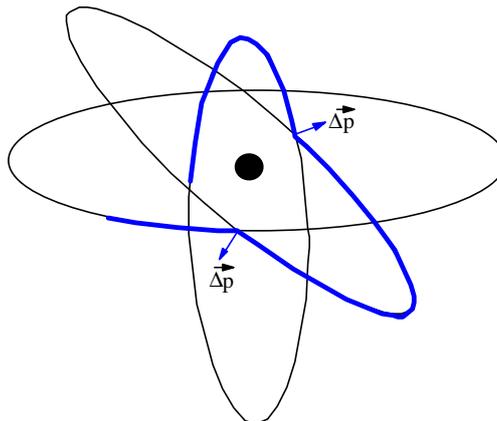


Figure 30 : Principe général du transport classique

Un modèle basé sur une description classique de l'espace des phases peut se justifier dans un certain régime au dessus d'un nombre quantique principal critique n_c pour lequel l'électron projectile hautement excité, avec une énergie de liaison négative ou positive, est fortement perturbé par des interactions collisionnelles. Le paquet d'onde transitoire formé à l'intérieur du solide a alors peu en commun avec des états atomiques stationnaires. Ce nombre quantique n_c est atteint quand le temps de révolution sur une orbite classique ($t_{\text{orbite}} = \frac{2\pi n^3}{Z_p^2}$) est égal au temps libre moyen entre 2 collisions. Pour donner une idée, $n_c = 7$ pour un ion Ar^{17+} à $v = 23$ u.a. dans du carbone, et $n_c = 27$ pour un ion Kr^{35+} à $v = 35,6$ u.a. dans le carbone. Ce nombre critique n_c donne un ordre de grandeur des conditions pour lesquelles des phénomènes purement quantiques peuvent apparaître. Dans l'exemple ci-dessus, on peut s'attendre à ce qu'une description classique, même si elle peut éventuellement reproduire correctement l'évolution des états de cœur (à partir de $n = 2$) de l'argon, échouera certainement à expliquer l'évolution des états de cœur du krypton.

Ce modèle collisionnel pour états très excités a reproduit de façon très satisfaisante les transitions Lyman $2p \rightarrow 1s$ et $3p \rightarrow 1s$ **retardées** résultant des cascades à partir d'états de Rydberg peuplés lors des collisions pour de nombreux systèmes (Richard, 1973; Braithwaite, Matthews and Moore, 1975; Rothermel, Betz, Bell *et al.*, 1982; Betz, Rösenthaller and Rothermel, 1983; Rösenthaller, Betz, Rothermel *et al.*, 1983; Dydbal, Sorensen, Hvelplund *et al.*, 1986; Can, Maurer, Bandong *et al.*, 1987; Kemmler, Burgdörfer and Reinhold, 1991; Kemmler, Burgdörfer and Reinhold, 1992) mais uniquement à l'équilibre des populations. Une étude faite dans notre équipe a depuis étendu sa validité aux raies $2p \rightarrow 1s$ et $3p \rightarrow 1s$ **retardées** pour le système Ar^{18+} ($v = 23$ u.a.) \rightarrow C, y compris largement avant l'équilibre des populations (Lamour, 1997; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 1999; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000; Lamour, Vernhet, Rozet *et al.*, 2001). Le seul écart théorie-expérience était visible sur la cible la plus fine ($3,5 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$, correspondant à un temps de transit de 14,3 u.a.) et serait dû non pas à la nature classique du modèle mais à la non prise en compte du champ de sillage dans ce modèle purement collisionnel. De plus, il reproduit correctement aussi les intensités de Lyman promptes (sensibles aux états de cœur) à l'équilibre des populations. Ce résultat était inattendu à cause de la description classique du modèle. Par contre, l'approche purement collisionnelle ne permet pas d'expliquer les intensités des Lyman promptes avant l'équilibre des populations.

2°) Introduction du champ de sillage

Pour rajouter la contribution du champ de sillage au modèle classique, il suffit de rajouter le potentiel de sillage au potentiel coulombien du noyau dans V (expression 141). Le potentiel ressenti par l'électron est alors dissymétrique par rapport au potentiel coulombien (Kemmler, Burgdörfer and Reinhold, 1991). Les auteurs ont montré que l'introduction du champ de sillage ne modifie pas de façon significative les intensités d' X retardés pour des épaisseurs de cible à l'équilibre des populations. Une étude effectuée sur les états de cœur (X prompts) du système Ar^{18+} ($v = 23$ u.a.) $\rightarrow C$ a montré, comme pour le modèle d'équations d'évolution, que l'introduction du champ de sillage décale la distribution en ℓ des populations vers les moments angulaires élevés, et l'effet sur les populations est plus visible sur les états 2s et 4p (voir figure 31) que sur les états 2p et 3p. Précisons que les conditions initiales utilisées pour la simulation montrée figure 31 sont elles aussi calculées par une méthode CTMC.

La figure 31 est l'équivalent de la figure 26 pour le modèle CTMC. Le lecteur pourra noter les différences et les similitudes entre ces deux figures. Parmi ces similitudes, revenons à l'importance croissante de l'effet du champ de sillage sur les états n_p , lorsque n augmente. L'explication ici est la même que celle que l'on avait donnée alors : lorsque n augmente, le nombre de sous-états n, ℓ mélangés par le couplage au champ de sillage croît et la diminution des populations n_p qui en résulte est d'autant plus importante.

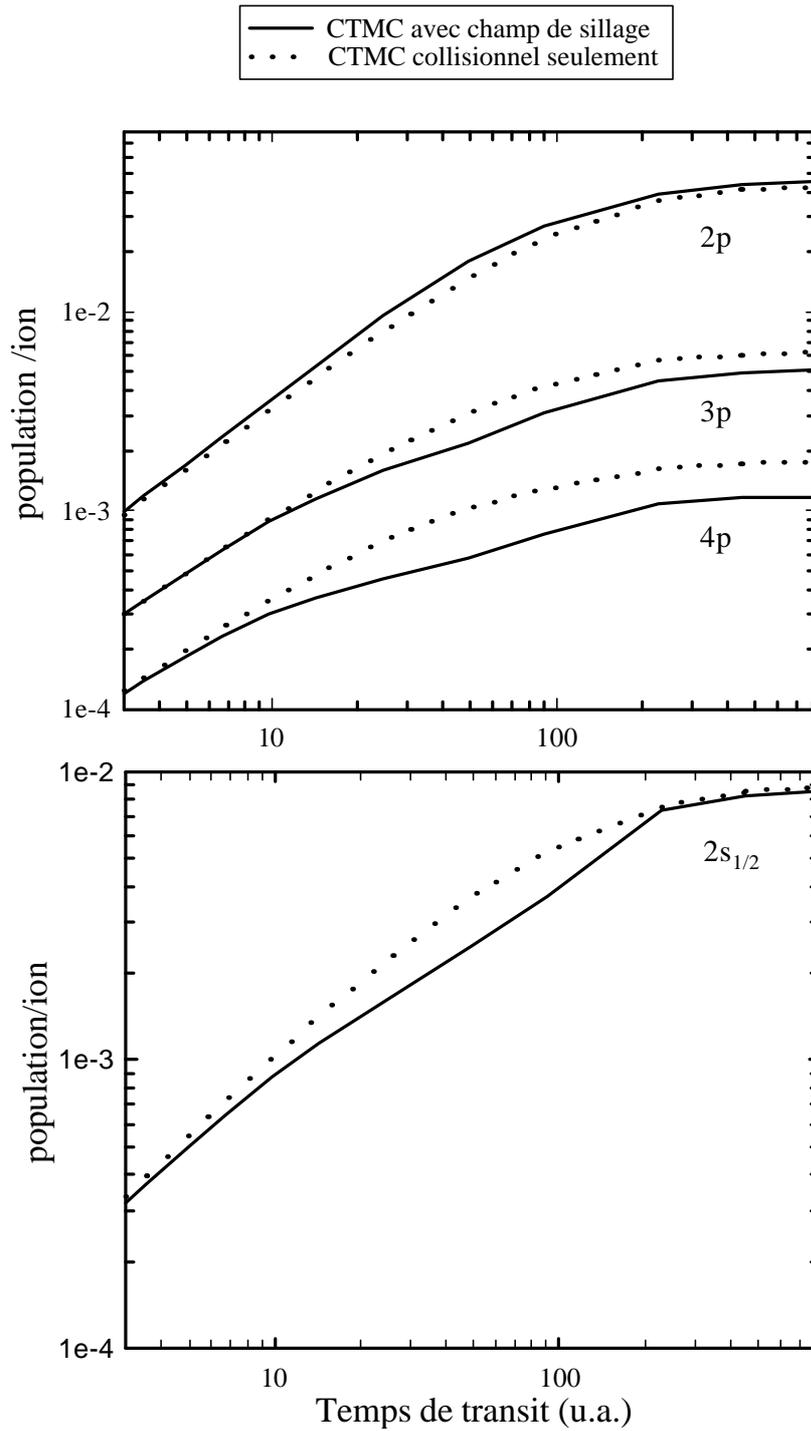


Figure 31 : Evolution des populations absolues np et $2s$ pour le système Ar^{18+} @ C à $v = 23$ u.a. Résultat d'un modèle CTMC (Reinhold, Arbo, Burgdörfer et al., 2000).

III - Transport Monte-Carlo dans l'espace des phases quantiques.

1°) Présentation

La représentation classique du paragraphe précédent est théoriquement limitée, comme nous l'avons vu, à la description des états très excités ($n \geq n_c$), mais elle est également incapable de décrire les effets intrinsèquement quantiques, comme par exemple la désexcitation radiative qui peut survenir pendant le transport.

Récemment, une théorie stochastique du transport d'un ion hydrogénéoï de dans un solide a été développée (Arbo, Reinhold, Kürpick *et al.*, 1999). Elle décrit l'évolution d'une fonction d'onde test sous l'effet de potentiels déterministes (celui du champ coulombien du noyau et du sillage) et stochastiques représentant les collisions. Il représente donc une version quantique que les auteurs ont appelée "Quantum Transport Theory ; QTT", du modèle CTMC.

En pratique, le calcul de la matrice densité réduite initiale peut se faire par des méthodes quantiques (type CDW, PWBA, ... en fonction du processus de peuplement), ou à partir de calculs classiques CTMC. Dans ce dernier cas, les cohérences sont obtenues à partir des valeurs moyennes d'opérateurs construits à partir du moment cinétique orbital et du vecteur de Runge-Lenz (Burgdörfer and Dubé, 1984).

Cette matrice densité initiale est diagonalisée, et dans cette base elle représente un mélange statistique d'états. Chacun de ces états est ensuite transporté par l'équation de Schrödinger stochastique projetée sur une base choisie judicieusement. Cette phase de transport est résolue de façon exacte et en particulier, la cohérence de l'état quantique est conservée. Par contre, il faut noter que l'évolution stochastique consiste en une distribution de transferts d'impulsion ne dépendant pas de l'état quantique précédant chaque transfert. L'évolution de chaque état dépend donc du déroulement temporel des transferts d'impulsion, mais la réciproque n'est pas vérifiée. La difficulté du problème est donc de choisir une distribution de transfert qui soit bien représentative de l'interaction.

Ce modèle donne des résultats en accord avec l'expérience pour la transmission d'ions H⁺ relativistes à travers des feuilles minces de carbone (Arbo, Reinhold, Kürpick *et al.*, 1999). On comparera les tous nouveaux résultats du modèle pour le transport d'ions Kr³⁵⁺ ($v = 47$ u.a.) \rightarrow C, (Vernhet, Fourment, Lamour *et al.*, 2001), système qui se situe en dehors du domaine de validité classique, dans la 3^{ème} partie de cette thèse.

2°) Similitudes entre les traitements classique et quantique

Les modèles Monte-Carlo Quantique et Classique (quand celui-ci est applicable) montrent de grandes similitudes en ce qui concerne les résultats prédits : c'est le cas du transport des ions H relativistes dans le carbone (Arbo, Reinhold, Kürpick *et al.*, 1999) et des populations n_p des états de cœur des ions Ar^{17+} dans le carbone à $v = 23$ u.a. (Reinhold, Arbo, Burgdörfer *et al.*, 2000). Pour ce dernier système, rappelons que $n_c = 7$, et que l'accord des résultats entre le traitement Classique et Quantique est obtenu dès $n = 2$. Notons également que la désexcitation radiative dans la cible, non prise en compte, est négligeable puisqu'elle atteint au plus 4% des états excités aux épaisseurs de cible pour lesquelles la comparaison est faite (Lamour, 1997).

Arbo *et al.* (Arbo, Reinhold, Kürpick *et al.*, 1999) montrent que l'excellent accord entre les 2 approches obtenu pour le système qu'ils étudient est dû à la combinaison de 2 effets. Premièrement, les transferts d'impulsions d'importance prépondérante dans ce système se situent dans un régime où la correspondance quantique-classique est assez bien vérifiée pour chacun de ces transferts pris individuellement. Deuxièmement, la nature aléatoire des interactions collisionnelles "gomme" les effets quantiques. L'effet de moyenne du transport élargit en particulier le domaine de correspondance classique-quantique de chaque transfert d'impulsion, et détruit la cohérence propre au système quantique.

Une étude analytique montre (Beuve, Gervais, Lamour *et al.*, 2000) que la dynamique d'un électron soumis à une série aléatoire de transfert d'impulsion est **exactement** la même d'un point de vue classique ou quantique, si la perturbation à laquelle il est soumis est linéaire ou quadratique par rapport à la variable d'espace. Les différences qui peuvent se rencontrer proviennent donc de singularités (en particulier la singularité en $r = 0$ du potentiel coulombien du noyau pour des états très liés ou les états n, s). On pourra alors voir des effets purement quantiques en utilisant un projectile suffisamment lourd.

Cette même étude (Beuve, Gervais, Lamour *et al.*, 2000) montre aussi que dans le cadre de la Random Phase Approximation (RPA), un modèle basé sur un échantillonnage Monte-Carlo aboutit formellement au modèle d'équation d'évolution purement collisionnel du Chap.I§A-V-1. On voit donc que la même approche (Monte Carlo quantique) peut mener, selon l'approximation faite, au modèle CTMC (Monte-Carlo classique) ou bien au modèle d'équations différentielles collisionnel quantique. Cela explique la similitude des résultats prédits par ces deux modèles concernant l'étude du système $Ar^{18+} \rightarrow C$ à $v = 23$ u.a. (Lamour,

1997; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 1999; Reinhold, Arbo, Burgdörfer *et al.*, 2000; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000).

Notons par contre une différence intrinsèque entre les deux approches Monte-Carlo, quantique et classique : à la fin de la phase de transport, la méthode classique projette l'espace des phases classiques sur l'espace des phases quantiques discrétisé en parcelles désignant chacune un état $|n, \ell, m\rangle$. On peut ensuite passer aux états hydrogénoïdes $|n, \ell, j, m_j\rangle$ via l'utilisation des coefficients de Clebsch-Gordan, mais ceux-ci mènent forcément à des rapports de structure fine entre états de même n et ℓ fractionnaires et constants. La méthode CTMC ne convient donc pas pour étudier l'évolution de ces observables accessibles expérimentalement. La méthode Monte-Carlo quantique propage quant à elle des états quantiques et ne devrait pas être confrontée à ce problème dès lors que la base utilisée pendant le transport est isomorphe à celle des états hydrogénoïdes des auxquels on s'intéresse.

IV – Spécificités de l'approche Monte-Carlo par rapport aux méthodes d'équations différentielles couplées

Avant de clore cette partie, on peut déjà dégager quelques spécificités de l'un ou l'autre des programmes :

- La méthode Monte-Carlo peut facilement gérer des grosses bases d'états, puisqu'il n'est pas nécessaire d'introduire toutes les sections efficaces affectant chacun des états de départ et d'arrivée, contrairement à ce qui est fait dans notre système différentiel d'équations pilotes. En particulier, la méthode Monte-Carlo classique (CTMC) est bien adaptée à la description de la dynamique des systèmes pouvant être très excités (états de Rydberg). Par contre, le modèle collisionnel est précisément limité par le nombre d'états à prendre en compte pour la description des intensités des X retardés émis après la collision $\text{Ar}^{18+} (v = 23 \text{ u.a.}) \rightarrow \text{C}$ en cible solide (Lamour, 1997; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 1999; Lamour, Vernhet, Rozet *et al.*, 2001). Pour cette observable et dans le cadre de ce système précis, il a été montré que l'introduction des états jusqu'à $n = 30$ était nécessaire.
- Les méthodes Monte-Carlo tant classique que quantique permettent une description aisée des états du continuum : l'électron est alors simplement placé sur une "orbite" non liée. On peut toujours suivre son histoire, et éventuellement le re-capturer (l'électron "retombe" sur une "orbite" liée). La description du continuum dans nos trois modèles est plus délicate et il est considéré comme un puits : l'électron ionisé est définitivement perdu.

- Par contre, les méthodes Monte-Carlo tant classique que quantique ne décrivent pas la capture durant la phase de transport : les captures multiples, au cours desquelles un ion hydrogénéoïde est perdu au profit d'un ion à plusieurs électrons, sont interdites.
- La désexcitation radiative est un phénomène purement quantique qui ne peut pas être pris en compte dans un modèle de transport classique. Cela est sans importance tant que ce processus est négligeable durant la phase de transport, comme cela arrive pour un ion pas trop lourd (le temps de désexcitation radiative est proportionnel à $\frac{1}{Z_p^4}$) et rapide dans des cibles minces. C'est typiquement le cas du système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$ étudié par (Lamour, 1997) où ce processus atteint au plus 4% des états excités pour les plus grands temps de transit. Par contre, la description correcte de ce processus peut devenir cruciale quand on étudie des projectiles plus lourds.
- La précision des résultats d'une méthode Monte-Carlo dépend du nombre de réalisations R effectuées. On peut montrer (Breuer, Huber and Petruccione, 1997) que le nombre R de réalisations nécessaire pour atteindre la précision σ_B sur la valeur moyenne d'une observable B est donné par :

$$R = \frac{\lambda_B(N)}{\sigma_B^2} \quad (143)$$

où $\lambda_B(N)$ est un facteur spécifique au système de taille N et de l'observable B . Nous voyons donc que la variance des résultats obtenus est inversement proportionnelle au nombre de réalisations.

A l'inverse, le calcul d'équation pilote n'est pas entaché d'incertitude liée à sa résolution, en dehors de la précision numérique intrinsèque au calcul.

Ces considérations ont une conséquence directe sur le temps de calcul nécessaire : Pour un système à N états, l'approche "équations différentielles" nécessite la résolution au plus d'un nombre de l'ordre de N^2 équations, tandis que l'approche Monte-Carlo implique R résolutions de l'évolution de N variables. Le temps de calcul CPU nécessaire varie en $N^{\alpha+1}$ pour la première méthode et $R \cdot N^\alpha$ pour la seconde, où α est un exposant caractéristique du système (mais indépendant de N). En général, R est une fonction non croissante de N et on en déduit que la méthode WFMC est toujours plus rapide pour des systèmes suffisamment grands.

Les considérations que je viens de présenter sont tout à fait générales. Dans notre cas particulier où l'on s'intéresse aux N populations et donc aux seules cohérences couplées à ces populations, l'ensemble des règles de sélection s'appliquant à ces cohérences précises mène à la

résolution de $\approx 3N$ équations différentielles plutôt que N^2 . Cela réduit considérablement le temps de calcul et rend la méthode d'équations différentielles couplées très attractive pour traiter la phase de transport. Par exemple, le calcul de la **phase de transport** montrée sur la figure 27 représente quelques minutes de temps CPU, tandis que l'équivalent CTMC de la figure 31, quelques jours.

Il faut préciser cependant que nos programmes basés sur des systèmes d'équations différentielles couplées utilisent, pour décrire la phase de transport, des fichiers contenant les caractéristiques (sections efficaces et cohérences le cas échéant) de tous les processus collisionnels. La génération de ces fichiers est très gourmande en temps CPU (quelques jours également). Il n'en reste pas moins qu'une fois ce prix payé, on peut effectuer à loisir (ou du moins pour un temps CPU modique) des simulations du transport en faisant varier les paramètres propres à cette phase comme la fréquence plasma par exemple ou en bloquant certains termes de couplages particuliers. Cette possibilité nous permet de discerner le rôle d'un processus donné pendant la phase de transport.

C - Cahier des charges d'une étude expérimentale

Les buts motivant une étude expérimentale du transport des états excités d'un ion hydrogénéoïde dans un solide sont multiples.

Nous traitons d'ions hydrogénéoïdes car ils représentent les systèmes les plus simples possibles : la description théorique d'ion à plusieurs électrons reste de nos jours un problème épineux. Il est important de pouvoir décrire le plus précisément possible tant le processus initial de peuplement que ceux intervenant durant la phase de transport qu'ils soient collisionnels, radiatifs ou de couplage au champ de sillage. Du point de vue expérimental, les X émis par ion hydrogénéoïde sont mieux séparés en énergie que ceux provenant d'ion à plusieurs électrons et leur identification en est d'autant facilitée.

Une étude expérimentale constitue un test des modèles, (par exemple de la supposition que les processus collisionnels peuvent être traités de la même façon formelle que les processus radiatifs), et guide leur développement. Une fois définis les domaines de validité des modèles, la confrontation expérience-théorie permet d'effectuer des mesures sur plusieurs paramètres comme l'intensité du champ de sillage, la variation spatiale du champ, la phase des cohérences et la valeur des sections efficaces avec une précision qui dépendra de la sensibilité réelle des observables à ces paramètres (information déjà riche en soi), et de la précision expérimentale.

A la lumière de l'étude théorique développée jusqu'ici, on peut définir un certain nombre d'impératifs que devra vérifier cette expérience et qui constituent le cahier des charges de l'expérience :

- Les observables étudiées seront les populations des états de cœur. En effet, nous avons vu (Lamour, 1997) que les désexcitations retardées d'états de Rydberg ne sont sensibles au champ de sillage qu'à des épaisseurs de cibles très faibles. Par contre, les populations $2s$, np , et $3\ell_j$ sont porteuses d'informations sur tous les paramètres que l'on veut tester.
- La probabilité du processus initial de peuplement doit être suffisamment faible pour qu'il ne brouille pas le transport des états excités qu'il a créés (le système collisionnel doit être tel qu'on se place en régime de collision unique vis à vis de ce processus). A l'inverse, les processus étudiés intervenant dans le transport doivent être maximisés pour être bien visibles. En particulier, si l'on s'intéresse au mélange Stark dû au champ de sillage, on voit

que les populations sont couplées à la **partie imaginaire** des cohérences (expression (131)), et il faut donc maximiser cette partie. L'utilisation d'un processus initial amenant à des cohérences imaginaires est dès lors intéressante.

- Le processus initial de peuplement doit être expérimentalement identifié sans ambiguïté et bien décrit théoriquement. Pour peupler les états excités d'un ion hydrogénoïde, les processus simples qui remplissent ces critères sont la capture sur un état excité d'un ion nu et l'excitation à partir du niveau fondamental d'un ion hydrogénoïde.
- Plusieurs types de cibles doivent être étudiés : cette variation de Z_c entraîne effectivement une variation des conditions initiales parce qu'elle modifie la symétrie de la collision. Elle permet également la mesure du champ de sillage de plusieurs matériaux et donc de déterminer le rôle des électrons internes de la cible dans la réponse collective. Lors d'une expérience précédente (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998) il a été montré que le champ de sillage du carbone correspond à celui calculé à partir de son pouvoir d'arrêt d'une part, et de sa fréquence plasma d'autre part. Par contre, pour le cuivre, le champ de sillage mesuré par son effet sur les populations des états de structure fine correspond aux mesures de pouvoir d'arrêt mais pas à la fréquence plasma mesurée par transmission d'électrons.
- Dans le but d'étudier la compétition dynamique entre le couplage au champ de sillage intervenant rapidement, et les processus collisionnels jouant un rôle prépondérant pour des temps de transit plus grands, la gamme d'épaisseurs de cible doit s'étaler de la plus fine possible manipulable expérimentalement, jusqu'à une épaisseur d'équilibre des populations.

Le dernier chapitre de cette thèse présentera des résultats obtenus lors d'études expérimentales menées sur des systèmes respectant les impératifs énoncés ci-dessus. Deux de ces expériences ont déjà fait l'objet de thèses, et je ne reviendrai pas sur leurs descriptions. Par contre, **le chapitre II** précise le choix du système collisionnel particulier sur lequel s'est axé le travail expérimental de ma thèse. J'y exposerai les méthodes utilisées pour l'observation, l'acquisition et le traitement des données.

CHAPITRE II :

DEMARCHE EXPERIMENTALE

L'étude expérimentale de l'interaction ion-solide et plus précisément de la phase de transport des états excités d'un ion lourd dans une cible a débuté il y a une dizaine d'années dans l'équipe. Les systèmes étudiés étaient $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$, Al , Cu à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A) et $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A). Ces expériences avaient des objectifs propres qui impliquaient, entre autre, que les états excités de l'ion hydrogénéoï de soient peuplés initialement par capture. Néanmoins ceci constitue un problème car les conditions initiales sont alors imparfaitement connues. En particulier, des mesures faites pour le système H^+ sur He entre 20 et 100 keV montrent un désaccord avec les **cohérences** CDW (Ashburn, Cline, van der Burgt *et al.*, 1990). Le processus primaire d'excitation d'un projectile hydrogénéoï de dans son état fondamental semble beaucoup mieux connu, car théoriquement plus simple, dans le domaine haute vitesse. De plus, les cohérences entre états tels que $\Delta\ell = \pm 1$ sont alors principalement **imaginaires** (voir Tableau IV du chapitre I) et l'effet dû au champ de sillage est bien mis en valeur.

Une nouvelle expérience a donc été entreprise, pour laquelle le processus initial de peuplement était l'excitation. Dans le troisième chapitre de cette thèse, je montrerai les résultats non encore publiés des deux expériences précédentes ($\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$, $v = 35,6$ u.a. et $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$, $v = 23$ u.a.) ainsi que ceux extraits de cette dernière, qui fait l'objet de la partie expérimentale de cette thèse.

Les deux premières expériences ont déjà fait l'objet de thèses (Despiney, 1994), (Lamour, 1997) et de publications (voir par exemple (Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998), (Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000), (Lamour, Vernhet, Rozet *et al.*, 2001)) et je ne reviendrai donc pas dessus. D'autre part, l'expérience "Excitation" reprenait en très grande partie le dispositif expérimental décrit dans (Despiney, 1994) et (Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998). Je me contenterai donc de décrire celui-ci très brièvement.

I – Choix du système étudié

Le choix du système de collision -l'ion projectile, la vitesse de collision et la nature de la cible- dépend directement de ce que l'on veut étudier. Nous nous intéressons à :

- L'évolution des intensités Lyman hydrogéoï des en fonction de l'épaisseur de cible, c'est à dire de la condition de collision unique aux conditions de collisions multiples. Nous avons vu à plusieurs reprises dans le chapitre I que ce signal est sensible aux paramètres étudiés (conditions initiales de peuplement par exemple).
- L'évolution des populations de structure fine de couches internes, sensibles notamment au champ de sillage induit.

Le système retenu est l'ion krypton hydrogéoï de Kr^{35+} sur des cibles de carbone et d'aluminium à $v = 46,95$ u.a. ($E = 60$ MeV/A). Les X observés sont ceux provenant des transitions Lyman et Balmer α . Ces dernières reflètent des rapports de populations de structure fine en $n = 3$ et sont reliées à $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ par (voir figure 32) :

$$\begin{cases} \frac{3p_{1/2}}{3s_{1/2}} = \frac{R(\text{Ba}_1)}{R(\text{Ba}_{4a})} \frac{I(\text{Ba}_4)}{I(\text{Ba}_1)} - \frac{R(\text{Ba}_{4b})}{R(\text{Ba}_{4a})} \\ \frac{3d_{3/2}}{3d_{5/2}} = \frac{R(\text{Ba}_3)}{R(\text{Ba}_2)} \frac{I(\text{Ba}_2)}{I(\text{Ba}_3)} \end{cases} \quad (144)$$

où $R(\text{Ba}_x)$ désigne le rapport de branchement de la transition x et $I(\text{Ba}_x)$ son intensité. $I(\text{Ba}_4)$ est la somme $I(\text{Ba}_{4a}) + I(\text{Ba}_{4b})$; en effet ces deux transitions sont trop proches énergétiquement ($\Delta E = 2,24$ eV dans le référentiel du projectile) pour être séparées. Signalons que les transitions Balmer α du krypton créent des X d'énergie voisine de 3 keV, domaine d'application de notre spectromètre cristallin à haute résolution. La plage énergétique des transitions Lyman est comprise entre ≈ 13 keV (Lyman α) et ≈ 18 keV (fin de série) et sont donc aisément détectables par des détecteurs à jonction.

Je vais maintenant justifier le choix du système collisionnel en montrant qu'il remplit bien le cahier des charges fixé (Chap.I§C), et qu'il vérifie les hypothèses nécessaires pour être décrit par les modèles théoriques du chapitre I.

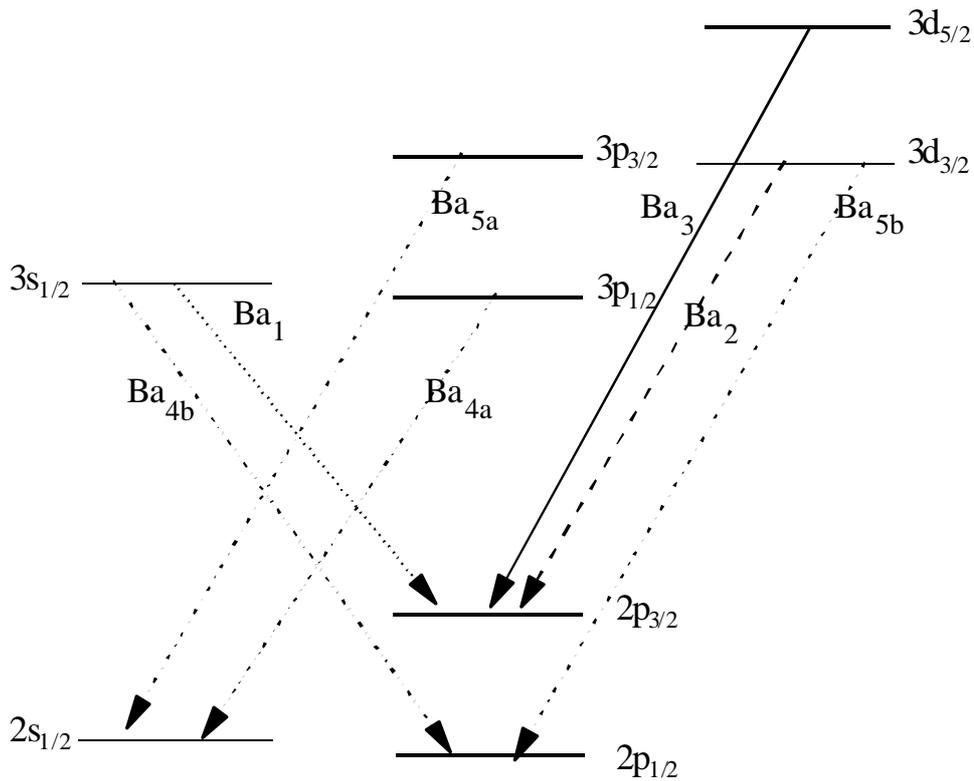


Figure 32 : Schéma des transitions de structure fine de la raie Balmer **a** pour un ion hydrogénoïde

1°) Le système est sensible aux phénomènes étudiés

a) Sensibilité aux conditions initiales

Nous avons vu dans le chapitre I que les observables choisies sont théoriquement sensibles aux conditions initiales, c'est à dire aux sections efficaces et aux cohérences du processus initial de peuplement. Afin de vérifier cette sensibilité d'un point de vue expérimental, deux types de cibles ont été utilisées : carbone et aluminium.

Dans le cas de l'aluminium, ($Z_c = 11$), la collision est moins perturbative que pour la cible de carbone ($Z_c = 6$) et les phases des cohérences devraient être sensiblement différentes.

b) Etude des libres parcours moyens

Afin d'estimer si le système collisionnel permettra d'étudier la compétition entre le couplage Stark et les interactions collisionnelles, on peut estimer l'importance relative de tous ces processus. C'est ce que nous allons faire pour quelques états caractéristiques 2p, 3p et 4p, ainsi que pour le mélange Stark entre les états 2s et 2p, 3s et 3p, et 4s et 4p traités ici à titre d'exemple.

A cette vitesse $v = 46,95$ u.a. et pour une telle asymétrie de collision (Z_c/Z_p valant 0,17 et 0,36 respectivement pour les cibles de carbone et d'aluminium), nous sommes dans le régime dit des hautes vitesses, où les méthodes perturbatives sont applicables aux calculs des processus de capture, ionisation et excitation. Pour chacun de ces processus collisionnels, un libre parcours moyen peut être défini par λ ($\mu\text{g}/\text{cm}^2$) = $10^6 A/N_A \sigma$ où σ est la section efficace en cm^2 associée à un processus déterminé, A est la masse atomique de la cible et N_A le nombre d'Avogadro. Au processus de désexcitation radiative d'un sous niveau $n\ell$, on associe aussi un libre parcours moyen radiatif calculé par λ_{rad} ($\mu\text{g}/\text{cm}^2$) = $\rho v \tau_{n\ell}$ où ρ est la densité des cibles en $\mu\text{g}/\text{cm}^3$, v la vitesse du projectile en cm/s et $\tau_{n\ell}$ la durée de vie radiative d'un état $n\ell$ en secondes. On associe en fait de façon générale à tout processus caractérisé par un temps τ en s la longueur λ ($\mu\text{g}/\text{cm}^2$) = $\rho v \tau$ avec les mêmes notations. Cela s'applique au temps caractéristique d'établissement de l'onde de sillage, donné par $\tau = \frac{2\pi}{\omega_p}$ où ω_p est la fréquence plasma de la cible traversée par l'ion Kr^{35+} à $v = 46,95$ u.a. Cela s'applique aussi à la période du battement dû au champ de sillage donnée approximativement par $\tau_{\omega_s} = \frac{2\pi}{|2\omega_s|}$, et qui est caractéristique de la dynamique du mélange Stark entre deux niveaux (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999).

Les libres parcours moyens des principaux processus collisionnels affectant les états np, ainsi que les longueurs caractéristiques du mélange Stark entre les états s et p, pour n variant entre 2 et 4, sont reportés dans le tableau VI en $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ pour les systèmes $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ et Al à $v = 46,95$. Les libres parcours moyens collisionnels sont calculés par la méthode PWBA avec écrantage et antiécrantage pour les sections efficaces d'excitation et d'ionisation, et par l'approximation CDW pour celles de capture. Nous verrons au paragraphe suivant que ces méthodes sont valables pour les collisions étudiées. La densité de l'aluminium est prise égale à $2,7 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ et celle du carbone égale à $2,0 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. La fréquence plasma des cibles, nécessaire

pour calculer λ_{ω_p} caractéristique de l'établissement du champ de sillage, est déduite des mesures de pouvoir d'arrêt par la méthode exposée au chapitre I§A-III, équations (87) et (88). On trouve 0,97 u.a. pour la cible de carbone et 1,06 u.a. pour la cible d'aluminium.

Les termes de couplage Stark (ω_s), nécessaires pour calculer $\lambda_{ns_0p_0}$ caractéristique du mélange Stark entre les états ns_0 et np_0 , sont calculés par la méthode du chapitre I§A-III, expressions (97) à (102), en tenant compte de la dépendance spatiale du champ de sillage.

Cible	Carbone			Aluminium		
	2	3	4	2	3	4
$\lambda(1s \rightarrow np)$	5809	32989	92247	3010	17053	47612
λ_{np} (ionisation)	591	246	143	307	127	74
$\lambda(np \rightarrow n\Sigma\ell')$ $\ell' \neq 1$	460	61	29	245	33	16
$\lambda(ns \rightarrow np)$	153	49	29	82	27	16
$\lambda(np \rightarrow n'\Sigma\ell')$ $n'=n+1$	341	140	83	178	75	45
λ_{np} (capture)	177904	389927	787560	14467	33223	68058
$\lambda_{ns_0p_0}$ (Stark)	184	85	52	212	98	61
$\lambda_{rad}(np)$	20	66	152	26	89	205
λ_{ω_p}	3,2	3,2	3,2	4,0	4,0	4,0

Tableau VI : Libres parcours moyens en $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ des principaux processus atomiques affectant la population des états $2p$, $3p$ et $4p$ de Kr^{35+} à $v = 46,95$ u.a., et longueurs caractéristiques d'établissement du champ de sillage et du mélange Stark entre les états $2s$ et $2p$, $3s$ et $3p$, et $4s$ et $4p$, à comparer aux épaisseurs de cible variant entre $3,2$ et $200 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour le carbone et entre $4,8$ et $103 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour l'aluminium.

On peut également vouloir raisonner en termes de temps : temps libre moyen pour les processus atomiques, et temps caractéristique d'établissement du champ de sillage ou du mélange Stark. Un tableau équivalent au tableau VI, mais dans lequel les valeurs sont portées en temps (en u.a.) est aussi présenté (tableau VII). Les valeurs doivent alors être comparées au temps de transit dans les cibles. Rappelons qu'1 u.a. de temps est égale à $2,419 \cdot 10^{-17}$ s.

Cible	Carbone			Aluminium		
	2	3	4	2	3	4
$\tau(1s \rightarrow np)$	11691	66390	185647	4491	25421	70975
τ_{np} (ionisation)	1189	495	288	458	189	110
$\lambda(np \rightarrow n\Sigma \ell')$ $\ell' \neq 1$	926	123	58	365	49	24
$\tau(ns \rightarrow np)$	308	99	58	122	40	24
$\tau(np \rightarrow n'\Sigma \ell')$ $n'=n+1$	686	282	167	265	112	67
τ_{np} (capture)	358032	784728	1584965	21566	49526	101454
τ_{ns0p0} (Stark)	370	171	105	316	146	90
$\tau_{rad}(np)$	39	132	305	39	132	305
τ_{ω_p}	6,5	6,5	6,5	6,0	6,0	6,0

Tableau VII : Temps libres moyens (en u.a.) des principaux processus atomiques affectant la population des états $2p$, $3p$ et $4p$ de Kr^{35+} à $v = 46,95$ u.a., et temps caractéristiques d'établissement du champ de sillage et du mélange Stark entre les états $2s$ et $2p$, $3s$ et $3p$, et $4s$ et $4p$, à comparer aux temps de transit dans les cibles variant entre 6,4 et 403 u.a. pour le carbone, et entre 7,2 et 154 u.a. pour l'aluminium.

❖ Condition de collision unique vis à vis du processus initial

Examinons pourquoi cette condition est importante : si ce n'était pas le cas, on peut imaginer que l'électron de l'ion projectile peut subir une excitation puis une phase de transport avant de retomber sur le niveau fondamental après avoir traversé une épaisseur de cible e_1 , puis recommencer un nouveau cycle avant de sortir de la cible d'épaisseur totale e_c . Tout se passerait alors comme si le projectile traversait deux cibles successivement, la première d'une épaisseur e_1 inconnue et la deuxième d'épaisseur $(e_c - e_1)$. Le signal recueilli serait alors la moyenne de chacun des deux signaux équivalents correspondant aux épaisseurs e_1 et $(e_c - e_1)$, avec e_1 variant de 0 à e_c . Ce processus de moyennage ne peut que nuire à la sensibilité des observables.

Si λ_{proc} est le libre parcours moyen d'un processus donné, le critère de collision unique vis à vis de ce processus est atteint si λ_{proc} est très supérieur à e_c . En examinant les tableaux VI ou VII, on voit que pour toutes les cibles utilisées, le critère de collision unique pour l'excitation à partir du niveau fondamental est vérifié.

❖ Processus de capture

Ce processus est à minimiser car il conduit à la création d'ions héliumoi des dont certaines désexcitations radiatives (transitions satellites) produisent des X d'énergies proches de ceux provenant d'ions hydrogénoï des dus au processus d'excitation que l'on veut étudier. Bien que les spectromètres à haute résolution que nous utilisons pour détecter les raies Balmer α caractéristiques des populations $3\ell j$ (en structure fine) permettent de séparer la majorité de ces transitions héliumoi des, il en subsiste une indiscernable sous la raie hydrogénoï de $B\alpha$. De plus, les détecteurs à jonction utilisés pour mesurer les transitions Lyman (caractéristiques des états np) ne séparent aucune de ces transitions. Il est donc important de minimiser ce signal parasite en se plaçant à très haute vitesse. Nous pouvons voir sur les tableaux VI et VII que le processus de capture a une très faible probabilité d'arriver dans les cibles que nous utilisons. Dans le carbone, la capture vers un état np est environ 10 fois inférieure à l'excitation vers cet état depuis l'état fondamental. Dans l'aluminium, ce rapport devient approximativement 2 (la capture varie en $\approx Z_c^4$ tandis que l'excitation varie en Z_c^2 dans l'approximation de Born I).

❖ Condition d'observation de la phase de transport

Les tableaux VI et VII permettent de comparer la dynamique des processus intervenant durant le transport. Afin de pouvoir observer expérimentalement les processus intervenant sur un état excité durant son transport, il faut que ces processus aient le temps de se manifester sur cet état, ce qui implique que l'épaisseur de cible et la longueur radiative (associée à la durée de vie de l'état excité) soient supérieures aux longueurs caractéristiques des processus étudiés.

Le champ de sillage est effectif dès lors que le trajet de l'ion dans la cible est supérieur à la longueur λ_{ω_p} d'établissement du champ ($3,2 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour le carbone, $4 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour l'aluminium). La longueur $\lambda_{\text{ns}0\text{p}0}$ représente une période complète du battement Stark. Dans le cas modèle d'un système fermé à 2 états, cela équivaut à un aller-retour complet de la population de l'un à l'autre des états, et l'on peut donc s'attendre, si on regarde le rapport des populations, à observer un maximum d'amplitude du battement pour une longueur parcourue inférieure à la moitié de la période. Dans le carbone, la demi-période correspond, pour les états $3s_{1/2}/3p_{1/2}$ à $\approx 40 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$, et pour le même rapport dans l'aluminium à $\approx 50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. Cependant, le mélange Stark se manifeste dès les premiers $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ parcourus et il n'est pas nécessaire d'attendre que les effets soient maximum pour être visibles.

Les libres parcours moyens donnent l'ordre de grandeur de l'épaisseur de cible à partir de laquelle les phénomènes collisionnels se manifestent et brouillent éventuellement le mélange cohérent dû au champ de sillage. En prenant les libres parcours moyens minimaux, on voit que le mélange collisionnel se manifeste pour des épaisseurs de cible valant approximativement 150, 50 et $30 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour les niveaux 2p, 3p et 4p dans le carbone, et 80, 30 et $15 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour les mêmes niveaux dans des cibles d'aluminium.

L'observation d'un effet dû au transport sur un état excité est subordonnée à la durée de vie de l'état (celle-ci doit être assez longue pour que l'effet de transport se manifeste). La longueur associée vaut 20, 66 et $152 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour les niveaux 2p, 3p, et 4p dans le carbone, et 26, 89 et 205 pour les mêmes niveaux dans l'aluminium. Comparant ces valeurs à celles des libres parcours moyens, on peut s'attendre à ce que le transport collisionnel soit visible sur les niveaux 3p et 4p mais n'ait pas d'effet notable sur le niveau 2p du krypton. D'autre part, les niveaux de la couche $n = 2$ sont trop écartés énergétiquement pour être mélangés par le champ

de sillage : le Lamb-Shift vaut 0,06 u.a. tandis que $2\omega_s \approx 0,02$ u.a. dans la couche $n = 2$ pour les cibles de carbone (voir tableau V du Chap.I) et on calcule la même valeur approximative pour l'aluminium. On ne devrait donc pas voir d'effet significatif du transport sur la population $2p$, ni par effet collectif, ni par effet collisionnel seul.

En conclusion, on peut s'attendre à ce que les systèmes collisionnels choisis $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ et $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{Al}$ à $v = 46,95$ u.a. soient adaptés à l'observation du transport des états excités.

- Dans les cibles de carbone, les rapports de populations de structure fine dans la couche $n = 3$ devraient être sensibles au champ de sillage pour des épaisseurs de cible allant de $3,2$ à $\approx 50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ et la contribution collisionnelle du transport devrait s'ajouter au delà. La population $2p$ devrait évoluer linéairement avec l'épaisseur, tandis que les populations $3p$ et $4p$ devraient montrer une sensibilité au transport.
- Dans les cibles d'aluminium on devrait observer le même genre de comportement, mais l'effet du mélange Stark sur les rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ pourrait être moins visible puisque le maximum de l'amplitude du battement est attendu autour de $50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ et que le mélange collisionnel devrait se manifester de façon très marquée dès $30 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. Par ailleurs, s'écartant du domaine perturbatif, l'amplitude du battement Stark devrait être moins importante, la phase des cohérences d'excitation entre les états s_0 et p_0 par exemple n'étant plus purement imaginaire.

2°) Le système rentre dans le cadre des modèles théoriques développés

Il s'agit ici de vérifier que les hypothèses faites lors de l'établissement des modèles théoriques sont vérifiées par les conditions expérimentales.

❖ Domaine de vitesse

L'électron auquel nous nous intéressons est celui centré sur le projectile. Le paramètre K permettant de définir des domaines de vitesse est donc donné par

$$k = \frac{Z_c}{Z_p} \frac{v_e}{v}$$

On trouve donc $k < 0,13$ pour une cible de carbone, et $k < 0,28$ pour une cible d'aluminium. Nous nous trouvons donc bien dans le régime perturbatif en ce qui concerne les cibles de carbone, et dans une moindre mesure en ce qui concerne les cibles d'aluminium.

❖ Processus de capture

Le critère de validité (85) de la théorie CDW s'écrit $E(\text{keV/uma}) > 80 \sup\{\epsilon_i, \epsilon_f\}$, et la condition la plus drastique est donnée par le processus de capture d'un électron cible vers la couche 1s du krypton. Il est donc vérifié puisque $60 \cdot 10^3 > 80 \times 36$ où 36 est la vitesse d'un électron sur l'orbite 1s du krypton.

La vitesse de collision est inférieure à $(19,15 \times Z_c^{5/7})$ pour $Z_e = 6$ ou 13. La REC est donc inférieure à la MEC (voir relation (80)) qui est elle-même déjà très petite (voir tableaux VI et VII). On peut donc négliger la contribution de REC.

❖ Conditions d'application de l'approximation des vitesses indépendantes

La condition (129-a) entre les termes de couplage Stark et les fréquences de Bohr du krypton est vérifiée comme nous l'avons déjà vu lors de la présentation du programme d'équation pilote (Tableau V du Chap.I).

La condition (129-b) entre les termes de couplage Stark et le temps moyen de collision τ_c est vérifiée puisque ω_s est de l'ordre de 0,1 u.a. (Tableau V : ce tableau ne donne les valeurs que pour une cible de carbone, mais les valeurs de ω_s pour une cible d'aluminium sont encore inférieures, ce qui amène à des libres parcours moyens plus longs, comme nous l'avons vu au tableau VI pour les couplages entre s_0 et p_0) et τ_c peut être écrit comme l'inverse de la vitesse de collision. La condition (129-b) s'écrit donc $0,1 \ll 46,95$ ce qui est correct.

II – Description des conditions expérimentales

L'expérience a été réalisée en octobre 1995 auprès du Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL) sur la ligne d'Ions Super Epluchés (LISE).

Sans entrer dans le détail, le principe du GANIL est le suivant : le faisceau d'ions primaires extraits d'une source à résonance cyclotronique d'électrons (ECR) est injecté dans un premier cyclotron à secteurs plats (C0). Ces ions sont post-accélérés dans un premier cyclotron à secteurs séparés (CSS1) à une énergie de 4 à 13 MeV/A. Ils sont ensuite "épluchés" par passage à travers une mince feuille de carbone qui augmente le rapport charge/masse des ions injectés de 2,5 environ. L'état de charge étant ainsi accru, le faisceau peut alors être injecté dans un second cyclotron, CSS2, identique au premier et multipliant l'énergie des ions d'un facteur 7 environ. Les énergies maximales pouvant être délivrées par cet ensemble sont 96,4 MeV/A pour l'ion le plus léger $^{12}\text{C}^{6+}$ et 24 MeV/A pour le plus lourd

$^{238}\text{U}^{58+}$ (GANIL, 1992). L'énergie maximale obtenue pour des ions krypton ($A=84$) est 60,3 MeV/A. Le faisceau d'ions peut être épluché une nouvelle fois avant d'être envoyé dans le monochromateur α , qui a pour tâche de sélectionner l'état de charge voulu par un jeu de dipôles magnétiques, ainsi que la divergence angulaire par un jeu de 2 fois 3 fentes. Le faisceau est ensuite distribué dans les salles d'expériences avant de finir sa course dans des cylindres de Faraday destinés à la fois à arrêter le faisceau et à mesurer son intensité électrique.

1°) Caractéristiques du faisceau

a) Faisceau arrivant à l'entrée de LISE

Je m'intéresse ici à la faisceaologie intervenant entre la sortie de CSS2 et l'entrée dans LISE. Le faisceau sortant de CSS2 était du $^{84}\text{Kr}^{33+}$ à 60 MeV/u. Une cible de $1300\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone était placée juste avant le monochromateur "alpha" pour éplucher ces ions jusqu'à l'état de charge désiré $35+$; la sélection de cet état de charge est réalisée dans l' α . Le choix de placer l'éplucheur avant l' α plutôt que sur la ligne LISE proche de la chambre de collision est dicté par la volonté de limiter le taux de bruit de fond sur les détecteurs utilisés puisque dans la configuration choisie, les états de charge non sélectionnés sont arrêtés dans l' α , loin de la chambre de collision. La figure 33 montre l'évolution de la proportion d'états de charge des ions incidents Kr^{33+} traversant une cible de carbone à 60 MeV/u, en fonction de l'épaisseur traversée, calculée par le code ETACHA (Rozet, Stéphan and Vernhet, 1996). Sachant que les impératifs étaient de maximiser l'obtention de Kr^{35+} tout en se réservant la possibilité de faire quelques mesures avec des ions incidents Kr^{34+} (ce qui est en dehors du cadre de cette thèse) et en ayant une cible d'épluchage la plus fine possible pour limiter les divergences en énergie et angulaires induites par cette cible, le choix s'est porté sur une épaisseur de $1300\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone. A la sortie de la cible d'épluchage, nous avons mesuré que le faisceau était constitué de 10,5% de Kr^{36+} , 43,7% de Kr^{35+} et 45,3% de Kr^{34+} . La perte d'énergie des ions dans cette cible est de 15,2 MeV, ce qui représente 3% de l'énergie du faisceau incident.

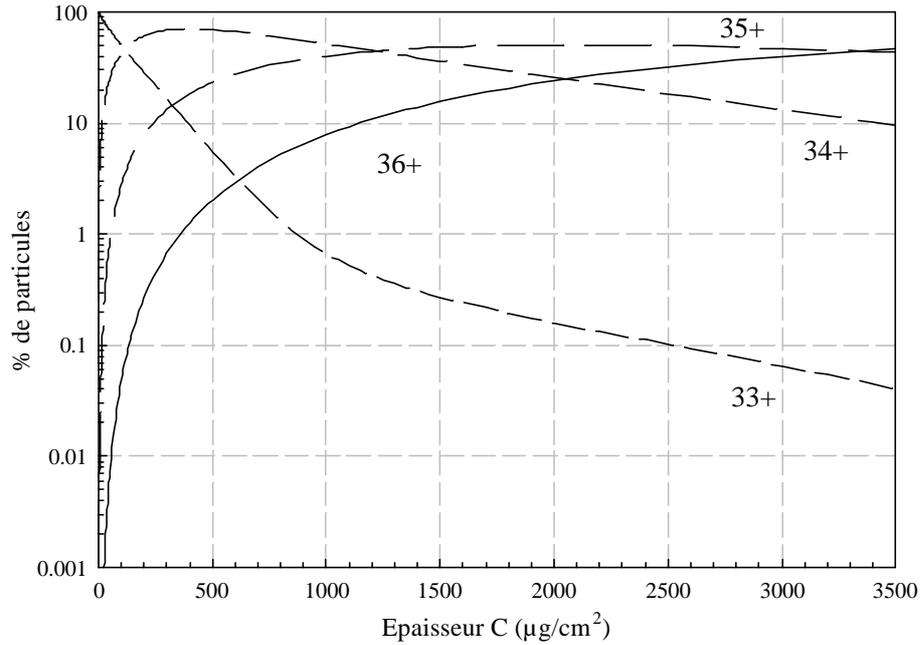


Figure 33 : Evolution de la distribution d'états de charge pour la collision $Kr^{33+} @ C$ à 60 MeV/u en fonction de l'épaisseur de cible.

Le ralentissement et/ou l'épluchage d'un ion à travers une cible solide induit, du fait des collisions multiples, une dispersion en énergie et en angle du faisceau émergent. Un calcul estimatif de ces deux modes de dispersion peut être fait (Baron, 1975) en tenant compte des paramètres de l'ion après la traversée de la cible, charges et énergie, de la nature et de l'épaisseur de la cible supposée parfaitement uniforme :

L'expression de la dispersion en énergie δE est :

$$\delta E(\text{MeV}) = 9,24 \cdot 10^{-4} Z \sqrt{\frac{Z_c}{A_c} \times 10^6} \quad (145)$$

où Z_c et A_c sont respectivement le numéro et la masse atomiques de la cible, x est l'épaisseur de la cible en g/cm^2 et Z est le nombre de charges de l'ion. δE est maximisée pour $Z = Z_p = 36$ le numéro atomique de l'ion.

L'expression de la dispersion angulaire du faisceau $\delta\theta$ est :

$$\delta\theta(\text{radians}) = \left\{ 3,925 \cdot 10^{-2} \frac{Z_c(Z_c + 1)\bar{Z}_\infty^2 x}{A_c E_p^2} \ln \left[\frac{2,126 \cdot 10^8 (Z_c + 1)x}{A_c Z_c (Z_c^{2/3} + Z_p^{2/3})} \right] \right\}^{1/2} \quad (146)$$

où E_p est l'énergie du projectile en MeV et \bar{Z}_∞ la charge moyenne de l'ion à l'équilibre. \bar{Z}_∞ correspond à la moyenne pondérée par le rendement des états de charge à l'épaisseur d'équilibre et vaut 35,5.

La contribution de l'éplucheur de carbone placé avant le monochromateur α est ainsi pour la dispersion en énergie $\delta E = 0,85 \text{ MeV}$ soit $\frac{\delta E}{E} = 1,7 \cdot 10^{-4}$ et pour la dispersion en angle $\delta\theta = 0,26 \text{ mrad}$.

Les dispersions en énergie et en angle induites par l'éplucheur étant très inférieures à celles du faisceau en sortie de CSS2 (soit $\delta E/E = 2 \cdot 10^{-3}$ et $\delta\theta = 20 \text{ mrad}$, valeurs nominales), sa contribution n'induit pas d'effet notable sur la résolution finale du spectromètre cristallin utilisé (les termes contribuant à la résolution de ce système de détection sont explicités Chap.II§II-3-d-vii).

Lorsque cette expérience a été effectuée, le seul endroit possible pour réaliser l'épluchage avant le spectromètre α était à l'emplacement de SISSI, un montage prévu pour la production d'ions radioactifs. Par conception, le faisceau à cet endroit est très focalisé et les éléments de lignes sont tels que la faisceaologie est extrêmement sensible aux réglages. De plus notre expérience était la première à utiliser cette nouvelle configuration et les conducteurs de lignes ne maîtrisaient pas alors tous les paramètres importants. Cela a entraîné une détérioration importante sur la résolution atteinte par nos spectromètres cristallins. Le temps d'expérience étant compté, il a pourtant fallu s'en accommoder, après de longues tentatives de réglages infructueuses. Des essais effectués pendant ces réglages ont montré que le faisceau était contenu dans une émittance de $40 \pi \text{ mm mrad}$, et que 35% seulement du faisceau entrait dans $5 \pi \text{ mm mrad}$ (valeur "réglable" dans l' α et retenue pour notre expérience), alors que la valeur nominale de l'émittance en sortie de CSS2 (mais avant SISSI) est de l'ordre de $6 \pi \text{ mm mrad}$. Enfin une série de fentes destinées à améliorer la qualité du faisceau dans le spectromètre alpha étaient démontées, ce qui nous a handicapé pour effectuer des réglages fins.

Tous ces facteurs ont eu pour conséquence principale que le faisceau était accompagné d'un halo important, entraînant un bruit de fond bien supérieur à celui observé lors d'expériences précédentes utilisant le même type de faisceau, et une limitation importante à la résolution due à une dispersion en énergie et/ou en angle du faisceau beaucoup plus grande que les valeurs demandées. Lors du dépouillement des spectres, j'ai pu, à partir de la largeur des raies enregistrée, évaluer la dispersion du faisceau sans toutefois pouvoir distinguer la dispersion angulaire de celle en énergie car elles interviennent toutes les deux *via* l'effet Doppler (voir Chap.II§II-3-d-vii).

En supposant que la dispersion angulaire était celle attendue pour l'émittance 5π mm mrad réglée dans l' α et la géométrie du faisceau au niveau de la cible (voir paragraphe suivant), la dispersion en énergie effectivement obtenue et observée était alors $1,3 \cdot 10^{-2}$, soit un ordre de grandeur supérieure à celle attendue.

A l'inverse, si la dispersion en énergie était celle attendue, la dispersion angulaire devrait être de 7 mrad.

b) Faisceauologie dans LISE

i) Faisceau arrivant sur la cible

La ligne LISE comprend de nombreux diagnostics et équipements : profileurs, cages de Faraday, quadripôles et dipôles permettant de modifier l'enveloppe géométrique, mais en aucun cas de corriger la dispersion angulaire ou énergétique du faisceau incident.

La tache du faisceau au point de focalisation (emplacement de la cible) est un bâtonnet horizontal de 1 mm de hauteur sur 7 mm de largeur. Cette forme de la tache a été contrôlée par deux profileurs en amont et en aval de la chambre de collision ainsi que par une alumine au niveau même de la cible. Cette forme particulière de la tache a été choisie afin de répondre à deux préoccupations liées à la résolution finale du système de détection (Chap.II§II-3-d-vii) :

- ◆ le faisceau doit être le plus parallèle possible dans le plan horizontal sans toutefois avoir une largeur excessive.
- ◆ la hauteur de source doit être minimale car elle contribue à la résolution du spectromètre cristallin.

Les caractéristiques du faisceau au niveau de la cible sont les suivantes :

- ◆ Ions Kr^{35+} $E = 60 \text{ MeV/A} \Rightarrow \beta = \frac{v}{c} = 0,343$
- ◆ Intensité de 10 nAe pour les cibles les plus épaisses, de 300 nAe pour les plus fines. Cette gamme d'intensités a été choisie pour minimiser les problèmes de décomptage dus au temps mort des jonctions et du système d'acquisition (Chap.II§II-3-e).
- ◆ La dispersion en énergie vaut $\frac{\delta E}{E} \approx 1,3 \cdot 10^{-2}$ en supposant que l'émittance du faisceau, fixée en sortie de l' α , est 5π mm mrad, ce qui définit une dispersion angulaire de $\delta\theta = 1,43$ mrad

ii) Influence de la cible en termes de dispersion et d'état de charge

- Etat de charge :

On peut prévoir l'évolution de l'état de charge des ions incidents Kr^{35+} dans les cibles grâce au code ETACHA. La figure 34 montre cette évolution pour le cas des cibles de carbone. Nous voyons que les proportions de Kr^{36+} et Kr^{34+} formés restent tout à fait négligeables même pour la cible la plus épaisse de $200 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. Ceci illustre le fait que les libres parcours moyens d'ionisation, et plus encore de capture sont très grands devant les épaisseurs de cible (voir tableau VI). Le même résultat est valable pour les cibles d'aluminium, dont la plus épaisse atteint $103 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$.

- Dispersion en énergie et angulaire :

Nous pouvons calculer ces valeurs pour nos cibles les plus épaisses (carbone et aluminium) grâce aux formules (145) et (146). Les résultats sont reportés dans le tableau VIII.

Cible	$\frac{\delta E}{E}$	$\delta\theta$ (rad)
C $200 \mu\text{g}/\text{cm}^2$	$6,6 \cdot 10^{-5}$	$8,7 \cdot 10^{-5}$
Al $103 \mu\text{g}/\text{cm}^2$	$4,6 \cdot 10^{-5}$	$7,3 \cdot 10^{-5}$

Tableau VIII : Dispersion maximale en énergie et en angle du faisceau de Kr^{35+} à $60 \text{ MeV}/A$ atteintes dans nos cibles.

Nous voyons que l'influence de la traversée des cibles est parfaitement négligeable devant les valeurs des dispersions du faisceau incident et nous pouvons donc négliger cette contribution lors du dépouillement. De même, nous avons vérifié que l'on peut aussi négliger la perte d'énergie dans les cibles.

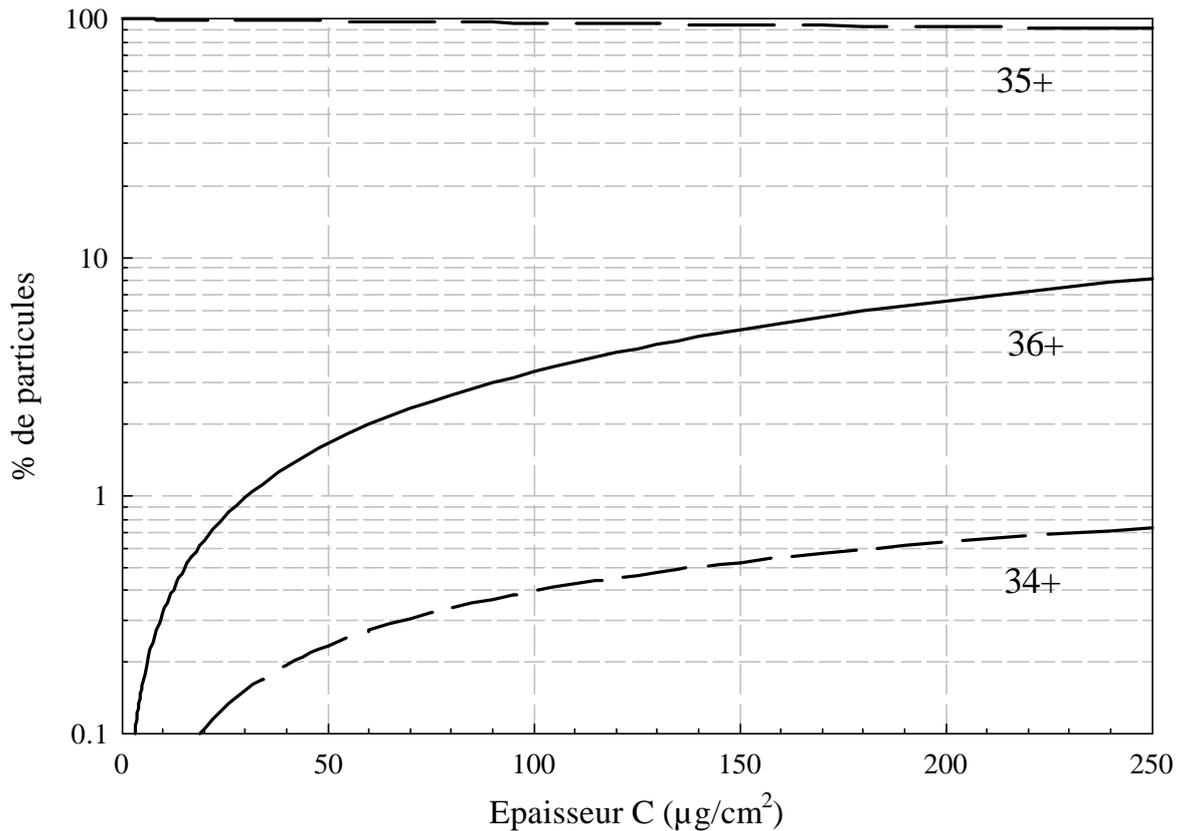


Figure 34 : Evolution de la distribution d'états de charge pour la collision Kr^{35+} @ C à 60 MeV/u en fonction de l'épaisseur de cible.

2°) Caractéristiques des cibles solides.

Au cours de cette expérience, trois natures de cibles différentes étaient utilisées : des cibles fines de carbone autosupportées, des cibles fines d'aluminium supportées par un film de carbone, et des cibles fines d'aluminium autosupportées. Ces cibles sont fabriquées grâce à une technique d'évaporation sur des lames de verre recouvertes au préalable d'un mouillant. Le film ainsi formé est décollé de la lame par immersion progressive dans de l'eau distillée qui va dissoudre le mouillant et est recueilli sur un support d'aluminium. Les supports, de forme trapézoïdale sont percés soit d'un trou ovale de hauteur 5 mm et de largeur 12 mm, soit d'un trou circulaire de diamètre 16 mm. Il faut en effet choisir un compromis entre avoir un trou de grande taille devant celle du faisceau afin de minimiser le bruit de fond dû à l'interaction faisceau-support de cible, et un trou suffisamment petit pour bien maintenir la cible et éviter qu'elle se détruise. Un trou ovale était donc utilisé pour les cibles les plus fines (de 3 à 21 $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour le carbone, et la cible de 5 $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ d'aluminium supportée par 13 $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone), et un trou circulaire pour les cibles plus épaisses. Notons qu'une

étude antérieure (Despiney, 1994) a montré que la structure du carbone dans nos cibles est amorphe, et que le passage sous faisceau ne modifie pas cette structure.

Nos observables dépendent de l'épaisseur de cible traversée et il est donc important d'effectuer des mesures sur celle-ci. De plus, les sections efficaces des mécanismes de collision dépendent du numéro atomique de la cible Z_c : les processus d'ionisation et d'excitation varient en $C_E(Z_c) \times Z_c^2$ avec $C_E(Z_c)$ un coefficient dit de "saturation" pour les sections efficaces et dépendant du numéro atomique de la cible (Adoui, 1995; Vernhet, Adoui, Rozet *et al.*, 1997). Afin que les conditions initiales du transport, c'est à dire le processus initial de peuplement, soient bien connues, il est nécessaire de maîtriser le taux et la nature des impuretés. Cette mesure est effectuée en même temps que celle de l'épaisseur des cibles, par une méthode de Rutherford Back Scattering (RBS).

Des mesures ont été réalisées auprès de l'accélérateur Van de Graaff du Groupe de Physique des Solides (GPS, Universités Paris VII et VI - CNRS). Le principe de l'expérience est simple. Un faisceau de particules α d'énergie $E_0=2$ MeV vient frapper perpendiculairement une cible à tester. Un détecteur à barrière de surface placé dans notre cas à 165° par rapport à la direction du faisceau incident permet d'enregistrer les spectres en énergie des particules α rétrodiffusées. L'étalonnage en énergie du détecteur est effectué grâce à une cible référence comportant un nombre connu d'atomes par cm^2 de bismuth implanté dans une matrice de silicium. L'énergie des particules α rétrodiffusées et donc la position des pics sur les spectres dépendent du numéro atomique de l'atome cible. L'intégrale d'un pic S_E correspondant à la détection d'un élément E est reliée au nombre d'atomes/ cm^2 , n_E , par la formule suivante:

$$n_E = \frac{S_E}{S_{\text{Bi}}} \frac{\sigma_{\text{Bi}}}{\sigma_E} n_{\text{Bi}} \frac{D_{\text{Bi}}}{D_E} \left(1 - \frac{\Delta E}{2E_0} \right)^2 \quad (147)$$

avec: - S_{Bi} surface du pic de Bi.

- $\sigma_{\text{Bi}}/\sigma_E$ rapport des sections efficaces de rétrodiffusion Bi sur l'élément E.

- n_{Bi} épaisseur de la cible de référence de Bi (ici $5.68 \cdot 10^{15}$ atomes par cm^2).

- D_{Bi}/D_E rapport des nombres d' α incidents entre la mesure sur la cible de référence Bi et celle de la cible testée.

- ΔE perte d'énergie dans la cible (tables de (Biersack and Ziegler, 1980)).

Un programme de dépouillement adapté (RUMP) nous a permis d'effectuer l'analyse complète des spectres enregistrés. A titre d'exemple deux spectres sont présentés figure 35. La figure 35-a correspond à une cible de carbone de $3,2 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ d'épaisseur pour laquelle la seule impureté présente est l'oxygène $Z_c=8$. La figure 35-b correspond à une cible de carbone de $28 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ de mauvaise qualité. Des impuretés lourdes ($36 < Z_c < 56$) sont, en effet, présentes en proportion non négligeable. Ce type de cible a été rejeté pour notre expérience.

Le tableau IX donne l'ensemble des caractéristiques des cibles de carbone et d'aluminium utilisées lors de l'expérience. La contribution au processus initial de peuplement des divers éléments (que l'on appelle "impureté" mais qui peut être le support de carbone d'une cible d'aluminium non-autosupportée) par rapport à l'élément-cible est donnée dans la dernière colonne par le rapport des sections efficaces d'excitation à partir de $1s$, $\sigma(Z_{\text{impureté}})/\sigma(Z_{\text{cible}})$ multiplié par le pourcentage d'atomes d'impuretés. Les sections efficaces d'excitation sont calculées par le calcul PWBA décrit au chapitre I. L'incertitude sur l'épaisseur qui est notée dans le tableau est l'incertitude **statistique** liée aux spectres RBS. Il faut noter qu'une étude effectuée lors d'une expérience précédente (Lamour, 1997) a montré que les cibles subissent un épaissement systématique d'environ $1 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. Les valeurs d'épaisseur portées dans le tableau IX ne tiennent pas compte de cet effet.

Notons que nous n'avons pas pu mesurer l'épaisseur par RBS de la cible de carbone la plus épaisse ($\approx 200 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) car l'énergie des particules α (2 MeV) est insuffisante pour permettre aux particules rétrodiffusées sur la face de sortie de la cible (flanc arrière) de retraverser complètement la feuille de carbone et d'être détectées.

A l'examen du tableau IX, nous voyons que la contribution des impuretés à l'excitation du projectile Kr^{35+} à partir de son niveau fondamental reste négligeable ($< 5\%$) pour les cibles de carbone. Dans le cas des cibles d'aluminium non autosupportées, nous devons tenir compte de la couche de carbone dans nos modèles de transport, avant de les comparer à l'expérience. Pour que la phase de transport ait lieu préférentiellement dans l'aluminium, ces cibles ont été positionnées dans le faisceau de façon à ce que celui-ci pénètre par la face carbone et sorte par l'aluminium. La contribution de l'oxygène reste raisonnable ($< 15\%$) sauf pour la cible la plus fine (25%). Le point expérimental correspondant à cette cible devra donc être considéré au mieux comme un ordre de grandeur plutôt qu'une mesure quantitative. De plus le processus de capture varie en Z_c^4 et conduit à la production de raies héliumoiï des qui peuvent nous gêner pour le dépouillement. Il était donc important de vérifier que les cibles ne contenaient pas

d'impuretés lourdes. C'est pourquoi nous avons rejeté les cibles du type de celle correspondant au spectre de la figure 35-b.

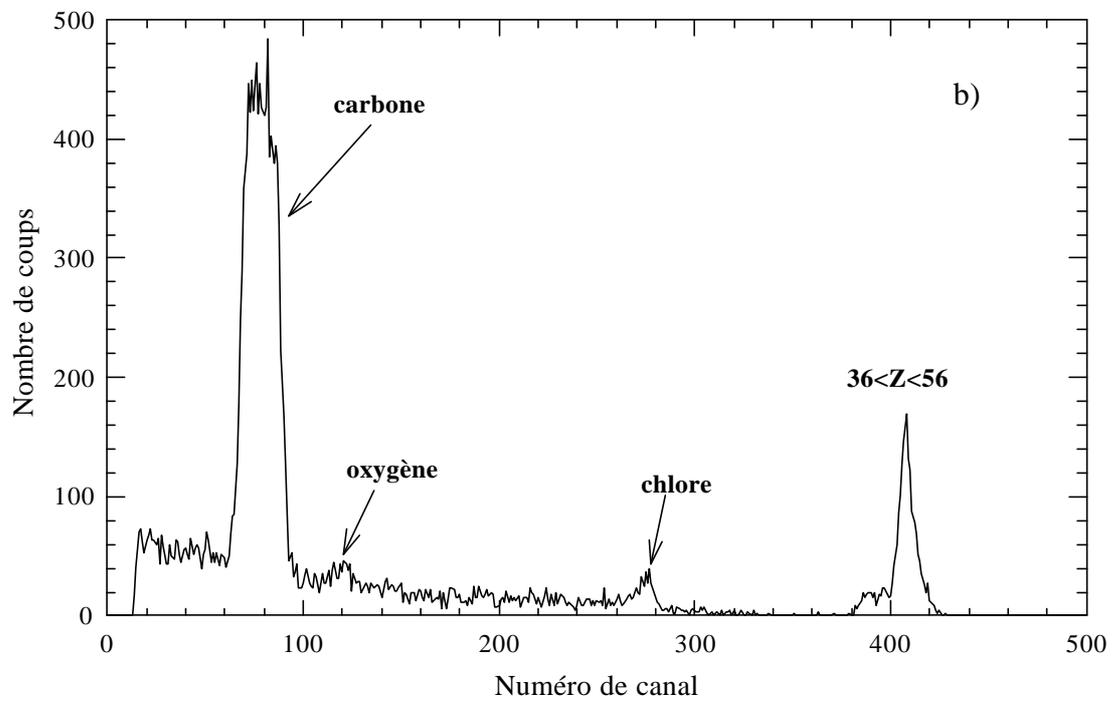
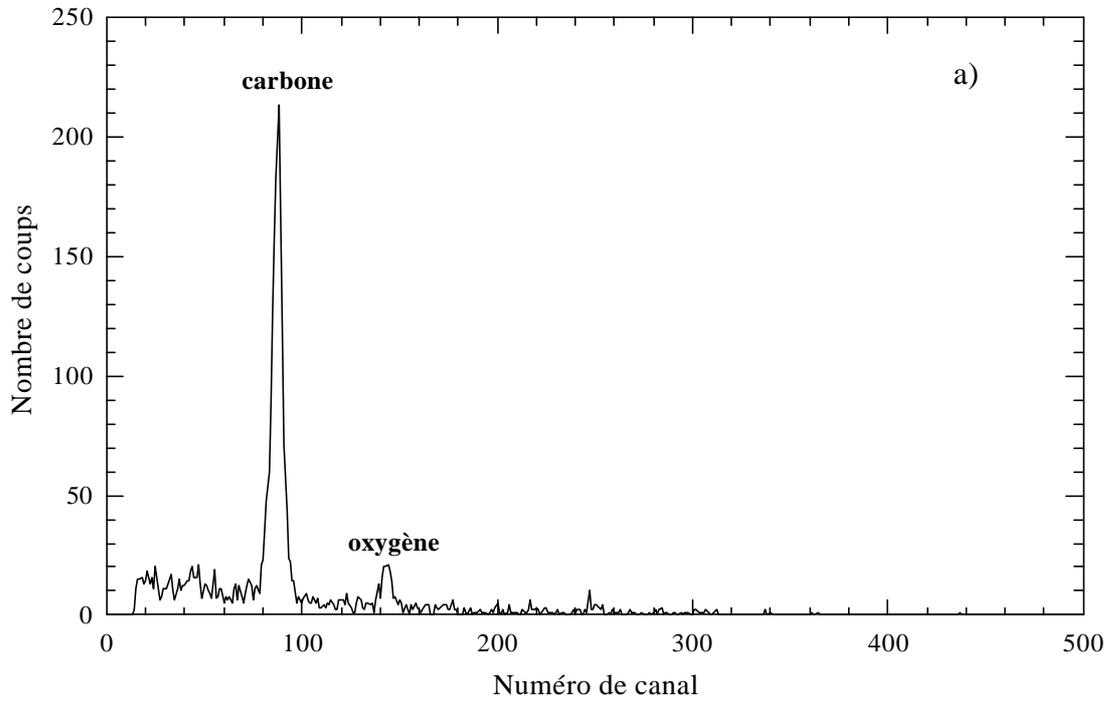


Figure 35 : Spectre en énergie des particules α rétrodiffusées détectées à 165°

a) pour une cible de $3,2 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone. b) pour une cible de $28 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone de mauvaise qualité.

Epaisseur de carbone ($\mu\text{g}/\text{cm}^2$)	Support de cible ϕ (mm)	$Z_{\text{impuretés}}$	Pourcentage d'atomes/ cm^2 d'impureté	Contribution (%) des impuretés à l'excitation à partir de 1s du krypton vers une couche $n \leq 10$
3,2 ($\pm 8\%$)	ovale	8	2,6	4,7
7 ($\pm 7\%$)	ovale	8	2,4	4,3
15 ($\pm 5\%$)	ovale	8	1,9	3,4
21,6 ($\pm 5\%$)	ovale	8	1,8	3,3
≈ 35	$\phi 16$	non mesurée		
77 ($\pm 5\%$)	$\phi 16$	8	0,2	0,4
111 ($\pm 4\%$)	$\phi 16$	8	0,2	0,4
≈ 200	$\phi 16$	8	0,1	0,2

Epaisseur d'aluminium ($\mu\text{g}/\text{cm}^2$)	Support de cible ϕ (mm)	$Z_{\text{autre élément}}$	Pourcentage d'atomes/ cm^2 d'autre élément	Contribution (%) des autres éléments à l'excitation à partir de 1s du krypton vers une couche $n \leq 10$
4,8 ($\pm 6\%$) sur carbone	ovale	6	640	150
13,6 ($\pm 6\%$)		8	60	25
10,6 ($\pm 5\%$) sur carbone	$\phi 16$	6	300	70
14,0 ($\pm 6\%$)		8	29	12
20,4 ($\pm 5\%$) sur carbone	$\phi 16$	6	145	34
13,2 ($\pm 6\%$)		8	16	6,4
40 ($\pm 5\%$)	$\phi 16$	6	13	3,1
		8	12	5,1
72 ($\pm 5\%$)	$\phi 16$	6	4,7	1,1
		8	5,0	2,1

Tableau IX : Récapitulatif des caractéristiques des cibles de carbone (en haut) et d'aluminium (en bas) utilisées lors de l'expérience.

Enfin, il faut préciser que le système porte-cible permettait, pendant l'expérience au GANIL, d'incliner les cibles, afin de permettre un recoupement des mesures à une épaisseur donnée en utilisant des cibles différentes ou d'effectuer des mesures à des épaisseurs intermédiaires. La gamme finale d'épaisseurs est de $3,2 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ à $200 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ pour le carbone, représentant 14 épaisseurs différentes, et de $4,8 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ à $103 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ pour l'aluminium, représentant 6 épaisseurs différentes.

3°) Système de détection

a) Implantation des détecteurs

Lors de l'expérience, l'ensemble des photons détectés, signant la désexcitation des états excités de Kr^{35+} formés lors de la traversée de cibles solides, appartient au domaine en énergie d'émission X. Deux types de systèmes de détection ont été utilisés :

- ❖ des diodes semiconductrices placées à 3 angles différents (60° , 120° et 150°) détectant l'ensemble des X émis sur une plage de 1,5 à 45 keV environ et permettant en particulier d'enregistrer les transitions de type Lyman avec une résolution suffisante.
- ❖ deux spectromètres cristallins à cristal mosaï que plan équipés de détecteurs à localisation, placés à $\pm 30^\circ$ et en géométrie verticale. Un premier spectromètre était chargé de détecter l'ensemble des transitions Balmer α tandis que le second effectuait un zoom sur la région comprenant les raies Ba_1 , Ba_2 et Ba_3 afin de mieux séparer les transitions très proches Ba_2 et Ba_3 permettant de mesurer le rapport de populations $3d_{3/2}/3d_{5/2}$.

On peut voir l'implantation du dispositif expérimental sur la figure 36.

Le choix des angles d'implantation est guidé par les problèmes de polarisation : en effet, l'intensité de l'émission d'une transition dipolaire électrique est fonction de la polarisation du rayonnement et de l'angle d'émission du rayonnement par rapport à l'axe de quantification (ici, l'axe du faisceau). De plus, la réponse des spectromètres cristallins sera différente selon que le vecteur électrique est parallèle ou perpendiculaire au plan de réflexion du cristal. Il existe cependant des "angles magiques" insensibles à la polarisation pour un système donné de détection (Vernhet, 1990).

Pour les détecteurs à jonction, ces angles magiques valent dans le référentiel du laboratoire :

$$\theta_L^1 = \pm 39,8^\circ \quad \text{et} \quad \theta_L^2 = \pm 107,1^\circ$$

Notre chambre de collision étant une enceinte dodécagonale, nous avons choisi de placer les jonctions à 60° , 120° , et 150° . La jonction placée à 120° est insensible à la polarisation, tandis que les deux autres le sont. La comparaison des signaux donnés par ces trois détecteurs à semiconducteur permettrait alors d'étudier la polarisation et donc les populations des niveaux magnétiques. Cependant cette étude ne fait pas l'objet de cette thèse et je ne reviendrai donc pas sur les détecteurs placés à 60° et 150° .

Les spectromètres cristallins jouent un rôle de polarimètre et leur angle magique dépend en particulier de la nature du cristal et de l'angle de Bragg utilisés. Pour un cristal mosaïque de graphite avec un angle de Bragg de 34° , représentatif de nos conditions expérimentales, l'angle magique vaut 38° dans le référentiel du projectile, soit $27,1^\circ$ dans le référentiel du laboratoire. La figure 37 illustre la sensibilité à la polarisation de 2 spectromètres tels que notre spectromètre de 750mm placés respectivement à 30° et 60° . Ce calcul a été effectué en utilisant la formule II-45 de la thèse d'Isabelle Despiney (Despiney, 1994). En plaçant nos spectromètres à $\pm 30^\circ$, ceux-ci sont donc très peu sensibles à la polarisation.

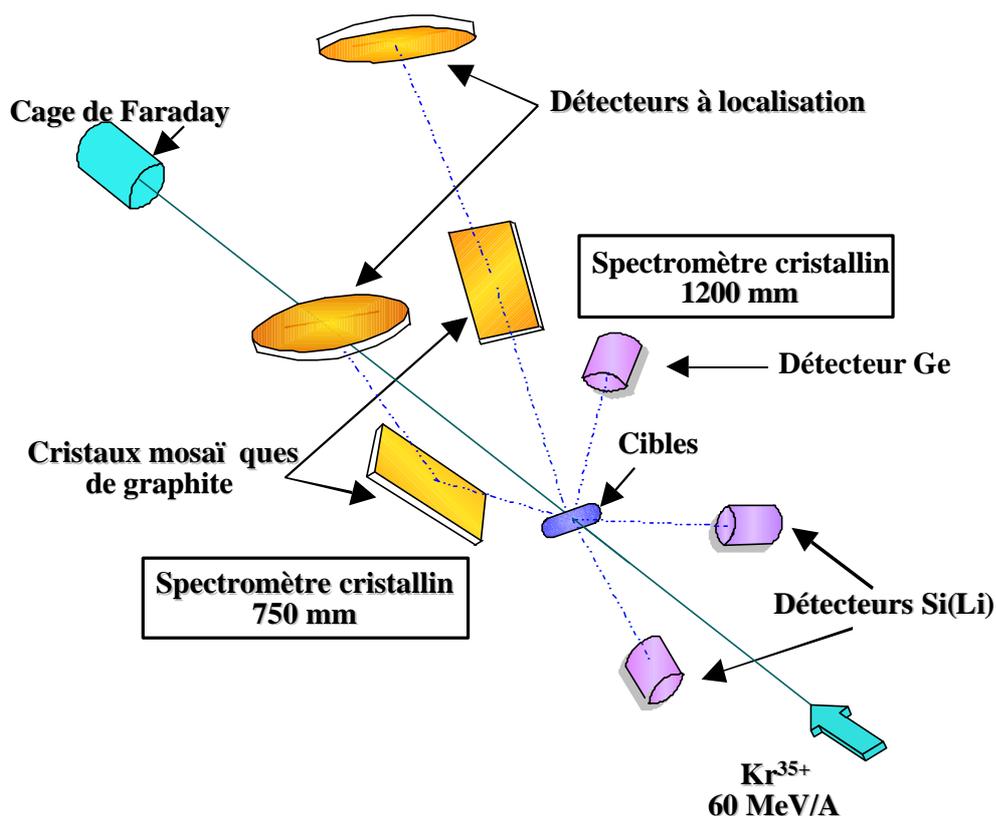


Figure 36-a : Représentation schématique du dispositif expérimental.

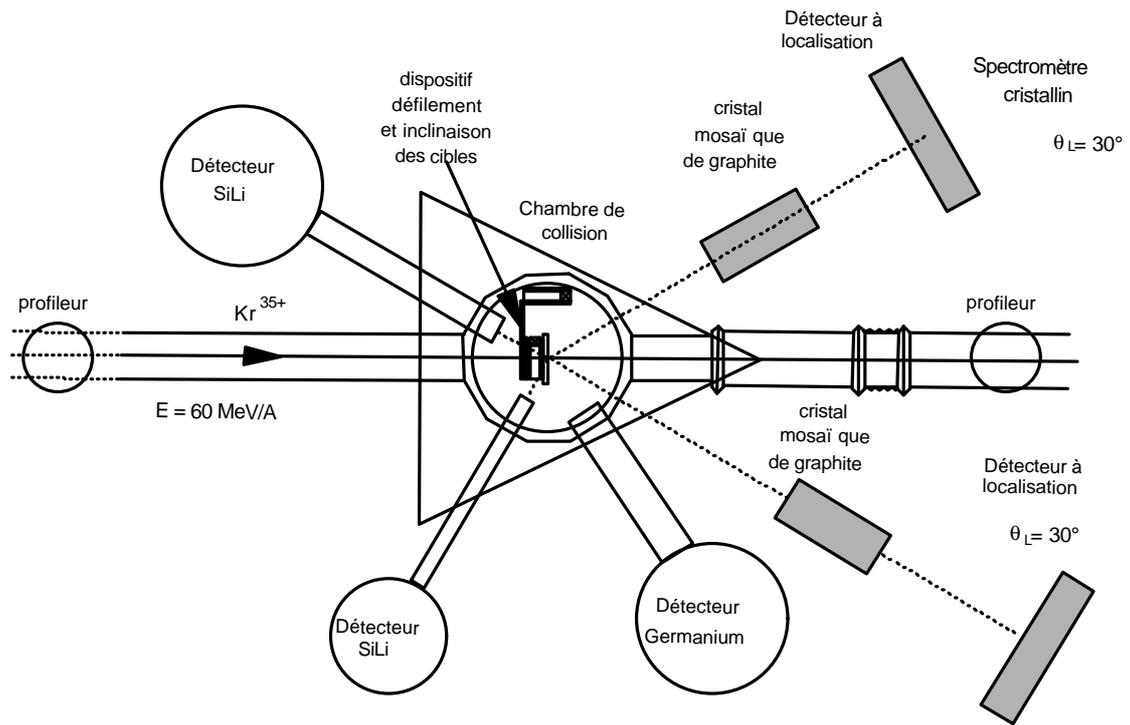


Figure 36-b : Implantation des détecteurs (vue de dessus).

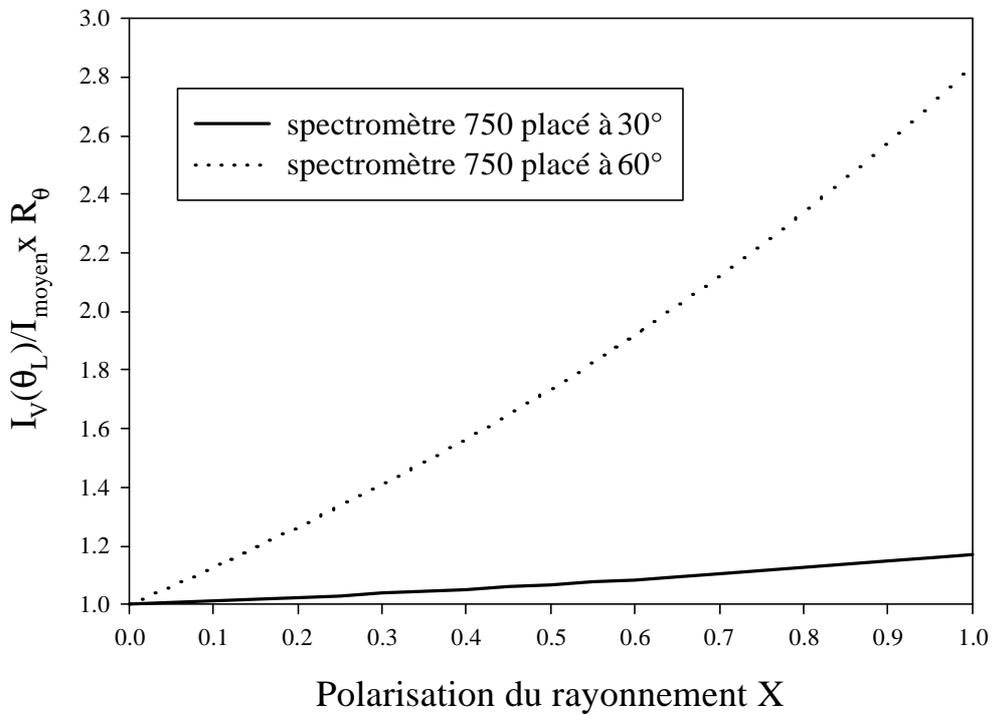


Figure 37 : Evolution de l'intensité enregistrée par le spectromètre 750mm placé à un angle donné en fonction de la polarisation du rayonnement.

b) Nature des X observés

i) Les X émis par le projectile

Les X du projectile, caractéristiques de la désexcitation radiative des états excités, sont émis en vol à la vitesse v telle que :

$$\beta = \frac{v}{c} = \left[1 - \left(\frac{1}{1 + \frac{E(\text{MeV/u})}{931,5}} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (148)$$

Cette relation donne $\beta = 0,3425$ pour $E = 60 \text{ MeV/A}$. On peut mesurer très finement l'énergie du faisceau à partir d'une mesure précise (à l'aide d'une sonde à résonance magnétique nucléaire) du champ magnétique régnant à l'intérieur des dipôles magnétiques permettant de le guider. Les valeurs données par les conducteurs du GANIL d'une part, et relevées dans la ligne LISE d'autre part amènent au même résultat $\beta = 0,3433$. C'est donc cette valeur qui est conservée par la suite.

L'énergie des transitions observées sera déplacée et les raies légèrement élargies par effet Doppler. Nous verrons au Chap.II§II-3-d-i que l'utilisation des spectromètres en géométrie verticale permet de rattraper cet élargissement au 1^{er} ordre. Les énergies E_L des X dans le référentiel du laboratoire sont proportionnelles à celles exprimées dans le référentiel du projectile E_p :

$$E_L(\theta_L) = E_p \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{1-\beta \cos \theta_L} \quad (149)$$

θ_L étant l'angle d'observation dans le référentiel du laboratoire (angle de détection par rapport à l'axe du faisceau).

◆ Transitions Lyman

Ces transitions sont observées par le détecteur à jonction Si(Li) placé à 120° par rapport à l'axe du faisceau. En plus des transitions hydrogénoïdes des $np \rightarrow 1s$, on a observé des transitions Lyman de type héliumoïde de $1snp \rightarrow 1s^2$ résultant d'un processus de capture par le projectile. Les tableaux X et XI présentent les énergies de ces transitions dans le référentiel propre du projectile et dans le référentiel du laboratoire, à l'angle d'observation $\theta_L = 120^\circ$.

On voit dans ces tableaux que les deux composantes de chaque transition Lyman (hydrogénoïde ou héliumoïde) sont séparées de moins de 100 eV et ne peuvent donc pas être

distinguées par nos détecteurs à jonction dont la résolution intrinsèque dans cette gamme d'énergie est de l'ordre de 290 eV. On pourra par contre distinguer les transitions Lyman $np \rightarrow 1s$ issues de n différents jusqu'à $n = 4$.

	Etat initial	E_p (eV) référentiel du projectile	E_L (eV) référentiel du laboratoire $\theta_L = 120^\circ$
Ly H_α	$2p_{1/2}$	13429	10765
	$2p_{3/2}$	13509	10829
Ly H_β	$3p_{1/2}$	15942	12780
	$3p_{3/2}$	15966	12799
Ly H_γ	$4p_{1/2}$	16818	13482
	$4p_{3/2}$	16828	13490
Ly H_δ	$5p_{1/2}$	17222	13806
	$5p_{3/2}$	17227	13810
Ly H_ϵ	$6p$	17444	13984
	fin de série	17936	14378

Tableau X : Energies des transitions Lyman ($np \rightarrow 1s$) du Kr^{35+} (Desclaux, 1991).

	Etat initial	E_p (eV) référentiel du projectile	E_L (eV) référentiel du laboratoire $\theta_L = 120^\circ$
Ly He $_{\alpha}$ n=2	3P_1	13027	10443
	1P_1	13115	10513
Ly He $_{\beta}$ n=3	3P_1	15409	12352
	1P_1	15435	12373
Ly He $_{\gamma}$ n=4	3P_1	16220	13002
	1P_1	16225	13006
Ly He $_{\delta}$ n=5	3P_1	16235	13014
	1P_1	16246	13023
	fin de série	17297	13866

Tableau XI : Energies des transitions de type $1snp @ 1s^2$ du Kr^{34+} (Desclaux, 1987)

◆ Transitions Balmer α

L'optimisation de la résolution et de la transmission des spectromètres cristallins permet d'avoir directement accès aux composantes de structure fine de la Balmer α . Les cinq composantes principales de structure fine bien résolues en énergie sont :

$$Ba_1 : 3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$$

$$Ba_2 : 3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$$

$$Ba_3 : 3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$$

$$Ba_4 : (3p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}) + (3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2})$$

$$Ba_5 : (3p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}) + (3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2})$$

Le tableau XII résume les énergies de ces transitions dans le référentiel propre et dans le référentiel du laboratoire, à l'angle d'observation $\theta_L = 30^\circ$, ainsi que les rapports de branchement.

Transition	E_p (eV) référentiel du projectile	E_L (eV) référentiel du laboratoire $\theta_L = 30^\circ$	Rapports de branchement %
Ba ₁ : $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	2433,69	3252,86	69,70
Ba ₂ : $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	2456,69	3283,60	16,19
Ba ₃ : $3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	2464,31	3293,79	100
Ba _{4a} : $3p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$	2511,03	3356,23	12,47
Ba _{4b} : $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$	2513,27	3359,23	30,30
Ba _{5a} : $3p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$	2534,66	3387,82	11,71
Ba _{5b} : $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$	2536,34	3390,06	83,70

Tableau XII : Energies (Desclaux, 1991) et rapports de branchement (Pal'chikov, 1998) des composantes de la transition Balmer α ($3\ell \rightarrow 2\ell'$) de Kr^{35+} .

En plus des transitions hydrogénoïdes, nous avons pu observer la présence d'un certain nombre de transitions héliumoïdes Balmer α $1s3\ell \rightarrow 1s2\ell'$ consécutives à la désexcitation du Kr^{34+} formé par capture. La décomposition de nos spectres nécessite que l'on connaisse avec précision les énergies de ces transitions et des rapports de branchement. Il existe en tout 23 composantes Balmer héliumoïdes, mais seulement 4 d'entre elles sont enregistrées par nos spectromètres cristallins en même temps que les raies hydrogénoïdes :

$$1s3p \ ^3P_0 \rightarrow 1s2s \ ^3S_1$$

$$1s3p \ ^3P_1 \rightarrow 1s2s \ ^3S_1$$

$$1s3p \ ^3P_2 \rightarrow 1s2s \ ^3S_1$$

$$1s3p \ ^1P_1 \rightarrow 1s2s \ ^3S_1$$

Le tableau XIII résume les énergies de ces transitions dans le référentiel propre et dans le référentiel du laboratoire, à l'angle d'observation $\theta_L = \pm 30^\circ$, ainsi que les rapports de branchement.

Transition	E_p (eV) référentiel du projectile	E_L (eV) référentiel du laboratoire $\theta_L = 30^\circ$	Rapports de branchement %
$1s3p\ ^3P_0 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$	2430,15	3248,13	100
$1s3p\ ^3P_1 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$	2432,24	3250,92	22,16
$1s3p\ ^3P_2 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$	2450,85	3275,80	100
$1s3p\ ^1P_1 \rightarrow 1s2s\ ^3S_1$	2457,10	3284,15	1,43

Tableau XIII : Energies et rapports de branchement des transitions de type $1s3l @ 1s2l'$ du Kr^{34+} (Cornille, 1987).

ii) Les X émis par la cible

Il faut d'abord préciser que ces photons ne font pas l'objet de notre étude. L'interaction du projectile avec la cible elle-même est la cause de plusieurs types de rayonnement :

- le rayonnement de freinage ("bremsstrahlung") provenant de la variation du mouvement des électrons de la cible rentrant en collision avec le projectile (bremsstrahlung primaire) et de leur interaction avec les autres électrons cibles (bremsstrahlung secondaire). Je reviendrai sur ce rayonnement lors de la description de l'extraction des résultats.

- l'interaction projectile-cible peut amener à l'ionisation de celle-ci, et la relaxation de l'atome conduit à l'émission d'un photon dont l'énergie est maximisée par celle de la couche K. Pour le carbone, cette énergie vaut 284 eV et est inférieure au seuil d'observation des détecteurs à jonction (≈ 1 keV) et en dehors de la plage observée par les spectromètres cristallins. Pour l'aluminium, cette énergie vaut 1,56 keV et se situe en dehors de la zone énergétique où se situent les transitions étudiées (à partir de 3 keV pour les Balmer, et 15 keV pour les Lyman).

L'interaction du faisceau avec le support de cible peut également produire des X_K du matériau utilisé. L'utilisation d'un matériau de Z élevé pourrait entraîner des bruits de fond importants sous les raies des transitions étudiées et des X d'énergies proches des transitions Balmer α ou Lyman. L'utilisation des supports en aluminium dont les X_K ont des énergies inférieures à 1,5 keV résout ce problème.

Enfin, nous avons monté des collimateurs devant nos détecteurs à jonction, afin de limiter leur angle solide de détection et donc le taux de comptage et le temps mort de

l'acquisition (voir Chap.II§II-3-e). Ces collimateurs étant en laiton (principalement composé de cuivre), il est possible que des raies K_{α} et K_{β} du cuivre soient produites. Ces raies, d'énergie proche de 8 keV, se trouvent en dehors des fenêtres énergétiques qui nous intéressent. Elles ne posent donc aucun problème pour l'analyse des résultats.

c) Détecteurs à jonction

i) Principe de fonctionnement

Le matériau sensible est un semi-conducteur Si(Li) soumis à une tension de polarisation typiquement de l'ordre de 1000 à 1500 V. Cette polarisation fait apparaître une zone sensible de déplétion. Un photon X traversant cette zone peut créer un électron principalement par effet photoélectrique. Cet électron crée à son tour des paires électron-trou dont la charge est collectée grâce au champ de polarisation. Cette charge fournit alors un signal proportionnel à l'énergie du photon incident. Le détecteur utilisé a fait l'objet d'études exhaustives dans des thèses précédentes (Adoui, 1995; Lamour, 1997) et on pourra s'y reporter pour plus de renseignements. Je présenterai dans la suite les caractéristiques essentielles qui ont servi au dépouillement des spectres.

ii) Efficacité du détecteur à jonction utilisé

L'efficacité du détecteur est le rapport entre les événements enregistrés et ceux émis par une source radioactive calibrée. Elle varie beaucoup avec l'énergie des X étudiés à cause des phénomènes physiques à la base de la détection (effet photoélectrique principalement).

La figure 38 montre la courbe d'efficacité calculée pour le détecteur Si(Li) placé à 120° ainsi que des mesures expérimentales obtenues pour ce détecteur (Lamour, 1997). Pour montrer l'influence de la fenêtre d'entrée de Be, chargée de maintenir l'étanchéité dans le détecteur, sur la transmission, les courbes sont tracées en tenant compte ou pas de l'absorption dans cette dernière. Nous pouvons constater que son influence est grande dans le cas d'un détecteur Si(Li) à basse énergie, mais nulle au dessus de 10 keV.

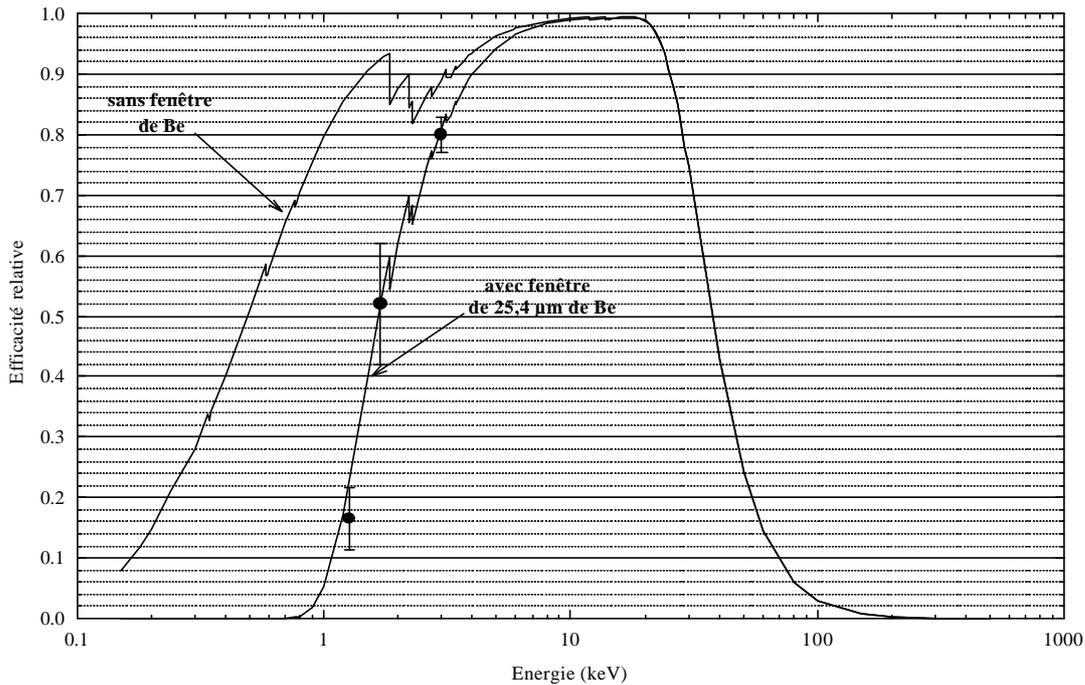


Figure 38 : Efficacité du détecteur Si(Li) utilisé à 120° en fonction de l'énergie du rayonnement X détecté.

Notons que ce détecteur est particulièrement adapté à la détection des Lyman que l'on veut mesurer, puisque sur toute la plage en énergie correspondante (≈ 10 - 18 keV) l'efficacité est maximale et constante. Dans cette plage, elle vaut 0,99. L'incertitude sur cette efficacité provient essentiellement de l'incertitude sur l'épaisseur de la fenêtre de Be (20%) et sur l'épaisseur de la zone morte de détection (50%) de la jonction. Comme on peut le voir sur la figure 38, l'influence de la fenêtre de Be est nulle dans le domaine d'énergie qui nous intéresse pour les transitions Lyman et l'incertitude sur l'efficacité est inférieure à 1%. Lorsqu'on s'intéresse à un rapport d'intensités entre les raies Lyman, l'erreur est bien inférieure à 1%.

iii) Angle solide et transmission globale

Compte tenu des caractéristiques de la jonction Si(Li) et de la chaîne d'acquisition utilisée, nous devons limiter le nombre d'X arrivant sur la jonction à ≈ 3000 cps/s. Dans ce but, un diaphragme de diamètre $D = 0,55$ mm et d'épaisseur 3 mm a été placé devant la fenêtre d'entrée du détecteur, car il faut par ailleurs maximiser l'intensité du faisceau d'ions Kr^{35+} pour obtenir un taux de comptage correct sur les spectromètres cristallins. Soit R la distance cible-détecteur, l'angle solide de détection dans le référentiel du laboratoire s'exprime comme :

$$\frac{\Omega_L}{4\pi} = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\left(\arctan\frac{D}{2R}\right) \right] \approx \frac{D^2}{16R^2} \quad (150)$$

avec $R = 125,5$ mm, on a $\frac{\Omega_L}{4\pi} = 1,20 \cdot 10^{-6}$. L'erreur relative sur cet angle solide est de 4% et provient de l'incertitude sur le diamètre D mesuré au microscope.

L'angle solide ainsi déterminé est relatif à un repère fixe et c'est effectivement l'angle solide de détection des X de la cible. Dans le cas du projectile, l'émission a lieu en vol à grande vitesse ($\beta = 0,3433$) et les angles solides subissent une correction relativiste donnée par les transformations de Lorentz. L'angle solide de détection des X émis par le projectile Ω_p vérifie alors :

$$\frac{d\Omega_p}{d\Omega_L} = \frac{1 - \beta^2}{(1 - \beta \cos \theta_L)^2}.$$

Dans nos conditions expérimentales, $\beta = 0,3433$ et $\theta_L = 120^\circ$, on obtient alors $\frac{d\Omega_p}{d\Omega_L} = 0,642$. L'angle solide ainsi calculé est correct pour un X émis au centre de la chambre de collision. Le faisceau ayant une certaine étendue, la valeur effective de l'angle solide est modifiée, et il faut introduire un facteur correctif C_{zi} pour en tenir compte. En effet, la largeur du faisceau est 7 mm et sa largeur apparente à 120° est 3,5 mm. Cette valeur est supérieure au diamètre du collimateur placé devant la jonction ($D=0,55$ mm) et donc le bord extérieur (i.e. le plus proche de la cible) du collimateur écrante une partie des photons émis par les projectiles les plus excentrés du faisceau. Pour notre géométrie, C_{zi} vaut 97,23%.

La transmission globale, rapport du nombre d'X détectés par le détecteur dans la configuration de l'expérience sur le nombre d'X émis par le projectile, s'écrit alors :

$$T_{\text{glob}} = \varepsilon_R \times \left(\frac{\Omega_L}{4\pi} \right) \times \left(\frac{d\Omega_p}{d\Omega_L} \right) \times C_{zi} \quad (151)$$

où ε_R est l'efficacité relative donnée en i) ($\varepsilon_R = 0,99$).

Compte tenu de tous ces termes, la transmission globale du détecteur à jonction placé à 120° vaut $7,4 \cdot 10^{-7}$.

iv) Etalonnage

L'étalonnage en énergie du détecteur a été réalisé en repérant sur les spectres enregistrés :

D'une part, les X_K d'énergies connues émis par des sources radioactives tels que :

- les X_{K_α} (Mn) d'énergie $E_{K_\alpha} = 5,89$ keV provenant d'une source de ^{55}Fe
- les X_{K_β} (Mn) d'énergie $E_{K_\beta} = 6,49$ keV provenant d'une source de ^{55}Fe .

D'autre part, les positions des transitions Lyman α ($2p \rightarrow 1s$) et β ($3p \rightarrow 1s$) du Kr^{35+} d'énergies bien déterminées (Tableau X), ainsi que la raie REC K provenant de la capture radiative en couche K du krypton. Bien que ce processus soit faible (et minoritaire par rapport à la capture mécanique), cette raie est visible sur les détecteurs à jonction. Sur celui placé à 120° , l'énergie correspondante vaut 40,8813 keV.

La droite d'étalonnage est obtenue par régression linéaire avec ces différents couples (position, énergie) et l'équation obtenue est :

$$E(\text{keV}) = 0,0230 n^\circ_{\text{canal}} + 0,043 \quad (152)$$

et la précision obtenue est de ± 1 canal.

Sur la figure 39, on peut voir la droite d'étalonnage obtenue et les différents points expérimentaux.

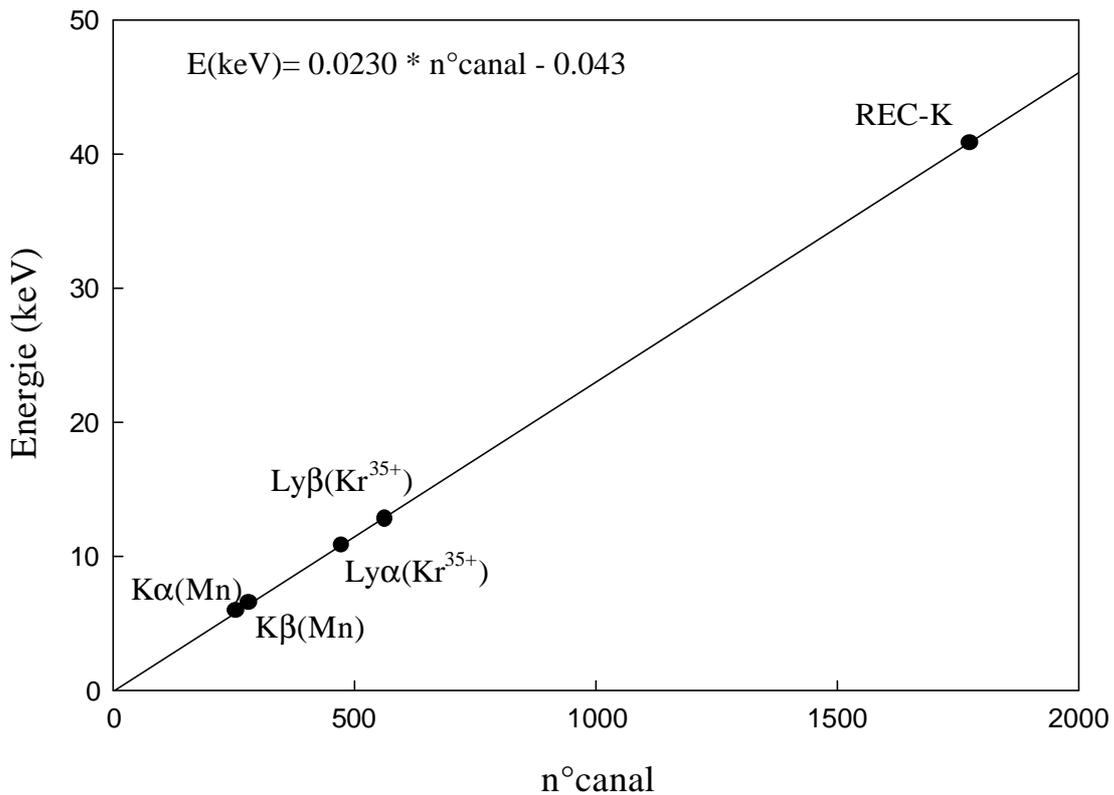


Figure 39 : Droite d'étalonnage de la jonction Si(Li) placée à 120° (énergie en keV en fonction de la position en canaux sur le détecteur).

v) Résolution

La résolution d'un détecteur à jonction, définie comme étant la largeur à mi-hauteur des raies enregistrées, est une fonction de l'énergie X détectée (elle varie grossièrement en $\sqrt{E_X}$). Elle a été mesurée en utilisant les sources radioactives de ^{55}Fe . Durant l'expérience, nous trouvons une résolution constante de 290 eV pour les transitions Lyman.

d) Spectromètres cristallins

Les spectromètres cristallins développés dans l'équipe sont conçus de façon à être très modulables. Ils se composent principalement d'un cristal mosaï que réfléchissant les X incidents et jouant le rôle de système dispersif et d'un détecteur à localisation de grande surface détectrice ($60 \times 60 \text{ mm}^2$). Chaque spectromètre se présente sous la forme de 2 longs tubes, appelés "bras" du spectromètre, reliant la chambre de collision à l'enceinte du cristal d'une part et celle-ci au détecteur à localisation d'autre part. L'ensemble fonctionne sous vide ($\approx 10^{-6}$ Torr) afin de s'affranchir de l'absorption des X de 3 keV.

Deux aimants parallèles établissant un champ magnétique intense (≈ 2500 Gauss) sont placés dans la chambre de collision, autour du diaphragme d'entrée de grande ouverture ($\phi=10$ mm) des deux spectromètres afin de réduire la contribution du bruit de fond provenant d'électrons secondaires éjectés lors de la collision. Les impératifs que doivent respecter les spectromètres sont :

- posséder une haute résolution pour distinguer les niveaux de structure fine et séparer en particulier les raies Ba_2 et Ba_3 .
- avoir une bonne transmission afin de maximiser le taux de comptage des détecteurs et donc minimiser le temps d'acquisition nécessaire par spectre et la contribution de bruit de fond.

Une étude complète des spectromètres ayant été faite dans des thèses précédentes (Despiney, 1994; Adoui, 1995), je donnerai les caractéristiques propres à notre configuration expérimentale de façon concise.

i) Cristal et géométrie

Le cristal est l'élément dispersif du spectromètre : la réflexion de photons de longueur d'onde λ se fera par les plans de notre cristal si la relation de Bragg est satisfaite :

$$2d \sin \theta_B = n\lambda \quad (153)$$

où d est la distance réticulaire du cristal de graphite ($2d = 6,71 \text{ \AA}$ dans notre cas), et n est l'ordre de réflexion ($n = 1$ dans notre cas).

Chaque énergie de photon correspond à un angle de Bragg et un seul, et s'identifie ainsi par une position donnée sur le détecteur à localisation (figure 40)

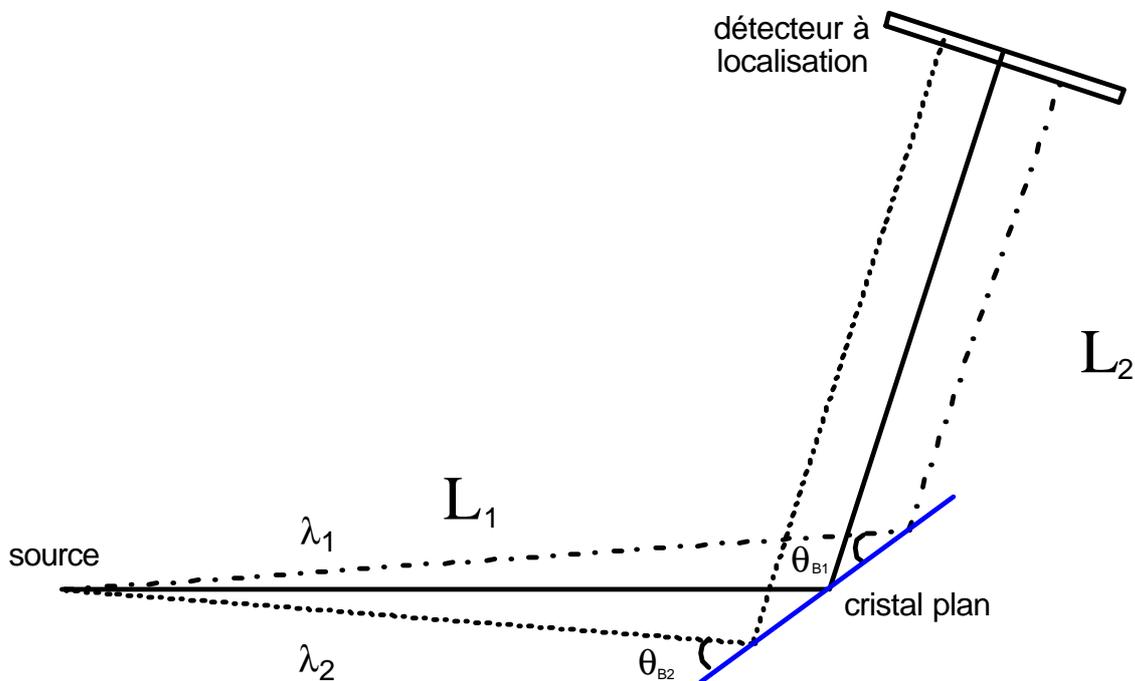


Figure 40 : Principe du cristal plan en mode réflexion.

Si la résolution d'un cristal plan est tout à fait remarquable (mieux que 10^{-3} dans la gamme de 3 keV), la transmission est insuffisante pour notre cas particulier. C'est pourquoi le choix s'est porté sur un cristal mosaïque : celui-ci est composé d'une mosaïque de microcristaux plans orientés au hasard, dont la distribution est de forme gaussienne de largeur à mi-hauteur 2α . Son principe de fonctionnement est le même que celui du cristal plan, mais on trouve plus d'un "point" qui va réfléchir un rayon incident d'une énergie donnée (l'angle d'incidence par rapport au plan moyen du cristal peut varier de $\theta_B - \alpha$ à $\theta_B + \alpha$), et la transmission est ainsi largement augmentée (d'environ un facteur 4 pour nos cristaux). De

plus, dans le cas particulier d'égalité des distances source-cristal (L_1) et cristal-détecteur (L_2), le rayonnement incident d'énergie E sera semi-focalisé sur le détecteur à l'intérieur d'une tache de largeur a (Adoui, 1995) :

$$a = \frac{2L\alpha^2}{\tan \theta_B} \quad (154)$$

$$L_1 = L_2 = L$$

Le cristal monté sur le spectromètre dont le bras avait une longueur de 750 mm ("spectromètre 750") avait une mosaïcité nominale de $0,6^\circ$. Celui monté sur le spectromètre 1200 avait une mosaïcité nominale de $0,2^\circ$. Des tests effectués lors de l'expérience ont permis de mesurer les valeurs réelles de mosaïcité. Celle-ci valait effectivement $0,6^\circ$ pour le cristal du spectromètre 750, mais valait $0,75^\circ$ pour celui du spectromètre 1200. Ceci a une incidence sur la plage énergétique effectivement vue par les spectromètres, comme nous le verrons plus loin.

La condition de semi-focalisation impose que les longueurs des bras soient identiques : $L_1 = L_2 = L$. Le choix de la taille des bras est guidé par un compromis à faire entre l'optimisation de la résolution et de la transmission. En effet la résolution augmente avec la longueur de bras (voir Chap.II§II-3-d-vii) tandis que la transmission diminue. La largeur de la fenêtre énergétique étudiée guide également ce choix puisqu'elle diminue lorsque la taille de bras augmente. L'ensemble de ces considérations a conduit au choix de construire un spectromètre avec $L = 750$ mm, chargé d'observer l'ensemble des raies Balmer α du projectile, et un autre de longueur de bras égale à 1200 mm, afin de bien séparer les raies Ba_2 et Ba_3 .

Enfin les spectromètres sont utilisés en géométrie verticale (ce qui signifie que le plan contenant les 2 bras du spectromètre est vertical) car cette technique permet de rattraper au 1^{er} ordre l'élargissement des raies dû à l'effet Doppler (Despiney, 1994; Adoui, 1995). Dans cette géométrie, le rattrapage est en effet possible en tournant le détecteur à localisation d'un certain angle φ autour de l'axe de symétrie du bras cristal-détecteur. Lors de l'expérience, une exploration en angle a permis d'ajuster finement la valeur de φ . Celle-ci ne variant pas de façon sensible pour les différentes raies à observer, la valeur optimisée a été conservée pour toute la durée de l'expérience. Elle valait $9,5^\circ$ pour le spectromètre 750, et $26,5^\circ$ pour le spectromètre 1200.

ii) Détecteur à localisation

Son principe de fonctionnement est le suivant : le détecteur est rempli d'un gaz dans lequel un photon X incident crée par effet photoélectrique un électron qui est accéléré vers l'anode portée à une haute tension (1750 V environ). Il s'en suit alors une émission d'électrons secondaires induisant une avalanche locale d'électrons et, consécutivement à celle-ci, la détection d'une charge de signe opposé, créée par influence, sur la cathode résistive.

Cette cathode est composée de strips de cuivre reliés entre eux par des résistances, et permet d'atteindre une résolution spatiale propre au détecteur de l'ordre de 500 μm .

La charge se propage alors vers chacune des deux extrémités de la cathode et on peut ainsi remonter à l'information localisation en mesurant les valeurs des charges Q_1 et Q_2 recueillies de chaque côté de la cathode :

$$\text{LOC} = \frac{Q_1}{Q_1 + Q_2}. \quad (155)$$

Le gaz détecteur utilisé dans cette expérience est un mélange de 90% de xénon, qui a une bonne efficacité aux énergies des X à détecter, et 10% de CH_4 dont le rôle est d'éviter les claquages.

L'efficacité du détecteur dépend de la pression de gaz. Afin de s'affranchir des fluctuations d'efficacité, une régulation de pression était utilisée et stabilisait la pression de gaz à la valeur 1,04 Atm. Une étude précédente (Adoui, 1995) a montré que l'utilisation de cette régulation limitait les variations d'efficacité à une valeur inférieure à 2%.

Le processus physique à la base de la détection du photon X incident étant bien connu (effet photoélectrique), on peut évaluer l'efficacité du détecteur par la relation :

$$\varepsilon(E) = \varepsilon_{\text{ph}} \times F \times (1 - P_{\text{échap}}) \quad (156)$$

avec :

- $\varepsilon_{\text{ph}} = 1 - \exp[-\mu_{\text{ph}}(E)x_{\text{gaz}}]$

$\mu_{\text{ph}}(E)$ est le coefficient d'atténuation de l'absorption photoélectrique dans le gaz détecteur (Xe) à la pression considérée en cm^{-1} . Pour un gaz, ce coefficient dépend de la pression P. On le calcule à partir de valeurs tabulées de (μ_{ph}/ρ_0) où ρ_0 est la masse volumique du gaz sous une pression de 1 atmosphère. μ_{ph} est donné par $(\mu_{\text{ph}}/\rho_0) \times \rho(P)$ et en considérant que $\rho(P)$ varie linéairement avec la pression (ce qui est légitime à basse pression), on a $\rho(P) = \rho_0 (P/P_0)$. Le CH_4 étant constitué d'atomes légers il est légitime de le négliger ici.

x_{gaz} est l'épaisseur traversée de gaz détecteur. Elle vaut 0,6 cm.

- $F = \exp[-(\mu_{My} x_{My} + \mu_{Al} x_{Al})]$

μ_{Al} , μ_{My} les coefficients d'absorption totale due à l'effet photoélectrique et aux diffusions Compton, respectivement dans la feuille d'aluminium et de Mylar constituant la fenêtre d'entrée du détecteur, en cm^{-1} .

x_{Al} et x_{My} les épaisseurs de ces deux composants en cm. $x_{My} = 10^{-3}$ cm et $x_{Al} = 4,4 \cdot 10^{-4}$ cm.

Notons que le Mylar étant composé de $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{O}_4$ nous avons calculé μ_{My} à partir des coefficients de ses constituants en respectant chaque proportion. Les coefficients d'absorption totale et photoélectrique pour ces éléments ainsi que pour Xe et Al sont tabulés dans (Veigle, Briggs, Bates *et al.*, 1971)

- $P_{\text{échap}}$: probabilité d'avoir un pic d'échappement. Les pics d'échappement apparaissent lorsqu'un photon primaire crée, par effet photoélectrique, un trou en couche K, (L, ...) du Xe et que le photon de réarrangement s'échappe du détecteur. Le photon X d'énergie initiale E sera alors détecté à l'énergie $E - E_K$, ($E - E_L$, ...), E_K , (E_L , ...) étant les énergies de liaison d'un électron K, (L, ...) du Xe. La probabilité de cette perte est d'autant plus importante que l'énergie du photon X incident est plus grande. Pour la couche L par exemple, elle s'exprime par (Hansen, McGeorge, Nix *et al.*, 1973) :

$$P_{\text{échap}} = \frac{1}{2} \frac{\mu_E^L}{\mu_E} \omega_L \left[1 - \frac{\mu_S}{\mu_E} \ln \left(1 + \frac{\mu_E}{\mu_S} \right) \right] \quad (157)$$

μ_E^L : coefficient d'absorption photoélectrique en couche L

μ_E et μ_S : coefficients d'absorption totale respectivement pour les photons incidents d'énergie E et pour les X_L du gaz considéré.

ω_L : rendement de fluorescence L du Xe.

La figure 41-a montre l'évolution de l'efficacité du détecteur à localisation en fonction de l'énergie du photon incident, pour deux sortes de gaz détecteurs : Xe(CH₄) et Ar(CH₄). La pression de gaz lors de cette expérience test est 1,15 atm, la profondeur de détection vaut 6 mm, l'épaisseur de Mylar 12 μm et celle d'aluminium vaut 3,7 μm . Les courbes sont les efficacités calculées par la formule (156), les points sont des mesures spécifiques faites à l'aide d'un canon à électrons sur 2 détecteurs à localisation. Le bon accord entre les points et les courbes montre la validité des calculs effectués. D'autre part, on voit que le choix du gaz détecteur Xe(CH₄) plutôt que Ar(CH₄) se justifie pour la gamme de photons d'énergie 3-4 keV

car on évite alors le seuil d'absorption K de l'argon, se situant vers 3,2 keV, tout en maximisant l'efficacité.

La figure 41-b montre la courbe d'efficacité d'un détecteur à localisation dans la configuration utilisée lors de l'expérience : $P = 1,04$ atm de $Xe(CH_4)$, ainsi que la fenêtre énergétique des X détectés par les spectromètres. On voit que l'efficacité est quasiment constante sur cette fenêtre énergétique (et vaut $\approx 0,73$). Il ne sera donc pas nécessaire d'effectuer des corrections d'**efficacité** sur les rapports d'intensités des raies Balmer α .

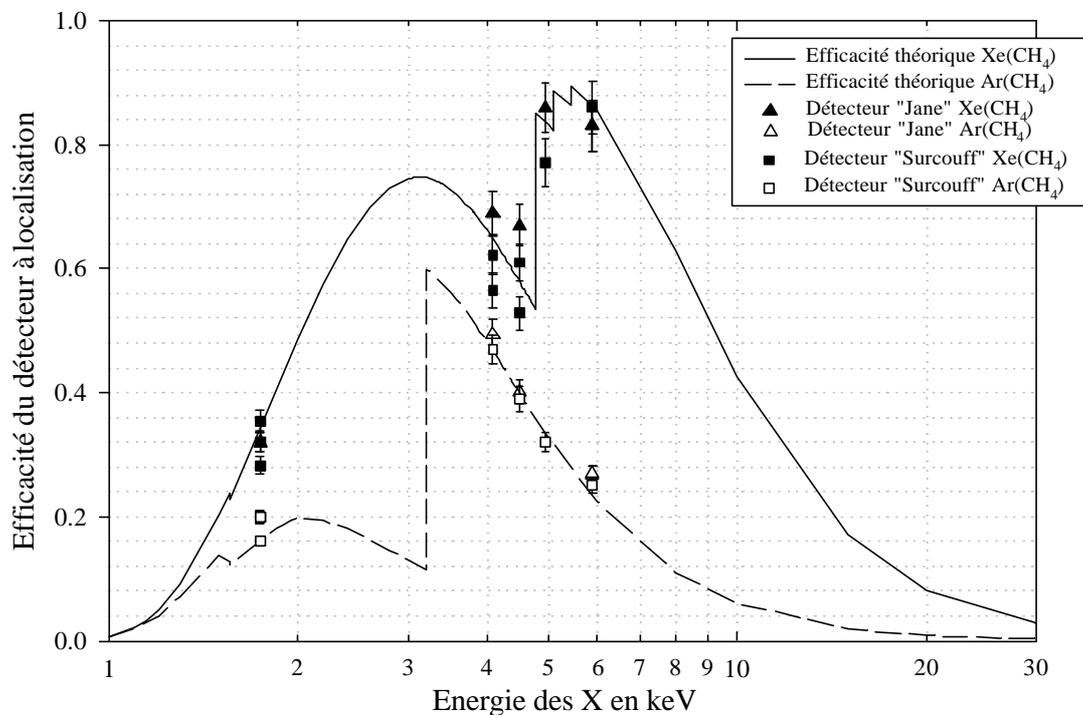


Figure 41-a : Evolution de l'efficacité de deux détecteurs à localisation pour deux gaz détecteurs $Ar(CH_4)$ et $Xe(CH_4)$ et comparaison avec une expérience test pour laquelle $P=1,15$ atm.

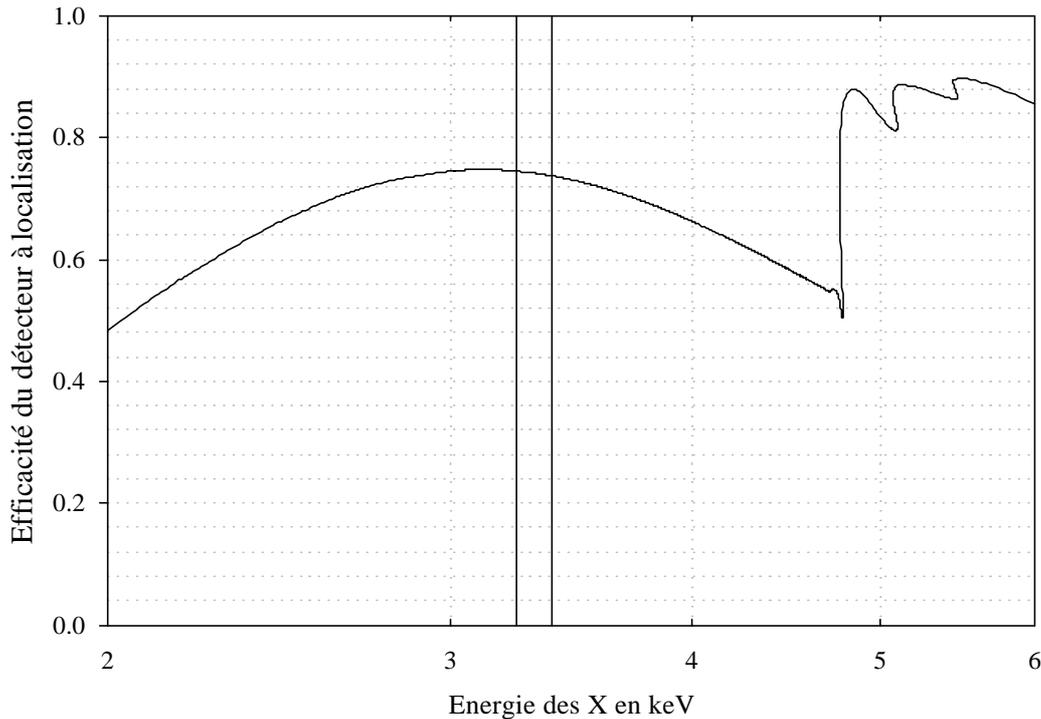


Figure 41-b : Evolution de l'efficacité du détecteur à localisation dans les conditions de l'expérience ($P = 1,04 \text{ Atm de Xe(CH}_4\text{)}$) et fenêtre énergétique observée.

iii) Test d'uniformité d'efficacité du détecteur

Afin de pouvoir comparer les intensités des différentes raies du spectre, il a fallu s'assurer que l'efficacité est la même sur toute la surface de détection. Pour cela, nous avons réalisé plusieurs spectres successifs, correspondant à la collision $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ ($111 \mu\text{g.cm}^{-2}$), en gardant l'angle d'incidence (θ_B) constant et en faisant varier la position du détecteur autour de l'angle de sortie ($2\theta_B$) : ainsi, une raie qui était détectée en x_1 va être détectée en x_2 . Pour tous ces spectres, nous avons mesuré l'intégrale des raies, et étudié le rapport ($I/\text{Far.}$) de l'intégrale par la charge électrique donnée par l'intégrateur lié à la cage de Faraday de bout de ligne et proportionnelle au nombre d'ions projectiles. La figure 42 montre les résultats de ces mesures pour les deux détecteurs utilisés. Pour ces figures, les rapports ont été normalisés au rapport $\text{Ba}_{2,3}/\text{Far.}$ où $\text{Ba}_{2,3}$ est la somme des intensités ($\text{Ba}_2 + \text{Ba}_3$). Nous voyons que les efficacités des détecteurs ne varient pas de façon notable sur la plage de détection. Nous avons également contrôlé que la largeur des raies ne variait pas sur la plage de détection en comparant les spectres normalisés entre eux.

Nous pouvons conclure que l'efficacité de détection et la résolution intrinsèque du détecteur ne varient pas avec la position d'incidence du rayonnement.

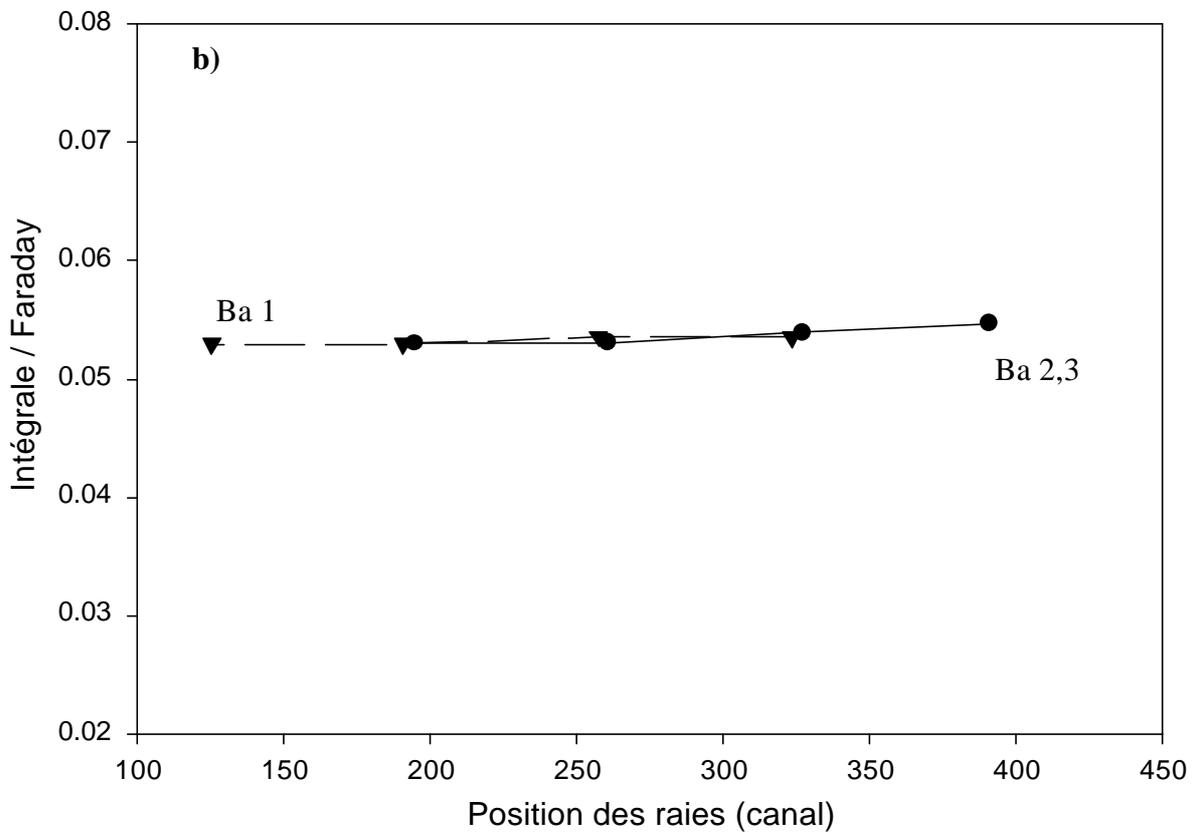
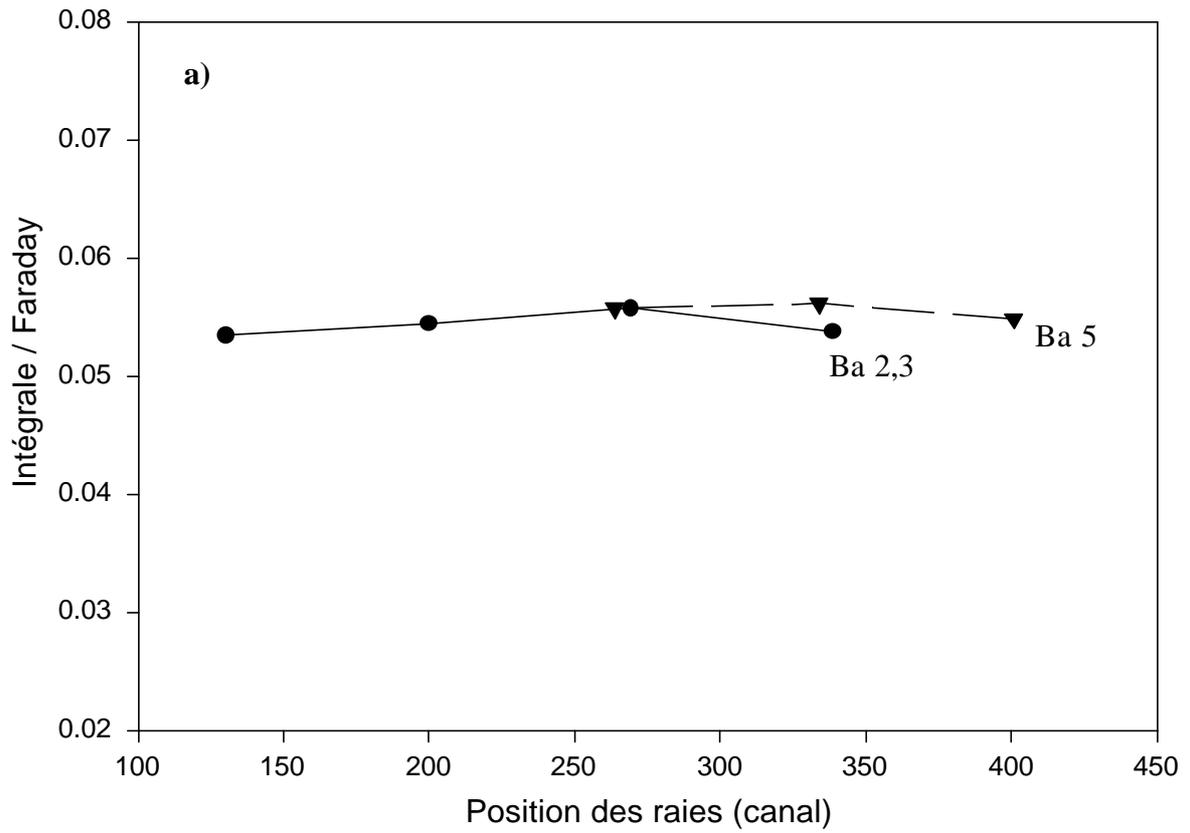


Figure 42 : Contrôle de la réponse du détecteur en efficacité en fonction de la position sur le détecteur : a) du spectromètre 750 mm – b) du spectromètre 1200 mm.

iv) Etalonnage en énergie du détecteur

L'étalonnage a été réalisé en repérant la position des raies lors de l'étude décrite au paragraphe précédent. En faisant varier la position des détecteurs par pas de 10 mm sans faire varier le rayon lumineux incident et en repérant le canal correspondant au centre de des raies, on peut à la fois vérifier que le coefficient de proportionnalité P (canal/mm) est constant sur toute la plage de détection, et mesurer ce coefficient. En effet, cette valeur de P est nécessaire pour identifier et simuler les raies enregistrées sur le spectre : la différence entre les positions (en n° de canal) de deux raies sur le détecteur est donnée en fonction des angles de Bragg θ_B correspondants par :

$$cnx(2) - cnx(1) = P \cdot 2L \tan[\theta_B(2) - \theta_B(1)] \quad (158)$$

où L est la longueur du bras du spectromètre (750 mm ou 1200 mm).

La figure 43 montre le résultat de ces mesures (points) ainsi que la pente P des droites obtenues par régression linéaire à partir de ces points. Les valeurs retenues pour P sont :

- spectromètre 750 : $P = -6,90 \pm 0,05$ cnx/mm
- spectromètre 1200 : $P = -6,55 \pm 0,06$ cnx/mm.

Précisons que l'ensemble de la plage de détection s'étendait du canal 1 au canal 512.

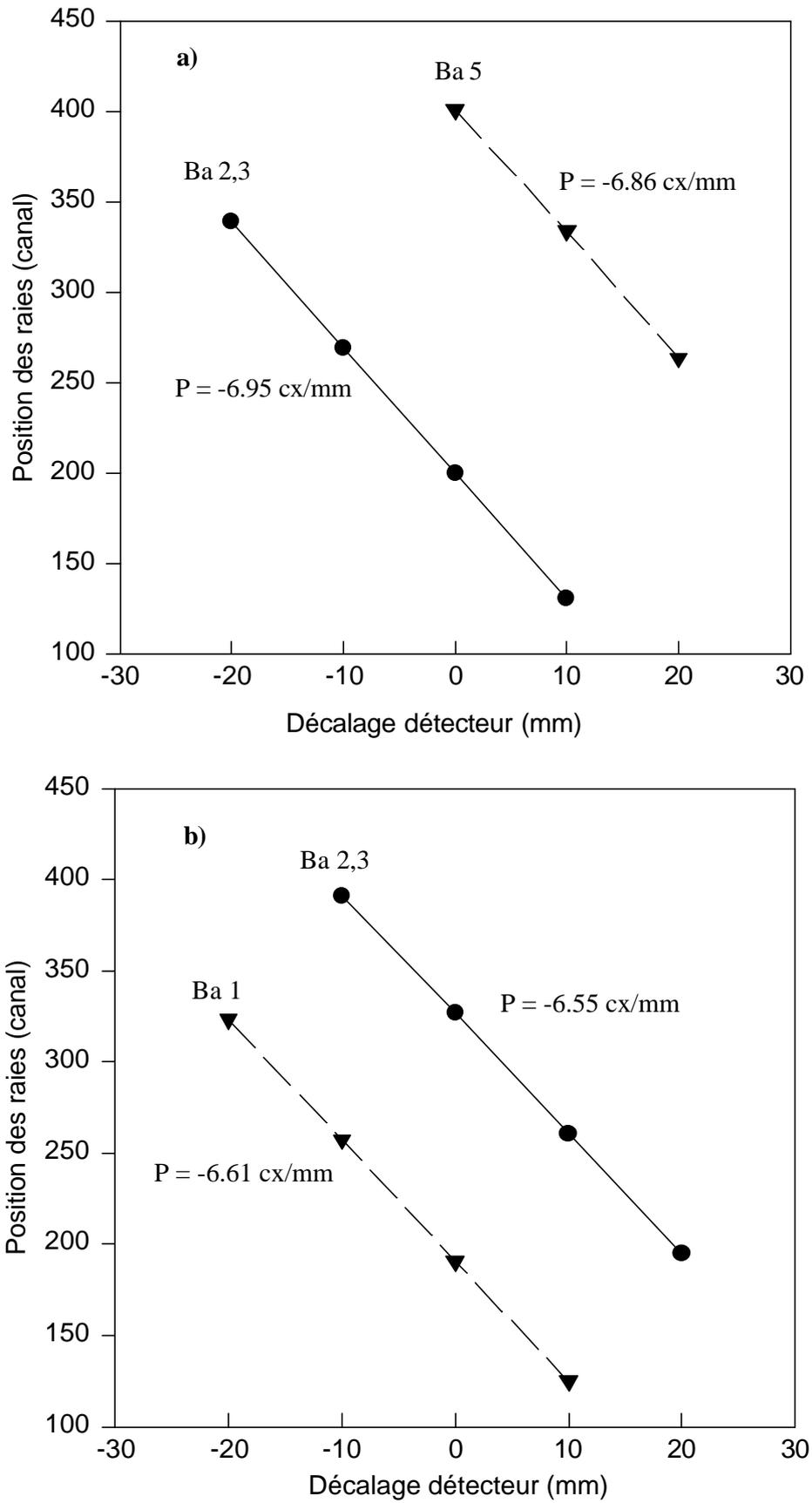


Figure 43 : Droites d'étalonnage en canal/mm. a) Détecteur du spectromètre 750 mm – b) Détecteur du spectromètre 1200 mm.

v) Plage en énergie et réflectivité des cristaux

La plage en énergie mesurée par le spectromètre peut être limitée soit par le cristal, soit par le détecteur. La figure 44 montre chacune de ces deux configurations dans le cas où le cristal est plan.

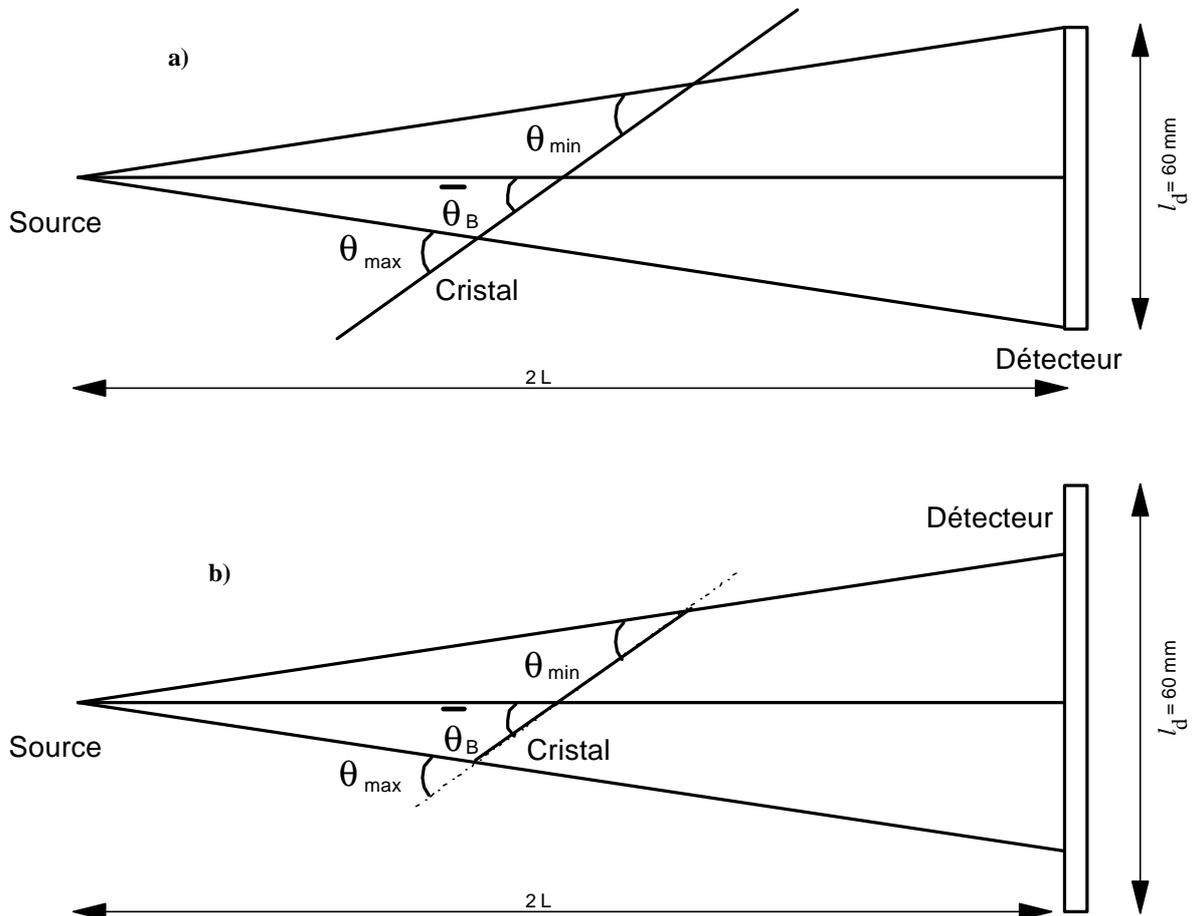


Figure 44 : Angles limites observés par un spectromètre à cristal plan. a) Plage limitée par le détecteur – b) Plage limitée par le cristal.

L'intérêt de limiter la zone vue par le détecteur et non par le cristal est de s'affranchir des effets de bord de celui-ci. De plus, la plage en énergie vue par le détecteur ne dépend alors pas de l'angle $\bar{\theta}_B$ (figure 44) du cristal. Pourtant, notre configuration expérimentale nous obligeait à nous limiter par le cristal, sans toutefois que cela soit gênant puisque chaque spectromètre enregistrerait une seule pose, correspondant à une seule valeur de $\bar{\theta}_B$. Notons que la figure 44 est représentée dans le cas d'un cristal plan. Quand le cristal est mosaïque, les valeurs θ_{\min} et θ_{\max} correspondant à une réflectivité maximale du cristal sont respectivement

augmentées et diminuées de la valeur de la mosaïcité du cristal. Les valeurs θ_{\min} et θ_{\max} sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \theta_{\min} = \bar{\theta}_B - \arctan \left[\frac{\frac{\ell}{2} \sin \bar{\theta}_B}{L + \frac{\ell}{2} \cos \bar{\theta}_B} \right] + \alpha \\ \theta_{\max} = \bar{\theta}_B + \arctan \left[\frac{\frac{\ell}{2} \sin \bar{\theta}_B}{L - \frac{\ell}{2} \cos \bar{\theta}_B} \right] - \alpha \end{array} \right. \quad (159)$$

où $\bar{\theta}_B$ est l'angle correspondant au milieu du cristal (figure 44) et dont la valeur est donnée dans le tableau XIV, ℓ est la longueur du cristal, L la longueur source-milieu du cristal et α la mosaïcité du cristal.

La mosaïcité du cristal utilisé sur le spectromètre 1200 était supérieure à la valeur nominale, ce qui a eu pour effet de réduire la plage en énergie correctement vue, par rapport à la valeur attendue. On peut calculer la plage en énergie pour chacun des spectromètres en appliquant la loi de Bragg (153) pour θ_{\min} et θ_{\max} . On obtient les résultats suivants :

- Spectromètre 750 mm :
 - $E_{\min} = 3225 \text{ eV}$
 - $E_{\max} = 3397 \text{ eV}$
- Spectromètre 1200 mm
 - $E_{\min} = 3249 \text{ eV}$
 - $E_{\max} = 3289 \text{ eV}$

En comparant ces valeurs avec celles des X émis par le projectile (Tableau XII), nous voyons que le spectromètre 750 mm observe correctement l'ensemble des raies Ba₁ (3251 eV) jusqu'à Ba₅ (3388 eV), nécessaires pour extraire les rapports de population $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, suivant les relations (144). Le spectromètre 1200 mm, chargé d'observer Ba₁, Ba₂ et Ba₃ et en particulier de faire un zoom sur les transitions Ba₂ et Ba₃, observe correctement Ba₁ et Ba₂ mais coupe en partie Ba₃ : la réflectivité du cristal à l'angle correspondant à l'énergie de Ba₃ ($3292 \text{ eV} > E_{\max}$) est inférieure à celle correspondant à Ba₂ (3282 eV).

Afin de mesurer la correction à effectuer sur l'intégrale de Ba₃, nous avons effectué des courbes de réflectivité, dont le principe est le suivant : pour une cible donnée (ici $111 \mu\text{g.cm}^{-2}$ de carbone) nous mesurons le rapport intégrale/Faraday (proportionnel à l'intensité de la raie par projectile) d'une raie donnée (la plus intense, c'est à dire Ba₃), en faisant varier l'angle $\bar{\theta}_B$

d'inclinaison du cristal. Nous suivons cette raie d'énergie donnée (et donc d'angle de Bragg fixé) qui se réfléchit à des positions différentes du cristal pour chaque inclinaison $\bar{\theta}_B$. On peut ainsi mesurer la réflectivité du cristal en fonction de l'angle d'incidence des photons (figure 45).

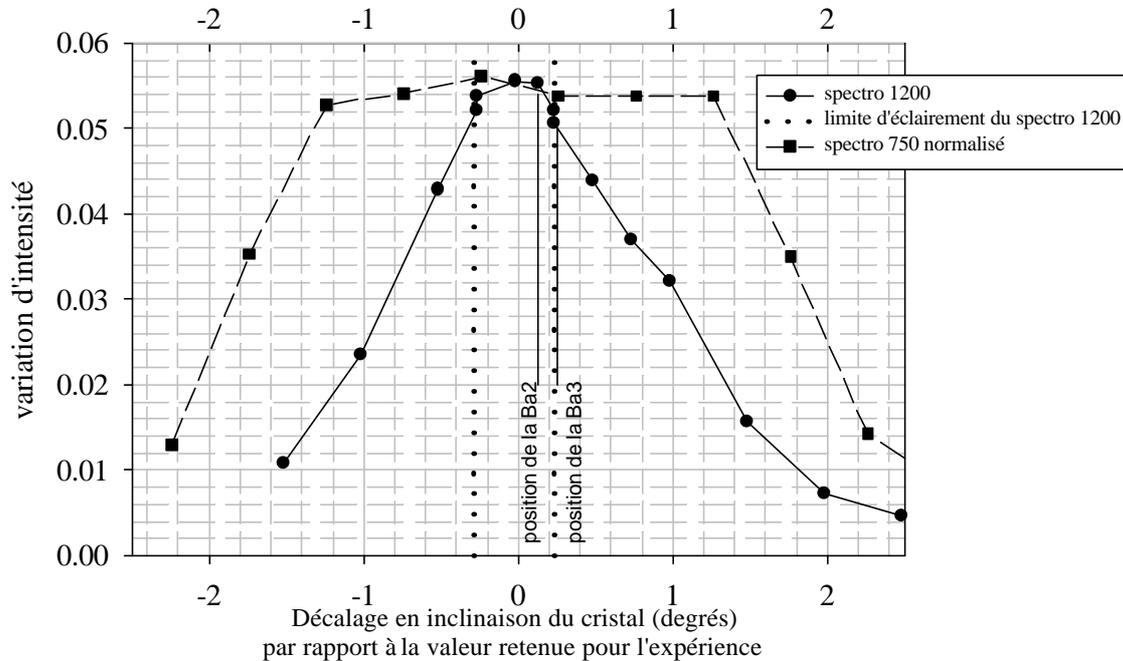


Figure 45 : Courbes de réflectivité des spectromètres 1200 et 750.

Nous voyons sur cette figure que le plateau de réflectivité maximale du spectromètre 750 est grand devant celui du spectromètre 1200. Ce résultat est compréhensible puisque la longueur de bras L est au dénominateur dans les expressions (159) de θ_{\min} et θ_{\max} . Pour le spectromètre 750 ce plateau s'étend sur plus de 1° de part et d'autre de la position choisie pour l'expérience, ce qui assure que toutes les raies étaient bien éclairées (les raies Ba_1 jusqu'à Ba_5 sont toutes contenues dans un intervalle de $\pm 1^\circ$ autour de la position choisie). Nous voyons également que l'angle d'incidence de la raie Ba_3 est situé en dehors du plateau du spectromètre 1200. L'incertitude sur ces courbes de réflectivité est trop importante pour pouvoir en extraire un coefficient correctif avec une barre d'erreur minime. Une calibration sur la raie héliumoi de ($1s3p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$) entre les 2 spectromètres nous a permis d'affiner cette mesure et il faut multiplier l'intensité de la raie Ba_3 mesurée par le spectromètre 1200 par un facteur 1,19 avant de la comparer à l'intensité de la raie Ba_2 . Notons par ailleurs que le contrôle de la stabilité de la position des raies sur le détecteur à localisation lors de

l'exploration en $\bar{\theta}_B$ nous a assuré de l'égalité des longueurs de bras des spectromètres ($L_1 = L_2$).

vi) Dispersion en énergie

La dispersion en énergie (eV/mm) d'un spectromètre dépend de l'énergie E_L du photon incident et vaut :

$$\text{Disp(eV/mm)} = \frac{E_L(\text{eV})}{2L(\text{mm}) \tan \theta_B} \quad (160)$$

où θ_B est l'angle de Bragg correspondant à l'énergie E_L et $2L$ la longueur totale du spectromètre. La dispersion moyenne pour les deux spectromètres vaut :

- Disp = 3,29 eV/mm pour le spectromètre 750
- Disp = 1,99 eV/mm pour le spectromètre 1200.

vii) Résolutions obtenues sur les spectromètres

Plusieurs termes contribuent à la résolution des spectromètres. Ils dépendent des caractéristiques du faisceau (en terme de dispersion et de géométrie), du cristal et du détecteur à localisation. Ces termes et leur contribution sont expliqués en détail dans un travail précédent (Adoui, 1995) que je résume ici ; les différentes contributions à la résolution sont :

- la dispersion en énergie du faisceau :

$$\left(\frac{\delta E}{E} \right)_{\text{dispersion en énergie}} = \frac{(\cos \theta_L - \beta) \frac{\Delta E}{E} (1 - \sqrt{1 - \beta^2})}{\beta(1 - \beta \cos \theta_L)}$$

où la valeur de la dispersion en énergie du faisceau est $\frac{\Delta E}{E} = 1,3 \cdot 10^{-2}$ trouvée expérimentalement si la dispersion angulaire du faisceau est nominale, et $\theta_L = 30^\circ$ est l'angle de détection dans le référentiel du laboratoire.

- la dispersion angulaire du faisceau :

$$\left(\frac{\delta E}{E} \right)_{\text{dispersion angulaire}} = \beta \frac{\sin \theta_L \Delta \theta_f}{1 - \beta \cos \theta_L}$$

où la dispersion angulaire $\Delta \theta_f$ (ou "straggling"), reliée à la divergence horizontale du faisceau est donnée par :

$$\Delta\theta_f = \frac{4 \text{ émittance du faisceau}}{\pi 2 \times \text{largeur du faisceau}}$$

avec $\Delta\theta_f = 1,43 \cdot 10^{-3}$ rad. dans notre cas, en négligeant le straggling supplémentaire induit dans les cibles solides (Tableau VIII). Nous voyons ici l'intérêt de travailler avec un faisceau large pour minimiser $\Delta\theta_f$.

- la hauteur de source apparente

Ce terme est une contribution importante puisque le spectromètre est utilisé en géométrie verticale. C'est pourquoi nous avons choisi d'utiliser un faisceau en forme de bâtonnet horizontal afin de minimiser sa hauteur. Ce terme s'exprime par :

$$\left(\frac{\delta E}{E} \right)_{\text{source apparente hauteur}} = \frac{h_f}{2L \tan \theta_B}$$

h_f étant la hauteur du faisceau (1 mm).

- la longueur de source apparente

Ce terme, minimisé par le rattrapage au 1^{er} ordre de l'effet Doppler, dépend de la longueur de source apparente ℓ_s :

$$\left(\frac{\delta E}{E} \right)_{\text{source apparente longueur}} = \frac{\ell_s}{2L} \frac{\beta \sin \theta_L}{1 - \beta \cos \theta_L}$$

avec $\ell_s = \ell_f \cos \theta_L$ et ℓ_f la largeur du faisceau (7 mm).

- la résolution spatiale r des détecteurs à localisation :

$$\left(\frac{\delta E}{E} \right)_{\text{détecteur}} = \frac{r}{2L \tan \theta_B}$$

avec $r = 500 \mu\text{m}$.

- la mosaïcité α du cristal :

$$\left(\frac{\delta E}{E} \right)_{\text{cristal}} = \left(\frac{\alpha}{\tan \theta_B} \right)^2$$

où $\alpha = 0,6^\circ$ sur le spectromètre 750 et $\alpha = 0,75^\circ$ sur le spectromètre 1200.

- la chaîne d'acquisition électronique

Ce terme a une contribution lorentzienne qui ajoute une "queue" aux raies enregistrées sur les spectres. La nécessité d'inclure ce terme est apparue au dépouillement afin de reproduire parfaitement la forme des raies. Une étude ultérieure a montré que c'est l'utilisation des Linear Gate & Stretcher (voir paragraphe suivant) qui en était la cause.

Les cinq premiers termes ont une contribution gaussienne, et le sixième, lié à la mosaïcité du cristal, est de forme exponentielle décroissante vers les hautes énergies (Adoui, 1995). La forme globale d'une raie attendue est donc la convolution de cinq gaussiennes, d'une exponentielle décroissante et d'une lorentzienne.

La résolution totale peut être estimée par la somme des résolutions des termes gaussiens et lorentzien plus la moitié de celle du terme exponentiel. La résolution des termes gaussiens est donnée par la somme quadratique de la résolution de chaque terme.

Le tableau XIV résume les principales caractéristiques du faisceau et de chaque spectromètre. Pour ces derniers, chaque terme de résolution est calculé pour l'angle correspondant au milieu de la zone vue.

Nous voyons sur ce tableau que la principale contribution à la résolution est la dispersion du faisceau. Comme elle ne dépend pas de la longueur de bras des spectromètres, les résolutions totales sont assez proches même si les pouvoirs dispersifs des spectromètres sont différents.

L'écart énergétique des raies Ba_2 et Ba_3 est d'environ 10 eV dans le référentiel du laboratoire, et ces raies pourront donc être séparées sur les deux spectromètres. Cependant, c'est la mauvaise qualité du faisceau qui limite principalement les résolutions et nous n'avons pas obtenu beaucoup mieux sur le spectromètre 1200 que sur le 750. Avant de décrire les méthodes de dépouillement, je vais présenter la chaîne d'acquisition utilisée pendant cette expérience.

FAISCEAU Kr³⁵⁺	
Energie du faisceau E (MeV/A) = 60 $\beta = 0,3433$ Dispersion en énergie $\frac{\Delta E}{E} = 1,3 \cdot 10^{-2}$ Emittance ($\pi \cdot \text{mm} \cdot \text{mrad}$) = 5	Largeur du faisceau $l_f = 7 \text{ mm}$ Hauteur du faisceau $h_f = 1 \text{ mm}$ Dispersion angulaire $\delta\theta = 1,43 \text{ mrad}$ Longueur de source apparente $l_s = 6,06 \text{ mm}$
SPECTROMETRE 750	
$\theta_L = 30^\circ$	Longueur de bras = 750 mm
Cristal	Détecteur à localisation
2d = 6,71 Å $\alpha = 0,6^\circ$ Hauteur h = 75 mm	Résolution = 0,5 mm Surface de détection : 60 × 60 mm ² Etalonnage : P = 6,90 cx/mm
Energie moyenne de la pose : 3313,78 eV Angle de Bragg correspondant : 33,89° Dispersion : 3,29 eV/mm Résolution { <ul style="list-style-type: none"> Dispersion en énergie : 1,71 10⁻³ Dispersion angulaire : 3,48 10⁻⁴ Longueur de source apparente : 9,84 10⁻⁴ Hauteur de source : 9,92 10⁻⁴ Résolution du détecteur : 4,96 10⁻⁴ } Contribution gaussienne : 2,29 10 ⁻³ Mosai cité du cristal : 2,43 10 ⁻⁴ (exponentielle droite) Réponse du détecteur + acquisition : 4,3 10 ⁻⁴ (lorentzienne) Résolution totale : 2,84 10 ⁻³ Résolution totale en eV : 9,42 eV	
SPECTROMETRE 1200	
$\theta_L = 30^\circ$	Longueur de bras = 1200 mm
Cristal	Détecteur à localisation
2d = 6,71 Å $\alpha = 0,75^\circ$ Hauteur h = 75 mm	Résolution = 0,5 mm Surface de détection : 60 × 60 mm ² Etalonnage : P = 6,55 cx/mm
Energie moyenne de la pose : 3269,20 eV Angle de Bragg correspondant : 34,42° Dispersion : 1,99 eV/mm Résolution { <ul style="list-style-type: none"> Dispersion en énergie : 1,71 10⁻³ Dispersion angulaire : 3,48 10⁻⁴ Longueur de source apparente : 6,15 10⁻⁴ Hauteur de source : 6,08 10⁻⁴ Résolution du détecteur : 3,04 10⁻⁴ } Contribution gaussienne : 1,97 10 ⁻³ Mosai cité du cristal : 3,65 10 ⁻⁴ (exponentielle droite) Réponse du détecteur + acquisition : 3,7 10 ⁻⁴ (lorentzienne) Résolution totale : 2,45 10 ⁻³ Résolution totale en eV : 8,0 eV	

Tableau XIV : Récapitulatif des caractéristiques des spectromètres cristallins utilisés et des termes à la résolution.

e) Chaîne d'électronique et acquisition.

i) Electronique

❖ Voies jonction

L'électronique associée au détecteur à jonction est simple (figure 46). Intégré au bloc détecteur se trouve un préamplificateur (PA) ayant trois rôles : collecter les charges et délivrer un signal dont l'amplitude sera proportionnelle à l'énergie des X détectés, donner à l'impulsion une forme compatible avec une électronique linéaire, adapter l'impédance du détecteur à l'impédance de l'électronique logique (50 Ω). De plus, ce préamplificateur possède un circuit de contre réaction permettant de diminuer le bruit électronique du détecteur. Le signal issu du PA est amené par câble jusqu'à la salle d'acquisition. Une voie d'électronique linéaire et une voie d'électronique logique sont associées à chaque détecteur.

• La voie linéaire est constituée :

- d'un amplificateur linéaire (LA) ORTEC 572 amplifiant le signal sortant du PA
- d'un module "Linear Gate and Stretcher" (LGS) ORTEC 542 permettant de filtrer, mettre en forme le signal sortant du LA et éventuellement de le retarder.
- d'un codeur analogique numérique (ADC).

La stabilité de la voie linéaire a été vérifiée, tout au long de l'expérience en contrôlant que la position d'un signal pulseur (signal répétitif calibré en fréquence et en amplitude) entré au niveau du PA restait constante sur les spectres.

• La voie logique est constituée :

- d'un amplificateur linéaire (LA) ORTEC 572.
- d'un discriminateur à fraction constante (DISCRI) ORTEC 455 créant une impulsion logique indépendante de l'amplitude du signal entrant dès lors que celle-ci dépasse un seuil réglable.
- d'un module (REDUV) permettant d'introduire un retard à durée variable.
- d'un distributeur (FI/FO) séparant le signal vers les différentes échelles et vers un module à décision rapide (FDM).

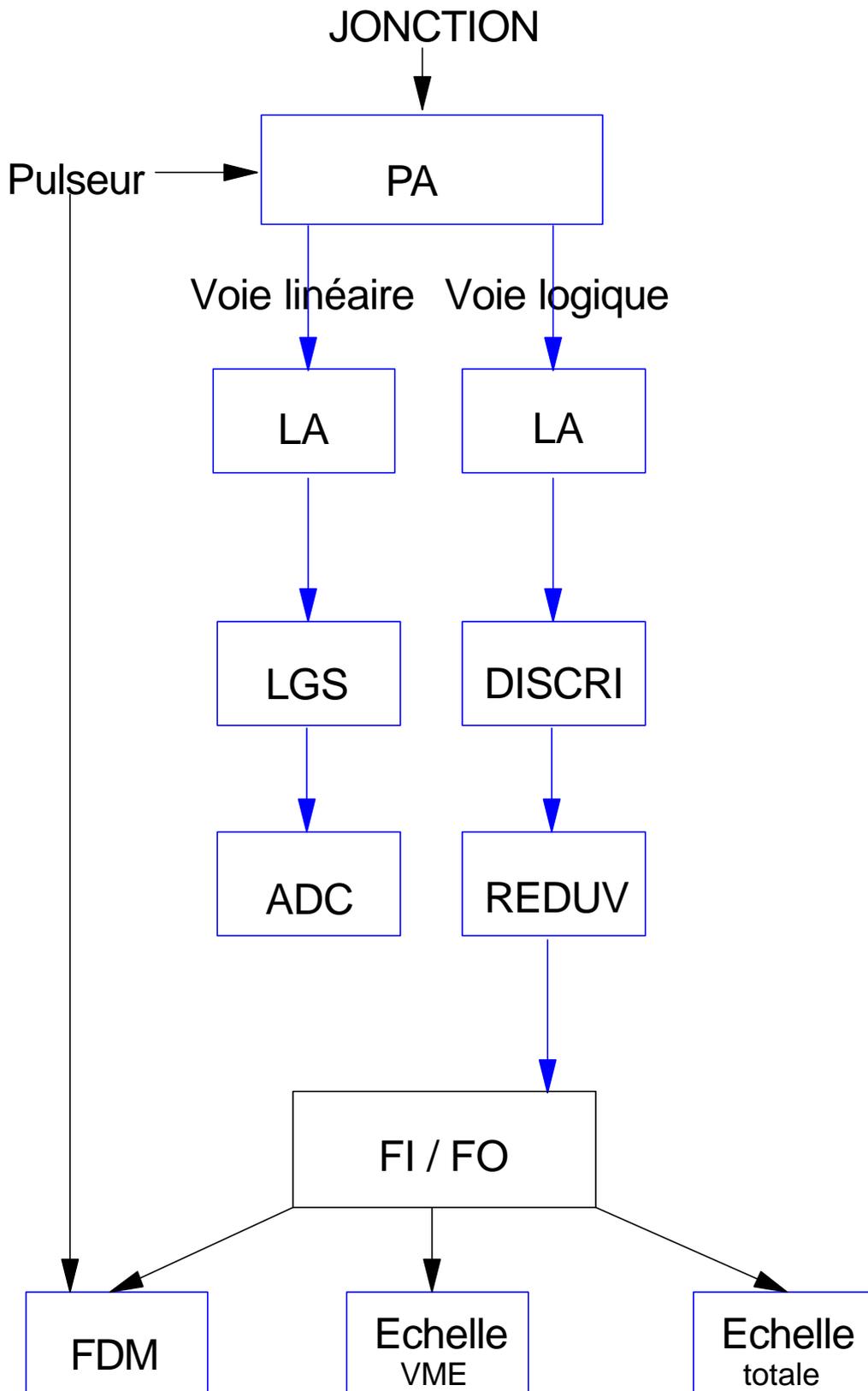


Figure 46 : Schéma de l'électronique associée à chaque jonction.

❖ Voies détecteur à localisation

Chaque détecteur à localisation possède 3 sorties : 2 pour les signaux Q_1 et Q_2 (Chap.II§II-3-d-ii) et une pour le signal d'anode qui sert pour la voie d'électronique logique (voie "temps"). De plus, ce dernier est équivalent à la somme $Q_1 + Q_2$ indépendante de la position d'incidence du photon X sur le détecteur à localisation mais dépendante de son énergie, et bénéficie d'une meilleure résolution. Ce signal servira à éliminer une partie du bruit de fond lors du traitement des données (voir Chap.II§III-1).

Le schéma d'électronique associée à chaque détecteur à localisation est présenté figure 47, avec les mêmes notations que sur la figure 46. On notera cependant que les amplificateurs linéaires sont différents (AFP6) et que le même amplificateur sert pour la voie linéaire et la voie logique de l'anode.

ii) Fonctionnement de l'acquisition ; Temps mort

Le module à décision rapide (FDM) dans la chaîne électronique permet de vérifier à chaque instant si un événement de type donné s'est produit, et, dans le cas d'une réponse affirmative, prévient le processeur qu'un événement doit être lu sur les codeurs analogiques numériques (ADC) correspondants (OA : Ordre d'Analyse). Le processeur envoie alors les données vers un ordinateur VAX qui les enregistre sur bande magnétique et permet la visualisation des spectres "en ligne", autorisant un monitoring pendant le déroulement de l'expérience. La bande magnétique contient donc les données de chaque événement, et en particulier nous sommes capables lors du traitement ultérieur de distinguer les événements "physiques" des événements artificiels provoqués par le pulseur. Cela est très important pour connaître le temps mort de l'acquisition et de chaque détecteur : en effet, lorsqu'un ADC est en train de coder un événement (de 20 à 40 μ s), les suivants sont rejetés. Ainsi, un certain nombre de données ne sont pas enregistrées sur bande magnétique. Ceci représente le temps mort de l'acquisition proprement dite. Chaque détecteur possède également un temps de réponse qui entraîne lui aussi un certain décomptage, en plus du temps mort de l'acquisition. Le décomptage est évidemment d'autant plus important que le nombre d'événements par seconde est grand.

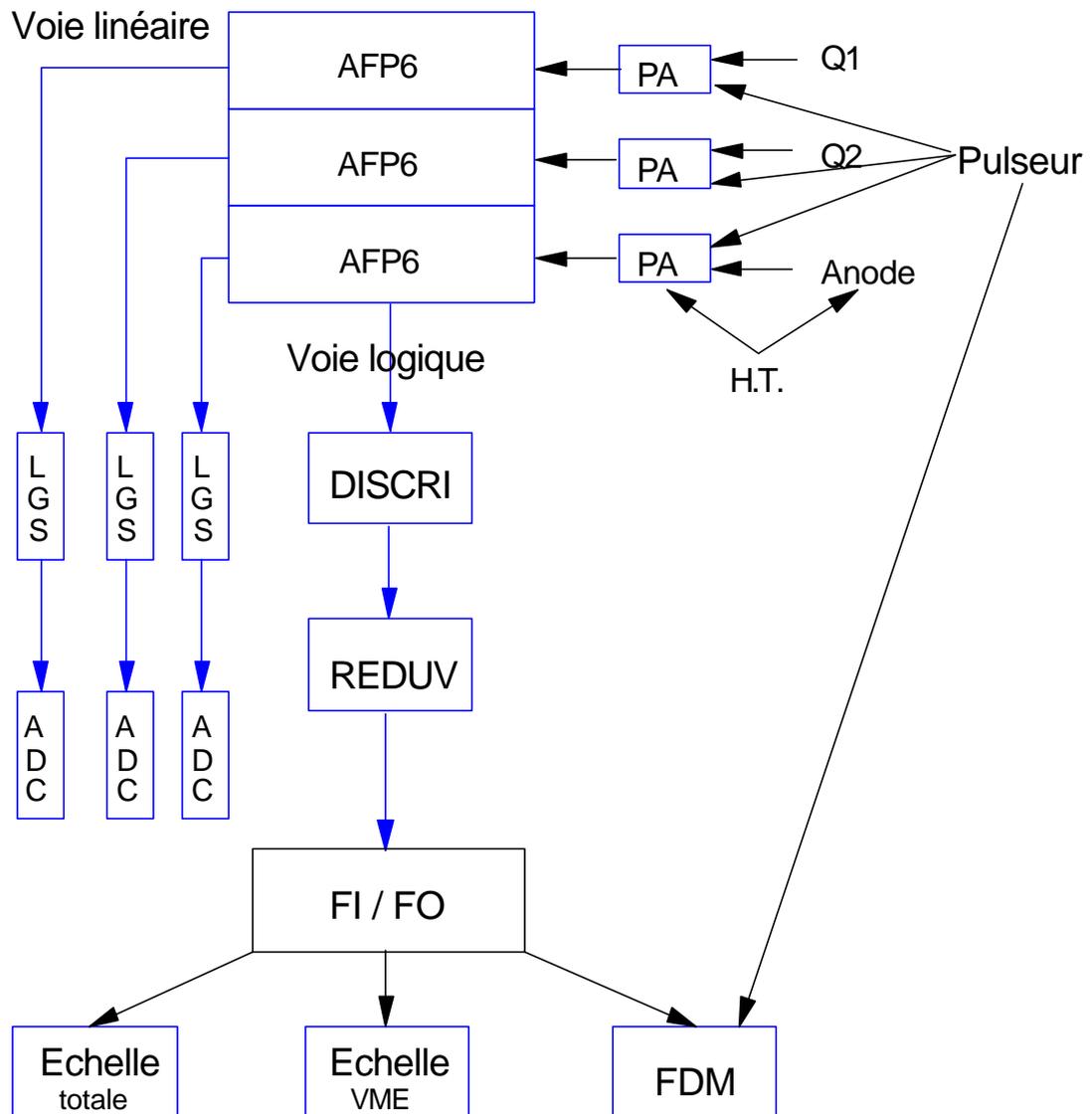


Figure 47 : Schéma de l'électronique associée à chaque détecteur à localisation

Lors du traitement des données, nous pouvons compter le nombre d'événements "pulseur" enregistrés par l'acquisition pendant une mesure et le comparer au nombre réel de coups "pulseur" produits pendant cette mesure. Ce nombre réel est donné par le relevé d'une échelle VME reliée au générateur de pulse, enregistré sur la bande magnétique. Le rapport obtenu est le pourcentage de détection. Comme les données écrites sur bande permettent également de compter le nombre de coups pulseur enregistrés par chaque voie d'électronique, on peut également connaître le pourcentage de détection (détecteur + acquisition) pour chaque détecteur.

Ainsi, à chaque spectre et pour chaque détecteur correspond un pourcentage de détection. En supposant que le temps mort ne dépend pas de la nature de l'événement (coup physique ou coup pulseur), il suffit de diviser le contenu de chaque canal du spectre par ce pourcentage pour se ramener au cas idéal où le temps mort est nul.

A titre d'illustration, on peut voir sur la figure 48 les pourcentages de détection de chaque spectre pour les trois détecteurs utilisés, en fonction du nombre d'ordres d'analyse (OA) par seconde. Cette figure nous a permis d'identifier des spectres aberrants (pourcentage de détection supérieur à 100% ou anormalement bas) correspondant à un dysfonctionnement accidentel de l'acquisition.

On peut constater que nous nous trouvons la plupart du temps entre 90% et 100% de détection. De plus, la grande similitude des pourcentages de détection entre les trois détecteurs indique que c'est le temps mort de l'acquisition et non le temps de réponse des détecteurs qui est principalement responsable du décomptage.

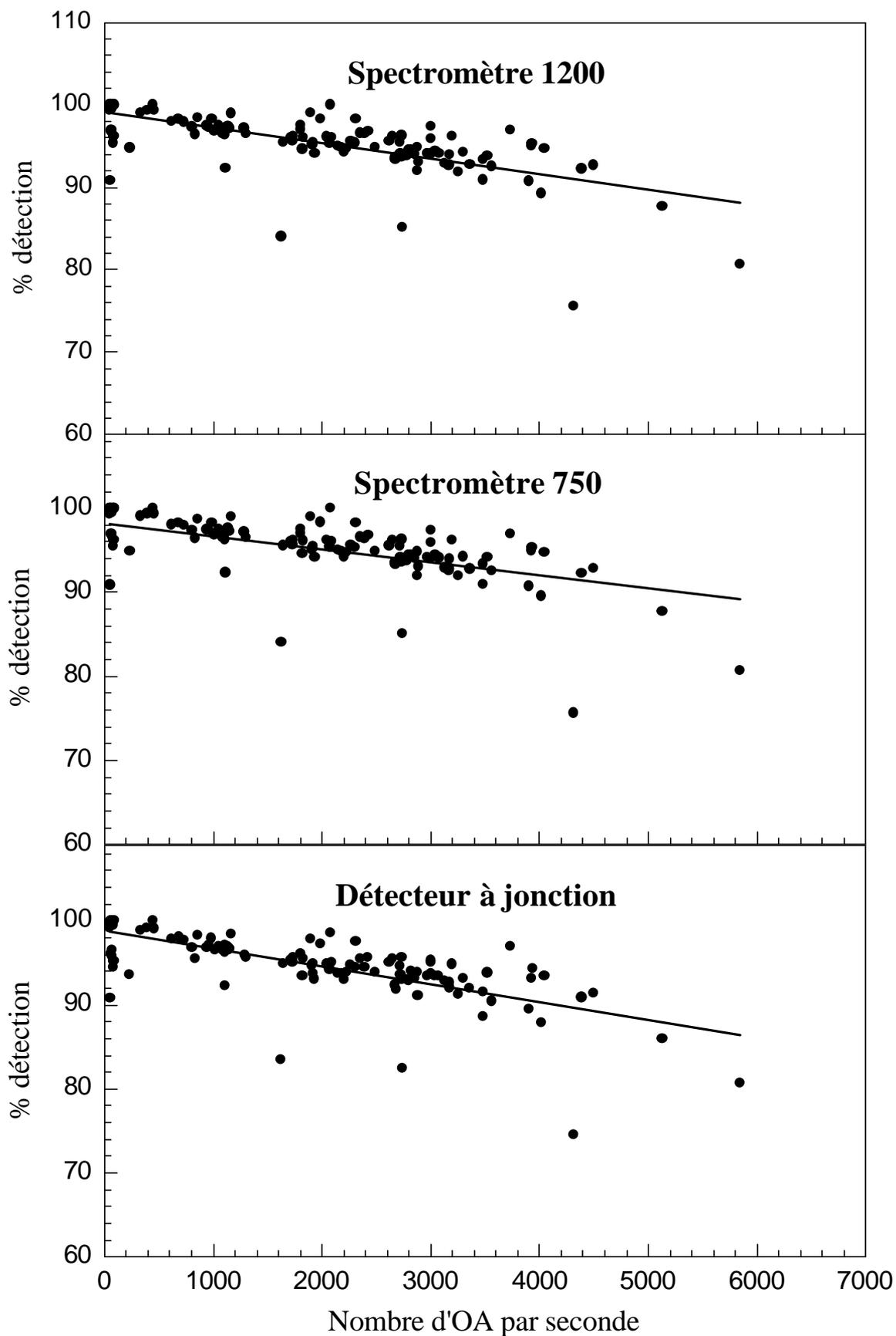


Figure 48 : Evolution du pourcentage de détection pour chaque détecteur en fonction du nombre d'ordres d'analyse par seconde.

III- Extraction des résultats

1°) Lecture des données et construction des spectres.

a) Généralités

J'ai effectué la lecture et un pré-traitement des résultats expérimentaux sur un VAX de l'IPN d'Orsay. Le programme que j'ai écrit lisait la bande magnétique événement par événement et en tirait trois résultats :

- Le relevé des échelles VME qui sert d'une part à avoir la charge collectée par la cage de Faraday en bout de ligne et donc connaître le nombre de projectiles correspondant à un spectre, et d'autre part à calculer les pourcentages de détection (Chap.II§II-3-e-ii) *via* le nombre de coups pulseurs.
- Les spectres des détecteurs à jonction, tout simplement en comptant le nombre de coups tombant dans chaque canal (nombre de coups en fonction de l'énergie des photons), mais sans autre traitement particulier.
- Les spectres des détecteurs à localisation des deux spectromètres cristallins. Cette extraction était accompagnée d'un traitement spécifique que je vais décrire dans le paragraphe suivant.

b) Cas particulier des spectromètres

J'ai utilisé pour traiter les données des spectromètres la librairie de programmes de l'IPN d'Orsay, et en particulier le programme "DP2" écrit par L.Tassan-Got et J.F.Rabasse.

i) Spectres à n dimensions

Avant de construire les spectres "monodim" à une dimension (nombre de coups en fonction de l'énergie des photons, elle-même fonction de la localisation), on passe par des spectres "n-dim", à 7 dimensions. Ces 7 dimensions sont :

- le numéro de run (ou numéro de spectre)
- le détecteur touché (correspondant au spectro 750 ou 1200)
- la valeur de Q_1 pour le détecteur touché
- la valeur de Q_2
- la valeur du signal d'anode

- la somme Q_1+Q_2
- la localisation $\frac{Q_1}{Q_1 + Q_2}$ sans traitement sur Q_1 et Q_2 .

On peut ensuite construire les spectres "monodims" en localisation en projetant, pour un numéro de run et un détecteur fixés, le spectre "n-dim" sur la direction "localisation". L'intérêt de passer par l'objet n-dim est de pouvoir y faire des coupes et enlever du bruit de fond sans supprimer du signal physique. Par exemple, j'ai supprimé le contenu de tous les canaux "zéro" qui correspondent à du bruit électronique. De même, j'ai pu définir un contour dans le plan (LOC, anode). Rappelons que le signal d'anode est sensible à l'énergie du photon incident, et que les coups correspondant à des photons d'énergie voisine de 3 keV sont donc relativement localisés sur l'axe d'anode. On peut donc supprimer du bruit de fond en rejetant les coups ayant une anode trop grande ou trop petite par rapport aux coups physiques. A titre d'illustration la figure 49 représente le plan (LOC, anode) et le contour utilisé pour filtrer les spectres du spectromètre 750. Le contour est le polygone ; nous conservons tous les points situés à l'intérieur et rejetons tous ceux situés à l'extérieur pour construire les spectres monodims. Chaque "tache" à l'intérieur du contour représente une raie à mesurer. Les taches se trouvant en dessous ont une origine mal déterminée : comme elles correspondent à des énergies (anodes) inférieures, nous avons pensé à des pics d'échappement (Chap.II§II-3-d-ii), mais elles ne correspondent à aucun de ceux que l'on peut prévoir à partir des X incidents et de la composition du gaz détecteur. Il semblerait donc qu'elles soient dues à un écho dans la chaîne d'électronique. Nous avons vérifié que sur chaque spectre, le rapport des intégrales entre cette tache et la tache de coups physiques était constant (il vaut $\approx 12\%$) et nous avons décidé de ne pas garder ces taches (voir le contour sur la figure 49). Notons que puisque nous faisons des mesures relatives (rapport B_{a_4}/B_{a_1} et B_{a_2}/B_{a_3}), nous aurions pu les conserver sans modification du résultat, mais il s'avère qu'elles détériorent la résolution finale.

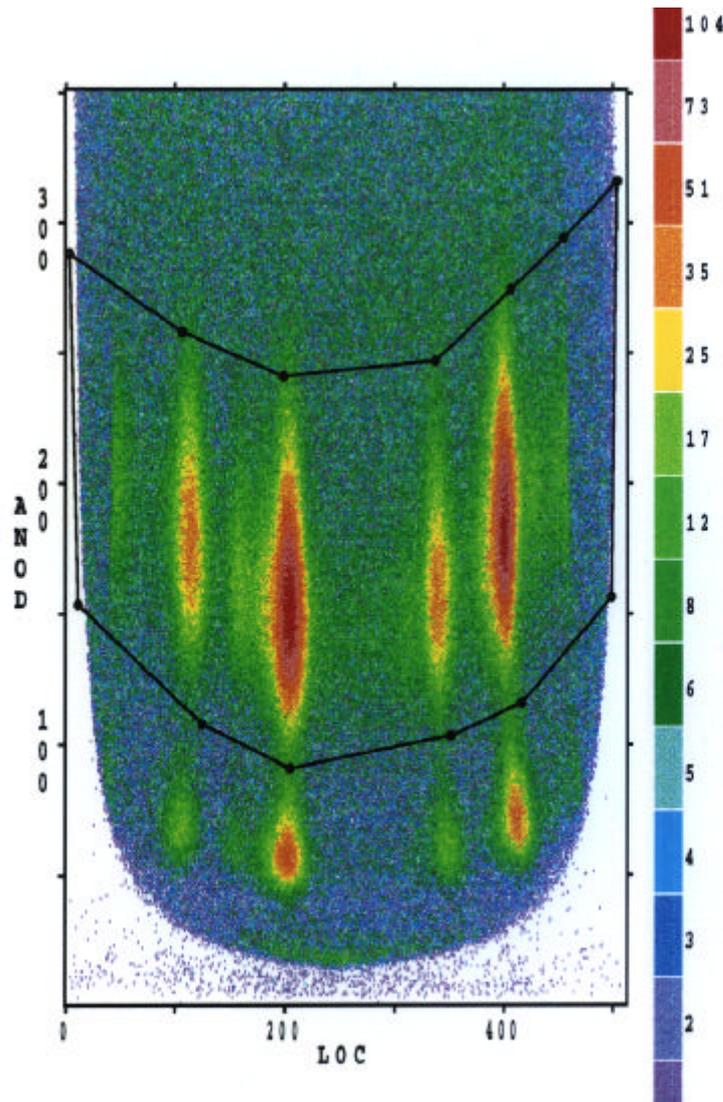


Figure 49 : Spectre bi-dim (LOC, anode) et contour utilisé pour filtrer les données du spectromètre 750.

Les spectres à 1 dimension sur lesquels se fait le travail de dépouillement proprement dit sont obtenus en projetant les spectres à 2 dimensions (LOC, anode) sur l'axe de LOC.

Avant de présenter ces spectres, il faut préciser que le détecteur du spectromètre 1200 produit des "cornes" sur les bords des spectres (centrées sur les canaux ≈ 50 et 450). L'étude que j'ai effectuée sur ces "cornes" a montré que leur centroïde dans le spectre bidim (LOC-anode) se déplaçait le long de l'axe d'anode d'un spectre à l'autre, ce qui nous a empêché d'utiliser un contour d'extraction pour les spectres de ce détecteur. En effet, il nous fallait conserver l'intégrité de la forme des "cornes" pour pouvoir caler convenablement les fonds à soustraire aux spectres (voir Chap.II§III-2-a-i), d'autant plus qu'une raie hélium se trouve sur le bord gauche du spectre.

ii) Présentation des spectres bruts obtenus sur ces détecteurs.

La figure 50 présente des spectres obtenus sur les deux spectromètres dans le cas d'une cible de carbone d'épaisseur $77 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. Les raies Balmer présentes sur les spectres sont identifiées. On voit que le spectromètre 1200 possède une dispersion bien supérieure à celle du spectromètre 750, mais que sa résolution n'est pas tellement meilleure. Notons aussi que le rapport signal/bruit est visiblement meilleur pour le spectromètre 750 que pour le spectromètre 1200, ce qui montre la validité du filtrage avec contour présenté au paragraphe précédent, quand il est applicable.

Enfin, on peut observer sur le spectre du spectromètre 750 une structure très étalée (du canal ≈ 250 jusqu'à la coupure du bord du cristal, visible au canal ≈ 460) qui vient polluer en particulier les raies Ba_4 et Ba_5 . Je reviendrai plus loin sur ce problème.

L'identification des raies est faite à partir des droites d'étalonnage (Chap.II§II-3-d-iv) et des énergies théoriques des transitions (Tableaux XII et XIII). Si les écarts énergétiques entre les différentes transitions hydrogénoïdes d'une part, et héliumoïdes d'autre part, sont bien connus, on peut émettre des réserves sur la valeur absolue des énergies de transition et sur la position relative des raies hydrogénoïdes et héliumoïdes. A partir des raies Ba (hydrogénoïdes) et $^3\text{P}_2 \rightarrow ^3\text{S}_1$ (héliumoïdes), identifiables sans ambiguïté et en prenant les énergies hydrogénoïdes comme référence, nous avons remarqué que les raies héliumoïdes doivent être abaissées d'environ 2 eV par rapport aux valeurs théoriques du tableau XII. Ce décalage constant n'est d'ailleurs pas étonnant dans la mesure où les calculs utilisés sont d'origine différente. La précision de ces calculs est tout de même très bonne (2eV sur 3000eV). Ceci explique pourquoi la raie $^1\text{P}_1 \rightarrow ^3\text{S}_1$ se trouve entre les raies Ba_2 et $^3\text{P}_2 \rightarrow ^3\text{S}_1$ sur la figure 50 alors qu'elle se situe entre les raies Ba_2 et Ba_3 dans les tableaux XII et XIII.

Dans un souci de continuité et afin de respecter l'ordre chronologique dans lequel le dépouillement a été fait, je vais présenter maintenant l'extraction des résultats à partir des spectres bruts obtenus sur les spectromètres.

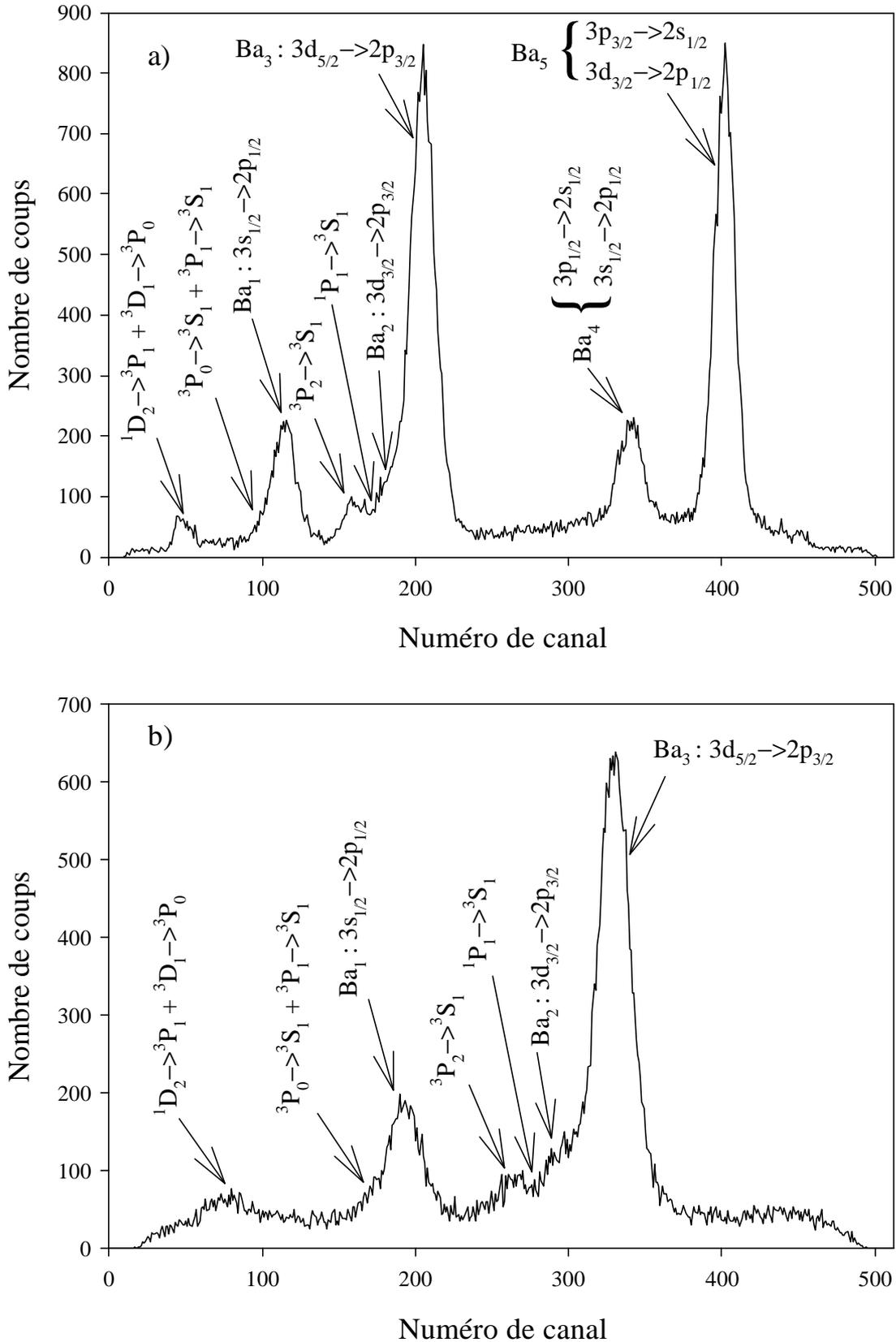


Figure 50 : Composantes de structure fine de la transition Balmer **a** et transitions de type héliumoi de enregistrées par les spectromètres cristallins 750 mm (a) avec contour (voir texte) et 1200 mm (b) sans contour pour Kr^{35+} @ C ($77 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) à 60 MeV/A.

2°) Résultats obtenus avec les spectromètres cristallins

a) Décomposition des spectres

La première chose à faire est de ramener artificiellement les spectres à 100% de détection en les divisant par leur pourcentage de détection (Chap.II§II-3-e-ii). Connaissant d'une part les énergies des transitions observées et d'autre part la forme et la largeur des raies, on simule ensuite les spectres pour extraire l'intensité de chaque transition. Avant de procéder à cette simulation, il faut toutefois soustraire les bruits de fond de diverses origines.

i) Soustraction des fonds

Pour illustrer l'importance et la nécessité de cette procédure, nous montrons sur la figure 51 deux spectres bruts ainsi que la contribution de fond enregistrés sur le spectromètre 1200 et correspondant à des cibles de carbone de $3,2 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ et $111 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. Nous pouvons voir que pour une cible fine, le rapport signal/bruit est très faible (l'intensité du fond représente 91,7% de l'intensité du spectre total sur la cible C $3,2 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) et il est primordial de bien maîtriser toutes les contributions de bruit de fond pour faire des mesures précises d'intensité. Sur le spectromètre 750, la procédure d'extraction avec contour diminue l'importance du bruit de fond, mais celui-ci atteint quand même 68,5% du spectre total pour la même cible de $3,2 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone.

Je vais présenter maintenant les 3 types de bruit de fond enregistrés sur nos détecteurs : le fond propre, le fond trou et le fond bremsstrahlung.

◆ Le bruit de fond propre

Ce bruit de fond est principalement dû aux microclaquages dans le détecteur à localisation et à la radioactivité ambiante, et son intégrale est normalement proportionnelle au temps de comptage. Des enregistrements de ce fond ont été faits tout au long de l'expérience (enregistrement sans faisceau). La figure 52 montre l'évolution de l'intensité des fonds propres (nombre de coups par seconde) au cours du temps, pour les deux spectromètres. La dispersion des mesures expérimentales pour le spectromètre 750 est faible et centrée autour de 0,833 coups/seconde. Par contre, les données du spectromètre 1200, extraites sans contour, montrent un bruit de fond globalement plus élevé.

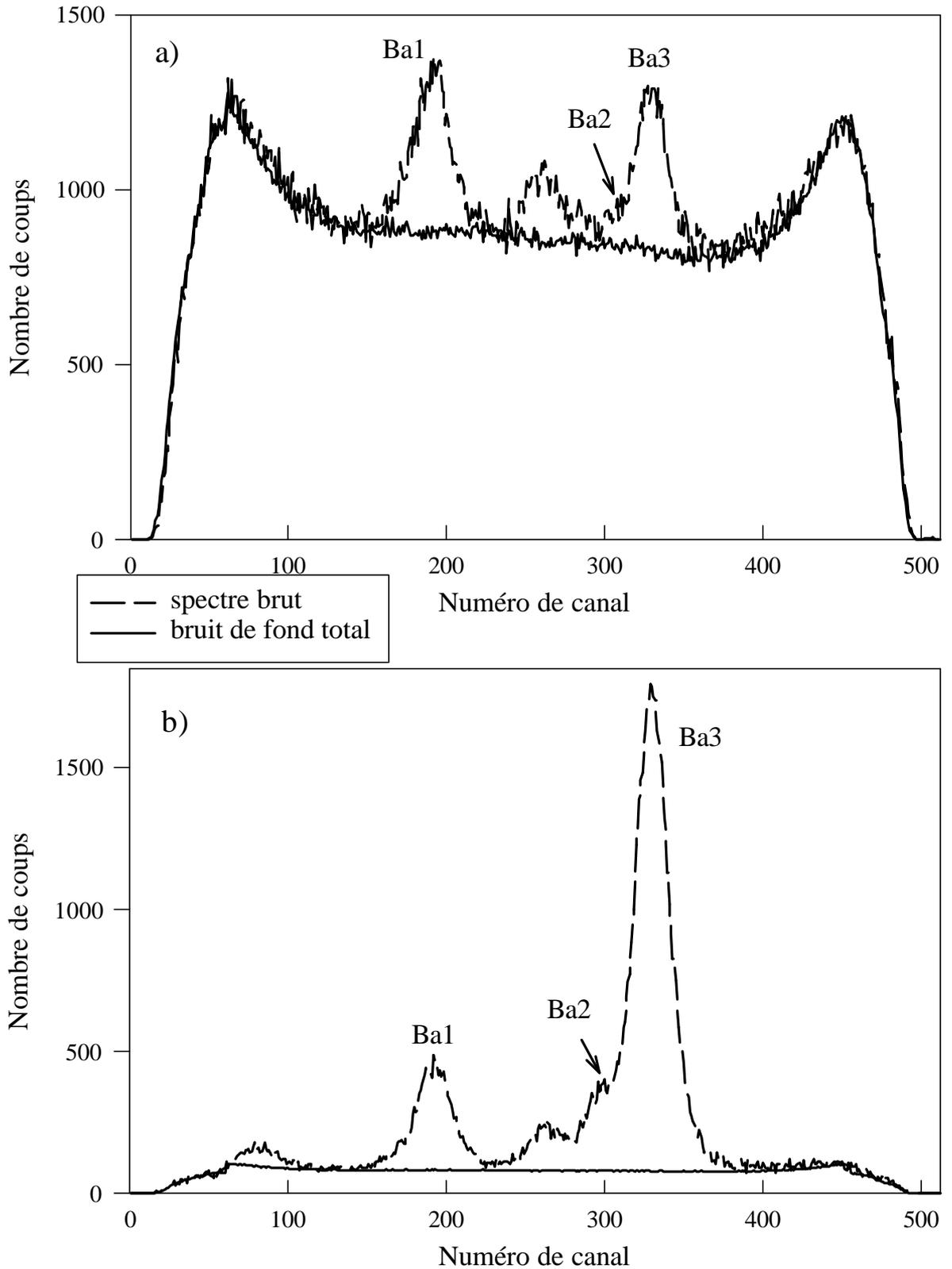


Figure 51 : Spectres bruts et contribution des bruits de fond enregistrés sur le spectromètre 1200 mm pour les collisions Kr^{35+} @ C a) cible de $3,2 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. b) cible de $111 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$.

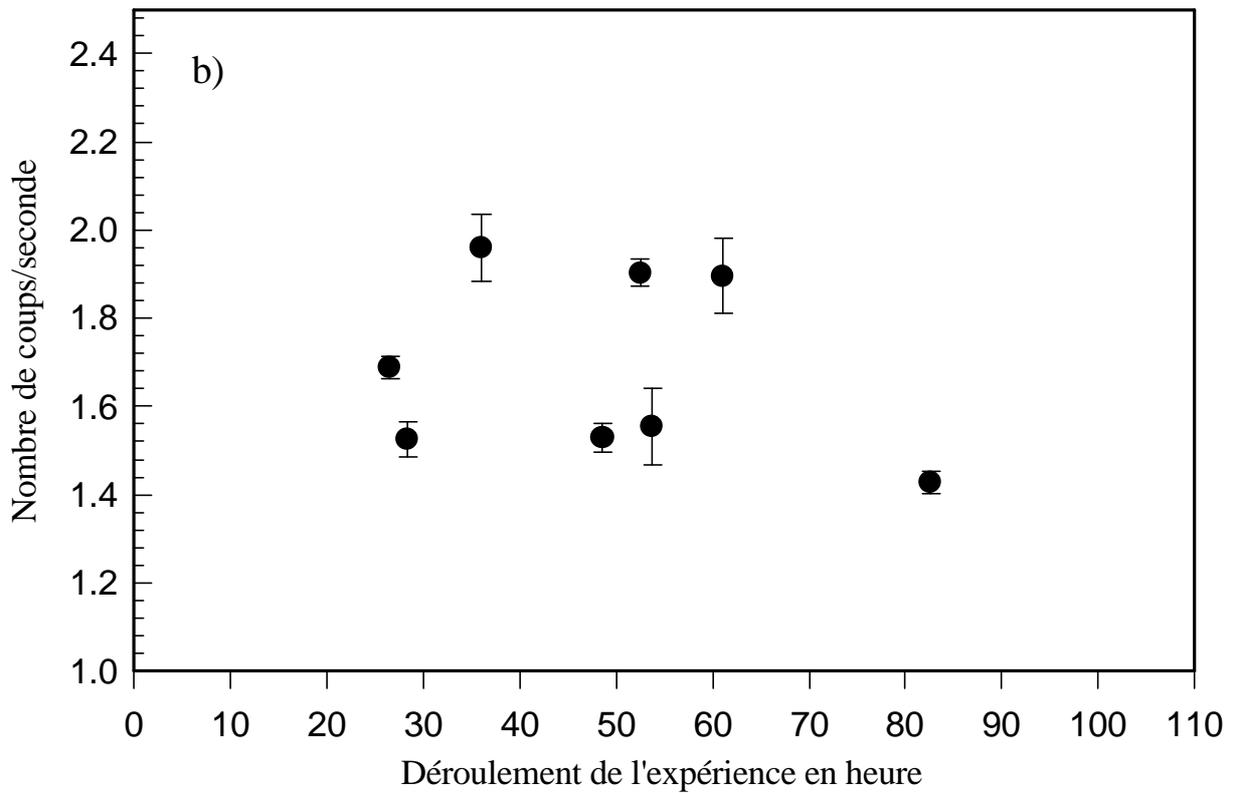
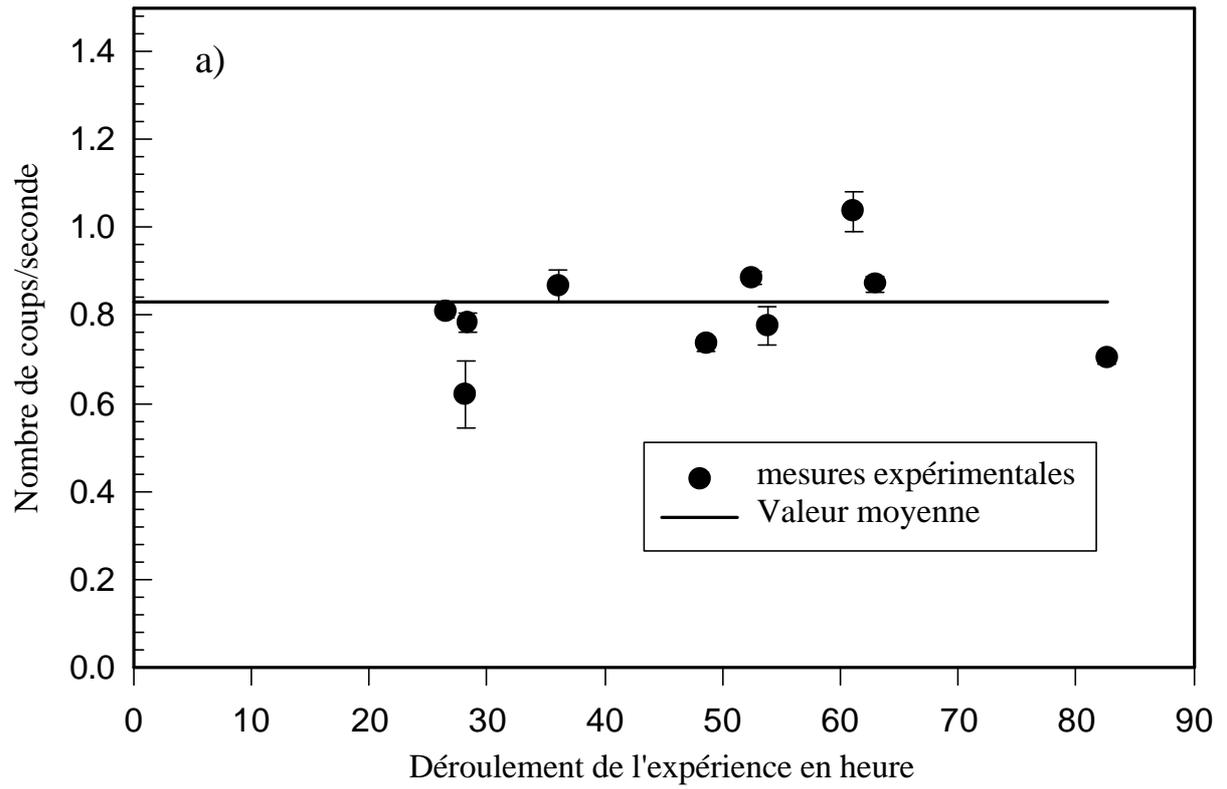


Figure 52 : Evolution dans le temps du bruit de fond propre pour les spectromètres 750 (a) et 1200 (b).

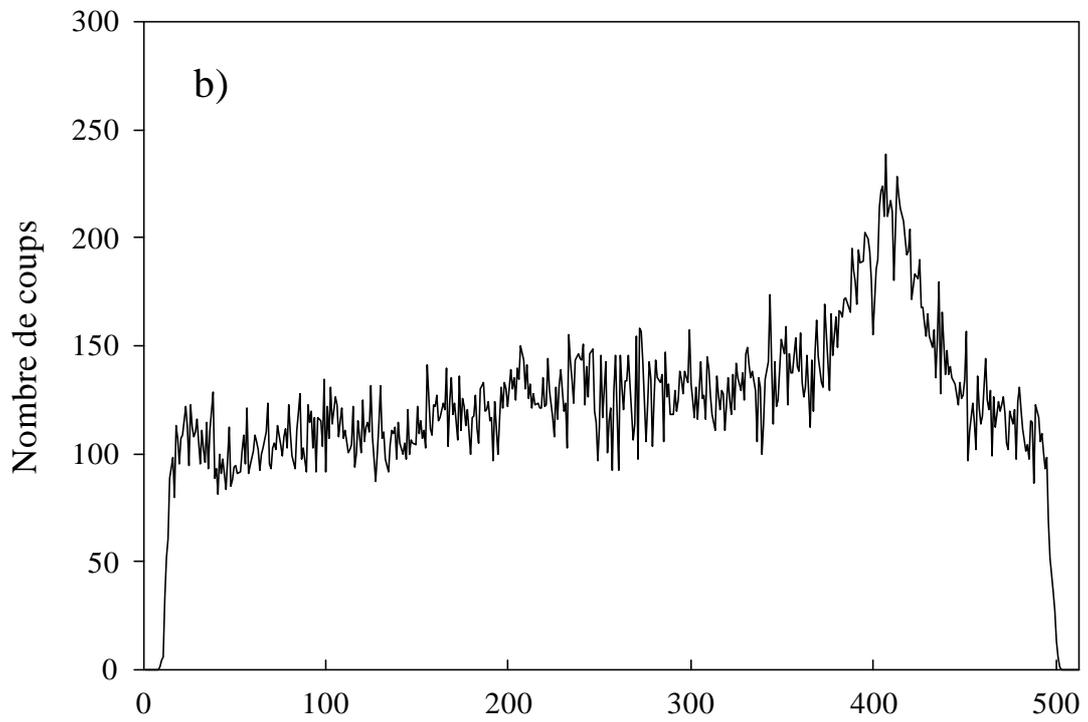
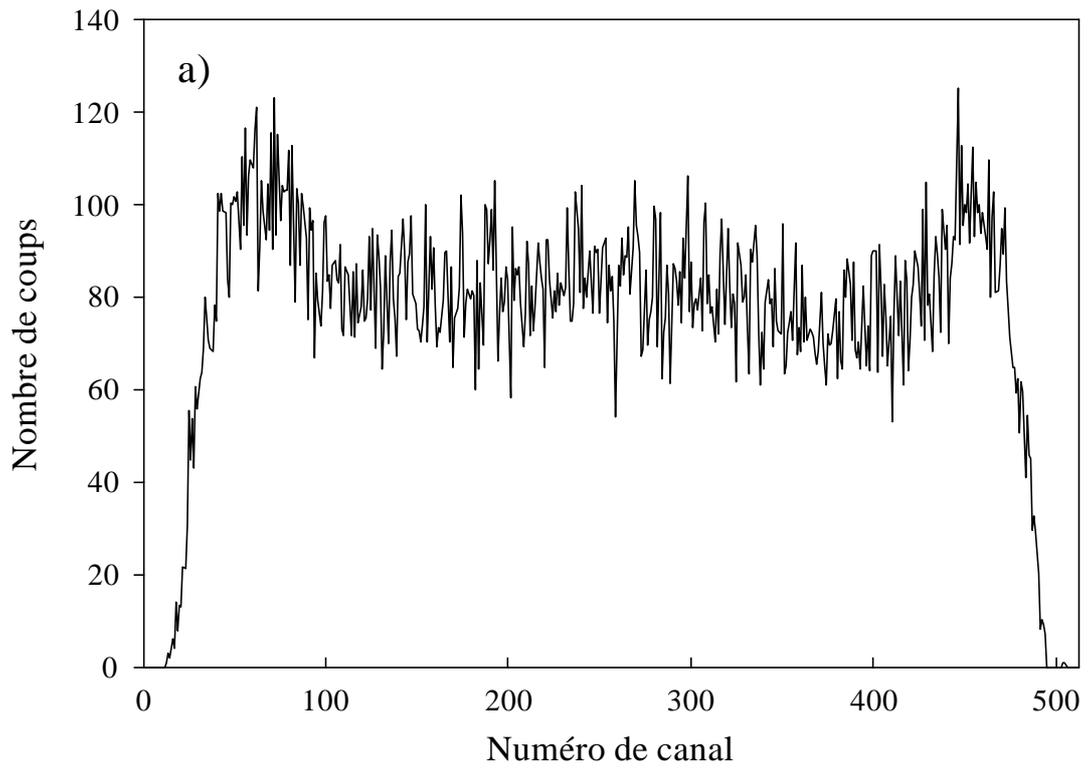


Figure 53 : Spectres de bruits de fond propre enregistrés par les spectromètres 1200 (a) et 750 (b)

Par contre la forme des fonds propres était constante sur chacun des détecteurs. Nous les avons donc sommés (augmentation de la statistique donc diminution de l'incertitude). La figure 53 montre ces sommes de fonds propres pour les deux spectromètres.

Nous remarquons sur cette figure la présence des "cornes" dont je parlais précédemment (Chap.II§III-1-a-i) sur le spectromètre 1200, et du parasite autour du canal 400 sur le spectre de l'autre spectromètre. La présence de ce parasite sur les spectres de fonds propres (enregistrés sans faisceau) indique qu'il s'agit d'un bruit lié au fonctionnement du détecteur, pouvant provenir par exemple d'une inhomogénéité du diamètre des fils de tungstène aurifié constituant l'anode de la chambre détectrice à gaz, ou d'un écho électronique dans la chaîne d'acquisition.

Soit Σ_{FP} la somme des bruits de fond propre (représentée figure 53), pour un des 2 détecteurs. La proportion de fond propre que nous devons soustraire à un spectre S donné enregistré par ce détecteur est $N_{fp}(S) \cdot \Sigma_{FP}$, où $N_{fp}(S)$ est un coefficient de normalisation donné par :

$$N_{fp}(S) = \frac{C_{FP}(S)t_{acq}(S)}{I(\Sigma_{FP})} \quad (161)$$

avec $C_{FP}(S)$ le nombre de coups par seconde dû au fond propre pour le spectre S , $t_{acq}(S)$ le temps d'acquisition du spectre S et $I(\Sigma_{FP})$ l'intégrale totale de la somme Σ_{FP} .

Pour le détecteur du spectromètre 750, $C_{FP}(S) = 0,833$ cps/s et pour le détecteur du spectromètre 1200, on tient compte de la variation de C_{FP} d'un spectre donné en fonction du moment où il a été enregistré : $C_{FP}(S)$ varie alors entre 1,53 cps/s et 1,90 cps/s.

◆ Bruit du fond trou

Le fond trou est le bruit généré par le faisceau d'ions pendant l'acquisition du spectre ; il est principalement dû à l'interaction entre le "halo" qui entourait le faisceau et le support de cible. Il est donc proportionnel au nombre de projectiles intervenant dans l'expérience.

Pour l'étudier, l'équipe a enregistré des spectres avec faisceau et support de cible mais sans cible, et pour les deux types de support de cible utilisés. Ces spectres ne représentent pas directement le fond trou puisqu'ils contiennent une proportion de fond propre. Il a donc fallu soustraire cette contribution de fond propre avant d'étudier les fonds trous. La proportion de fond propre par rapport au fond trou varie en fonction de l'intensité du faisceau, de 2% pour

des grandes intensités à environ 30% pour les faibles intensités. L'étude que nous avons menée nous a conduit aux résultats suivants :

- La forme des fonds trous était constante le long de l'expérience pour le spectromètre 1200, ainsi que pour le spectromètre 750 pour un type de support donné.

- Le nombre de coups moyen généré par un projectile a évolué dans le temps à cause d'une dégradation de la qualité du faisceau. Nous avons régulièrement mesuré le nombre de coups moyen et nous avons donc pu tenir compte de cette évolution lors de la soustraction de ce fond. L'ordre de grandeur était 10^9 coups de fond trou par projectile.

Suivant le même raisonnement que précédemment, nous avons pu faire la somme des spectres de fonds trous superposables. A titre d'exemple, la figure 54 montre cette somme pour les fonds trous (où le fond propre a été soustrait) de chaque spectromètre dans le cas du support percé d'un trou circulaire de diamètre 16 mm.

Soit ΣFT la somme des bruits de fond trou adaptée au traitement d'un spectre S. La proportion de fond trou que nous devons soustraire à ce spectre est $N_{ft}(S) \cdot \Sigma FT$ où

$$N_{ft}(S) = \frac{C_{FT}(S)N_{proj}(S)}{I(\Sigma FT)} \quad (162)$$

avec $C_{FT}(S)$ le nombre de coups par projectile dû au fond trou pour le spectre S ($\approx 10^9$), $N_{proj}(S)$ le nombre de projectiles pour le spectre S et $I(\Sigma FT)$ l'intégrale totale de la somme ΣFT . $N_{proj}(S)$ est donné par $\frac{Far(S)}{35 \times 1,6 \cdot 10^{-19}}$ où $Far(S)$ est la charge récoltée par la cage de

Faraday de bout de ligne pendant l'acquisition du spectre S, en Coulomb.

◆ Bruit de fond bremsstrahlung

Ce fond provient du "rayonnement de freinage" (bremsstrahlung) des électrons de la cible en interaction avec le faisceau. On parle de bremsstrahlung primaire (BP) pour les photons provenant des transitions radiatives d'électrons libres de la cible vers les états de continuum du projectile. La distribution en énergie de ce rayonnement est décroissante (Bernhardi, Hang and Wiesman, 1983; Anholt, Stoller, Molitoris *et al.*, 1986; Lamour, 1997) et a une limite maximale dans le référentiel du laboratoire définie par :

$$(h\nu)_L^{\max} = (\gamma - 1)m_e c^2 \gamma^{-1} (1 - \beta \cos \theta_L)^{-1} \quad (163)$$

avec les notations usuelles. Dans notre cas ($\beta = 0,3433$ et $\theta_L = 30^\circ$) nous trouvons $(h\nu)_L^{\max} = 44,2 \text{ keV}$.

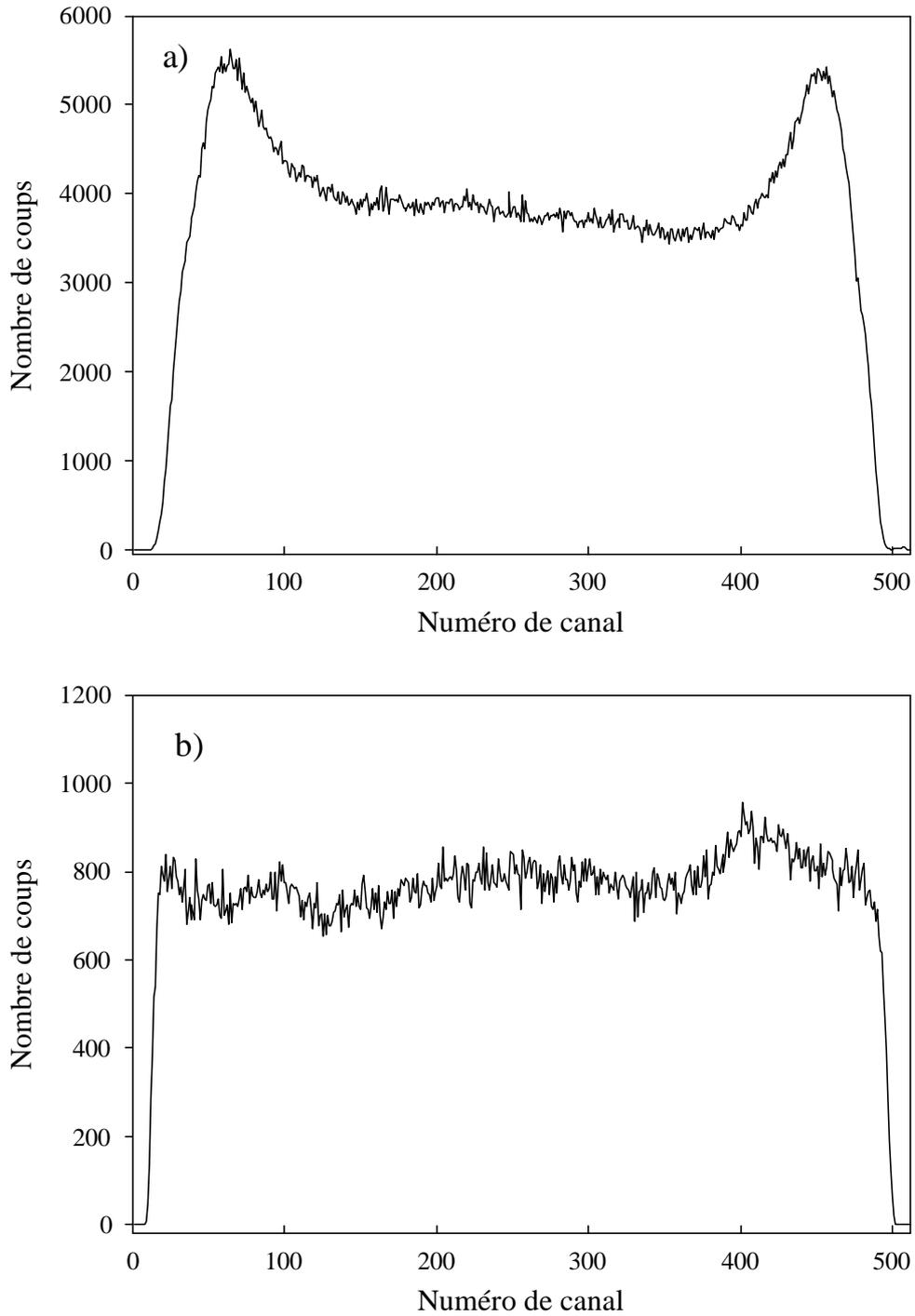


Figure 54 : Spectres de bruit de fond trou enregistrés par les spectromètres 1200 (a) et 750 (b) dans le cas d'un support de diamètre 16 mm (b).

Il existe aussi un rayonnement de bremsstrahlung secondaire (BS) qui provient d'un mécanisme en deux étapes : au cours d'une collision binaire entre un ion incident et un électron cible au repos ou peu lié, l'électron peut acquérir une énergie dans le référentiel du laboratoire comprise entre 0 et $E_{\max} = 2 \gamma^2 \beta^2 m_e c^2$ (soit ≈ 134 keV pour notre expérience). L'électron est ensuite ralenti par interaction avec les constituants de la cible en émettant le BS. Le spectre en énergie de cette composante décroît plus vite que le BP et a une contribution beaucoup plus importante à basse énergie (Lamour, 1997). Les estimations que j'ai faites à partir des tables de Bernhardt et d'un programme décrit dans la thèse d'Emily Lamour (Lamour, 1997) montrent que le BS est environ 30 fois plus intense que le BP pour des photons autour de 3 keV mesurés à $\theta_L = 30^\circ$. Cependant la plage en énergie vue par les détecteurs à localisation est telle (44 eV et 172 eV) que la variation d'intensité de bremsstrahlung attendue d'un bord à l'autre du spectre est de l'ordre de 1%. Nous avons donc négligé cette variation et soustrait un fond plat, dont nous avons ajusté la hauteur à des endroits des spectres auxquels avaient déjà été soustraits les fonds propres et trous et où il n'y a pas de raie (autour du canal 70 pour le spectromètre 750 et du canal 130 pour le spectromètre 1200). De par ses origines physiques, ce fond doit être proportionnel au nombre de projectiles traversant la cible et au nombre d'atomes cibles. Nous avons donc contrôlé que le rapport de l'intensité du fond bremsstrahlung soustrait sur la valeur de Faraday (proportionnelle au nombre de projectiles) avait une dépendance linéaire en fonction de l'épaisseur de cible (figure 55).

Avant de clore ce paragraphe, nous pouvons consulter sur le tableau XV la contribution de chaque type de fond en pourcentage de l'intégrale totale du spectre, pour trois épaisseurs différentes de cible de carbone.

Épaisseur de cible ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	FP/Ispectre (%)	FT/Ispectre (%)	FB/Ispectre (%)
3,2	2,2	86,6	2,9
21,6	1,2	52,5	7,1
111	3,1	20,1	10,5

(a)

Épaisseur de cible ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	FP/Ispectre (%)	FT/Ispectre (%)	FB/Ispectre (%)
3,2	1,7	63,3	3,4
21,6	0,6	25,9	8,6
111	1,0	7,2	9,6

(b)

Tableau XV : Contribution de chaque type de fond en % de l'intensité totale du spectre pour trois épaisseurs de cible de carbone –(a) spectromètre 1200 – (b) spectromètre 750.

On note que la contribution de fond due aux supports de cible domine à faible épaisseur, tandis que la contribution due au bremsstrahlung augmente entre cible fine et cible épaisse. La contribution du fond propre reste quant à elle toujours très faible. Nous avons pu voir deux exemples de soustraction de fond pour le spectromètre 1200 sur la figure 51 (Chap.II§III-2-a-i). La bonne superposition du fond soustrait et du spectre sur les bords de la zone vue assure la validité de la procédure de soustraction de fond.

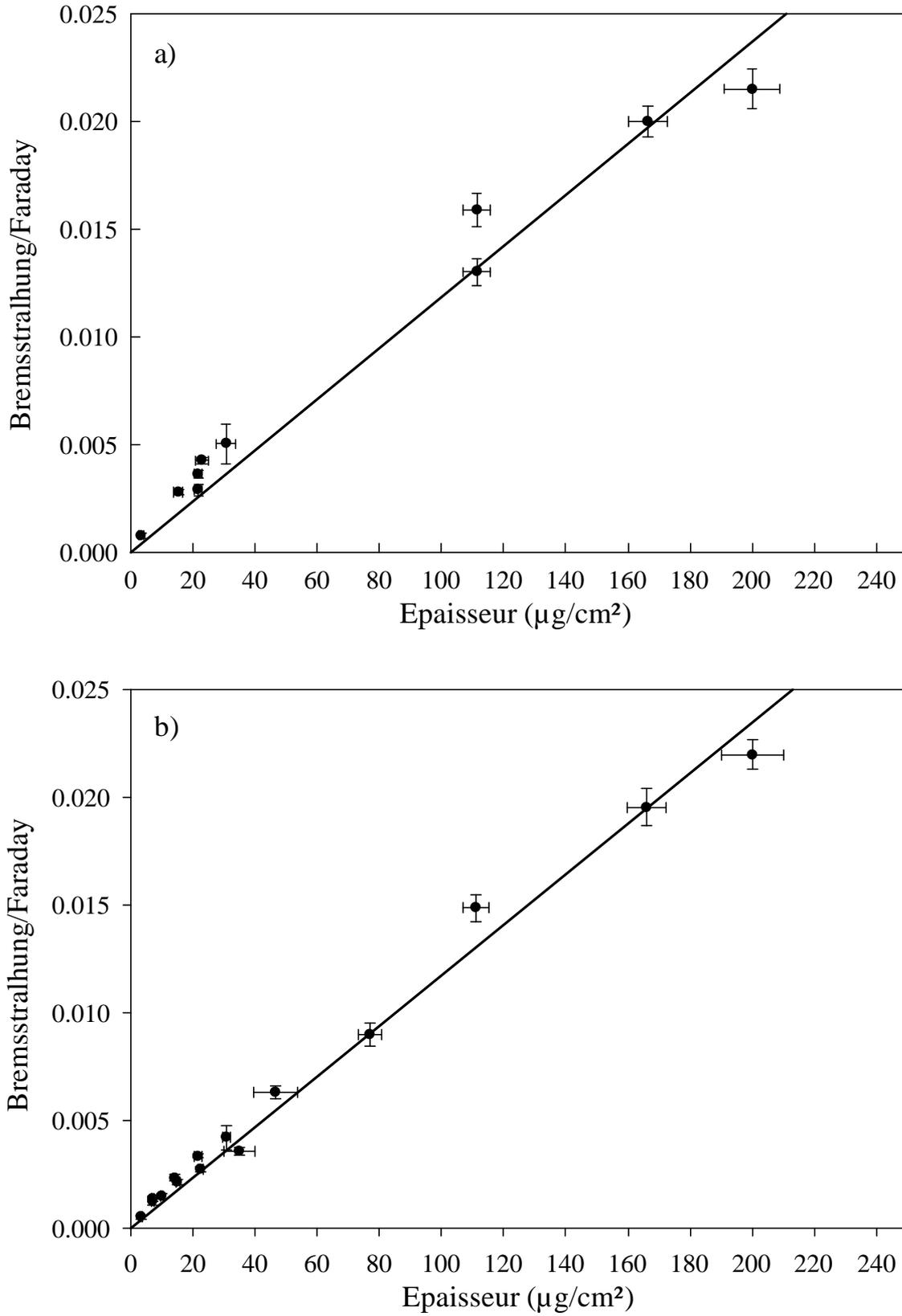


Figure 55 : Evolution du fond dû au bremsstrahlung en fonction de l'épaisseur des cibles de carbone.
 a) Spectromètre 1200. b) Spectromètre 750

ii) Traitement du "parasite" sur le spectromètre 750

Nous avons tenté d'identifier l'origine des coups recueillis autour du canal 400 dans les spectres du spectromètre 750. Ces coups sont gênants car situés sous la raie Ba₄, nécessaire pour extraire le rapport des populations $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, comme nous l'avons vu dans l'expression (144) au début de ce chapitre. En supposant que cette origine soit physique, nous pensons :

- à des X émis par le projectile et correspondant à des raies satellites d'états doublement excités. Ces états sont produits à partir de l'ion Kr³⁵⁺ (1s) par des processus doubles, en une ou deux étapes. Dans ce cas, l'intensité du parasite doit dépendre de l'épaisseur de cible de façon respectivement linéaire ou à peu près quadratique. L'extraction de ce parasite que j'ai pu faire ne montre pas de telle dépendance, ce qui exclut cette hypothèse.

- à des X émis par la cible, son support, ou plus généralement par des éléments du dispositif expérimental. La plage énergétique sur laquelle ils sont observés correspond à la zone [3360-3390] eV au 1^{er} ordre de réflexion sur le cristal, [6720-6780] eV au 2^{ème} ordre et [10080-10170] eV au 3^{ème} ordre. Les éléments susceptibles de produire des X dans ces intervalles d'énergie sont ⁹¹Pa, ⁴⁵Rh, ⁴⁸Cd, ⁹⁰Th, ⁶⁷Ho, ⁷⁰Yb, ⁷¹Lu, ⁶⁰Nd, ⁷⁴W et ⁸¹Tl. Aucun de ceux-ci n'est présent en quantité appréciable dans notre dispositif expérimental, et nous rejetons donc aussi cette hypothèse.

Nous avons donc conclu qu'il s'agissait bien d'un parasite dû par exemple à une impureté dans le détecteur à localisation, une inhomogénéité des fils d'anode ou un écho de la chaîne d'électronique.

Malgré l'origine mal connue de ce parasite, nous avons pu l'extraire de façon suffisamment précise pour dépouiller les spectres. Comme nous l'avons vu au Chap.II§II-3-d-vii, nous maîtrisons la forme d'une raie enregistrée par le détecteur (convolution de gaussienne, exponentielle et lorentzienne) et cette forme est identique pour toutes les raies du spectre. Lors du dépouillement, et après avoir soustrait tous les fonds maîtrisés (propre, trou et bremsstrahlung), je retirais *a priori* la contribution du parasite des spectres (simulé par une gaussienne très large). Je procédais alors à la simulation du spectre comme expliqué dans la partie suivante, et vérifiais en particulier que la raie Ba₄, très sensible au parasite, pouvait être correctement simulée avec la forme de la raie appliquée à tout le spectre. Si ce n'était pas le cas, je modifiais la proportion de parasite et recommençais, jusqu'à atteindre un résultat acceptable. La sensibilité de cette procédure était suffisante puisque les résultats obtenus en la répétant plusieurs fois sur le même spectre en laissant libres les paramètres de la simulation de ce parasite se recoupaient tous. Le tableau XVI donne pour trois épaisseurs de cible les proportions de la partie du parasite localisée sous la raie Ba₄ par rapport aux intensités des

autres types de bruit de fond sous la même raie, et par rapport à l'intensité de la raie Ba_4 "nette". La figure 56 illustre les étapes de soustraction du bruit de fond (propre + trou + bremsstrahlung) et du parasite pour une cible de $111 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone vue par le spectromètre 750.

Épaisseur de cible ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	Parasite/FP (%)	Parasite/FT (%)	Parasite/FB (%)	Parasite/ Ba_4 (%)
3,2	1890	51	800	76
21,6	1250	31	78	9,2
111	2330	320	206	32

Tableau XVI : Proportion en % du parasite par rapport à chaque type de fond situé sous la raie Ba_4 et par rapport à l'intensité nette de cette raie pour trois épaisseurs de cible de carbone -spectromètre 750.

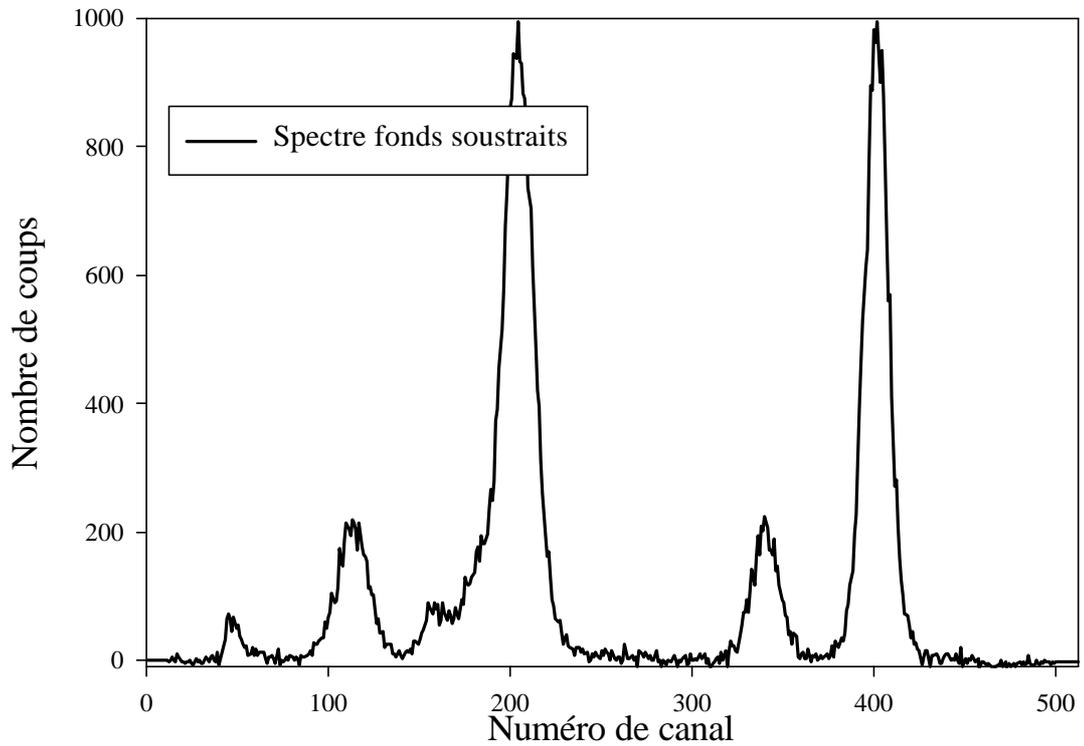
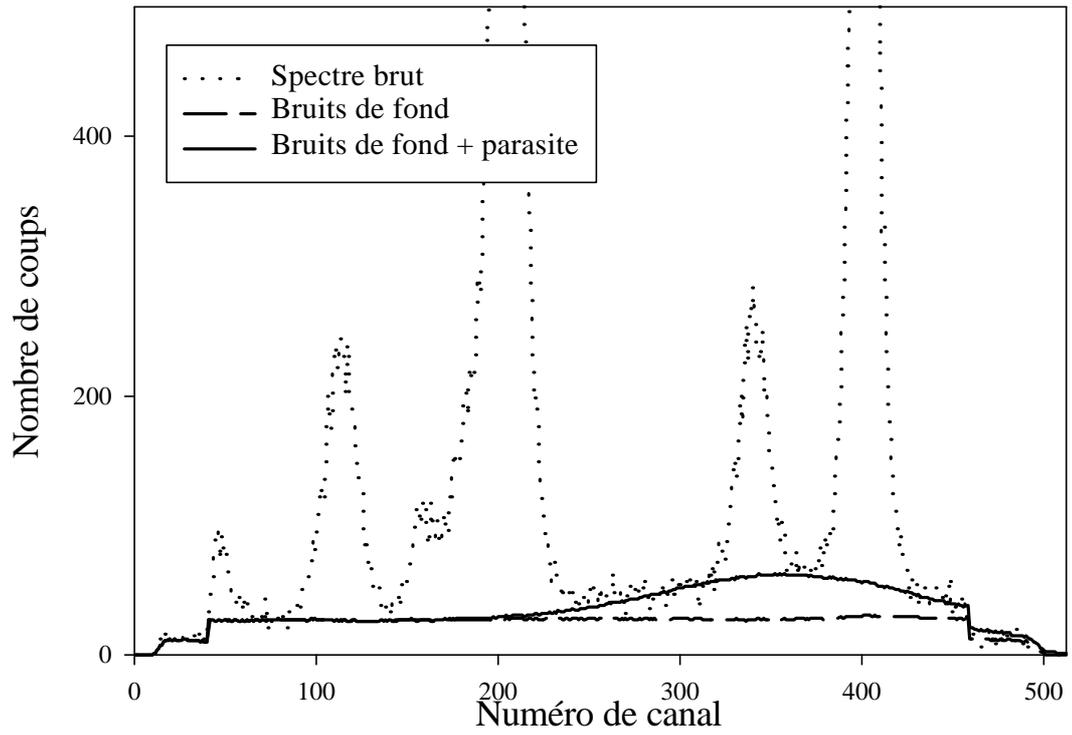


Figure 56 : Soustraction des bruits de fond et du parasite sur un spectre enregistré par le spectromètre 750 et correspondant à la collision Kr^{35+} @ $C 111 \mu g.cm^{-2}$ à 60 MeV/A.

iii) Simulation des raies

Pour effectuer cette simulation, nous avons utilisé le programme GENPLOT (Computer Graphics Service, 1988-1990) auquel nous avons adjoint des procédures permettant entre autre :

- L'étude et la soustraction des bruits de fond présentées au paragraphe précédent.
- La construction de convolutions de gaussiennes, lorentziennes et exponentielles de position, largeur et intégrales ajustables, ainsi que leur comparaison avec les spectres expérimentaux.

Les critères à respecter pour simuler un spectre, une fois les fonds soustraits, sont :

- conserver l'écart entre les raies sur tous les spectres
- conserver les largeurs de lorentzienne et d'exponentielle sur chaque raie et sur chaque spectre. La largeur de gaussienne peut varier (dans les 5%) d'un spectre à l'autre car elle est liée en partie à la qualité du faisceau qui n'était pas constante, mais jamais entre les raies d'un même spectre.
- bien reproduire la forme du spectre expérimental. Cela implique que la soustraction du spectre simulé au spectre expérimental doit être plate et son intégrale sur la zone de comparaison doit être inférieure à la barre d'erreur statistique.

Le respect de ces critères nous a permis d'extraire des raies à la limite du pouvoir de résolution des spectromètres, comme les raies Ba₂ et Ba₃, ou les raies héliumoi des situées dans le pied gauche de la Ba₁. A titre d'exemple, la figure 57 montre la décomposition effectuée sur les spectres de la cible de 111 $\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone. Notons que la raie Ba₅, inutile pour les rapports cherchés n'a pas été simulée.

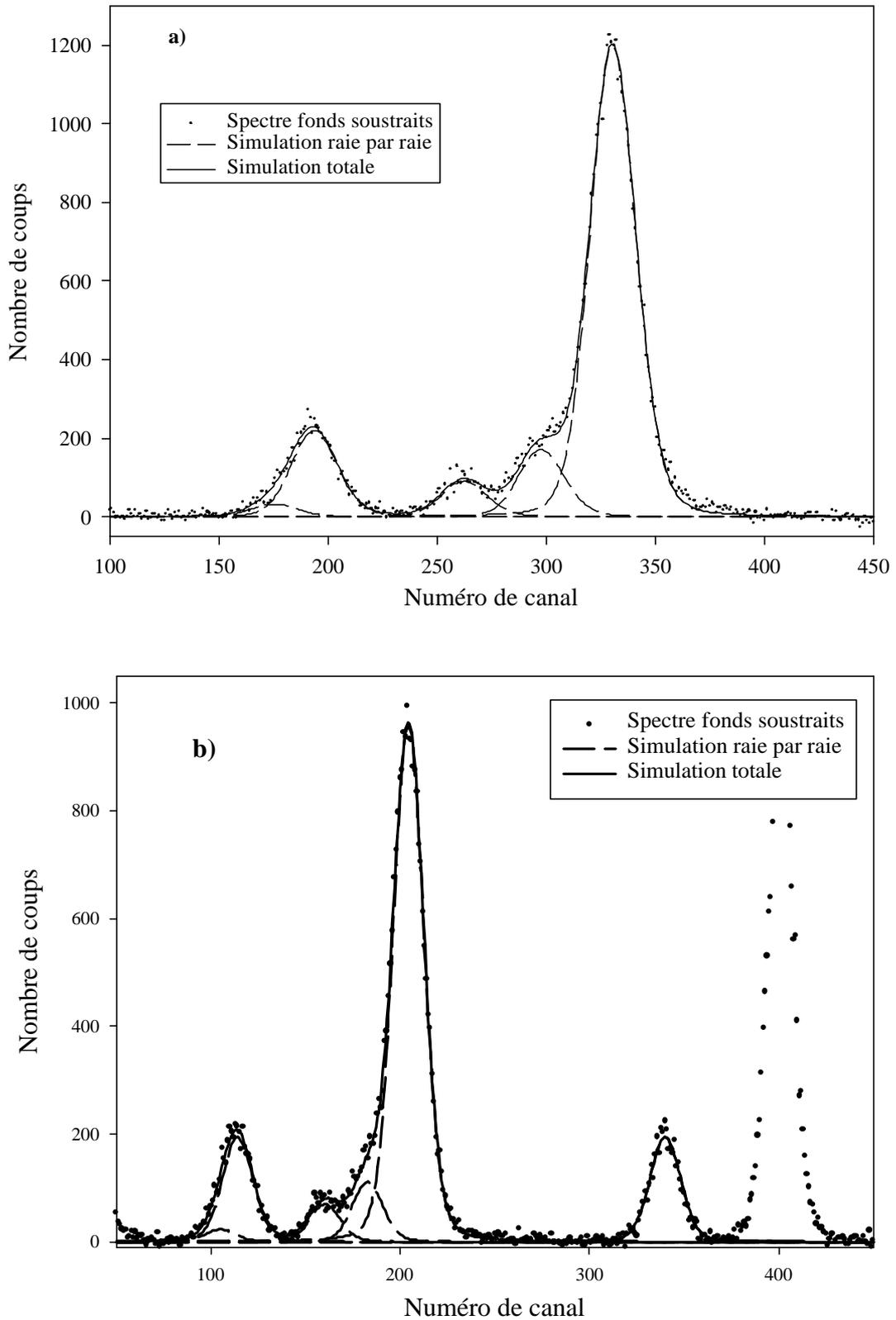


Figure 57 : Exemples de décompositions effectuées sur les spectres obtenus pour une cible de carbone de $111 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ sur le spectromètre 1200 (a) et 750 (b).

b) Extraction des résultats

Les résultats expérimentaux extraits à partir des spectromètres sont les rapports des intensités $R_1 = \frac{I(\text{Ba}_2)}{I(\text{Ba}_3)}$ et $R_2 = \frac{I(\text{Ba}_4)}{I(\text{Ba}_1)}$. Nous avons vu qu'ils permettront de mesurer les rapports des populations des états de structure fine $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ et $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ via l'expression (144).

i) Extraction des rapports

La simulation des spectres nous permet d'avoir l'intégrale des raies que l'on peut séparer avec nos spectromètres. Afin d'estimer la contribution de la transition héliumoi de $1s3p^1P_1 \rightarrow 1s2s^3S_1$, indiscernable, à la raie Ba_2 (voir figure 50), nous nous sommes servis de l'intensité de la transition héliumoi de $1s3p^3P_2 \rightarrow 1s2s^3S_1$ que nous pouvons mesurer avec précision. Pour cela :

- on admet que la capture peuple de façon statistique les états $1s3p$
- on tient compte des rapports de branchement (Tableau XIII) :

$$\frac{\text{Intensité}(^1P_1)}{\text{Intensité}(^3P_2)} = \frac{3 \times 1,43\%}{5 \times 100\%} = 8,5810^{-3}$$

- comme seulement une partie de cette transition est sous la transition Ba_2 , l'autre étant sous la transition du niveau $1s3p^3P_2$, on ne retire que 77% de cette raie. Cette valeur s'appuie sur une répartition linéaire en fonction de la position des raies. Bien qu'approximative, cette méthode est suffisante pour estimer la contribution d'une raie qui est de toute façon très faible en proportion de la raie dont on veut extraire l'intensité (moins de 2% de la Ba_2).

Afin de tenir compte de cette contribution, on retire donc 0,66% de contribution de la transition $1s3p^3P_2$ sous la transition Ba_2 .

Rappelons que l'intégrale de la raie Ba_3 mesurée par le spectromètre 1200 doit être multipliée par 1,19 pour tenir compte de la réflectivité du cristal (Chap.II§II-3-d-v).

Le calcul du rapport R_2 ne pose aucune difficulté puisque les deux raies Ba_1 et Ba_4 sont directement mesurées.

ii) Calcul de l'incertitude

Nous étudions l'évolution des rapports définis précédemment en fonction des épaisseurs de cible traversées. Les incertitudes statistiques sur les épaisseurs de cible sont extraites des mesures RBS et sont données dans le Tableau IX du Chap.II§II-2, et il faut y ajouter une

incertitude systématique (épaissement des cibles de $1\mu\text{g}/\text{cm}^2$ sous faisceau, voir le même paragraphe).

L'incertitude sur les rapports R_1 et R_2 a plusieurs contributions :

- celle due aux bruits de fond

Soit N_{fond} le nombre de coups dus à tous les bruits de fond mesurés sous une raie. Dans l'hypothèse où N_{fond} suit une distribution normale (gaussienne), il y a 85% de chances pour que la valeur réelle de N_{fond} soit dans l'intervalle $[N_{\text{fond}}-\Delta N_{\text{fond}}, N_{\text{fond}}+\Delta N_{\text{fond}}]$, avec $\Delta N_{\text{fond}} = \sqrt{2N_{\text{fond}}} = \Delta_F$.

Notons toutefois que cette valeur est légèrement surestimée puisque nous connaissons la forme du fond. Précisons également que j'ai inclus dans N_{fond} la contribution du "parasite" (voir paragraphe précédent), qui intervient principalement dans la raie Ba_4 .

- celle due à la statistique des raies

Soit I_{net} l'intégrale d'une raie simulée sur un spectre. Comme nous maîtrisons parfaitement sa forme, l'incertitude absolue sur I_{net} est donnée par $\sqrt{I_{\text{net}}}$.

Nous nous intéressons à des rapports d'intégrales mesurées sur **le même spectre** et nous nous affranchissons ainsi de toute erreur systématique, telles que celles que l'on peut faire sur l'angle solide de détection, le nombre de projectiles, etc...

Soient I_a et I_b les intégrales des raies dont on veut étudier le rapport $R = I_a/I_b$, et Δ_F l'incertitude absolue sur le fond présent sous une raie (les fonds étant assez plats sous les raies, Δ_F ne dépend pas de la raie). Nous avons choisi de maximiser l'erreur relative faite sur R en additionnant **linéairement** les erreurs relatives provenant de la soustraction du fond et de la statistique des deux raies :

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\left| \frac{I_a + \Delta_F}{I_b + \Delta_F} - \frac{I_a - \Delta_F}{I_b - \Delta_F} \right|}{2 \frac{I_a}{I_b}} + \frac{1}{\sqrt{I_a}} + \frac{1}{\sqrt{I_b}} \quad (164)$$

où le premier terme à droite du signe égal est l'erreur sur la soustraction des fonds, tenant compte du fait que l'on maîtrise leur forme : ainsi, on fait simultanément la même erreur sur la soustraction du fond sous les raies a et b.

Enfin nous avons choisi de ne pas rajouter d'erreur de décomposition, car celle-ci n'est pas estimable rigoureusement. Cependant, nous avons fait plusieurs essais indépendants de

décomposition, et l'application de la méthode décrite au paragraphe précédent amène toujours à un résultat très proche, largement dans la barre d'erreur calculée par la formule (164).

iii) Résultats expérimentaux

L'annexe B récapitule l'ensemble des résultats expérimentaux obtenus sur les spectromètres, qui sont représentés sur les figures 58 et 59. L'étude de ces résultats et leur comparaison avec les théories seront faites au Chapitre III.

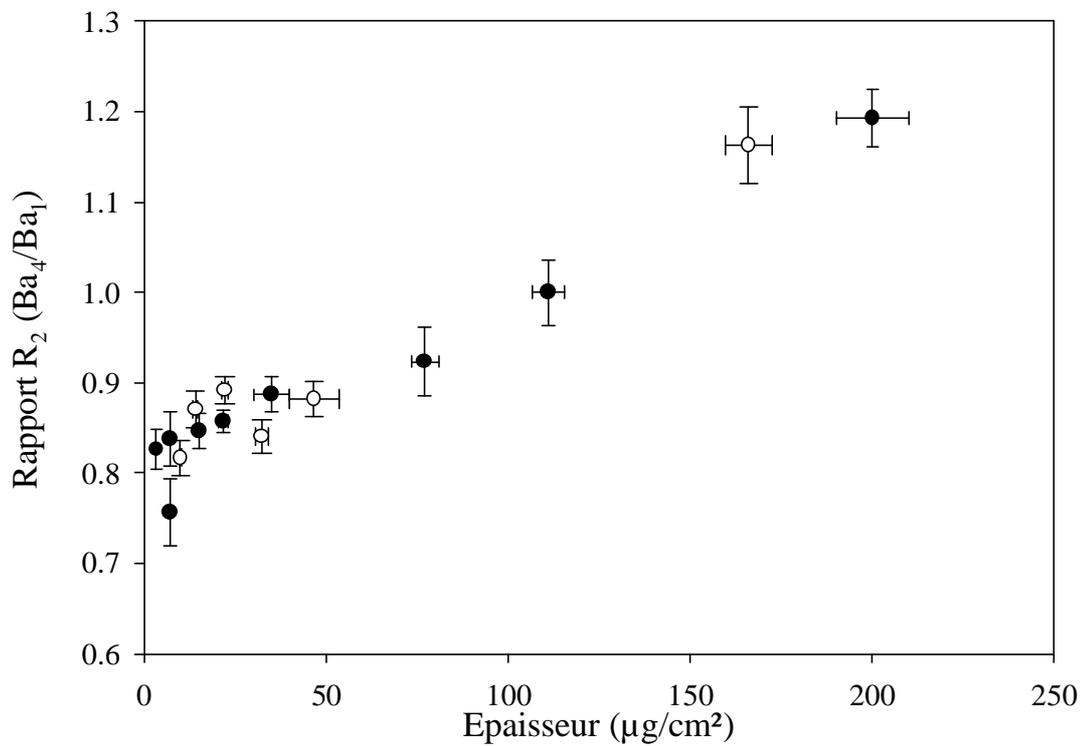
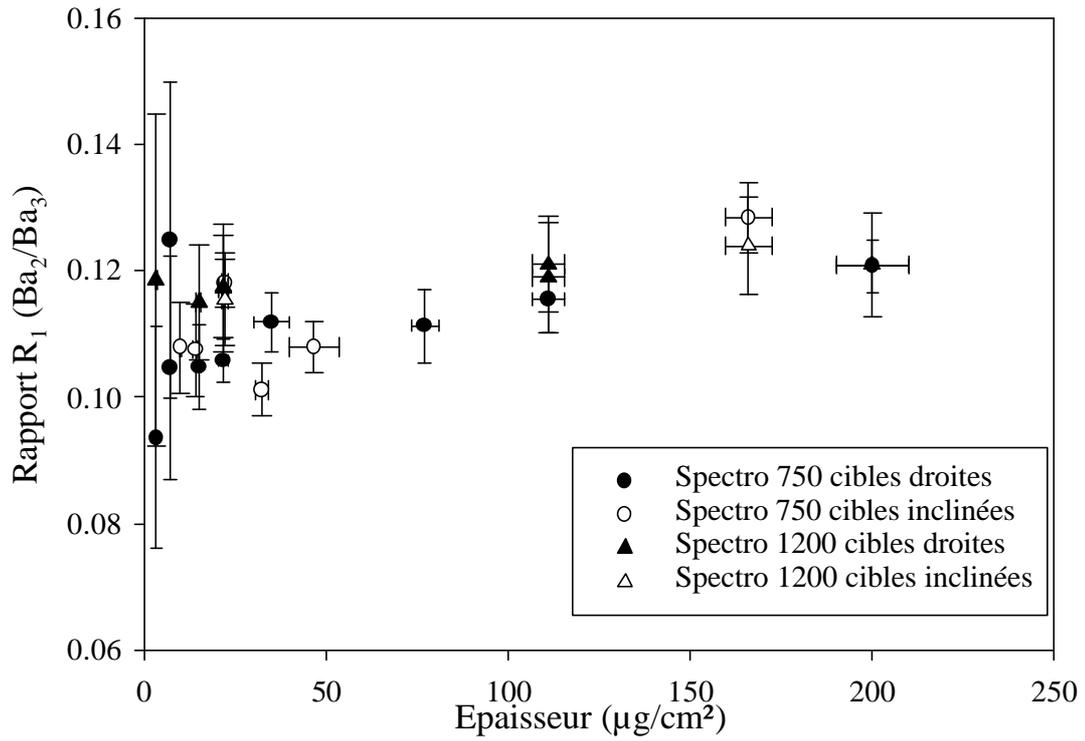


Figure 58 : Evolution des rapports R_1 et R_2 expérimentaux en fonction de l'épaisseur de cible de carbone traversée pour un ion Kr^{35+} à 60 MeV/A.

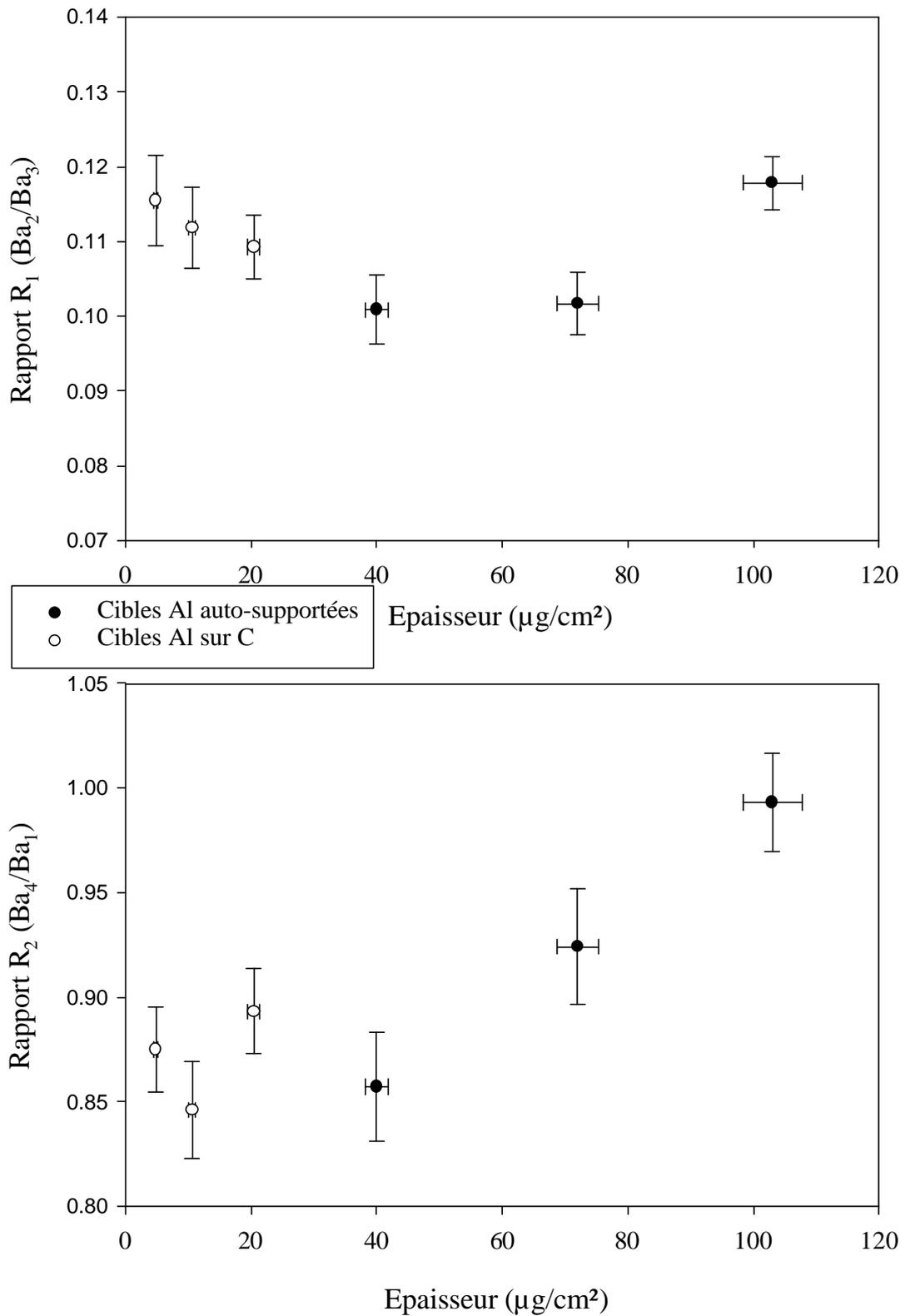


Figure 59 : Evolution des rapports R_1 et R_2 expérimentaux en fonction de l'épaisseur de cible d'aluminium traversée pour un ion Kr^{35+} à 60 MeV/A.

3°) Résultats obtenus avec le détecteur à jonction placé à 120°.

a) Présentation des spectres bruts.

Il faut tout de suite préciser que seuls les spectres enregistrés par la jonction Si(Li) placée à 120° lors des collisions d'ions Kr^{35+} avec des cibles de carbone ont été étudiés.

La figure 60 montre un spectre brut, en échelle logarithmique, correspondant à la cible de 111 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone. On y distingue :

- la série Balmer correspondant aux transitions radiatives du Kr^{35+} aboutissant sur le niveau $n=2$.

- la série Lyman, dont on peut distinguer les composantes α , β , et γ . La composante δ n'est pas clairement séparée de la fin de série $\Sigma(np \rightarrow 1s, n > 5)$, mais nous verrons plus loin qu'une bonne connaissance de la forme des raies nous a permis de l'extraire. Ce sont à ces transitions que nous nous sommes intéressés.

- les raies REC L et REC K correspondant à la capture radiative respectivement en couche L et K du krypton.

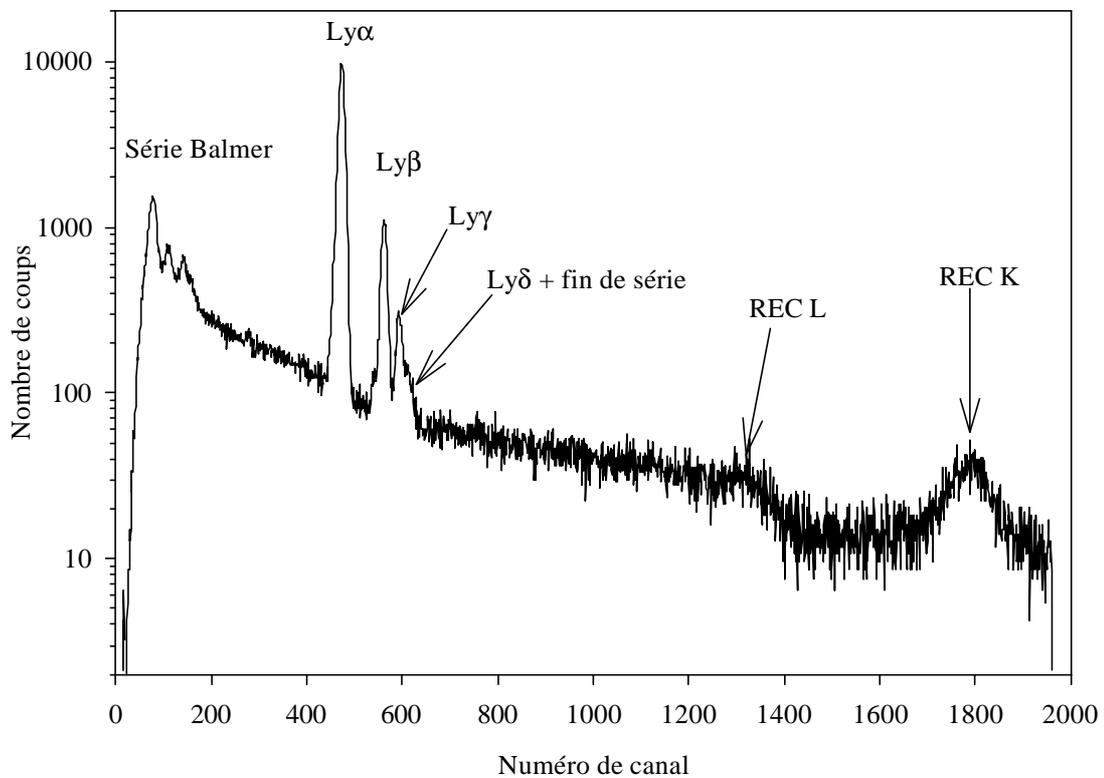


Figure 60 : Spectre X enregistré par la jonction Si(Li) à $q_L = 120^\circ$ pour la collision Kr^{35+} (60 MeV/A) avec une cible de carbone d'épaisseur 111 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

b) Décomposition des spectres.

La méthode utilisée pour décomposer les spectres suivait **scrupuleusement** la procédure dont la description exhaustive est donnée dans la thèse d'Emily Lamour (Lamour, 1997). Je préciserai donc ici seulement les caractéristiques propres à cette expérience. Ici comme pour les spectres obtenus par les spectromètres cristallins, nous avons tenu compte du taux de comptage du détecteur en divisant chaque spectre par son pourcentage de détection.

i) Soustraction des fonds.

Les trois types de fonds (propre, trou et bremsstrahlung) décrits dans le chapitre relatif aux spectromètres sont aussi visibles sur les détecteurs à jonction. La figure 61 montre l'exemple de la soustraction des fonds sur la jonction Si(Li) placée à 120° pour 2 épaisseurs de cible de carbone.

- ◆ Le fond propre était tellement faible qu'on peut parfaitement le négliger. Le nombre de coups de fond propre intégré sur tout le spectre valait typiquement 0,6 coups/seconde.
- ◆ Le fond trou a une contribution plus importante que le fond propre, et sa forme dépend du type de support de cible utilisé. De plus, il contient des structures dues à l'interaction entre le halo du faisceau (voir Chap.II§II-1) et les supports en aluminium des cibles. Plus précisément, ce sont des transitions Lyman provenant des désexcitations de projectiles krypton qui pénètrent dans le support de cible. Considérons par exemple la bosse située approximativement sous la raie Lyman α : sa plage énergétique démarre à l'énergie de la Lyman α du Kr^{35+} , et se prolonge à plus haute énergie. Les coups tombant à l'énergie de la Lyman α résultent de l'excitation du projectile incident par les atomes du support de cible. Les coups visibles à plus haute énergie sont des X émis par le projectile à l'intérieur du support de cible. A mesure que le projectile s'enfonce dans le support, il est d'une part ralenti et d'autre part "rhabillé" de ses électrons. Les X émis correspondent donc à des transitions Lyman α héliumoïdes, lithiumoïdes, etc... Ces X sont émis **dans le référentiel du projectile** à plus basse énergie que ceux de la Lyman α hydrogénoïde, mais à cause du ralentissement du projectile dans le support de cible et de l'effet Doppler, on les enregistre sur le détecteur placé à $\theta_L = 120^\circ$ à plus haute énergie que la Lyman α émise par des projectiles n'ayant pas été ralentis.

Des spectres de fond trou avaient été enregistrés régulièrement, et nous avons utilisé le fond trou (correspondant au "bon" support de cible) enregistré à un moment le plus proche possible de l'acquisition d'un spectre donné pour en soustraire sa contribution, afin de

tenir compte des fluctuations du faisceau. Cette soustraction a été effectuée en normalisant l'intégrale du fond trou utilisé au même nombre de projectiles que le spectre brut. Le tableau XVII-a donne la proportion de fond trou sous les raies nettes Lyman α et δ pour les 2 épaisseurs de cible correspondant au spectre de la figure 61. Nous voyons que la contribution de fond trou est d'autant plus importante que la cible est fine d'une part, et que l'on observe des désexcitations venant de niveaux élevés d'autre part.

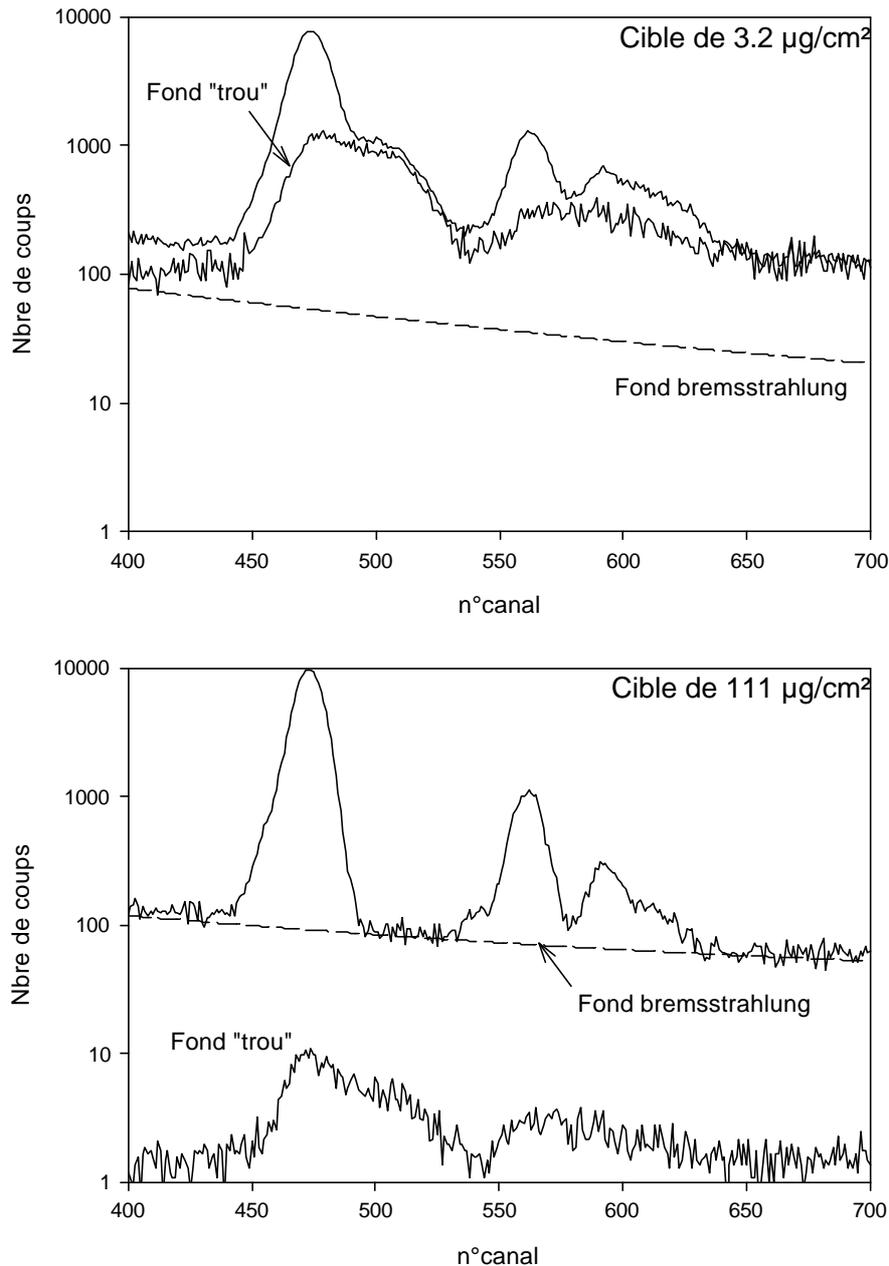


Figure 61 : Soustraction des bruits de fond sur des spectres enregistrés par la jonction Si(Li) placée à 120° correspondant au système $Kr^{35+} @ C$ (60 MeV/A) pour des cibles de carbone d'épaisseurs $3,2 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ et $111 \mu\text{g}/\text{cm}^2$.

- ◆ Le fond bremsstrahlung est à son tour simulé par une exponentielle décroissante, ajustée sur des parties où il n'y a pas de raie. Pour information, le seuil haut du bremsstrahlung primaire (voir Chap.II§III-2-a) vaut 26,38 keV sur un détecteur placé à $\theta_L = 120^\circ$ (on ne voit pas ce seuil sur le spectre de la figure 60 car il est "caché" par la REC L), tandis que celui du bremsstrahlung secondaire ne dépend pas de l'angle d'observation et vaut 134 keV pour notre expérience et sort donc de la fenêtre d'observation du détecteur Si(Li). Comme lors du dépouillement des spectromètres, nous avons vérifié que l'intensité du fond bremsstrahlung dépend bien de façon linéaire du nombre de projectiles (figure 62). Le tableau XVII-b donne la proportion de fond bremsstrahlung sous les raies nettes Lyman α et δ pour les 2 épaisseurs de cibles correspondant au spectre de la figure 61. Nous voyons que la contribution de ce fond est d'autant plus importante que la cible est épaisse, et que la raie mesurée est peu intense.

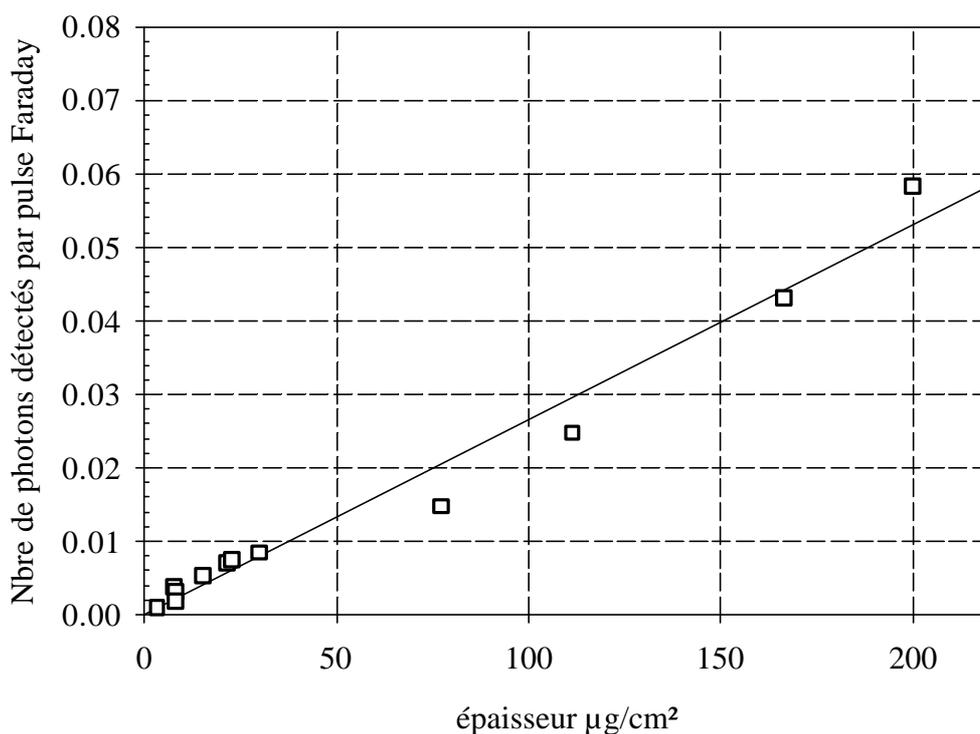


Figure 62 : Evolution du fond dû au bremsstrahlung enregistré par la jonction Si(Li) placée à 120° en fonction de l'épaisseur de cible.

Épaisseur de cible ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	FT/Ly α (%)	FT/Ly δ (%)
3,2	32,4	408
111	0,2	10

(a)

Épaisseur de cible ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	FB/Ly α (%)	FB/Ly δ (%)
3,2	2,7	50
111	3,1	247

(b)

Tableau XVII : Proportion en % de différents fonds par rapport à l'intensité nette des raies Ly α et Ly δ pour deux épaisseurs de cible de carbone vues par la jonction placée à 120°. - (a) fond trou - (b) fond bremsstrahlung.

ii) Simulation des raies.

Après avoir soustrait les fonds, nous avons mesuré les intensités des raies Lyman en les simulant par une forme constante à la fois d'une raie à l'autre sur un spectre donné, mais aussi d'un spectre à l'autre. L'étalonnage précis du détecteur et la bonne connaissance des énergies des raies nous a permis d'extraire la raie Lyman δ de la fin de série.

La forme de raie utilisée était la somme d'une gaussienne et d'une exponentielle simulant une queue basse énergie due à la réponse du détecteur. La largeur à mi-hauteur de la gaussienne était de 290 eV et celle de l'exponentielle valait 115 eV. L'intégrale de l'exponentielle représentait une fraction constante égale à 4% de celle de la gaussienne.

La figure 63 montre un exemple de décomposition effectuée sur un spectre correspondant à une cible de 111 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone.

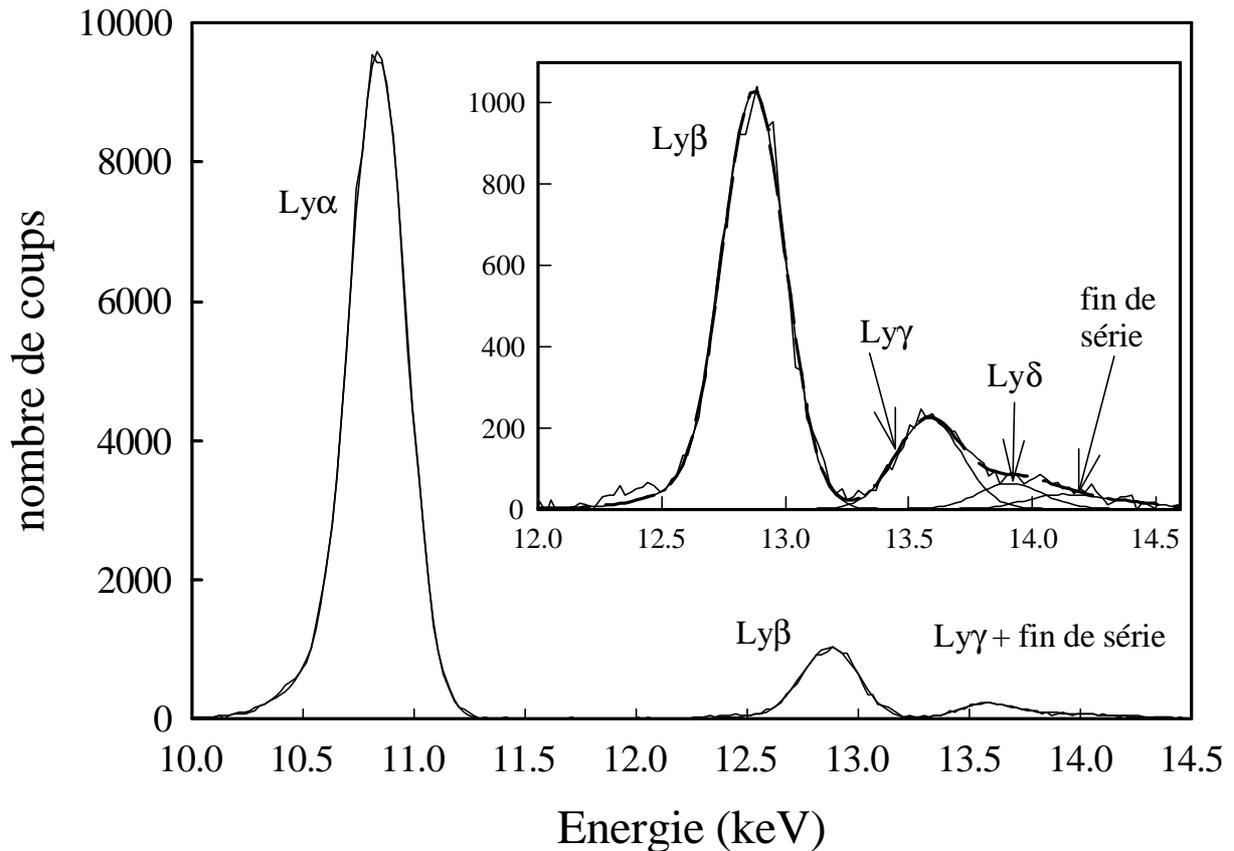


Figure 63 : Exemple de décomposition effectuée sur un spectre obtenu pour une cible de carbone de $111 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ sur la jonction Si(Li) placée à 120° . La courbe en tiret dans l'encadré montre la simulation globale, à comparer au spectre total.

c) Extraction des résultats.

i) Intensités absolues

Si $N^{n\ell}$ est l'intégrale d'une raie mesurée sur un spectre par la méthode décrite précédemment (où le spectre a été ramené à 100% de détection), le nombre d'X émis par ion correspondant vaut :

$$N_{\text{X/ion}} = \frac{N^{n\ell}}{\text{Far}} \times \frac{1,60 \cdot 10^{-19} \times 35}{T_{\text{glob}}} \quad (165)$$

où Far est la charge recueillie par la cage de Faraday placée en bout de ligne pour le spectre considéré, et T_{glob} est la transmission globale du détecteur égale à $7,4 \cdot 10^{-7}$ (Chap.II§II-3-c-iii).

ii) Calcul de l'incertitude

L'erreur relative commise sur le nombre d'X émis par ion est la somme linéaire des erreurs relatives liées au pourcentage de comptage, à la décomposition des raies, celle sur la mesure de la Faraday et sur la transmission globale du détecteur.

◆ **L'erreur relative sur le pourcentage de comptage** est liée à la statistique du nombre d'événements « pulseur » (Chap.II§II-3-e-ii). Si N_{pulseur} est le nombre de coups de pulseur enregistré par la voie de l'acquisition consacrée au détecteur, l'erreur relative faite sur le pourcentage de comptage vaut $1/\sqrt{N_{\text{pulseur}}}$. Cette erreur vaut environ 1%.

◆ **L'erreur de décomposition** d'une raie est quant à elle due à 3 termes:

1 l'erreur liée à la soustraction des fonds sous la raie ($n\ell$) considérée. Cette erreur est reliée à l'erreur statistique de chacun des fonds et dépend de l'ajustement de ces fonds au spectre brut. Elle est notée $\sqrt{2N_{\text{Fond}}^{n\ell}}$ et vaut $\sqrt{2N_{\text{FP}}} + \sqrt{N_{\text{FT}}} + \sqrt{N_{\text{FB}}}$ puisque le fond propre correspond à un processus aléatoire et que les fonds trou et bremsstrahlung, qui ont une forme caractéristique, sont dus à des processus physiques non aléatoires.

2 l'erreur liée à la statistique de l'intégrale d'un pic considéré soit $\sqrt{N^{n\ell}}$.

3 les pics voisins, possédant une erreur de décomposition, peuvent influencer l'intégrale du pic considéré et donc entraîner une erreur. Cette erreur notée $\sqrt{N_{\text{voisin}}^{n\ell}}$, pour un pic voisin, est égale à l'intégrale de ce pic voisin sous la raie considérée multipliée par l'erreur relative statistique de ce pic voisin.

L'erreur relative globale de décomposition a été maximisée en étant déduite par la formule : $\left(\sqrt{2N_{\text{Fond}}^{n\ell}} + \sqrt{N^{n\ell}} + \sqrt{N_{\text{voisins}}^{n\ell}}\right)/N^{n\ell}$

En effet, les formes des simulations de raies n'étant pas totalement indépendantes, l'erreur réelle faite sur ces décompositions ne peut être qu'inférieure ou égale à la somme ainsi calculée.

◆ **L'erreur relative sur la mesure de Faraday** est généralement très petite (moins de 1%), mais peut devenir importante ponctuellement. En effet il arrivait que l'acquisition s'arrête de façon impromptue, et nous avions alors 2 valeurs différentes de Faraday (une enregistrée sur bande, et l'autre sur les relevés des échelles VAX imprimés lors de

l'expérience). Dans ce cas, nous avons attribué comme incertitude la différence entre les 2 valeurs. Nous avons trouvé à chaque fois une incertitude relative de l'ordre de 20%

- ◆ **L'erreur relative sur la transmission globale du détecteur** est due essentiellement à l'incertitude sur l'angle solide délimité par le collimateur placé devant et vaut 4% (Chap.II§II-3-c-iii).

iii) Résultats expérimentaux obtenus sur la jonction à 20° .

Les résultats expérimentaux sont récapitulés dans l'annexe B, et sont portés sur la figure 64. L'étude de ces résultats sera faite au Chapitre III.

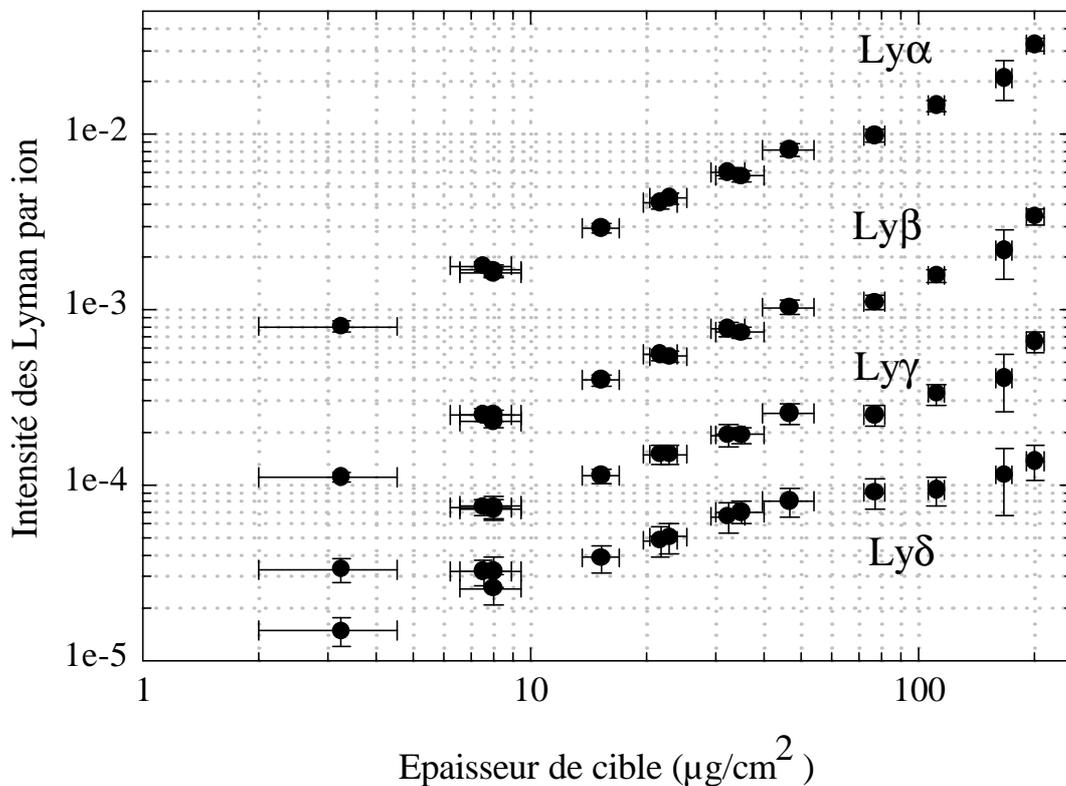


Figure 64 : Evolution du nombre d' X issus des états $2p$, $3p$, $4p$ et $5p$ par ion émis par un projectile Kr^{35+} ($60MeV/A$) en fonction de l'épaisseur de carbone traversée.

CHAPITRE III

RESULTATS ET DISCUSSION

Dans ce chapitre je présenterai des résultats expérimentaux tirés de plusieurs campagnes d'expériences, celle décrite dans le chapitre II qui concerne le transport des ions $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ et Al à $v = 47$ u.a. ($E = 60$ MeV/A) dont les états excités sont initialement peuplés par excitation, plus deux études précédentes effectuées sur les systèmes $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A) et $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A) et qui s'intéressent au transport d'états initialement peuplés par capture. Les résultats sont présentés par type d'observables et comparés aux diverses approches théoriques développées au chapitre I. Je présenterai d'abord l'évolution des populations n, ℓ absolues en fonction de l'épaisseur de cible traversée, puis celle des rapports de populations de structure fine de la couche $n = 3$.

I – Evolution des populations absolues $n\ell$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée

1°) Système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A)

Ces résultats sont issus de l'expérience décrite dans (Despiney, 1994) et (Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998). Cependant, ils étaient alors présentés en valeur relative (intensité d'une raie Lyman particulière sur la somme des intensités Lyman) et normalisés à la valeur en gaz (c'est à dire à l'épaisseur 0). L'intérêt de cette présentation réside dans la faible valeur des barres d'erreurs expérimentales mais en revanche la discussion des résultats est rendue plus compliquée. Je présente donc ici les intensités Lyman absolues.

a) Présentation des résultats expérimentaux

La figure 65 montre l'évolution des intensités des raies Lyman ($n \leq 5$) par ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée, pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$ u.a.

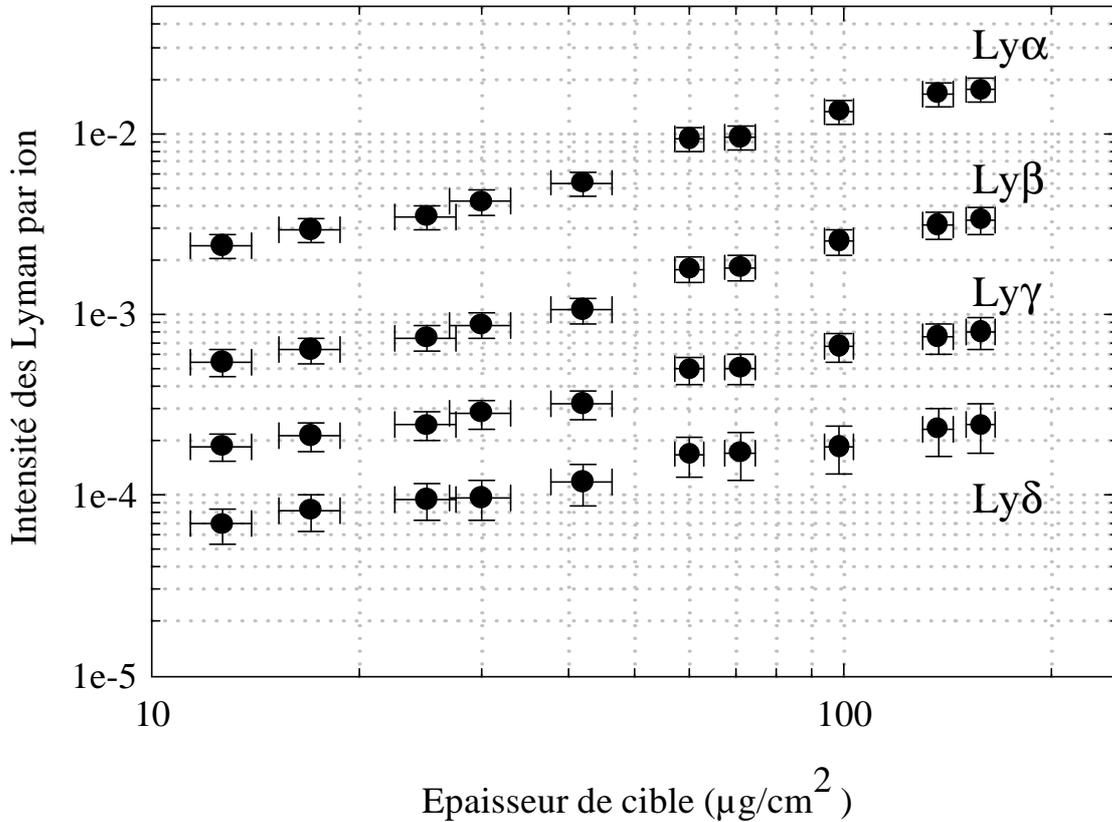


Figure 65 : Evolution des intensités des raies Lyman ($n \leq 5$) par ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée, pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$ u.a.

Nous ne pouvons pas mesurer les désexcitations venant de l'état $2s$ pour un projectile krypton car le temps de vie de cet état est trop court. En effet la méthode consiste normalement à effectuer une mesure de déclin radiatif de l'état métastable $2s$, à une certaine distance derrière la cible pour laquelle toutes les transitions Lyman ont déjà eu lieu. Mais pour le krypton à $35,6$ u.a. le libre parcours moyen radiatif de l'état $2s$ est de seulement 3 mm ce qui rend ce genre de mesure extrêmement difficile.

Il est intéressant d'évaluer la contribution des cascades au signal recueilli. La figure 66 montre cette contribution en pourcentage des Lyman absolues, en fonction de l'épaisseur de cible traversée et calculée par le programme collisionnel seulement (sans effet de champ de sillage) décrit au chapitre I.§A-V-1. Nous verrons que ce programme décrit correctement l'essentiel de l'évolution pour ce type d'observable, et son utilisation est donc justifiée ici. Le

rapport représenté est la part de la raie Lyman exclusivement due aux cascades à l'extérieur de la cible (quand il n'y a plus de transport) à partir des niveaux supérieurs, sur l'intensité totale de cette raie Lyman. Ce rapport peut s'écrire :

$$\text{CASC}_{np}(d) = \frac{\sum_{\substack{n'>n \\ \ell'=1\pm 1}} \tilde{\sigma}_{n'\ell'}(d) \frac{R_{n'\ell'}^{np}}{R_{n'\ell'}}}{N \int_0^d R_{np} \sigma_{np}(x) dx + \sigma_{np}(d) + \sum_{\substack{n'>n \\ \ell'=1\pm 1}} \tilde{\sigma}_{n'\ell'}(d) \frac{R_{n'\ell'}^{np}}{R_{n'\ell'}}$$

avec les mêmes notations que celles utilisées au chap.I§A-V-1-b lors de la description du modèle collisionnel. Cette expression est valable pour décrire les désexcitations venant d'un état np. Notons qu'en ce qui concerne la raie Lyman α , il faut ajouter la contribution des photons (de même énergie) provenant de la désexcitation M1 de l'état 2s à ceux provenant de l'état 2p, au numérateur et au dénominateur du rapport. Les niveaux considérés sont jusqu'à $n = 10$, et même $n > 10$ approximativement (loi de peuplement en $1/n^3$, voir Chap.I§A-V). Les sections efficaces de capture (processus initial) sont calculées par CDW. Elles amènent à une contribution des cascades à épaisseur nulle (donc sans transport) respectivement égale à 55%, 33%, 22% et 15% pour les Lyman α , β , γ , et δ et qui atteint 26%, 10%, 8% et 7% après transport dans $220 \mu\text{g.cm}^{-2}$ de carbone. De plus, la contribution des cascades pour la raie Lyman α venant du niveau directement supérieur $n = 3$ représente environ 30% de la contribution totale. (On peut se référer à la figure 14 du chapitre I à ce sujet.)

Nous voyons que les cascades sont importantes principalement pour la Lyman α , et donc que la population de l'état 2p est sensible aux populations des états de n supérieur. On note que pour cette raie, la contribution de cascade est croissante jusqu'à une certaine épaisseur de carbone ($\approx 15 \mu\text{g.cm}^{-2}$). Cette augmentation peut s'expliquer par les excitations vers des états de moment angulaire élevé lors du transport et les désexcitations Yraast vers le niveau 2p. Après avoir atteint une épaisseur de cible suffisante, l'effet de l'ionisation à partir des niveaux de n élevé devient important et la contribution des cascades diminue fortement. Pour les autres Lyman, les cascades ont une importance moindre et les Lyman γ et δ sont peu sensibles aux populations des niveaux supérieurs.

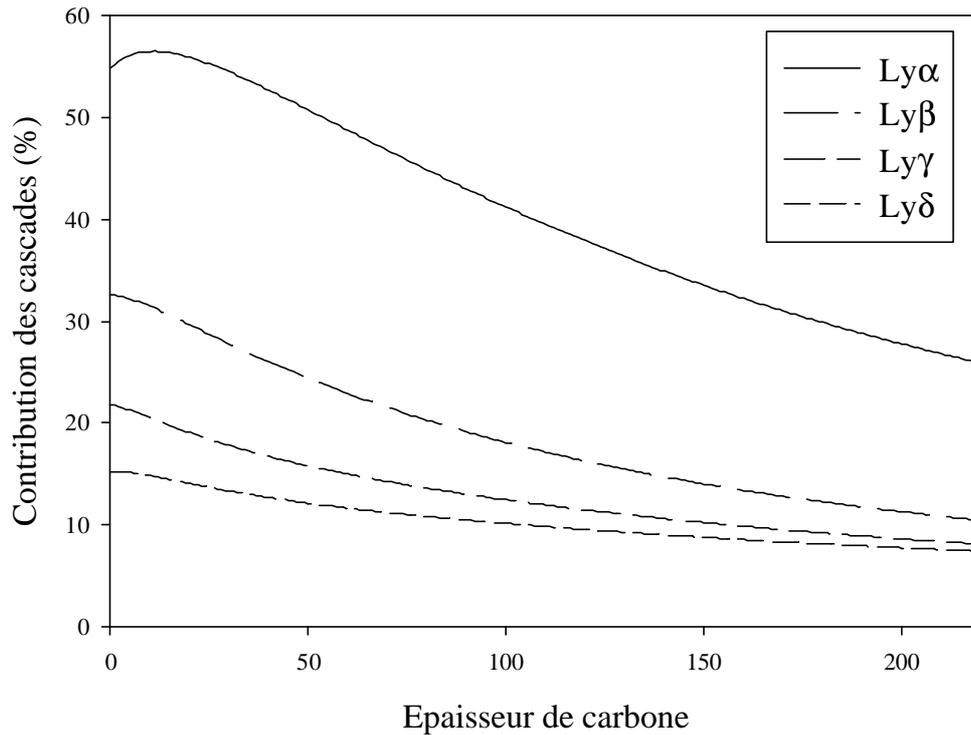


Figure 66 : Contribution des cascades aux intensités des raies Lyman lors de la collision $Kr^{36+} @ C$, $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A) en fonction de l'épaisseur de cible, calculée par le modèle collisionnel.

b) Comparaison avec les résultats théoriques

Je rappelle que le modèle dit "collisionnel" traite les états en base n, ℓ et ignore donc la structure fine des niveaux. De plus, il ne tient pas compte du champ de sillage ni de l'évolution d'aucune cohérence. Les niveaux jusqu'à $n=10$ sont traités, et les niveaux au dessus sont simulés par un loi d'échelle en $1/n^3$ (voir Chap.I§A-V-1). Le modèle dit "d'équation pilote" traite les états en base n, ℓ, j, m_j jusqu'à $n=6$ et calcule l'évolution des cohérences sous l'effet du champ de sillage et du dépeuplement (radiatif et collisionnel) des niveaux.

La figure 67 montre la comparaison des résultats expérimentaux avec les valeurs théoriques données par le modèle collisionnel seul (figure 67-a) et le modèle d'équation pilote (figure 67-b). Les conditions initiales sont données par CDW. Dans le modèle d'équation pilote, la fréquence plasma du milieu vaut 29,1 eV (1,07 u.a.) et la dépendance spatiale du champ est prise en compte.

Nous ne pouvons pas faire de comparaison avec un modèle classique de transport car le krypton est un projectile trop lourd pour être traité par un tel modèle (Chap.I§B), et nous n'avons pas à l'heure actuelle de valeurs données par un modèle Monte Carlo de type quantique pour les observables auxquelles je m'intéresse dans ce paragraphe.

La première constatation que nous pouvons faire est que l'effet principal du transport est correctement reproduit par une évolution collisionnelle. Nous nous attendions à ce résultat au moins pour $n = 2$ car dans cette couche le Lamb-shift est trop important pour que le champ de sillage mélange de façon efficace les états $2s_{1/2}$ et $2p_{1/2}$ séparés de 1,72 eV pour un couplage Stark $\omega_s = 0,26$ eV (et *a fortiori* les états $2s_{1/2}$ et $2p_{3/2}$ séparés de 77,9 eV par le couplage spin-orbite).

De plus, le couplage au champ de sillage entraîne un mélange entre les états d'une couche de n donné : ce mélange tend à répartir statistiquement les populations d'une couche entre les états n, ℓ . Plus le nombre d'états n, ℓ disponibles est grand (c'est à dire quand n augmente) et plus l'effet du champ de sillage sur un état n,p est donc visible (Chap.I§A-V-3-e). Les mélanges dus au champ se compensent d'une certaine façon quand on observe des sommes de niveaux de structure fine : par exemple les mélanges $3s_{1/2}$ - $3p_{1/2}$ et $3p_{3/2}$ - $3d_{3/2}$ agissent de façon contraire sur la population totale $3p$. On observe ainsi que le désaccord entre les points expérimentaux et le modèle collisionnel augmente avec n .

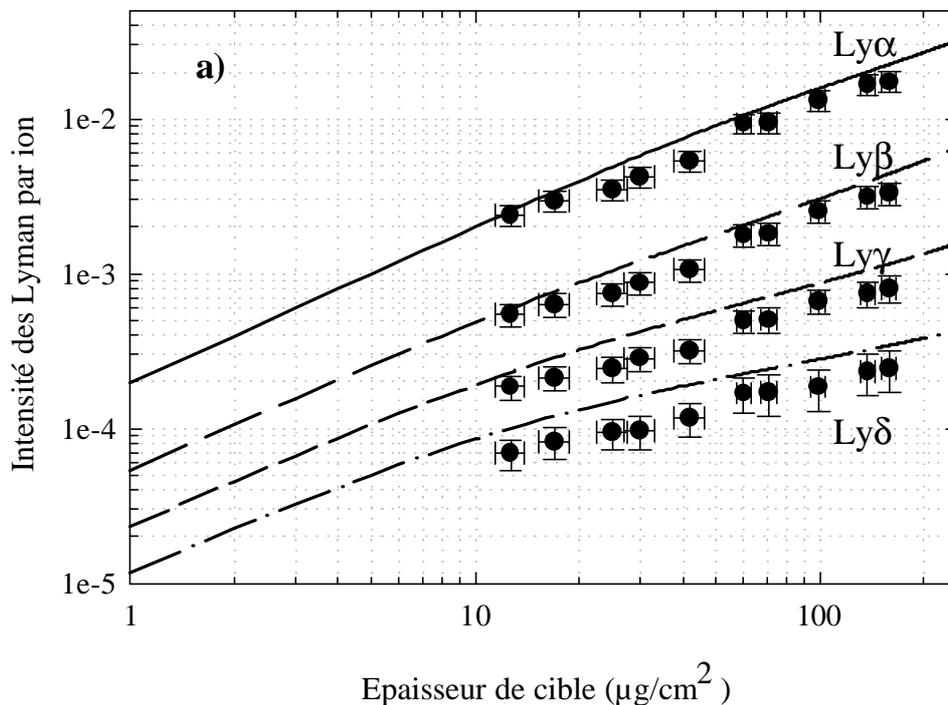


Figure 67-a : Evolution des intensités Lyman ($n=5$) par ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée, pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/a). Comparaison entre l'expérience et le modèle collisionnel

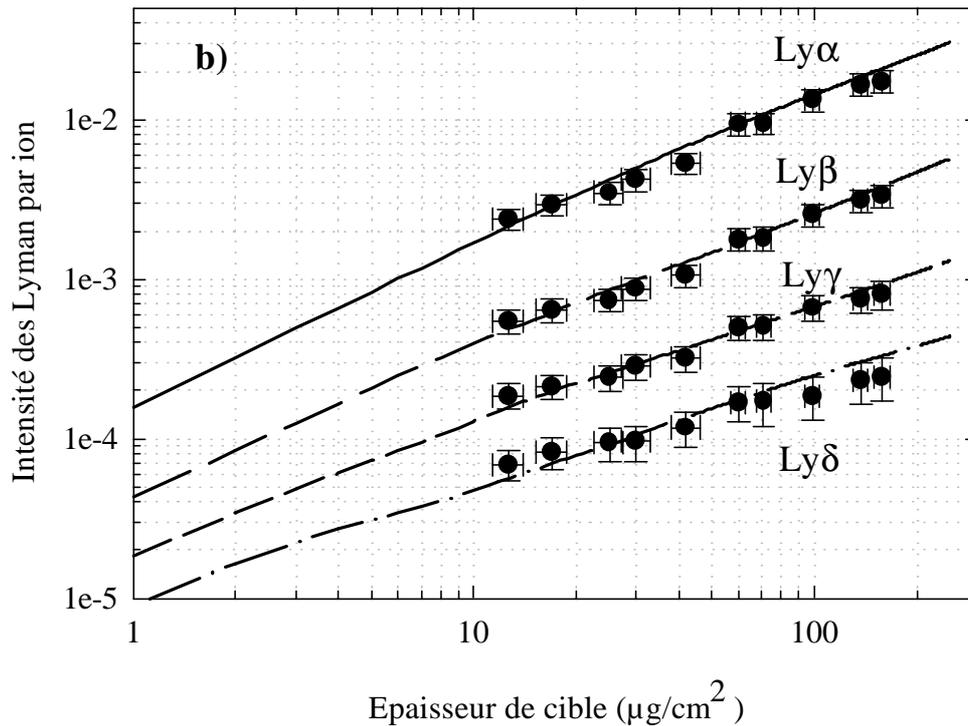


Figure 67-b : Evolution des intensités Lyman ($n \leq 5$) par ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée, pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6 \text{ u.a.}$ ($E = 33,2 \text{ MeV/a}$). Comparaison entre l'expérience et le modèle d'équation pilote.

Le modèle d'équation pilote présente un très bon accord avec les valeurs expérimentales. Le champ de sillage est correctement pris en compte et le modèle reproduit très bien l'évolution des Lyman γ et δ . Enfin, les conditions initiales en termes de population, c'est à dire les sections efficaces de capture CDW ne sont pas mises en défaut pour ce système, mais il faut souligner que nous ne possédons pas de valeur expérimentale en dessous de $12 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone, épaisseur pour laquelle le transport a déjà commencé à agir. Précisons que la contribution des cascades provenant des niveaux de $n > 6$, non prise en compte dans ce modèle, à la raie totale vaut 14% pour la Lyman α et 11% pour les Lyman β à δ pour ce système collisionnel et à épaisseur nulle, valeurs qui diminuent respectivement à 6% et 1% après transport dans $100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone. Ces considérations valident l'approximation de ne prendre les états que jusqu'à $n=6$ dans le modèle d'équation pilote pour traiter ces observables.

Pour visualiser l'influence du transport (collisionnel et dû au champ de sillage) sur ces observables, nous pouvons les comparer figure 68-a aux intensités produites par des collisions ion-atome, sans transport. Ces dernières sont bien entendu représentées par des droites, de

pende unité sur une échelle log-log. Nous voyons que le transport joue un rôle certain sur l'évolution des Lyman produites par le projectile krypton, et particulièrement quand n augmente. Cependant, ce rôle est prédit plus important sur un projectile argon (figure 23-b), et c'est pourquoi l'équipe a démarré l'étude expérimentale du transport de ce projectile. Nous allons donc étudier en détail ce système dans le paragraphe suivant.

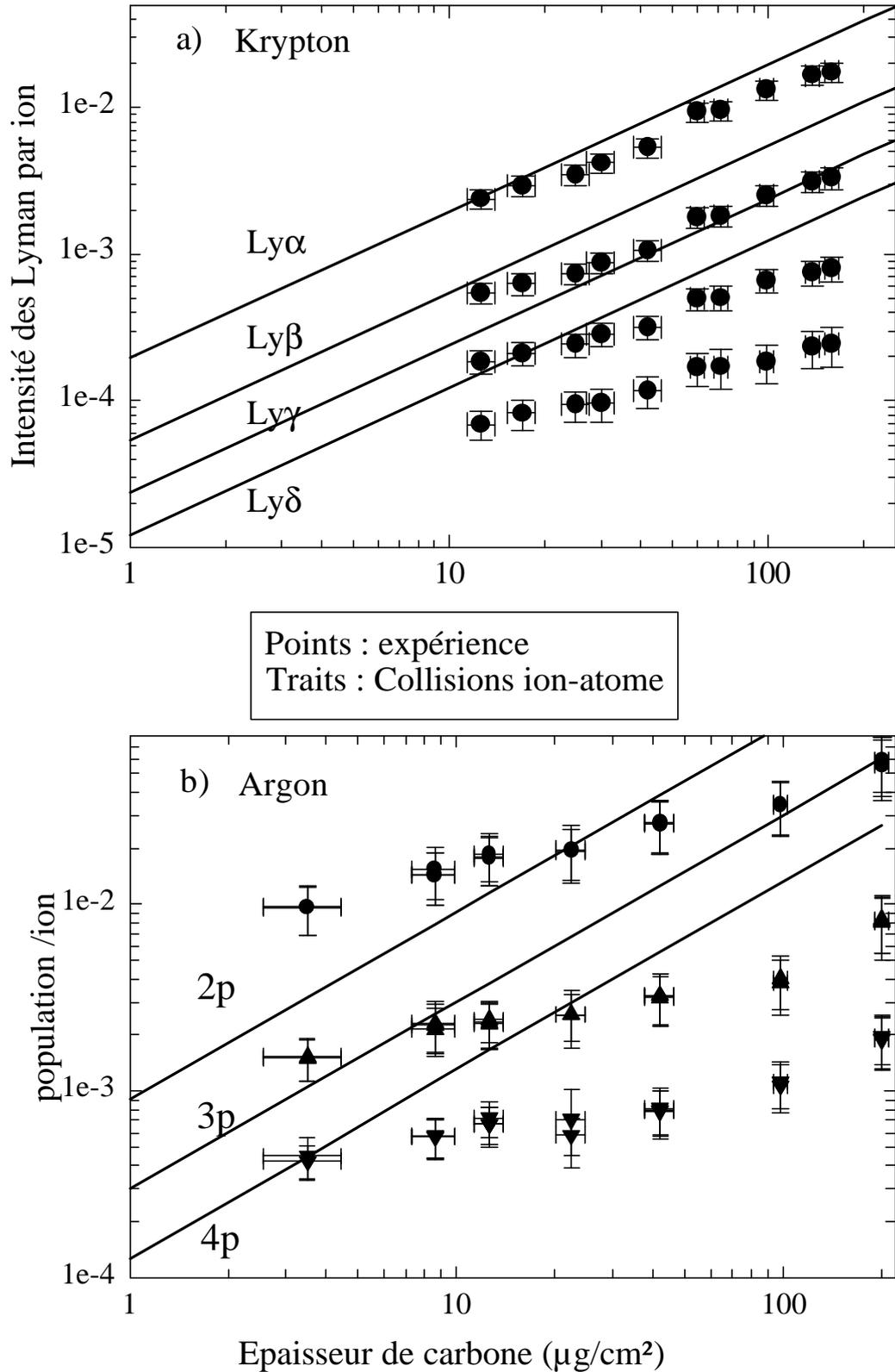


Figure 68 : Evolution des intensités des Lyman ou des populations absolues np en fonction de l'épaisseur de cible, et comparaison avec une évolution type ion-atome pour les systèmes Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. (33,2 MeV/A) et Ar^{18+} @ C à $v = 23$ u.a. (13,6 MeV/A).

2°) Système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A)

Ces résultats sont issus de l'expérience décrite dans (Lamour, 1997) et (Lamour, Vernhet, Rozet *et al.*, 2001).

a) Présentation des résultats expérimentaux

La figure 69 montre l'évolution des populations des niveaux np ($n \leq 4$) et 2s, extraites à partir des intensités des raies Lyman et 2E1, comme expliqué dans les références ci-dessus. Du fait de la grande stabilité du niveau 2s pour l'argon (libre parcours moyen radiatif de 174 mm), les désexcitations provenant de cet état ont pu être mesurées. Cela est important car on peut alors soustraire la contribution de transition M1 à la Lyman α sans hypothèse théorique autre que les valeurs des rapports de branchement qui sont assez bien connus. Les populations présentées sur la figure 69 sont donc purement expérimentales. Notons qu'il n'est pas possible d'extraire la population expérimentale de l'état 2s pour le cas d'un projectile krypton à 60MeV/A, c'est pourquoi la figure 65 présente des intensités de raies Lyman plutôt que les populations np.

La contribution des cascades présentée sur la figure 70 suit la même évolution que pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E = 33,2$ MeV/A). Rappelons que les populations 2s, 3p et 4p sont directement proportionnelles respectivement à la raie 2E1, Lyman β et Lyman γ et donc que la proportion de cascade est exactement la même entre population et raie correspondante. Par contre, 3% de la population 2s se désexcite par une transition M1 donnant un photon de même énergie que ceux de la Lyman α , et cette raie ne dépend donc pas uniquement de la population 2p. Cependant, comme l'état 2s est environ 10 fois moins peuplé que l'état 2p (cf figure 69), l'erreur faite en assimilant la Lyman α à la population 2p lorsqu'on calcule la contribution des cascades est de l'ordre de 3%. La contribution des cascades à la Lyman α donne donc une excellente approximation de la contribution des cascades à la population 2p. Les cascades représentent alors respectivement 47%, 31%, 23% et 19% des populations 2p, 3p, 4p et 2s pour une épaisseur de cible nulle, et 28%, 17%, 12% et 10% après le transport dans $220 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone, ce qui est du même ordre de grandeur que ce que nous avons calculé pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E = 33,2$ MeV/A). Nous pouvons donc conclure que si les observables expérimentales sont directement représentatives du peuplement et du transport des populations 2s et 4p, la population 2p (et 3p dans une moindre mesure) est aussi sensible aux conditions initiales et au transport intervenant dans les niveaux supérieurs.

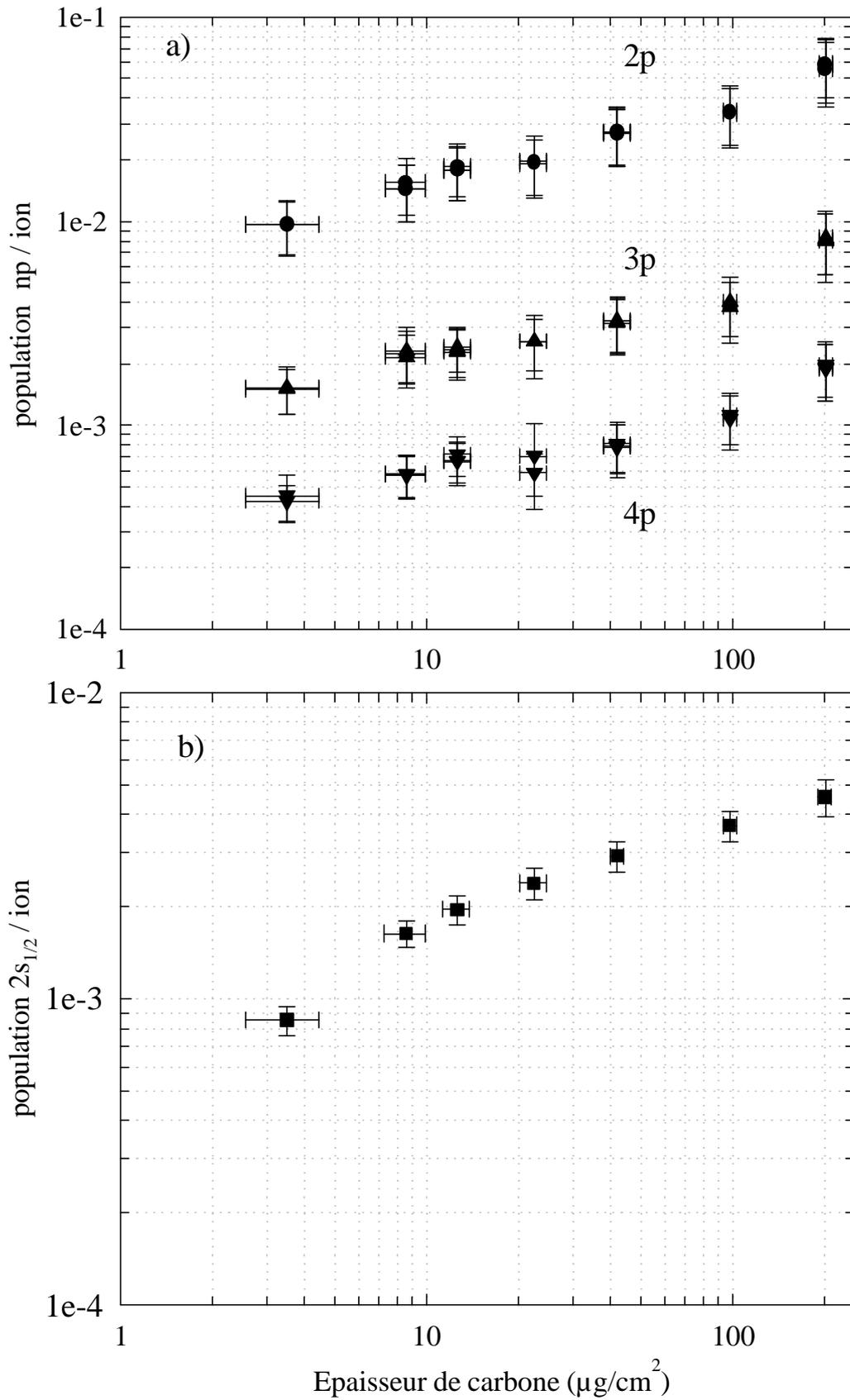


Figure 69 : Evolution des populations expérimentales np et $2s$ de l' Ar^{17+} en fonction de l'épaisseur de cible. Système Ar^{18+} @ C à $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A).

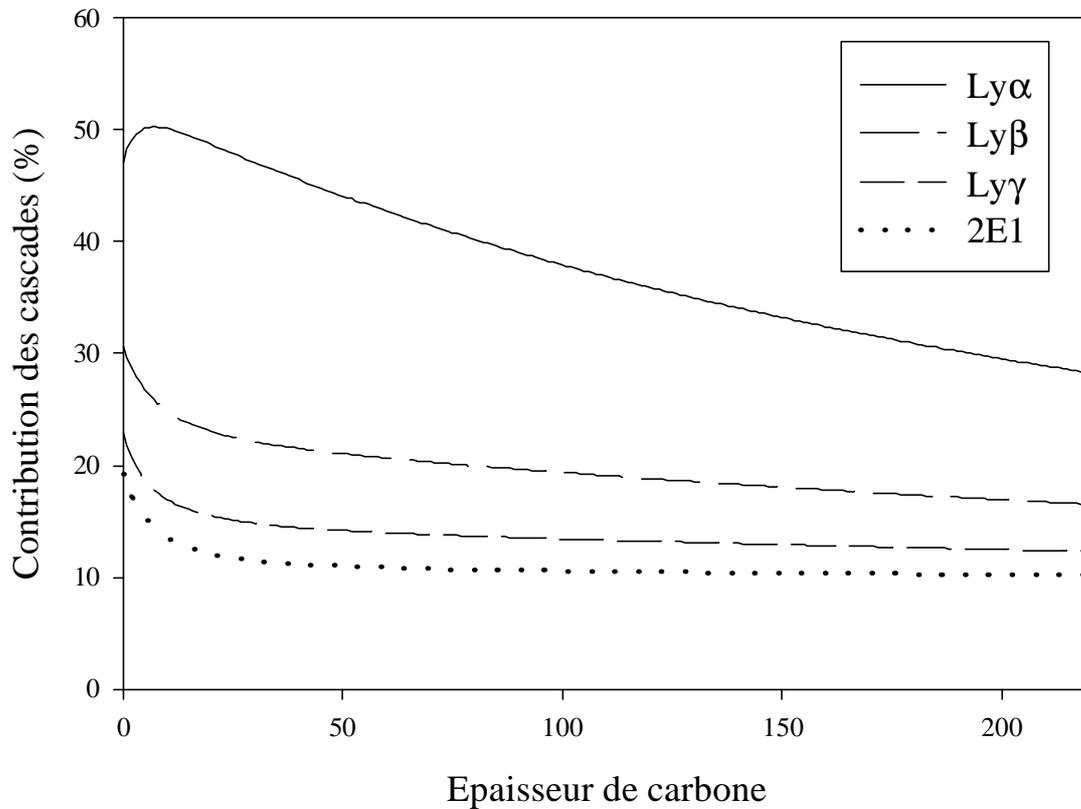


Figure 70 : Contribution des cascades aux intensités des raies Lyman et 2E1 lors de la collision $Ar^{18+} @ C$, $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A) en fonction de l'épaisseur de cible, calculée par le modèle collisionnel.

b) Comparaison avec les résultats théoriques

Dans ce paragraphe, nous allons comparer les résultats expérimentaux aux deux types de formalisme décrivant le transport, à savoir celui s'appuyant sur la résolution d'équations différentielles, et celui utilisant une méthode Monte Carlo. Ceci va en particulier nous permettre d'une part de les comparer entre eux, et d'autre part de discuter des conditions initiales de peuplement des états excités.

La figure 71 montre la comparaison entre les résultats expérimentaux de la figure 69 et les modèles s'appuyant sur le formalisme d'équations différentielles, décrits au chap.I§A-V. La fréquence plasma du carbone est égale à 29,1 eV et les conditions initiales sont données par CDW. Nous voyons ici aussi, comme dans le cas du paragraphe précédent que les principales caractéristiques de l'évolution sont décrites par le modèle purement collisionnel.

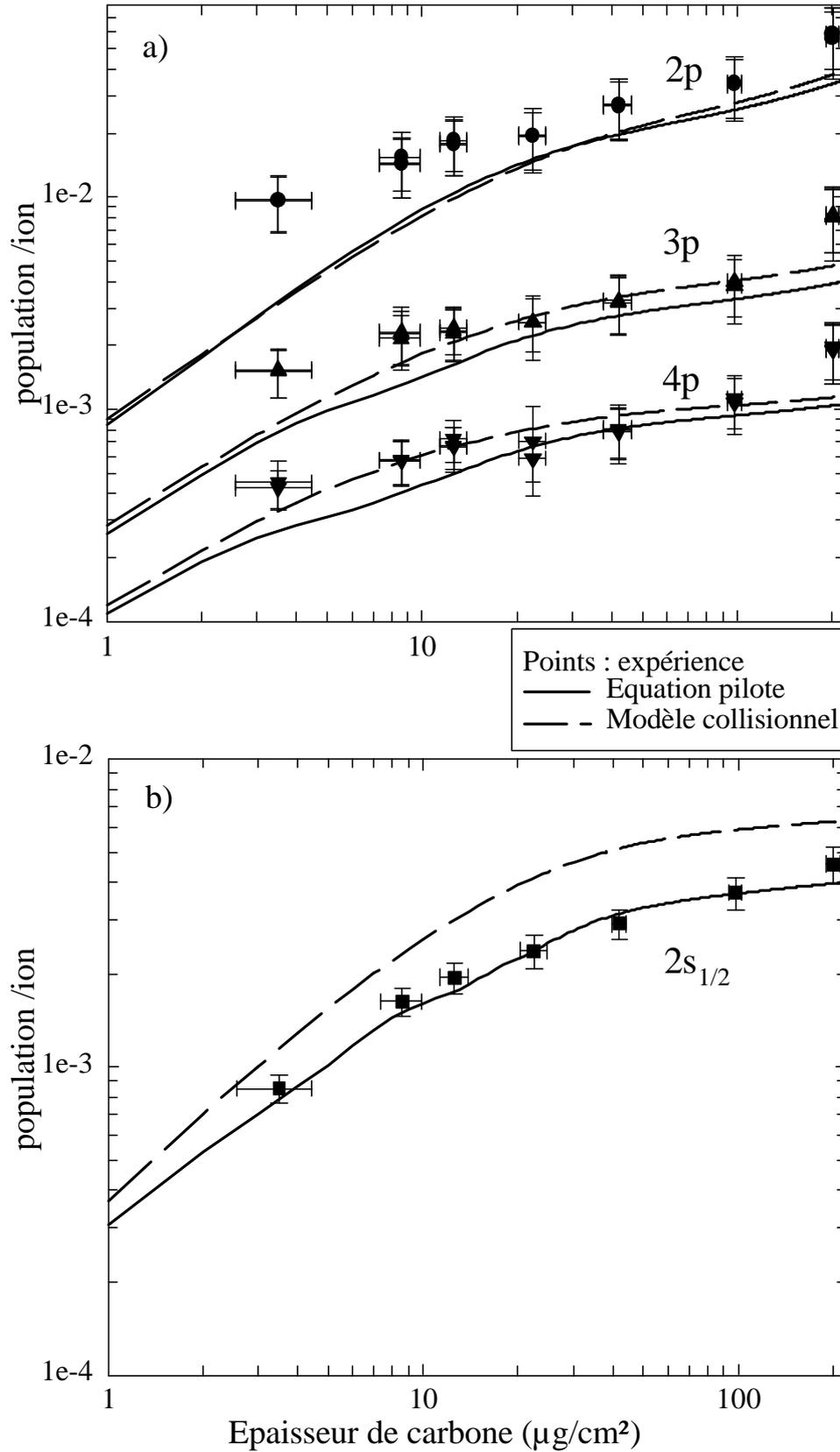


Figure 71 : Evolution des populations np et $2s$ de l' Ar^{17+} en fonction de l'épaisseur de cible pour le système $\text{Ar}^{18+} @ \text{C}$ à $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A). Comparaison des points expérimentaux avec les courbes théoriques données par le modèle collisionnel et le modèle d'équation pilote.

Ici encore, l'effet du champ de sillage sur les populations n_p augmente avec n , mais reste relativement faible sur ces observables puisqu'elles correspondent à une somme d'états de structure fine $1/2$ et $3/2$. Il est par contre important sur l'état $2s_{1/2}$ qui est un état de structure fine. On constate nettement que le modèle purement collisionnel sous-estime le mélange $2s-2p$ par rapport aux points expérimentaux.

Comme pour le système précédent, la contribution des cascades depuis les états $n > 6$ est relativement faible sur les observables, et la limitation à $n_{\max} = 6$ du modèle d'équation pilote est sans conséquence notable. Nous voyons que l'introduction du champ de sillage dans ce modèle favorise le mélange $n\ell-n\ell'$, et mène à un excellent accord avec l'expérience en ce qui concerne l'évolution de la population $2s$. L'accord est moins bon pour les populations n_p , et ce particulièrement pour les cibles fines ($\leq 10 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) pour lesquelles les populations sont sous-estimées. Nous voyons aussi sur cette comparaison que l'action du champ de sillage se manifeste essentiellement pour les petites épaisseurs. En terme de dynamique du transport, l'effet cohérent du champ est rapide puis il est brouillé par les processus collisionnels plus lents qui deviennent prépondérants. Le désaccord à faible épaisseur est peut-être dû aux conditions initiales. Les sections efficaces de capture calculées par une méthode Monte Carlo sont plus élevées et on peut s'attendre à ce qu'elles conviennent mieux. Nous ne disposons pas d'un jeu complet (sections efficaces + cohérences) de conditions initiales Monte Carlo utilisable dans nos programmes basés sur la résolution d'équations différentielles, mais nous pouvons utiliser un programme de résolution de transport classique basé sur une méthode Monte Carlo (CTMC voir Chap.I§B). La figure 72 montre la comparaison entre les points expérimentaux, les résultats du modèle collisionnel déjà montrés sur la figure précédente (conditions initiales CDW), ceux du modèle CTMC **collisionnel seulement** avec des sections efficaces de capture CDW, et enfin ceux du même modèle avec des sections efficaces de capture Monte Carlo. Rappelons que le modèle CTMC utilise une description classique de l'ion hydrogénoïde, tandis que le modèle appelé "modèle collisionnel" est basé sur des équations différentielles décrivant l'évolution du système dans l'espace des phases quantique. Les deux modèles donnent des résultats très proches quand les mêmes conditions initiales sont utilisées (ici, CDW), du moins pour les faibles épaisseurs (jusqu'à $\approx 10 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) pour lesquelles les modèles théoriques présentés sur la figure 71 sous-estiment les populations n_p . L'utilisation de conditions initiales Monte Carlo pour décrire la capture améliore beaucoup l'accord expérience-théorie dans cette gamme d'épaisseurs pour les populations n_p , mais s'avère moins satisfaisante pour la population $2s$.

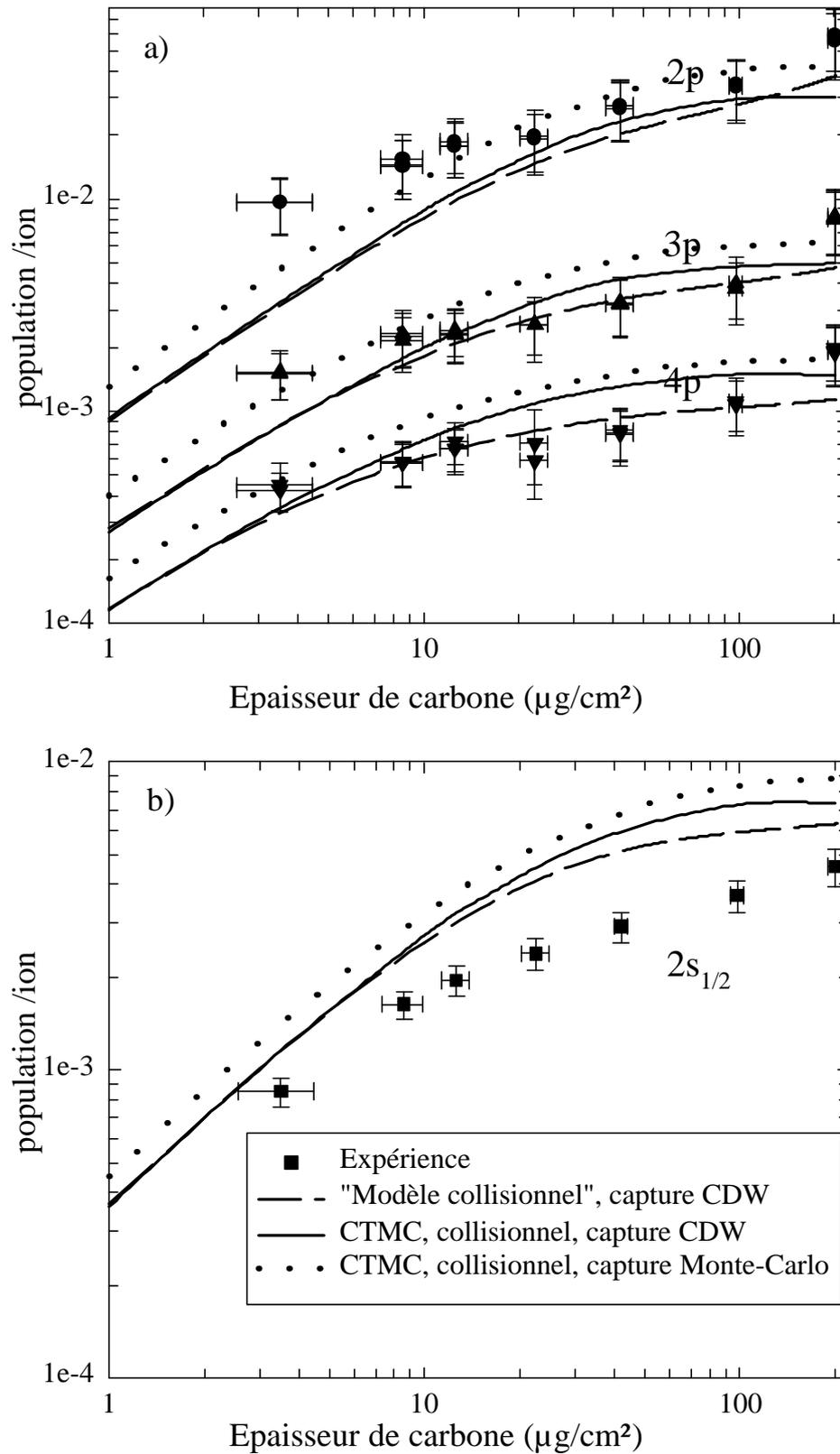


Figure 72 : Evolution des populations np et $2s$ pour le système $\text{Ar}^{18+} @ \text{C}$ ($E = 13,6 \text{ MeV/A}$). Points expérimentaux, modèle d'équations différentielles "collisionnel seulement" avec des conditions initiales CDW, modèle CTMC avec les mêmes conditions initiales (Gervais, 2000), et modèle CTMC avec des conditions initiales CTMC (Reinhold, Arbo, Burgdörfer et al., 2000).

La figure 73 montre finalement la comparaison des points expérimentaux avec le modèle d'équation pilote (déjà montré sur la figure 71) avec des conditions initiales CDW, et le modèle CTMC **prenant en compte cette fois le champ de sillage** avec des conditions initiales de capture Monte Carlo. Il faut bien noter que non seulement les conditions initiales, mais également les modèles de transport sont ici différents. Nous pouvons voir que les deux modèles de transport prévoient des évolutions semblables pour les populations n_p . **De plus, les conditions initiales CTMC semblent mieux adaptées à la description de ces observables.** Ce n'est pas le cas par contre pour la **population 2s, dont les conditions initiales de capture sont bien décrites par CDW, et sur-estimées par un calcul CTMC.** De plus, l'évolution de cette population prédite par une méthode CTMC n'est pas satisfaisante à grande épaisseur. Cela pourrait provenir de l'impossibilité de distinguer des états de structure fine dans ce calcul, lors de la projection de l'espace des phases classique dans l'espace des phases quantique (voir Chap.I§B). Notons que ce problème n'apparaît pas pour les populations n_p qui par nature ne font pas cette distinction.

Enfin nous voyons sur le point à très faible épaisseur ($3,2\mu\text{g}/\text{cm}^2$) que la population $2p$ expérimentale est supérieure à celle prévue par les simulations, y compris avec la capture décrite par CTMC. Afin d'expliquer cet écart, nous pourrions penser à l'influence d'un mélange cohérent collisionnel (décrit par l'expression (124) du chapitre I) non pris en compte dans les modèles, mais l'ordre de grandeur des cohérences collisionnelles montre que ce phénomène ne peut pas avoir lieu aussi rapidement. L'hypothèse d'un mélange Stark sous-estimé par les modèles n'est pas satisfaisante car l'augmentation du couplage Stark augmenterait certes la population $2p$, mais diminuerait les populations $3p$ et $4p$, qui ne semblent pas du tout surestimées par les modèles à cette épaisseur. Il reste l'hypothèse d'une erreur de mesure systématique sur le point expérimental correspondant à l'épaisseur $3,5\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$. La réalisation d'une campagne d'expérience (mai 1999) sur le même système, bien que visant à la détermination d'observables beaucoup plus fines (structure fine de la couche $n=2$, et Lyman jusqu'à $n=12$), permettra une confrontation avec ce point et sera capable de le confirmer ou de l'infirmier le cas échéant.

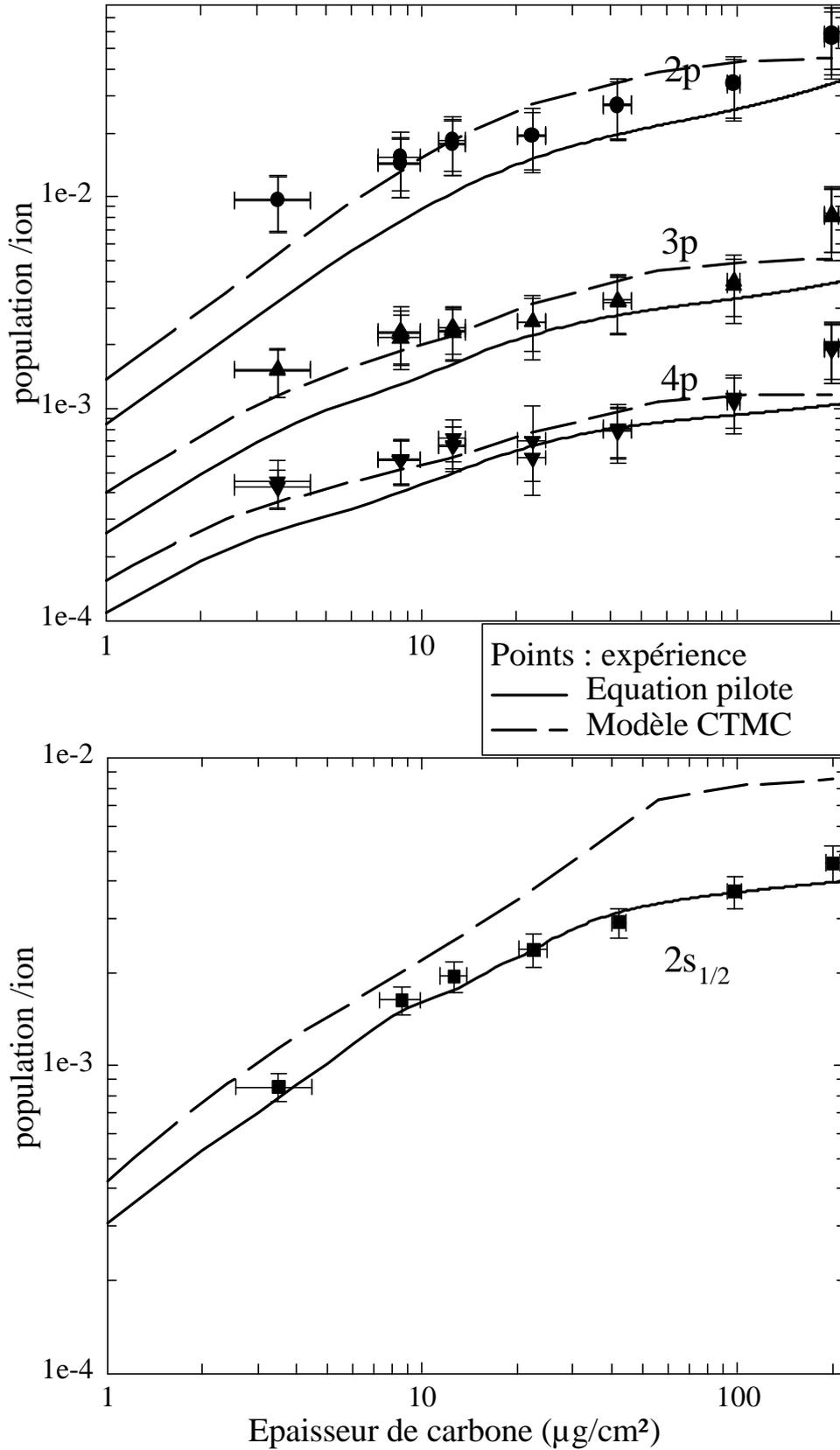


Figure 73 : Evolution des populations np et $2s$ pour le système $\text{Ar}^{18+} @ \text{C}$ ($13,6 \text{ MeV/A}$). Points expérimentaux, modèle d'équation pilote avec capture CDW, modèle CTMC avec champ de sillage et avec capture CTMC (Reinhold, Arbo, Burgdörfer et al., 2000).

3°) Système $\text{Kr}^{35+} \text{ @ } \text{C}$ à $v = 46,95$ u.a. ($E = 60$ MeV/A)

Ces résultats sont issus de l'expérience décrite dans le Chapitre II.

a) Présentation des résultats expérimentaux

Les résultats expérimentaux ont été présentés pour ce système collisionnel sur la figure 64 du Chapitre II. Ils concernent l'évolution en fonction de l'épaisseur de cible de carbone des intensités par projectile des transitions Lyman α à δ . La contribution des cascades sur les Lyman est beaucoup plus petite pour ce système peuplé par excitation à partir de $1s$ que pour les systèmes précédents : la contribution maximale des niveaux supérieurs représente respectivement environ 14% ,12%, 9%, et 7% des intensités des Lyman α à δ (voir figure 74) lorsqu'on utilise des conditions initiales PWBA, et des résultats sensiblement identiques sont obtenus avec des conditions initiales provenant d'un calcul d'équations couplées. Ces intensités sont donc très directement représentatives de l'évolution des populations des niveaux $2p$ à $5p$ respectivement, et dépendent très peu de l'évolution des niveaux supérieurs.

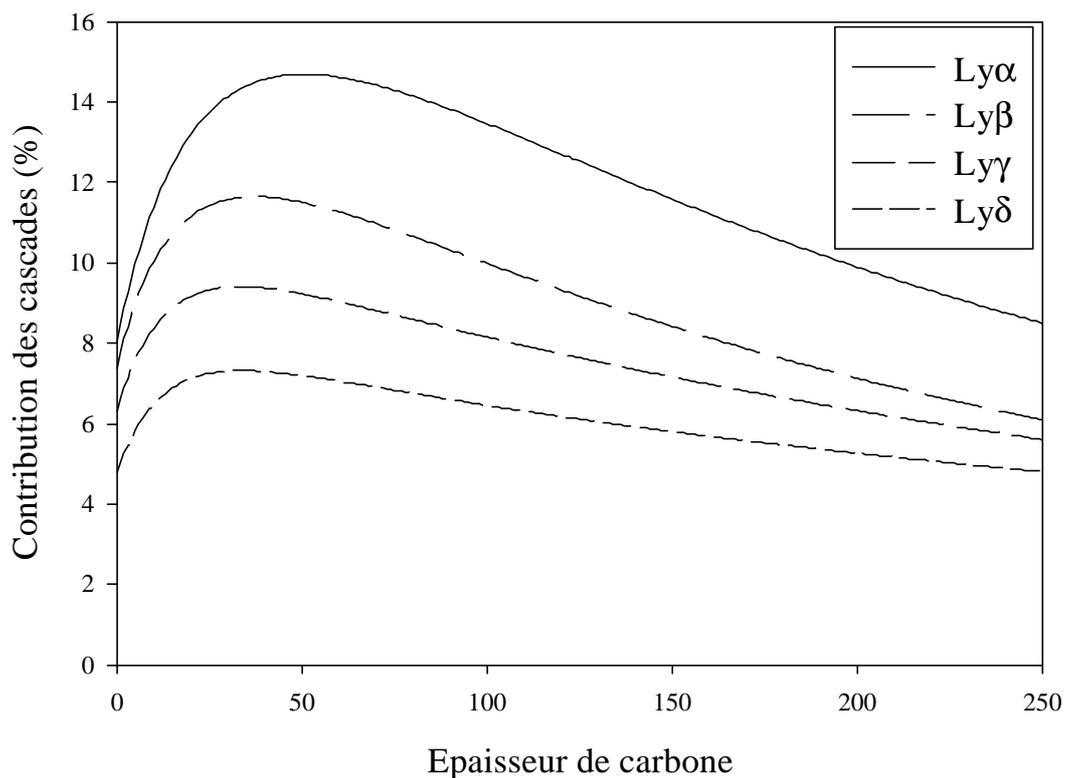


Figure 74 : Contribution des cascades aux intensités des raies Lyman lors de la collision $\text{Kr}^{35+} \text{ @ } \text{C}$, $v = 46,95$ u.a. ($E = 60$ MeV/A) en fonction de l'épaisseur de cible, calculée par le modèle collisionnel utilisant des conditions initiales PWBA.

b) Comparaison avec les résultats théoriques.

La figure 75 présente les intensités absolues des transitions Lyman obtenues expérimentalement pour plusieurs épaisseurs de cible, ainsi que la comparaison avec 3 modèles théoriques utilisant des conditions initiales PWBA : Le modèle collisionnel pur (ligne continue), les droites prévues par une succession de collision ion-atome sans transport (points), et le modèle d'équation pilote dans lequel la fréquence plasma du carbone est prise égale à 29,1 eV et la dépendance spatiale du champ de sillage est prise en compte (tirets).

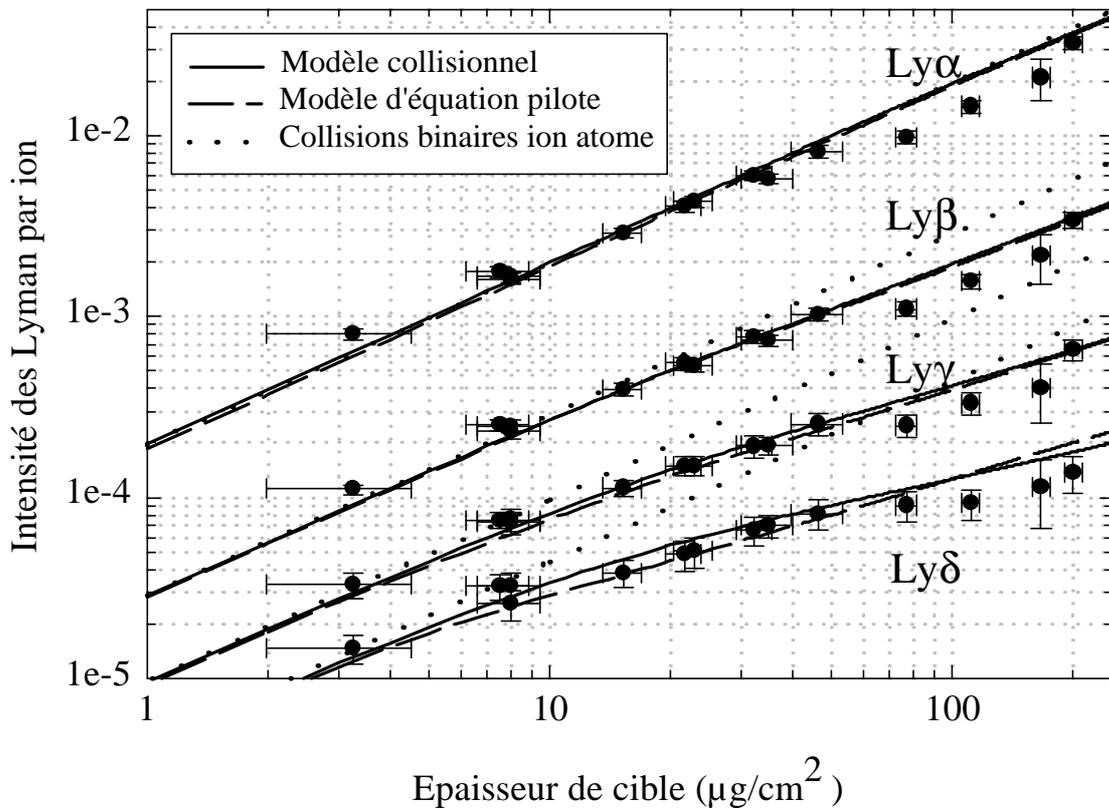


Figure 75 : Evolution des intensités Lyman ($n \leq 5$) par ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée, pour le système Kr^{35+} @ C à $v = 46,95$ u.a. ($E = 60$ MeV/a). Comparaison entre l'expérience et le modèle collisionnel, le modèle d'équation pilote, et une évolution sans transport.

De ces comparaisons, nous pouvons déduire plusieurs résultats :

- L'effet du transport, visible par comparaison des points expérimentaux et des droites (en pointillés) correspondant aux intensités sans transport, croît rapidement avec le nombre quantique principal de la transition Lyman observée. Pour $n = 2$, on ne note en effet quasiment aucune différence entre les deux évolutions sus nommées sur la gamme

d'épaisseurs de cible explorée, tandis que pour $n = 5$ l'écart atteint presque un ordre de grandeur à $250 \mu\text{g}/\text{cm}^2$.

- L'effet principal du transport est correctement reproduit par le modèle collisionnel pur.

- Les intensités observées deviennent sensibles au champ de sillage à partir de $n = 4$, comme on peut le constater en comparant les courbes du modèle collisionnel et du modèle d'équation pilote. Il faut noter ici que les cascades provenant de niveaux $n > 6$, non prises en compte dans le modèle d'équation pilote, sont négligeables puisque leur contribution reste toujours inférieure à 2%. Pour un projectile krypton, les écarts énergétiques dans la couche $n = 2$ sont trop importants pour autoriser un mélange Stark efficace, comme nous l'avons vu lors de l'étude du système initialement peuplé par capture. De plus, ici encore, les mélanges dus au champ de sillage se compensent en $n=3$. L'effet de transfert vers les hauts moments angulaires dû au champ de sillage se manifeste alors à partir de $n = 4$.

Ces conclusions sont très similaires à celles tirées des observations des Lyman enregistrées lors des collisions $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A), mais d'une certaine façon plus directes puisque les états n_p sont moins peuplés par cascade. Il en résulte d'ailleurs que, pour une épaisseur de cible donnée, les Lyman enregistrées sur le système $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 46,95$ u.a. ($E = 60$ MeV/a) sont moins sensibles au transport. L'écart énergétique entre les niveaux de l'argon étant moins grand, les populations n_p du système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23$ u.a. ($E = 13,6$ MeV/A) sont, elles, plus sensibles au champ de sillage.

Afin de tester l'influence des conditions initiales sur ces observables, nous avons tracé sur la figure 76 ces mêmes observables, mais où l'on peut comparer les données expérimentales avec les résultats du modèle d'équation pilote utilisant d'une part les conditions initiales PWBA, et d'autre part celles données par un calcul d'équations couplées. Nous constatons que les deux calculs sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales, même si les conditions initiales PWBA (C.I. PWBA) donnent un résultat légèrement meilleur. Le changement des conditions initiales se traduit sur ces observables par un décalage constant d'environ 12% des courbes sur toute la gamme d'épaisseurs de cible. Dans le cadre de l'analyse de ces observables, les deux types de calcul semblent donc donner des résultats très satisfaisants pour décrire le processus initial d'excitation.

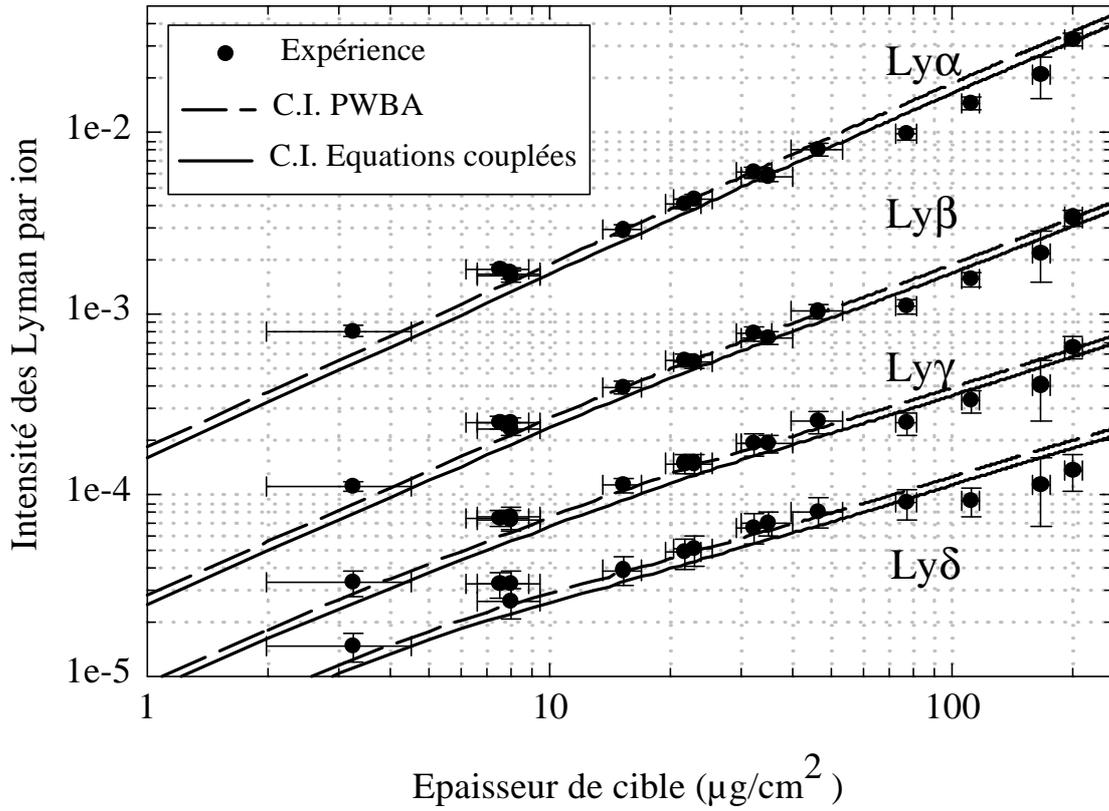


Figure 76 : Evolution des intensités Lyman ($n \leq 5$) par ion en fonction de l'épaisseur de cible traversée, pour le système Kr^{35+} @ C à $v = 46,95$ u.a. ($E = 60$ MeV/a). Comparaison entre l'expérience et le modèle d'équation pilote où des conditions initiales PWBA et provenant d'un calcul d'équations couplées sont successivement utilisées.

II – Evolution des rapports de populations des états de structure fine de n=3 du projectile Kr^{35+} pendant son transport en cible solide.

1°) Système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A)

a) Présentation des résultats expérimentaux

L'étude de ce système est décrite dans (Despiney, 1994) et (Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998). Le processus initial de peuplement est ici la **capture**. La méthode expérimentale est la même que celle décrite dans le chapitre II. L'utilisation d'un spectromètre à haute résolution a permis de mesurer les rapports $R_1 = I_{\text{Ba}2}/I_{\text{Ba}3}$ et $R_2 = I_{\text{Ba}4}/I_{\text{Ba}1}$ des intensités des composantes de structure fine des raies Balmer. On peut alors calculer les rapports de populations correspondants en utilisant les expressions (144). Lors d'études précédentes (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998; Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999), nous avons utilisé des rapports de branchement non relativistes (Bethe and Salpeter, 1977). Les rapports de populations des niveaux de la couche n=3 étaient alors donnés en fonction des rapports expérimentaux R_1 et R_2 par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{3p_{1/2}}{3s_{1/2}} = \frac{1}{0,177} (R_2 - 0,5) \\ \frac{3d_{3/2}}{3d_{5/2}} = 6 R_1 \end{array} \right. \quad (166)$$

Nous avons déjà vu au chapitre I que les valeurs relativistes de rapports de branchement sont peu différentes des valeurs non relativistes. Cependant, le fait que nos observables expérimentales soient des **rapports** d'intensités entraîne qu'elles sont assez dépendantes de certains rapports de branchement, et en particulier celui de l'état $3s_{1/2}$ qui se désexcite vers $2p_{1/2}$ et $2p_{3/2}$. En utilisant les résultats relativistes (Pal'chikov, 1998), les rapports de populations sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{3p_{1/2}}{3s_{1/2}} = \frac{1}{0,1789} (R_2 - 0,4347) \\ \frac{3d_{3/2}}{3d_{5/2}} = 6,1697 R_1 \end{array} \right. \quad (167)$$

Le tableau XVIII donne les valeurs des rapports de branchement non relativistes (Bethe and Salpeter, 1977) et relativistes (Pal'chikov, 1998) nécessaires pour extraire les populations relatives $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$:

Transition	Rapports de branchement non relativistes (%)	Rapports de branchement relativistes (%)
Ba ₁ : $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	66,67	69,90
Ba ₂ : $3d_{3/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	16,67	16,19
Ba ₃ : $3d_{5/2} \rightarrow 2p_{3/2}$	100	100
Ba _{4a} : $3p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$	11,80	12,47
Ba _{4b} : $3s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$	33,33	30,30

Tableau XVIII : Rapports de branchement non relativistes (Bethe and Salpeter, 1977) et relativistes (Pal'chikov, 1998) des composantes de la transition Balmer **a** ($3\ell \rightarrow 2\ell'$) de Kr^{35+} .

La figure 77 montre les deux séries de populations expérimentales selon qu'on les extrait avec (166) ou (167). Nous voyons que la différence est minime sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, mais est loin d'être négligeable sur $3p_{1/2}/3s_{1/2}$. Pour ce dernier, l'écart entre les valeurs données par (166) et (167) vaut 12% quand $R_2 = 1$ (ce qui correspond à une variation de $3p_{1/2}/3s_{1/2} \approx 2,8$ à 3) et 16% quand $R_2 = 0,82$ ($3p_{1/2}/3s_{1/2} \approx 1,8$ à 2,1). Les expressions (167) étant normalement plus appropriées, ce sont celles que nous retiendrons dans la suite. Il n'en reste pas moins que ces valeurs sont très dépendantes du type de calcul utilisé pour les probabilités de transitions qui sont des calculs complexes devant prendre en compte les effets relativistes et d'électrodynamique quantique. A notre connaissance, seul Pal'chikov a publié des données exploitables pour les désexcitations du niveau $n=3$ du krypton et nous les retiendrons donc dans la suite des discussions.

La figure 78 présente le schéma de désexcitation du krypton hydrogénoïde pour les niveaux $n = 1, 2$ et 3, avec les valeurs des rapports de branchement que nous avons utilisées pour extraire les populations expérimentales.

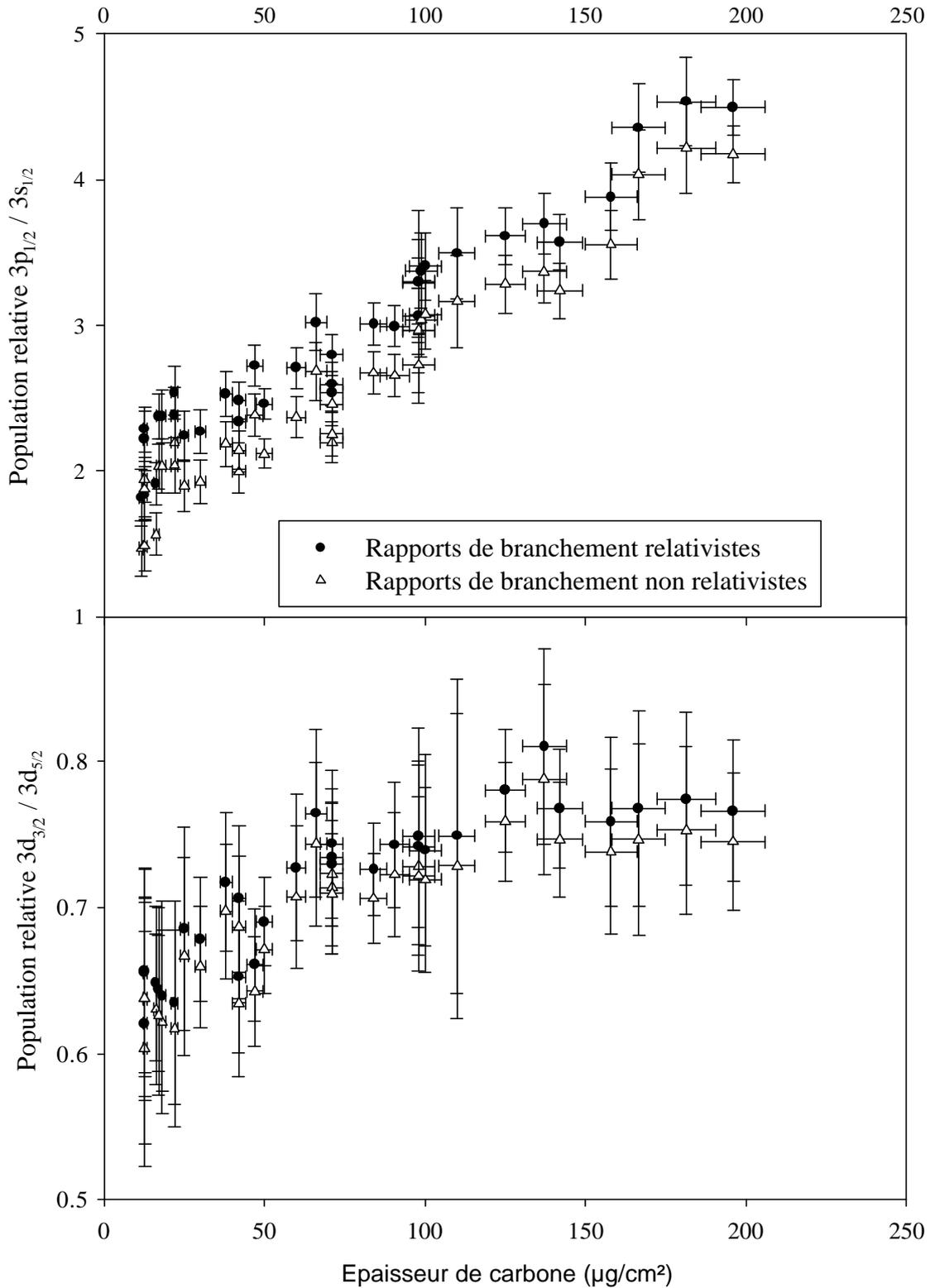


Figure 77 : Comparaison des rapports de population expérimentaux $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. (33,2 MeV/A) selon qu'on les détermine avec des rapports de branchement relativistes (Pal'chikov, 1998) ou non (Bethe and Salpeter, 1977).

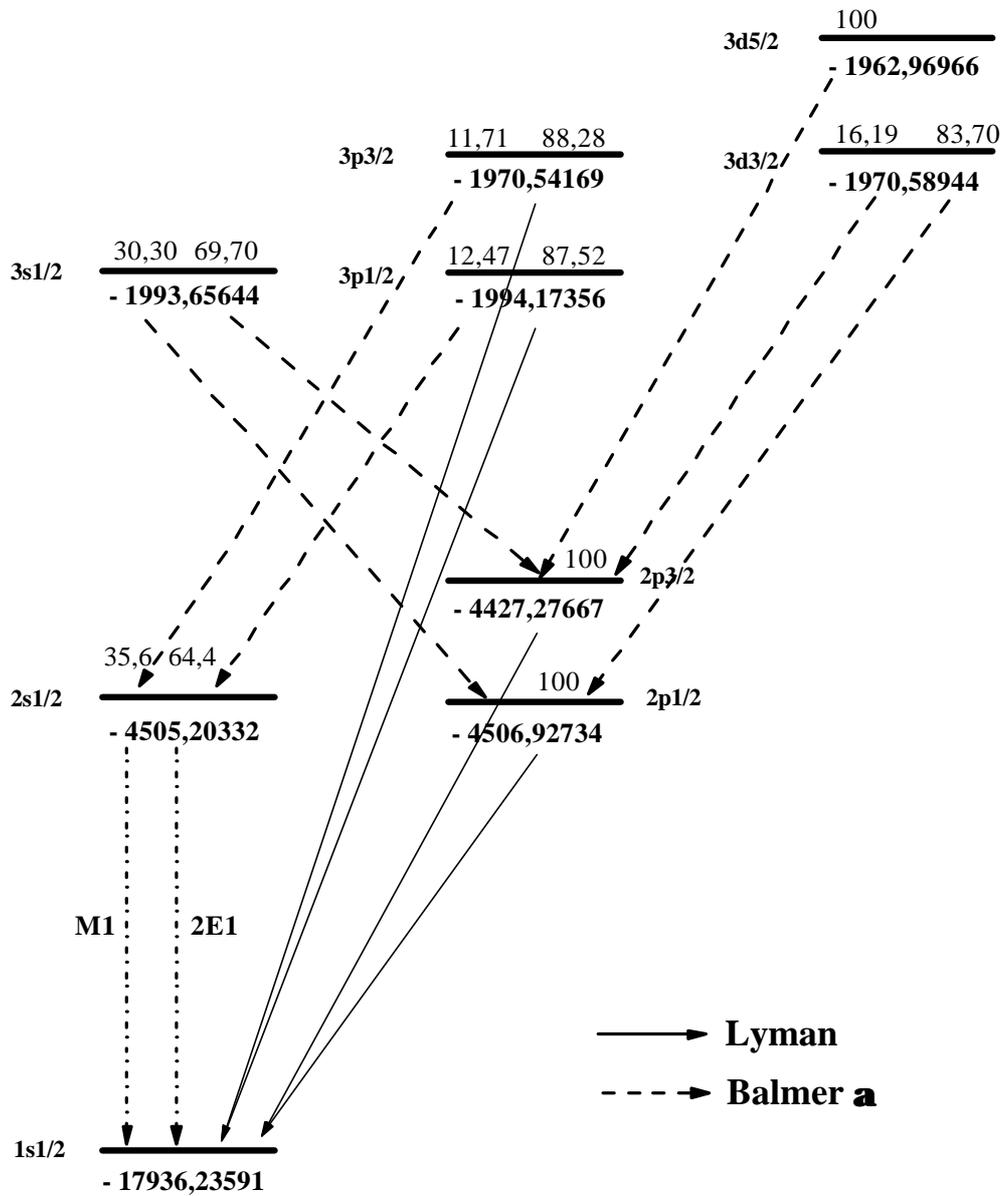


Figure 78 : Niveaux d'énergie et schéma de désexcitation de l'ion Kr^{35+} jusqu'à $n = 3$. Energies en eV (Desclaux, 1991) et rapports de branchement relativistes (Pal'chikov, 1998) pour les Lyman a et Balmer a (Cheng, Berry, Dunford et al., 1993) pour les désexcitations de $2s_{1/2}$.

b) Comparaison avec les différentes approches théoriques

i) Résultats obtenus précédemment.

Ces résultats ont été obtenus dans des travaux précédents (Despiney, 1994; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998; Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999). L'introduction dans le modèle collisionnel des sections efficaces d'excitation intercouche jusqu'à $n = 10$, effectuée depuis, ne change rien aux conclusions qui avaient été tirées alors. La figure 79 présente les résultats expérimentaux et théoriques (modèles "Stark seul" et "collisionnel seul" dans sa version actuelle) concernant l'évolution des rapports de populations des états de structure fine, $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de carbone traversée.

Remarquons tout d'abord que les rapports de populations illustrent bien l'évolution due au **transport** dans la matière ; en effet, les graphes représentant ces rapports dans le cas d'une collision binaire (sans transport) seraient des droites horizontales, d'ordonnée indépendante de l'épaisseur et égale à 1,3 pour le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, et 0,67 pour le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$. L'écart des points expérimentaux par rapport à cette évolution montre sans ambiguïté l'influence du transport.

Les deux modèles alors disponibles ne reflétaient pas bien l'évolution observée. En particulier, le modèle collisionnel ne prévoit pas d'évolution sélective en j (moment cinétique total), ce qui s'illustre par une droite horizontale pour le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$. Le modèle s'appuyant sur le mélange Stark montre une évolution pour ce rapport, mais l'accord avec l'expérience est au plus qualitatif. On arrivait néanmoins à reproduire les résultats expérimentaux en ajustant les phases des cohérences CDW utilisées pour décrire le processus de peuplement initial.

Les conclusions que l'on avait tirées de cette confrontation sont :

- Il existe durant la phase de transport un mélange entre les états supplémentaire au mélange collisionnel. Ce mélange est sélectif en j et semble être dû au couplage Stark entre l'ion hydrogénoïde et le champ de sillage.
- Dans le cadre du modèle simplifié traitant uniquement le mélange par effet Stark, on peut reproduire les résultats expérimentaux en modifiant artificiellement la phase des cohérences initiales CDW.
- La valeur du champ de sillage permettant de reproduire les données expérimentales dans le cadre du modèle "Stark seul" correspond à l'implication des électrons de valence seulement pour les cibles de carbone (fréquence plasma $\omega_p \approx 25$ eV sur la couche $n=3$ du

projectile), mais il est 5 fois plus grand que celui dû aux électrons de valence dans une cible de cuivre ($\omega_p \approx 48$ eV). Ce résultat a motivé des développements théoriques qui ont depuis montré qu'on peut reproduire cette valeur en prenant en compte les électrons de cœur des atomes de la cible (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998). Dans le cas des cibles de carbone, la prise en compte de tous les électrons amène à une fréquence plasma de 29,1 eV au niveau du noyau projectile, mais la dépendance spatiale du champ réduit cette valeur à 25 eV (égale à la fréquence plasma des électrons de valence) au niveau de la couche $n = 3$ du projectile.

ii) Confrontation avec le modèle d'équation pilote

La figure 80 montre la comparaison entre les populations expérimentales et les valeurs obtenues par le modèle d'équation pilote sans aucun ajustement (calcul "*ab initio*"). Les conditions initiales utilisées dans le modèle sont données par le calcul CDW, la fréquence plasma du carbone vaut 29,1 eV et la dépendance spatiale du champ de sillage est prise en compte comme expliqué Chap.I§A-III-2-b, expressions (98) à (102).

Nous constatons que l'évolution de ces deux observables est très bien prédite par le modèle d'équation pilote.

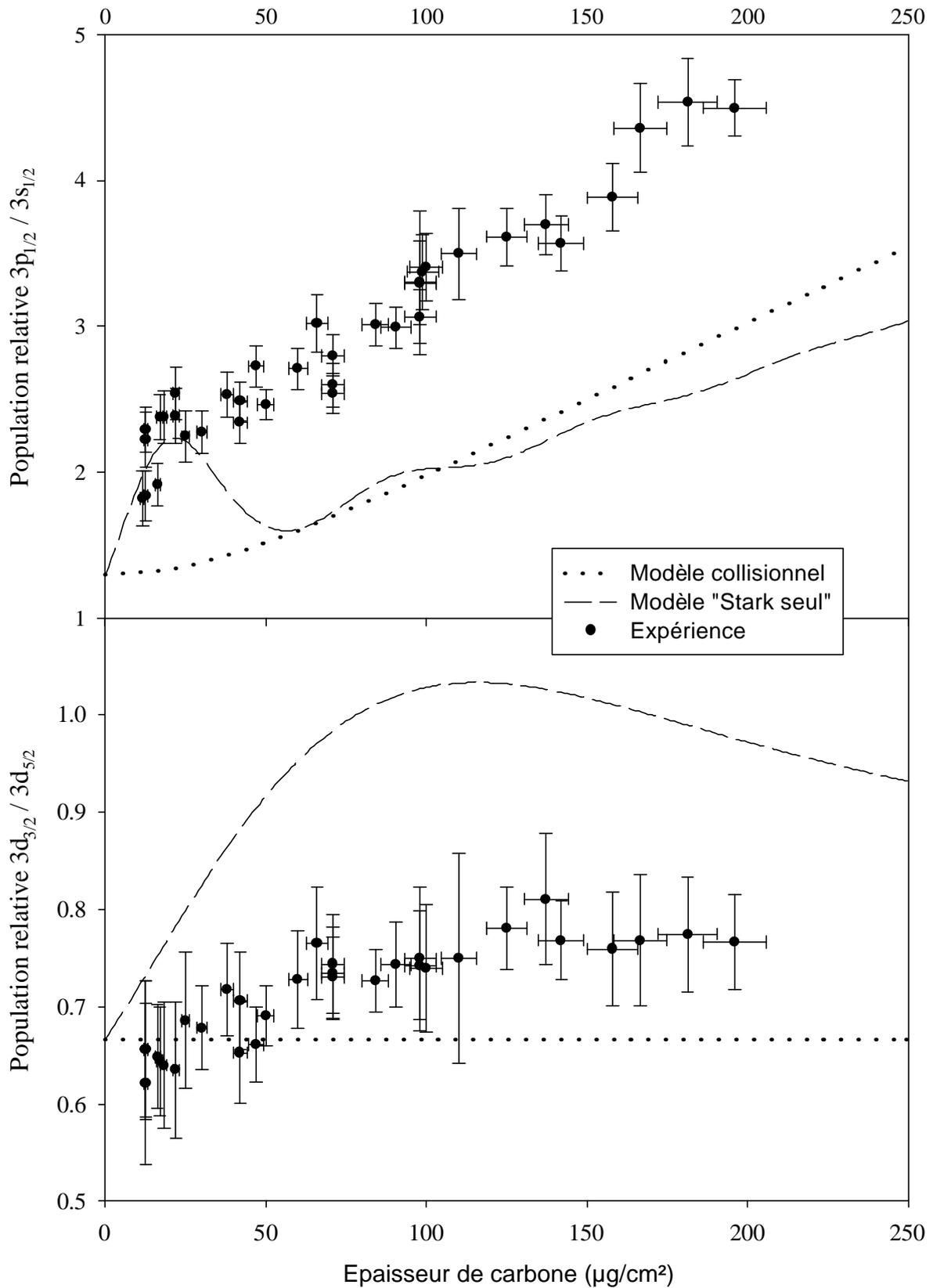


Figure 79 : Evolution des rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée. Système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. ($E = 33,2$ MeV/A). Expérience, modèle collisionnel seul, et modèle collectif ("Stark seul").

Sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ nous pouvons voir que la pente d'évolution générale après l'épaisseur $50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ est bien reproduite, ce qui n'était pas le cas pour les modèles purement collisionnel et purement collectif (voir figure 71). En particulier, sur cette gamme d'épaisseurs ($\geq 50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$), le fait que la pente soit supérieure à celle prévue par le modèle uniquement collisionnel montre que le champ de sillage joue un rôle non négligeable, même si l'essentiel de l'évolution est dû aux collisions binaires. Les 2 effets "s'additionnent" et favorisent encore plus la population des grands ℓ soit ici $3p_{1/2}$ au détriment de $3s_{1/2}$, comme on l'a constaté sur le système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à 13,6 MeV/A (Reinhold, Arbo, Burgdörfer *et al.*, 2000). L'évolution à faible épaisseur ($\leq 50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$) qui est très sensible au terme de cohérence du processus initial de peuplement est bien reproduite par le modèle. La cohérence $3s_0p_0$ CDW et le terme de couplage Stark qui agit sur celle-ci sont bien décrits. On peut remarquer toutefois que le modèle sous-estime légèrement (écart maximum expérience-théorie de 13%) et pratiquement sur toute la gamme d'épaisseurs de cible le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, alors qu'il a tendance à surestimer le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ à faibles épaisseurs (écart de 5% au maximum entre expérience et théorie pour les épaisseurs inférieures à $50\mu\text{g}/\text{cm}^2$). Plusieurs points peuvent être discutés pour expliquer ce léger désaccord ; citons les approximations faites dans le modèle, les conditions initiales utilisées, la sensibilité de nos observables aux rapports de branchement utilisés pour déterminer les populations à partir des intensités des raies émises, et la valeur du champ de sillage effectif sur un niveau $3\ell_j$ donné (extension spatiale du champ).

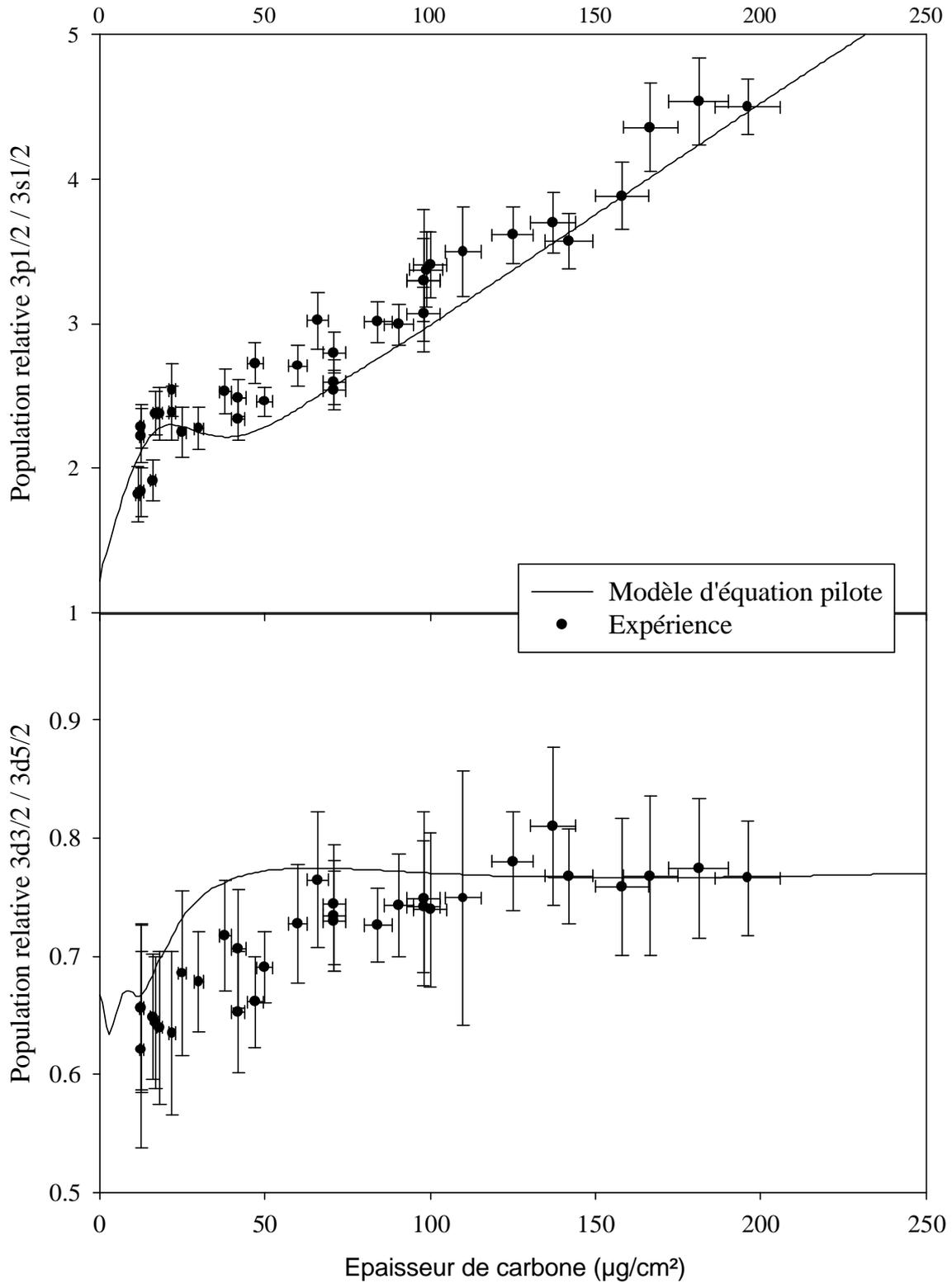


Figure 80 : Evolution des rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée. Système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. ($E=33,2$ MeV/A). Expérience et modèle d'équation pilote.

◆ Approximations faites dans le modèle d'équation pilote.

Une de ces approximations peut se révéler importante puisque nos observables $3\ell_j$ sont sensibles aux cohérences, c'est le fait que le modèle ne prend pas en compte les phénomènes cohérents collisionnels. Etant donné que les cohérences et les sections efficaces collisionnelles sont du même ordre de grandeur, ces transitions collisionnelles cohérentes pourraient se manifester, mais principalement pour les épaisseurs à partir desquelles on voit une nette influence des processus collisionnels c'est à dire autour de $40 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $E = 33,2 \text{ MeV/A}$ (rappelons que cette influence des processus collisionnels se manifeste dans le modèle par l'amortissement du battement Stark). Elles pourraient donc être en partie responsables du désaccord visible sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ entre les épaisseurs 35 et $50 \mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Une autre approximation est la limitation du modèle à $n_{\text{max}} = 6$, qui empêche de tenir compte en particulier des cascades provenant des niveaux de $n > 6$. L'étude en n_{max} effectuée au Chap.I§A-V-3-b a montré cependant que les rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ sont peu sensibles à l'introduction de niveaux de $n > 6$ dans le modèle, comme on peut le voir sur la figure 25 du Chapitre I. En effet le passage de $n_{\text{max}} = 5$ à $n_{\text{max}} = 6$ avait alors entraîné une variation maximale de 2% sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ pour un temps de transit de 660 u.a. (correspondant à une épaisseur de $250 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone), et de 2% également sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ pour un temps de transit de 130 u.a. (correspondant à une épaisseur de $50 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone). L'approximation de limiter n_{max} à 6 est donc justifiée pour étudier ces observables, et les cascades depuis les niveaux de $n > 6$ ne peuvent pas expliquer l'écart expérience-théorie observé.

◆ Conditions initiales utilisées (en termes de sections efficaces).

Nous avons déjà présenté dans la partie théorique (Chap.I§A-V-4-c) et discuté dans le présent chapitre, pour l'évolution des populations np et $2s_{1/2}$ de l' Ar^{17+} à $13,6 \text{ MeV/A}$ dans du carbone, la dépendance vis à vis des sections efficaces $n\ell$ décrivant le processus de capture. Nous avons effectivement constaté une différence significative de la distribution en ℓ entre les sections efficaces CDW qui sont celles utilisées ici et les sections efficaces obtenues par un calcul Monte Carlo (notons que ces 2 méthodes donnent par contre des termes de cohérence très proches (Reinhold, Arbo, Burgdörfer *et al.*, 2000)). A ce titre, la méthode CDW pourrait, dans le cas $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 35,6 \text{ u.a.}$ comme pour $\text{Ar}^{17+} \rightarrow \text{C}$ à $v = 23 \text{ u.a.}$ ($13,6 \text{ MeV/A}$), sous estimer la capture en couche p et la prédire correctement en couche s. La correction des

sections efficaces de capture en couche p entraînerait alors une translation vers les valeurs plus élevées du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ sur toute la gamme d'épaisseurs de cible sans affecter l'autre rapport. Ne disposant d'aucune autre théorie pour décrire la capture dans le cas du Kr^{36+} , nous ne pouvons pas à l'heure actuelle chiffrer et vérifier cette possibilité.

- ◆ Rapports de branchement utilisés pour extraire les populations expérimentales.

Rappelons qu'une incertitude sur les calculs relativistes des rapports de branchement, tout particulièrement pour l'état $3s_{1/2}$, entraîne elle aussi une translation complète de la courbe sur toute la gamme d'épaisseurs de cible (figure 77). Si on utilise des rapports de branchement plus proches de ceux provenant d'un calcul non relativiste, on améliore l'accord expérience-théorie pour le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$. Par contre on le détériore légèrement en ce qui concerne le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$.

- ◆ valeur du champ de sillage effectif sur un niveau $3\ell_j$ donné.

Enfin, nous pouvons examiner la sensibilité de nos observables à la valeur du champ électrique effectif sur un niveau $3\ell_j$ donné. Lors d'une étude précédente (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999) à partir de ces mesures expérimentales et du modèle collectif (Stark seul), nous avons trouvé que l'accord optimum expérience-théorie était donné pour des valeurs de champ de sillage agissant sur les cohérences $3s_0p_0$, $3p_0d_0$ et $3p_1d_1$ respectivement égales à $0,178 \pm 0,018$, $0,175 \pm 0,019$ et $0,171 \pm 0,017$ unités atomiques, alors que les calculs théoriques des expressions (92) à (102) prévoient 0,179, 0,197 et 0,163. Nous voyons donc que les valeurs tirées de la confrontation entre l'expérience et le modèle collectif en ce qui concerne $3p_0d_0$ et $3p_1d_1$ sont très proches contrairement aux prévisions théoriques. Si nous prenons les premières dans le modèle plus complet d'équation pilote, l'évolution du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ reste inchangée et l'accord théorie-expérience sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ est amélioré aux faibles épaisseurs ($\leq 50 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$), tout en restant comprise dans les barres d'erreurs pour les grandes épaisseurs (figure 81). Donc, si la dépendance spatiale en n semble bien prédite par les formules (98) à (102), on peut éventuellement émettre un doute sur la validité de différences aussi marquées en ℓ_j que celles qui sont prédites par la théorie.

En conclusion pour l'étude de ces observables, nous pouvons dire que le modèle d'équation pilote montre un très bon accord avec les points expérimentaux. Même si tous les processus susceptibles d'intervenir ne sont pas pris en compte (c'est à dire les processus

collisionnels agissant sur les cohérences autres que le dépeuplement des cohérences *via* la largeur collisionnelle des niveaux) ce modèle traite correctement d'une part le mélange Stark prédominant à faible épaisseur, et d'autre part le mélange collisionnel non cohérent, prédominant aux grandes épaisseurs. La bonne prise en compte de ces processus prépondérants est suffisante pour décrire le transport sur toute la gamme d'épaisseurs étudiées.

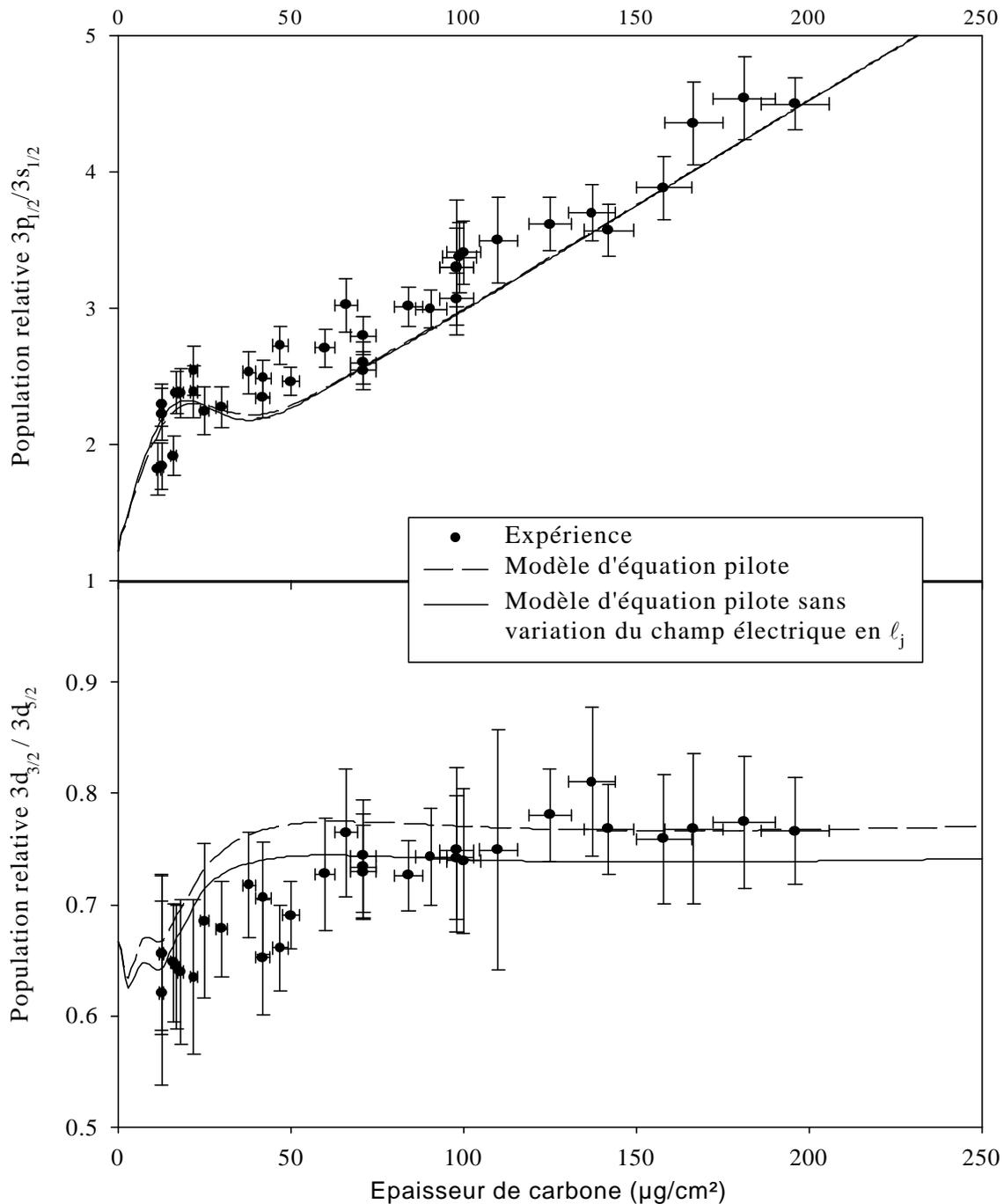


Figure 81 : Evolution des rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée pour le système Kr^{36+} @ C à $v = 35,6$ u.a. ($E=33,2$ MeV/A). Expérience et modèle d'équation pilote, où la dépendance spatiale du champ de sillage est prise en compte ou non.

2°) Système $\text{Kr}^{35+} @ \text{C}$ à $v = 46,95 \text{ u.a.}$ ($E = 60 \text{ MeV/A}$)

Les résultats relatifs à ce système sont issus de l'expérience décrite dans le chapitre II. On obtient les rapports de population $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ à partir des rapports d'intensités expérimentaux (Chap.II) en utilisant les expressions (167). Le processus initial de peuplement est ici **l'excitation** de l'ion hydrogénoïde de Kr^{35+} initialement dans son état fondamental. Le choix de ce processus initial plutôt que la capture est guidé par plusieurs raisons :

- Il permet de tester une comparaison expérience-théorie avec un processus différent, or nous avons vu au Chapitre I que les modèles prédisent une grande sensibilité en termes de sections efficaces et de cohérences.
- L'excitation est un processus plus "simple" à décrire théoriquement que la capture car l'électron actif ne change pas de centre. On peut donc s'attendre à une meilleure fiabilité des données théoriques, et on peut plus facilement disposer de plusieurs types de calculs. Ainsi nous disposons pour le système étudié ici de conditions initiales PWBA et provenant d'un calcul d'équations couplées.
- Il permet aussi un traitement du transport de type Monte Carlo plus facile car ce processus peut être assimilé de façon naturelle à un processus de transport. Nous pourrions donc faire ici un test de ce type de modèle et le confronter aux autres prédictions théoriques.

a) Comparaison de nos théories avec les résultats expérimentaux.

La figure 82 montre l'évolution des rapports de populations expérimentaux extraits en utilisant (167) et leur comparaison avec le modèle purement collisionnel d'une part, et le modèle d'équation pilote d'autre part. Les conditions initiales utilisées dans les deux modèles sont issues d'un calcul PWBA (Chap.I§A-II-2), et dans le modèle d'équation pilote la fréquence plasma du carbone vaut 29,1 eV et la dépendance spatiale du champ est prise en compte. Il est évident que le modèle collectif à 2 états qui est un modèle d'étude très simplifié n'a pas lieu d'apparaître ici.

Nous voyons que la forme de l'évolution est très bien décrite par le modèle d'équation pilote. La prise en compte du champ de sillage dans le modèle d'équation pilote améliore énormément la description du transport de ces observables par rapport au modèle purement collisionnel :

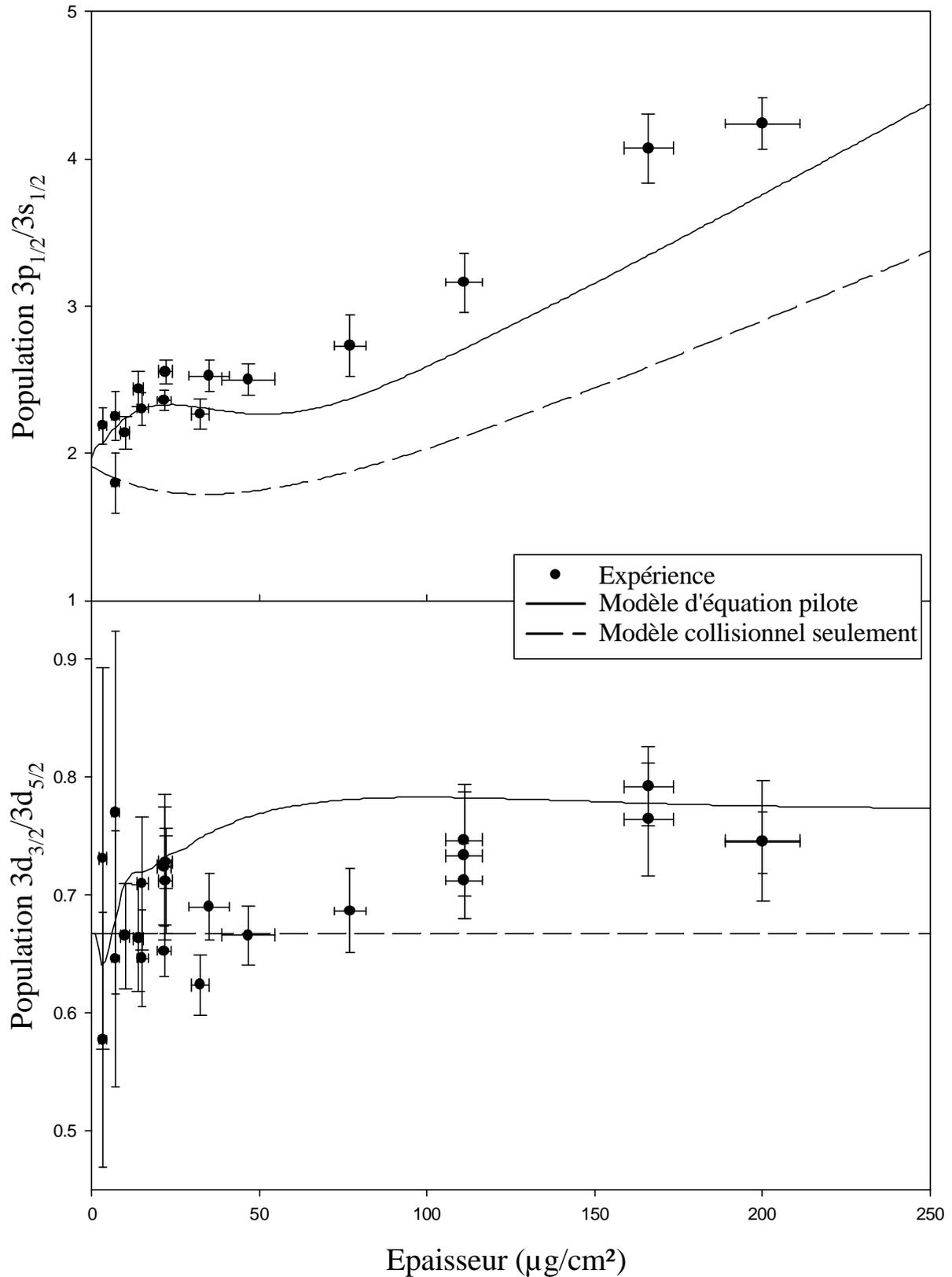


Figure 82 : Evolution des rapports des populations de structure fine $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée. Système Kr^{35+} @ C à $v=46,95$ u.a. ($E=60$ MeV/A). Expérience, modèle purement collisionnel et modèle d'équation pilote, utilisant tous deux des conditions initiales issues d'un calcul PWBA.

- sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, le modèle collisionnel prévoit une première phase décroissante jusqu'à environ $25\mu\text{g}/\text{cm}^2$, en contradiction avec la nette croissance du rapport expérimental très bien reproduite en revanche par le modèle d'équation pilote qui tient compte du couplage Stark. Cela démontre l'existence d'un champ de sillage dont nous maîtrisons la contribution sur les états excités de l'ion hydrogénéoïde. Notons que les cascades des niveaux de $n > 6$ ne jouent pratiquement aucun rôle sur nos observables. L'écart visible sur la figure 82 entre les valeurs initiales du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ du modèle purement collisionnel (traitant les états jusqu'à $n=10$ et avec une loi d'échelle en $1/n^3$ au delà) d'une part et le modèle d'équation pilote (traitant les états jusqu'à $n=6$) d'autre part, montre que ce rôle est en effet négligeable. Le désaccord entre l'expérience et le modèle d'équation pilote se situe à grande épaisseur et vaut au maximum 18% entre la courbe théorique et la valeur expérimentale mesurée et 13% si l'on tient compte de la barre d'erreur sur cette mesure, pour la cible d'épaisseur $166\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

- Sur l'autre rapport, qui concerne 2 populations de la même couche n, ℓ , le modèle collisionnel ne prévoit pas d'évolution, en contradiction avec les mesures expérimentales. Le modèle d'équation pilote, lui, montre une évolution et prédit correctement en particulier la valeur asymptotique du rapport. Par contre, ce rapport est légèrement surestimé dans le cadre de ce modèle pour les épaisseurs intermédiaires (50 à $100\mu\text{g}/\text{cm}^2$), comme on l'avait déjà vu dans une moindre mesure sur le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à $33,2\text{ MeV}/\text{A}$ dans le paragraphe précédent. Le désaccord vaut ici 13% au maximum entre la courbe théorique et la valeur expérimentale mesurée et 10% si l'on tient compte de la barre d'erreur sur cette mesure, pour la cible d'épaisseur $46,6\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Comme dans le paragraphe précédent, nous allons examiner l'influence des différents points qui pourraient expliquer ces légers désaccords :

◆ Approximations faites dans le modèle d'équation pilote.

Les cohérences collisionnelles, non prises en compte pendant le transport dans notre modèle pourraient jouer un rôle sensible au delà de $50\mu\text{g}/\text{cm}^2$ environ, puisque c'est l'ordre de grandeur des libres parcours moyens minima des processus collisionnels dans la couche $n=3$ (voir Tableau VI du Chapitre II). Cette épaisseur correspond en partie à la zone intermédiaire où se situe le désaccord expérience-théorie du rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, et il n'est pas exclu que la prise en compte de ces cohérences puisse diminuer ce désaccord.

Afin de chiffrer l'importance de la limitation du modèle à $n_{\max} = 6$, nous avons évalué la différence entre les résultats donnés par le modèle d'équation pilote lorsque n_{\max} passe de 5 à 6. La variation maximale engendrée par cette opération sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ est de 2% pour une épaisseur de cible de $250 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, comme pour le système collisionnel étudié précédemment où le peuplement initial se faisait par capture. Celle sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, est maximale à $100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ et vaut alors 2% également. Lorsque $n_{\max} = 6$, nous sommes donc très proches de la convergence et nous prenons donc en compte la très large majorité de la contribution des cascades sur les populations relatives observées en $n = 3$.

◆ Conditions initiales utilisées.

Contrairement au système collisionnel du paragraphe précédent où le processus initial était la capture, nous disposons pour le système actuel de sections efficaces et de cohérences (Martin, 1998) calculées par une méthode d'équations couplées présentée au Chap.I§A-II-1-a, en plus des valeurs PWBA utilisées pour la figure 82. Nous avons donc pu évaluer pour ce système l'influence de l'utilisation de ces conditions initiales différentes. Précisons que les sections efficaces intervenant dans le transport sont par contre inchangées. La figure 83 montre la comparaison entre les points expérimentaux et les résultats donnés par le modèle d'équation pilote utilisant successivement les deux types de conditions initiales à notre disposition (les courbes en tiret utilisant les conditions initiales PWBA sont donc identiques à celles de la figure 82). Nous voyons que l'effet principal de ce changement de conditions initiales est un décalage des courbes pratiquement constant sur toute la gamme d'épaisseurs de cible.

Sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, le décalage observé est dû au changement de conditions initiales en termes de **population**, et plus précisément à leur distribution en ℓ . En effet, les sections efficaces issues du calcul des équations couplées prévoient une population relative $3p/3s$ moins importante que le calcul PWBA, comme on l'a déjà vu au Chapitre I (figure 8 et tableau II). Le décalage observé représente 5,4% de la valeur "PWBA" de $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ à $250\mu\text{g}/\text{cm}^2$, et le calcul PWBA mène à un meilleur accord sur ce rapport. Par contre la phase de la cohérence $3s_0p_0$ passe de -90° (PWBA) à -98° (équations couplées, voir tableau IV du chapitre I) et cette faible modification n'entraîne qu'une très légère modification du battement quantique visible aux faibles épaisseurs sur la figure 83.

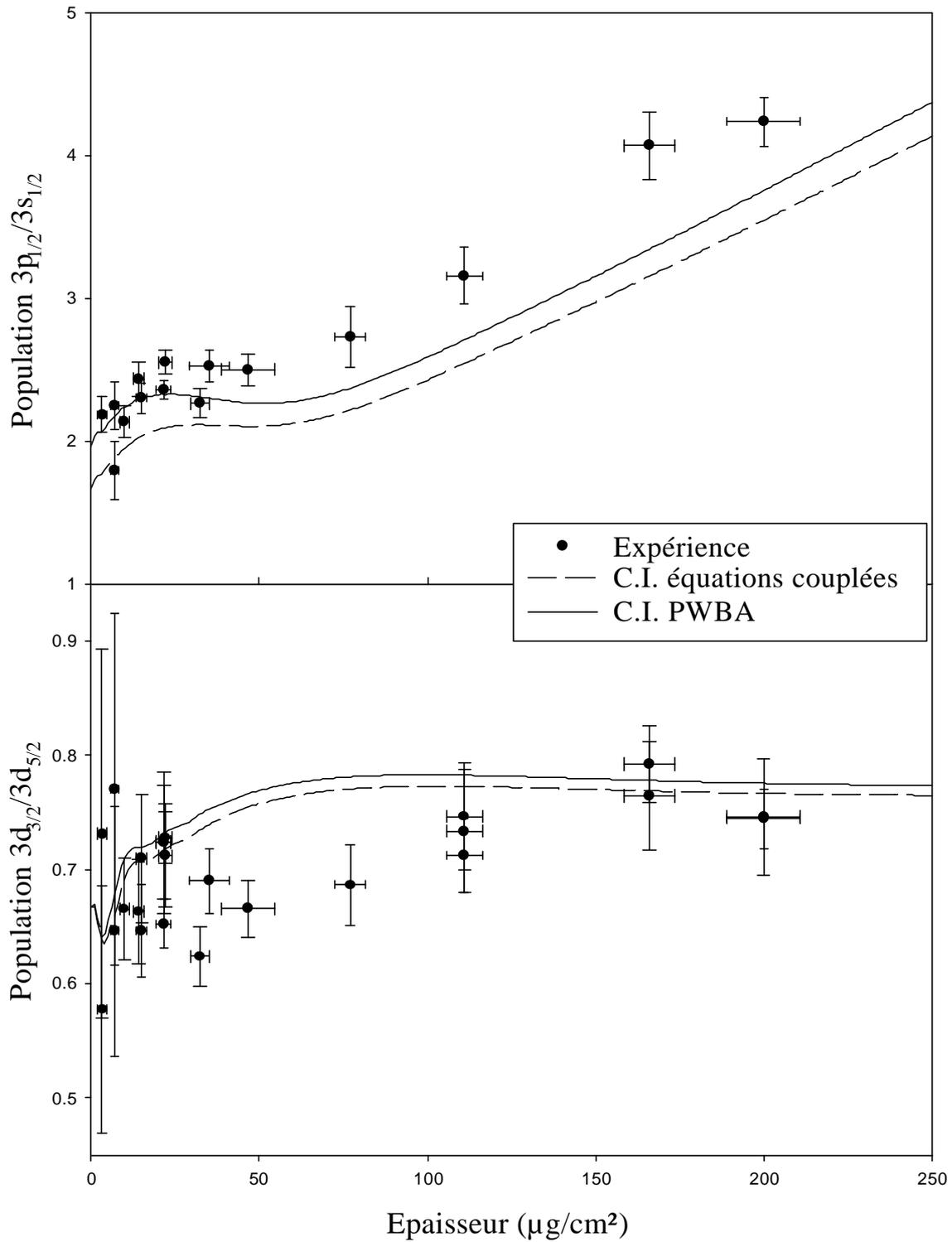


Figure 83 : Evolution des rapports des populations de structure fine $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée. Système $Kr^{35+} @ C$ à $v=46,95$ u.a. ($E=60$ MeV/A). Expérience et modèle d'équation pilote, utilisant tour à tour des conditions initiales issues d'un calcul PWBA et d'une méthode d'équations couplées.

Sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ entre 2 états de même moment cinétique orbital en revanche, le décalage est dû au changement des **cohérences** du processus de peuplement initial. Le changement de phase des cohérences entre 3p et 3d, et en particulier celui sur la cohérence $3p_{0d0}$ qui passe de -90° (PWBA) à -140° (équations couplées) entraîne un décalage de $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ dans les premiers $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ qui se répercute sur toute la gamme d'épaisseurs et représente 1,1% de la valeur de $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ à $250\mu\text{g}/\text{cm}^2$. Sur ce rapport contrairement au précédent, la méthode des équations couplées conduit à un meilleur accord expérience-théorie, et l'on peut penser qu'elle décrit plus correctement les phases des cohérences.

◆ Rapports de branchement utilisés pour extraire les populations expérimentales.

De la même manière que ce qui avait été observé pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à 33,2 MeV/A dans le paragraphe précédent, une incertitude sur les valeurs des rapports de branchement utilisés entraîne une translation des courbes sur toute la gamme d'épaisseurs de cible. A titre d'exemple, nous avons tracé sur la figure 84 les évolutions des populations relatives expérimentales extraites en utilisant des rapports de branchement relativistes ou pas (expressions (167) et (166) respectivement), ainsi que les prévisions du modèle d'équation pilote utilisant successivement des conditions initiales issues d'un calcul PWBA d'une part, puis d'équations couplées d'autre part. L'écart observé entre les 2 séries de points expérimentaux provient principalement de la différence des rapports de branchement de l'état $3s_{1/2}$ entre le calcul relativiste de Pal'chikov et le calcul non relativiste (voir tableau XVIII). En ce qui concerne le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, cet écart s'élève à 16% pour la cible la plus fine et 8% pour la cible la plus épaisse. Pour le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ l'écart est constant et vaut 3%. Ces valeurs sont du même ordre de grandeur que pour le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ à 33,2 MeV/A du paragraphe précédent (voir Chap.III§II-1-a et figure 77). La comparaison avec les modèles théoriques montre que la variation des populations expérimentales due aux différentes valeurs de rapports de branchement utilisées recouvre l'écart observé selon qu'on prend des conditions initiales PWBA ou d'équations couplées dans le modèle d'équation pilote (en particulier sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, on observe un très bon recouvrement aux faibles épaisseurs de cible entre les valeurs expérimentales utilisant des rapports de branchements non relativistes et les valeurs théoriques utilisant des conditions initiales d'équation couplées). Cela illustre bien le fait que nos observables expérimentales sont tellement sensibles qu'il est impossible à l'heure actuelle de faire des comparaisons à moins d'environ 15% avec les théories.

- ◆ Valeur du champ de sillage effectif sur un niveau $3\ell_j$ donné.

Pour le système $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ à 60 MeV/A comme pour celui du paragraphe précédent, on peut étudier l'influence de la variation en ℓ_j du champ de sillage dans la couche $n = 3$. Ici encore, la prise en compte d'un champ uniforme sur la couche $n = 3$ améliore l'accord expérience-théorie sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ sans changer de façon significative l'autre rapport (figure 85). Encore une fois donc, la dépendance spatiale en n du champ de sillage semble bien décrite tandis que la dépendance en ℓ_j pourrait être mise en défaut.

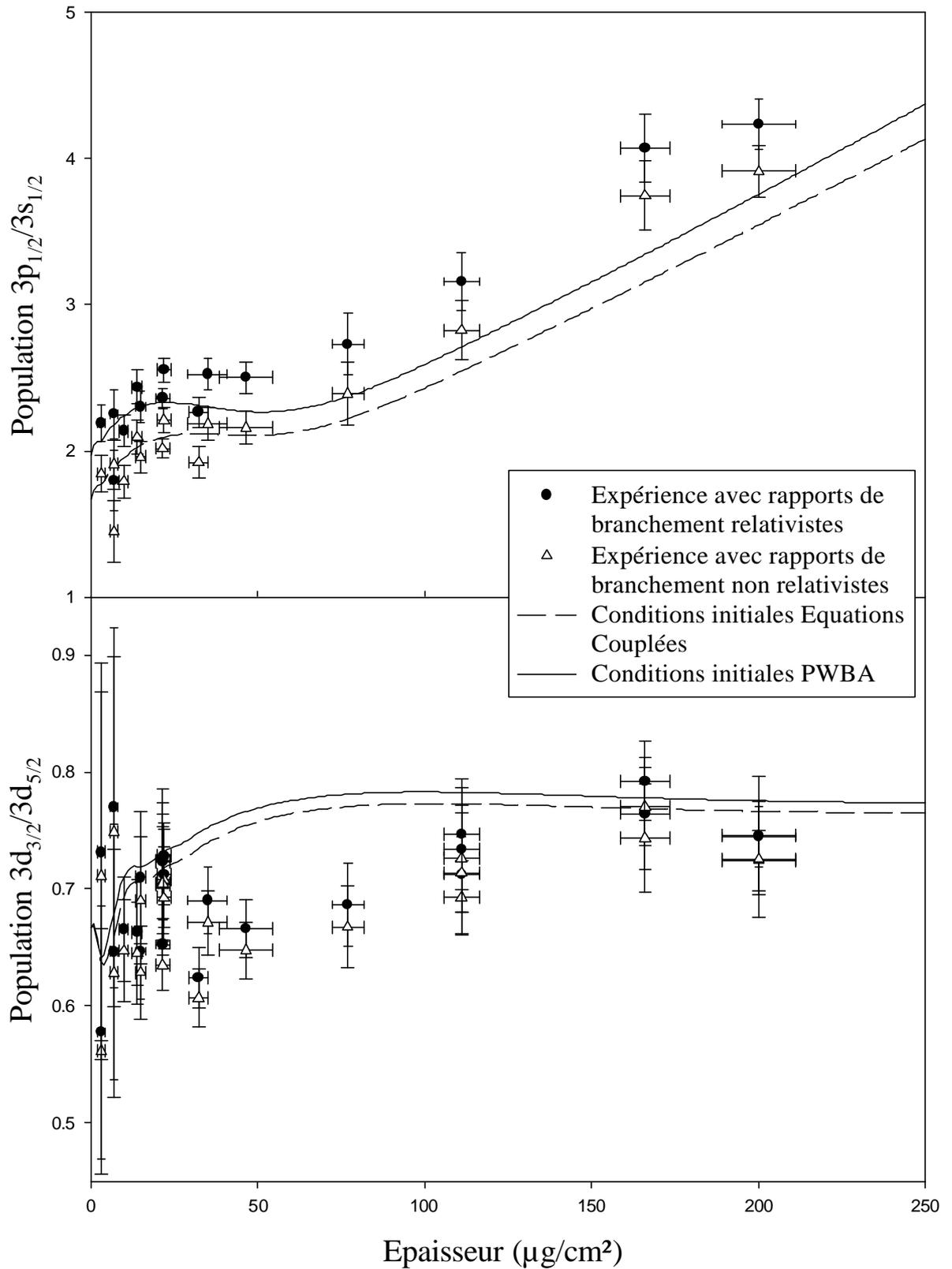


Figure 84 : Comparaison des rapports expérimentaux $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ obtenus pour le système $Kr^{35+} @ C$ à $v=46,95$ u.a. (60 MeV/A) selon qu'on les détermine avec des rapports de branchement relativistes (Pal'chikov, 1998) ou non (Bethe and Salpeter, 1977).

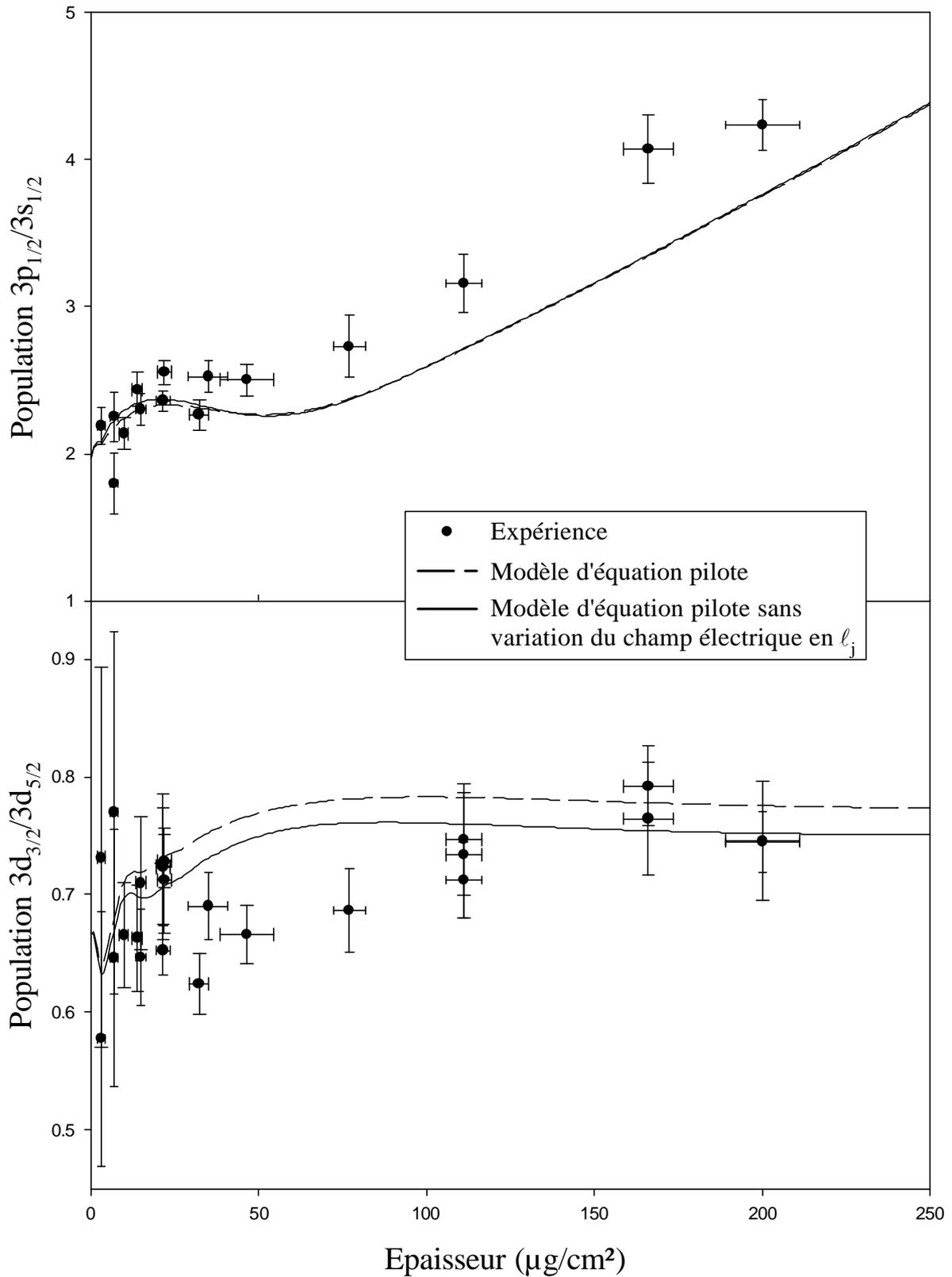


Figure 85 : Evolution des rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ obtenus pour le système $\text{Kr}^{35+} @ \text{C}$ à $v=46,95$ u.a. (60 MeV/A). Expérience et modèle d'équation pilote, où la dépendance spatiale en l_j du champ de sillage est prise en compte ou non.

b) Comparaison avec un modèle s'appuyant sur une méthode Monte Carlo.

Nous avons vu au Chap.I§B qu'un modèle de ce type donne des résultats très satisfaisants pour décrire l'évolution des états de Rydberg et de cœur d'un projectile Ar^{17+} à 13,6 MeV/A traversant des cibles de carbone. Le développement d'un calcul quantique basé sur une méthode Monte Carlo est actuellement en cours pour décrire l'évolution des populations relatives de structure fine de la couche $n = 3$ du système $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ à 60 MeV/A (calculs effectués par C.O. Reinhold et J. Burgdörfer, (Vernhet, Fourment, Lamour *et al.*, 2001)) et nous allons présenter ici des résultats préliminaires qui s'avèrent être très prometteurs.

i) Comparaison expérience-théorie

La figure 86 montre la comparaison entre les mesures extraites à partir de l'expérience décrite au chapitre II en utilisant les rapports de branchement relativistes (expressions (167)) et les résultats théoriques du modèle Monte Carlo quantique. Dans sa version actuelle, le nombre d'états traités par ce modèle est limité à $n_{\text{max}} = 4$, mais le transport est décrit de façon complètement cohérente, y compris pour les processus collisionnels.

Nous constatons que ce type de modèle reproduit de façon satisfaisante l'évolution générale des rapports de populations. Ici, comme nous l'avons vu précédemment pour le modèle d'équation pilote, la prise en compte du champ de sillage améliore sensiblement l'accord expérience-théorie sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et reproduit en particulier le battement quantique visible à faible épaisseur tandis que sur l'autre rapport, un traitement purement collisionnel ne prévoit aucune évolution.

Il est intéressant de remarquer l'incertitude du modèle théorique inhérente à la méthode Monte Carlo, et qui se traduit par des fluctuations sur les résultats prédits. En effet, les sections efficaces mises en jeu pour étudier ces observables (de l'ordre de 10^{-22} cm²) sont extrêmement petites, et à faible épaisseur en particulier, il faut accomplir un nombre de réalisations énorme avant d'atteindre une convergence convenable.

On peut noter la grande similitude du comportement général avec les résultats du modèle d'équation pilote, et nous allons dans le prochain paragraphe comparer ces deux approches.

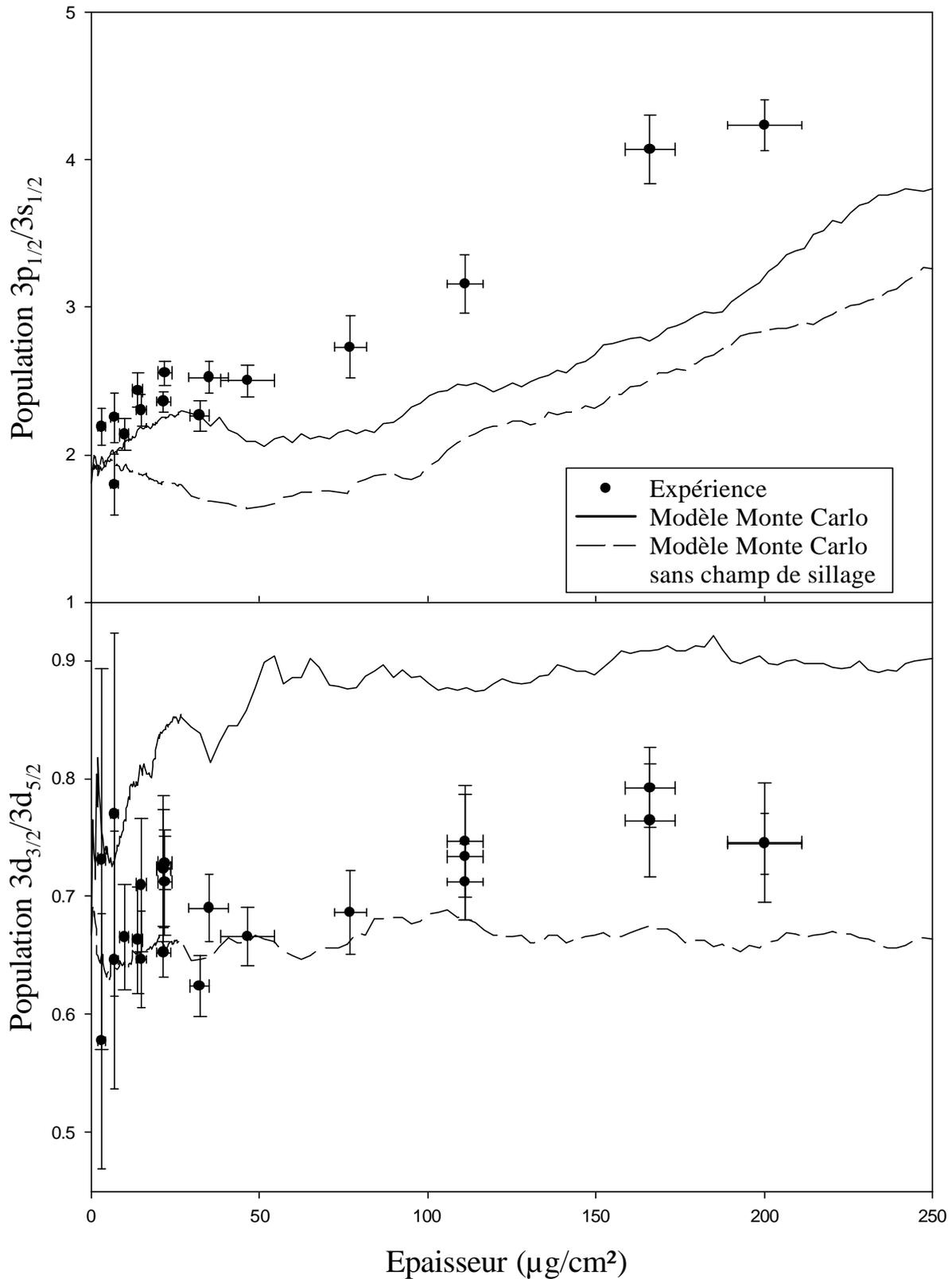


Figure 86 : Evolution des rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ obtenus pour le système $Kr^{35+} @ C$ à $v=46,95$ u.a. (60 MeV/A). Expérience et modèle Monte Carlo limité à $n_{max}=4$ avec et sans champ de sillage (C.O. Reinhold et J. Burgdörfer dans (Vernhet, Fourment, Lamour et al., 2001)).

ii) Comparaison des deux approches théoriques

Sur la figure 87 sont portées, en plus des points expérimentaux, les prédictions du modèle basé sur une méthode Monte Carlo et du modèle d'équation pilote, pour lequel nous avons fixé successivement n_{\max} égal à 3 puis à 6.

Nous constatons que les prévisions des deux types de modèles sont de façon générale très semblables. Les deux présentent un bon accord avec les valeurs expérimentales. Le modèle d'équation pilote est plus proche de l'expérience que l'autre, mais cela provient uniquement de la limitation en n_{\max} du modèle Monte Carlo. Nous voyons en effet un recouvrement presque parfait pour les deux rapports et sur toute la gamme d'épaisseurs étudiée entre les valeurs prédites par ce modèle limité à $n_{\max} = 4$ et celles provenant du modèle d'équation pilote quand celui-ci est limité à $n_{\max} = 3$. Nous constatons donc un décalage de 1 en n_{\max} entre les deux modèles, et ce fait est à l'étude actuellement.

Un autre fait intéressant qui ressort de cette comparaison est que les processus collisionnels cohérents, normalement pris en compte dans le modèle Monte Carlo ne semblent jouer aucun rôle sensible sur ces observables, ce qui rejeterait donc les hypothèses faites aux paragraphes précédents sur la possible implication de ces processus pour expliquer le léger désaccord visible entre l'expérience et la théorie à épaisseurs "intermédiaires".

Rappelons que très peu de tests ont été effectués pour l'instant sur le modèle Monte Carlo qui est toujours en cours de développement. Il devrait être étendu très prochainement au traitement des états jusqu'à $n_{\max} = 7$, ce qui devrait améliorer l'accord entre ces résultats et les données expérimentales. Néanmoins l'accord remarquable déjà obtenu entre les prévisions des deux modèles issus de deux approches très différentes est un argument de poids pour assurer la validité des traitements effectués.

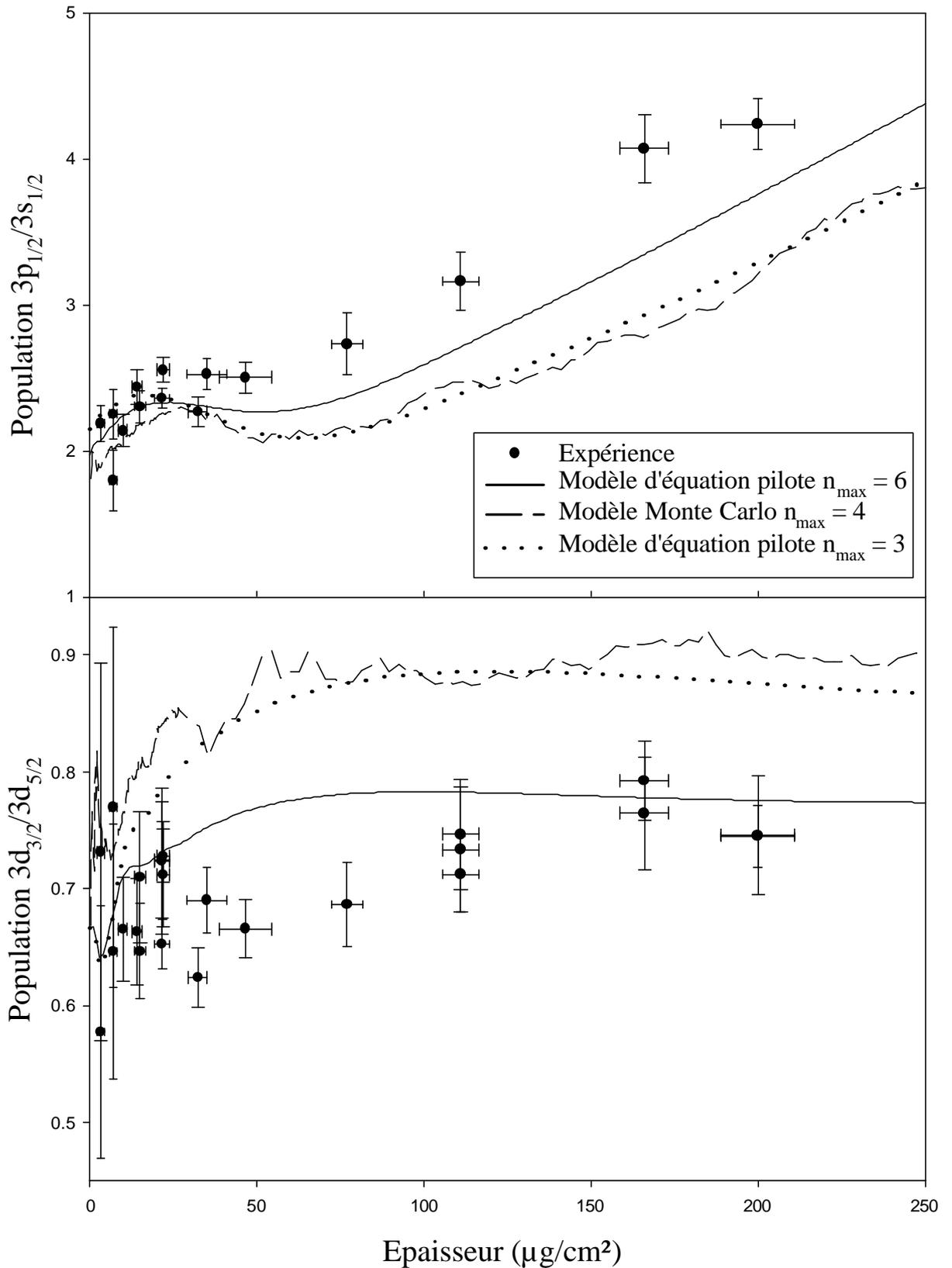


Figure 87 : Evolution des rapports $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ obtenus pour le système $Kr^{35+}@C$ à $v=46,95$ u.a. (60 MeV/A). Expérience et comparaison entre le modèle Monte Carlo et le modèle d'équation pilote.

En conclusion de cette partie consacrée à l'étude des populations relatives $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ du système $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ à 60 MeV/A, nous pouvons rappeler qu'il est impossible à l'heure actuelle de faire des comparaisons expérience-théorie à mieux que 15% environ sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, essentiellement à cause de la sensibilité de ce rapport aux rapports de branchement de l'état $3s_{1/2}$. De plus, nous avons rencontré de nombreux problèmes de faisceauologie au cours de l'expérience (voir Chap.II§II) et les barres d'erreurs expérimentales pourraient être légèrement sous estimées malgré nos efforts pour les maîtriser. Dans le cadre de cette limite néanmoins, nous disposons maintenant d'outils théoriques extrêmement aboutis que ce soit en termes de conditions initiales ou de transport, qui reproduisent parfaitement les résultats expérimentaux. Le modèle d'équation pilote, bien qu'incomplet au niveau des processus collisionnels cohérents, inclut les effets prédominants pour bien reproduire l'évolution des observables.

3°) Système $\text{Kr}^{35+} @ \text{Al}$ à $v=46,95$ u.a. (60 MeV/A)

Des cibles d'aluminium ont également été utilisées lors de l'expérience décrite au chapitre II. Le choix de cette nature de cible obéit aux considérations suivantes :

- lors de l'étude du transport du projectile Kr^{35+} à 33,2 MeV/A initialement peuplé par capture (Despiney, 1994), quelques cibles de cuivre avaient été utilisées. Ces mesures avaient montré l'importance du rôle des électrons de cœur de la cible dans la valeur effective du champ électrique de sillage qui mélangeait les états $3s_{1/2}$ et $3p_{1/2}$ d'une part, et $3p_{3/2}$ et $3d_{3/2}$ d'autre part. Il était donc intéressant de renouveler ce genre de mesure avec des cibles d'aluminium dont la fréquence plasma des électrons de valence (égale à 16 eV) est différente de celle déduite de mesures de pouvoir d'arrêt par les expressions (87) et (100) du chapitre I, et qui vaut 28,8 eV.

- d'autre part, la collision Kr^{35+} à 60 MeV/A sur Al s'écarte du domaine perturbatif par rapport à l'utilisation d'une cible de carbone, et on s'attend à constater un abaissement des amplitudes d'oscillations (la phase des cohérences s'écartant alors d'une valeur purement imaginaire) lors de l'utilisation de cibles d'aluminium.

a) Discussion des résultats expérimentaux.

i) Cibles utilisées.

Les mesures ont été effectuées sur 6 épaisseurs de cible différentes. Parmi celles-ci, 3 étaient trop cassantes du fait de leur faible épaisseur (respectivement 4,8, 10,6 et 20,4 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ d'aluminium). Ces cibles étaient donc supportées par une fine couche évaporée de carbone. Rappelons que les cibles étaient positionnées de manière à ce que le faisceau rentre par la couche de carbone, afin de favoriser le transport dans l'aluminium. Le faible nombre d'épaisseurs de cible utilisées s'explique :

- d'une part par le fait que ces cibles ne sont pas faciles à fabriquer et encore moins à faire tenir sur un support qui pour des raisons d'optimisation de la résolution faisait au minimum 12 mm de large.

- d'autre part on ne pouvait pas, afin d'augmenter le nombre d'épaisseurs de cible, incliner les cibles supportées par une couche de carbone car alors l'épaisseur de celle-ci aurait également varié, ce qui aurait rendu l'exploitation des résultats très compliquée.

- enfin, le temps de faisceau à notre disposition était limité, et la priorité était donnée aux mesures sur cible de carbone.

Nous allons néanmoins tenter d'exploiter les résultats obtenus.

ii) Comparaison avec les résultats obtenus avec des cibles de carbone.

La figure 88 montre les populations relatives expérimentales $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ du Kr^{35+} à 60 MeV/A obtenues en utilisant des cibles de carbone et d'aluminium. Malgré le peu de points expérimentaux dans ce dernier cas, on voit que l'évolution du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ est nettement moins marquée pour des cibles d'aluminium que pour celles de carbone. Les battements quantiques dus au couplage Stark avec le champ de sillage sont bien moins visibles dans le cas de l'aluminium. L'importance relative des phénomènes collisionnels par rapport aux phénomènes collectifs semble donc supérieure dans l'aluminium. C'est ce que nous attendions à l'étude des valeurs des libres parcours moyens associés aux processus collisionnels et de mélange Stark dans les deux types de cible, données dans le tableau VI du chapitre II. Nous voyons avec ces valeurs que le mélange collisionnel est 2 à 3 fois plus rapide dans l'aluminium que dans le carbone, tandis que le mélange Stark est légèrement plus lent. Le battement quantique est donc très vite brouillé par les effets collisionnels dans l'aluminium.

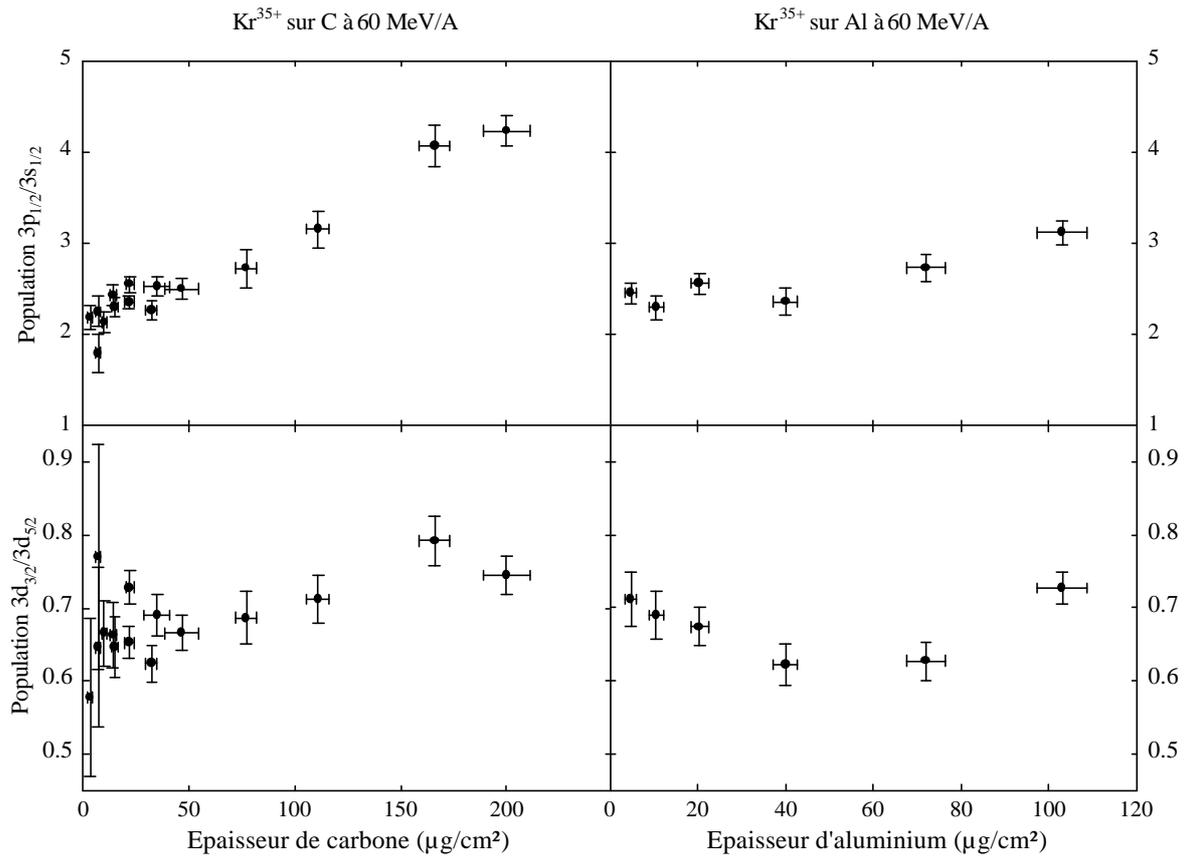


Figure 88 : Comparaison des populations relatives expérimentales $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ du Kr^{35+} à 60 MeV/A obtenues en utilisant des cibles de carbone et d'aluminium.

iii) Estimation du rôle du support de carbone pour les cibles fines d'aluminium.

Rappelons que les trois cibles les plus fines d'aluminium étaient supportées par une fine couche de carbone. L'épaisseur de cette couche a été mesurée par RBS en même temps que l'épaisseur d'aluminium (voir Chap.II) et valait pour chacune de ces trois cibles respectivement 13,6, 14 et 13,2 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ (voir le tableau IX du chapitre II). Les épaisseurs de ces couches de carbone ont été choisies les plus proches possible afin de ne pas compliquer l'interprétation des mesures. Dans un souci de simplification, je retiendrai dans la suite une même épaisseur (13,6 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$) de carbone pour les trois cibles. Cela est légitime car cette valeur (qui est bien sûr la valeur moyenne des épaisseurs de carbone mesurées) se situe dans la barre d'erreur de chaque épaisseur mesurée (environ 6%), comme on peut le constater en consultant le tableau IX du chapitre II. Afin d'étudier l'influence de ce support de carbone je vais m'appuyer sur le modèle d'équation pilote. De plus pour discuter cet effet, nous admettrons comme le suggèrent les mesures précédemment effectuées sur des cibles de cuivre, que la fréquence plasma à considérer pour calculer le champ de sillage est celle

donnée par le pouvoir d'arrêt du projectile (expressions (87) et (100) du chapitre I) qui vaut 28,8 eV dans l'aluminium. Enfin, nous tiendrons compte de la dépendance spatiale du champ de sillage, calculée selon les formules (98) à (102) du chapitre I.

Le but est de pouvoir tracer une évolution théorique des rapports de populations de structure fine en fonction de **l'épaisseur d'aluminium** traversée, en tenant compte du support de carbone. Il suffit donc d'utiliser comme matrice densité décrivant le projectile entrant dans l'aluminium la matrice densité obtenue par notre programme après transport dans $13,6\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone. Lors de cette opération, il faut évidemment utiliser les conditions initiales décrivant le processus initial de peuplement (excitation à partir de 1s) données par le même type de calcul aussi bien dans le carbone que dans l'aluminium. C'est ce que nous avons fait en utilisant successivement des conditions initiales PWBA et provenant d'un calcul d'équations couplées. Parallèlement à cela, nous avons effectué des simulations sans couche de carbone (qui pourront être directement comparées aux points expérimentaux des cibles d'aluminium auto supportées). La comparaison de ces deux types de calcul met donc en évidence l'effet de la couche de carbone.

La figure 89 montre l'évolution des rapports de population $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur d'**aluminium** traversée, obtenue par le modèle d'équation pilote utilisant des conditions initiales provenant d'un calcul d'équations couplées. La courbe continue concerne le cas où le projectile traverse uniquement une feuille d'aluminium, celle en tirets correspond au cas où le projectile traverse $13,6\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone avant de pénétrer dans l'aluminium. Pour cette courbe, l'épaisseur $0\mu\text{g}/\text{cm}^2$ correspond donc à $13,6\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbone. L'effet de la couche de carbone est important jusqu'à une épaisseur de $15\mu\text{g}/\text{cm}^2$ d'aluminium environ pour le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et de $30\mu\text{g}/\text{cm}^2$ environ pour le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, épaisseurs à partir desquelles l'évolution due au transport reste sensiblement identique, car dépendant exclusivement de l'aluminium. On notera néanmoins que même pour des épaisseurs supérieures à $20\mu\text{g}/\text{cm}^2$, la présence de la couche de carbone mène à un décalage vertical constant du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, bien qu'elle n'influe plus sur son évolution.

La figure 90 montre les mêmes rapports dans le cas où le processus initial de peuplement est décrit par un calcul PWBA. Nous observons des caractéristiques très proches du cas où le calcul des conditions initiales est effectué par une méthode d'équations couplées. Afin de comparer les résultats expérimentaux aux modèles théoriques, nous prendrons en compte la contribution du support de carbone présent devant les trois cibles les plus fines d'aluminium bien qu'elle soit relativement faible.

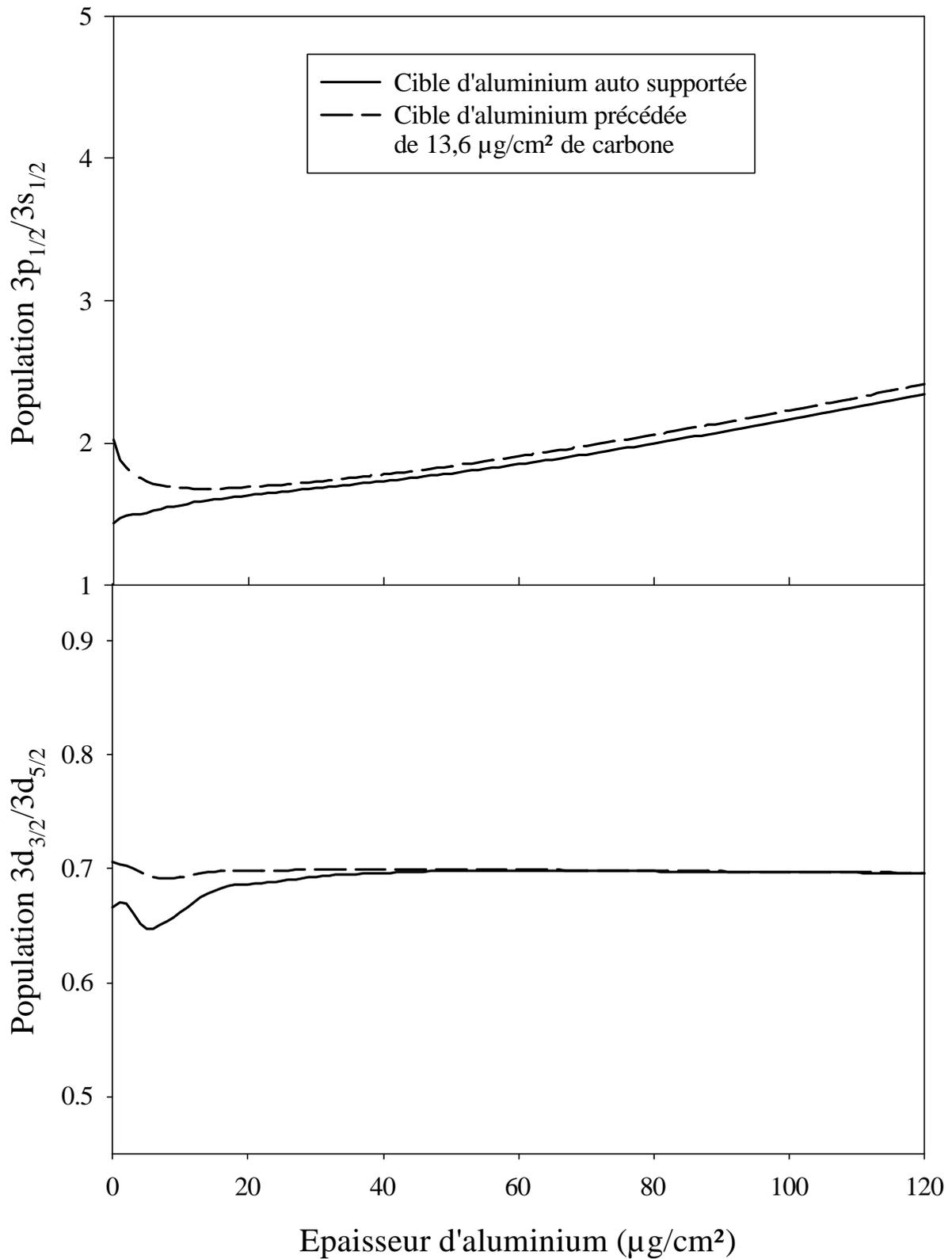


Figure 89 : Evolution des rapports de population $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur d'aluminium traversée, obtenue par le modèle d'équation pilote utilisant des conditions initiales provenant d'un calcul d'équations couplées. Système $Kr^{35+} @ Al$ ($E=60$ MeV/A).

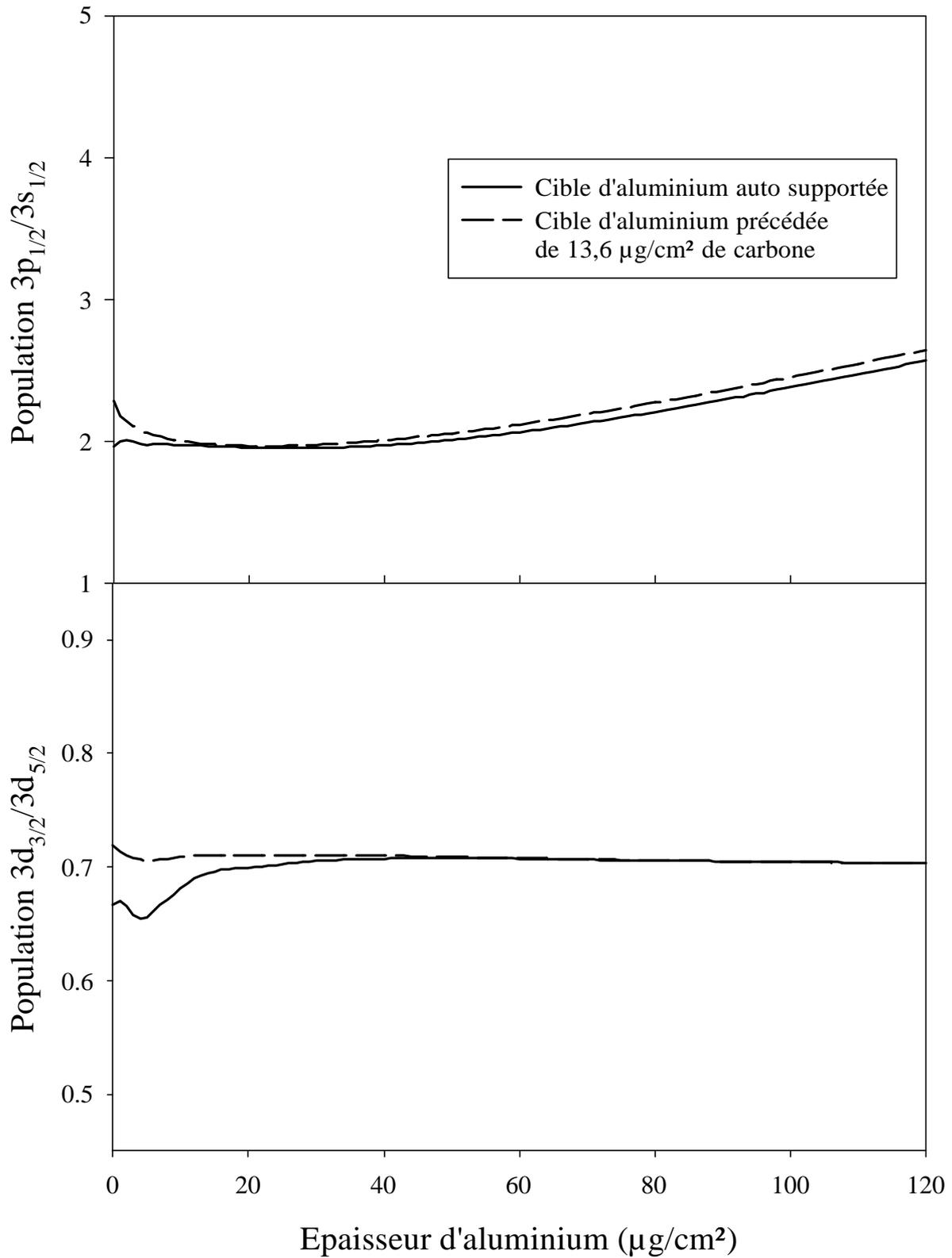


Figure 90 : Evolution des rapports de population $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur d'aluminium traversée, obtenue par le modèle d'équation pilote utilisant des **conditions initiales** provenant d'un calcul PWBA. Système $\text{Kr}^{35+} @ \text{Al}$ ($E=60 \text{ MeV/A}$).

b) Confrontation des résultats expérimentaux aux modèles théoriques.

Dans ce paragraphe, nous allons comparer les résultats provenant de l'expérience à ceux obtenus par nos modèles théoriques, collisionnel seul et d'équation pilote. Avant toute chose, il faut préciser que les courbes théoriques sont tracées jusqu'à une épaisseur de $40 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ d'aluminium en prenant en compte la couche évaporée de carbone, comme décrit dans le paragraphe précédent, aussi bien dans le modèle collisionnel que celui d'équation pilote. Nous avons choisi cette valeur particulière d'une part parce que nous avons vu que l'influence de la couche de carbone ne se fait plus sentir à cette épaisseur, et d'autre part car c'est à partir de cette valeur que les cibles d'aluminium étaient auto supportées. Cette manière de procéder explique le petit décrochement visible sur les courbes théoriques à l'épaisseur $40\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

La figure 91 montre la comparaison entre les points expérimentaux extraits des rapports d'intensités R1 et R2 en utilisant des rapports de branchement relativistes suivant l'expression (167), et les courbes théoriques utilisant des conditions initiales données par un calcul PWBA.

D'un point de vue théorique, l'évolution du rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ donnée par les deux modèles est similaire dès $10\mu\text{g}/\text{cm}^2$ environ. La prise en compte du champ de sillage dans le modèle d'équation pilote s'exprime par une évolution différente avec le calcul purement collisionnel jusqu'à cette épaisseur, puis par un décalage quasiment constant au delà. Les points expérimentaux présentent le même type d'évolution, ce qui confirme le fait que les processus collisionnels dominant très vite l'évolution de ce rapport. L'écart entre l'expérience et le modèle d'équation pilote est à peu près constant et s'élève à 23% par exemple pour la cible la plus épaisse de $103\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

En ce qui concerne le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, nous voyons ici aussi que le modèle d'équation pilote prévoit une évolution essentiellement dominée par des processus collisionnels (évolution "plate") dès l'épaisseur de $20 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. Comme nous l'avons déjà vu dans le cas de cibles de carbone, ce modèle est mis en défaut en ce qui concerne l'évolution de ce rapport dans la zone des épaisseurs intermédiaires. En effet, les mesures correspondant aux cibles les plus fines sont bien reproduites et la valeur asymptotique est correcte. Cependant, on observe un écart de 13% avec les mesures effectuées sur les cibles de 40 et $72 \mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Nous allons dans la suite discuter des points qui pourraient expliquer ce désaccord, comme l'influence des conditions initiales, d'une incertitude sur les rapports de branchement, la valeur du champ effectif pris en compte et la contribution des électrons internes de la cible, et enfin les approximations faites dans notre modèle.

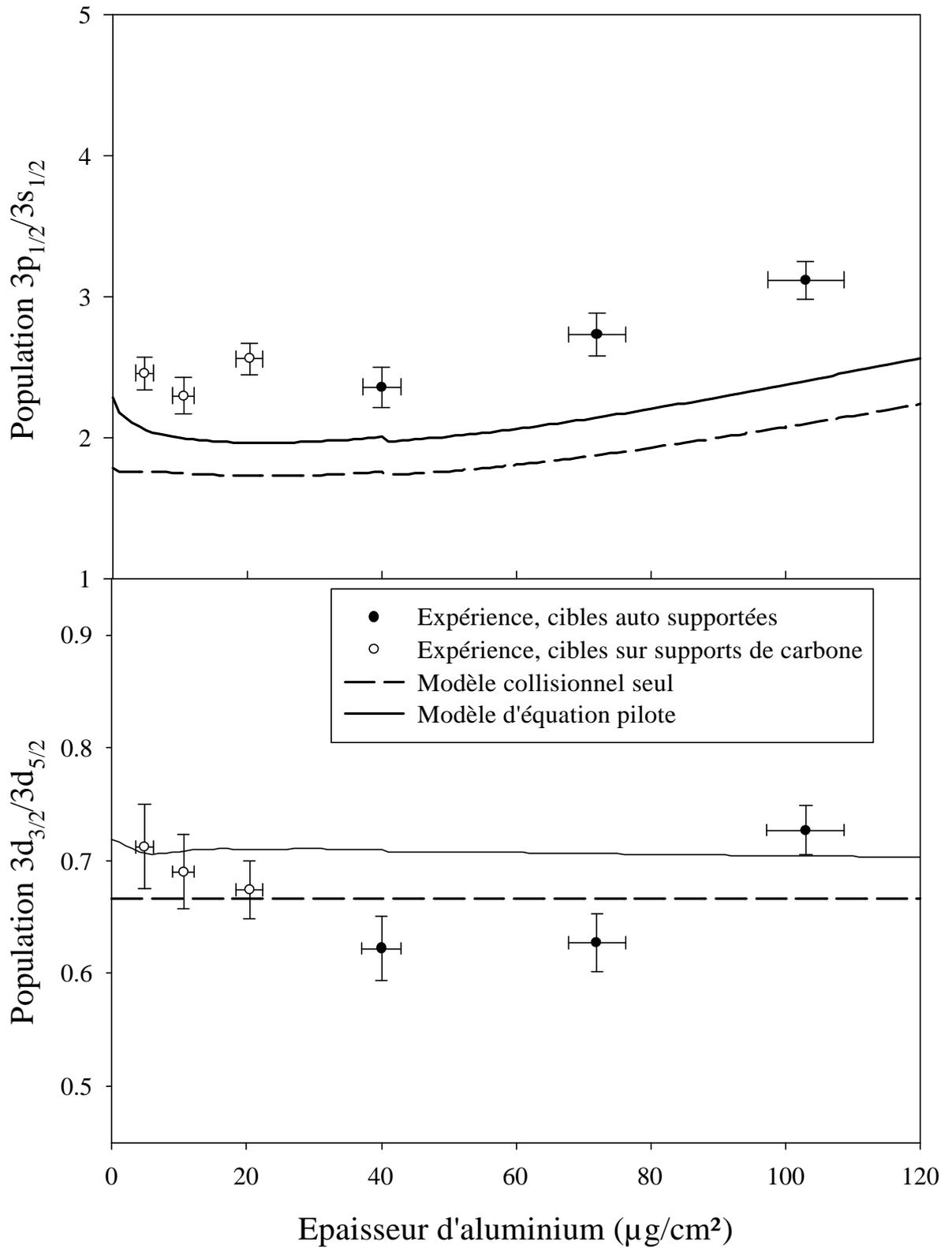


Figure 91 : Comparaison entre les rapports de populations $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ expérimentaux extraits en utilisant des rapports de branchement relativistes et les courbes théoriques (modèle collisionnel et modèle d'équation pilote) utilisant des conditions initiales données par un calcul **PWBA**. Système Kr^{35+} @Al ($E=60 \text{ MeV/A}$).

◆ Utilisation de conditions initiales différentes.

L'utilisation dans notre modèle d'équation pilote de conditions initiales différentes, données par une méthode d'équations couplées, mène aux résultats montrés sur la figure 92. Ici encore, comme pour le cas des cibles de carbone, le principal effet est une translation des courbes. L'accord du modèle d'équation pilote avec les mesures expérimentales en est amélioré en ce qui concerne les valeurs de $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, tandis que la prédiction théorique de $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ est dégradée. Le désaccord s'élève à 30% pour $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ à $103 \mu\text{g}/\text{cm}^2$, et à 10% pour $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ pour l'épaisseur $72 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. Par contre, l'utilisation de ces conditions initiales ne change pas de façon notable la forme de l'évolution des observables dans les cibles.

Le fait que des conditions initiales PWBA mènent à des résultats plus proches des mesures expérimentales que celles provenant d'un calcul d'équations couplées est d'autant plus étonnant que l'emploi d'une cible d'aluminium ($Z_c = 11$) plutôt que de carbone correspond davantage au domaine d'utilisation d'un calcul d'équations couplées qui est de type non perturbatif. Nous pouvons donc encore une fois nous interroger sur la possibilité d'une erreur systématique non sur la position relative des points expérimentaux les uns par rapport aux autres, mais sur leur valeur absolue.

◆ Sensibilité aux rapports de branchement utilisés pour extraire les populations expérimentales.

Afin d'illustrer cette sensibilité, nous avons porté sur la figure 93 les points expérimentaux extraits avec les rapports de branchement relativistes d'une part et non relativistes d'autre part (expressions (167) et (166) respectivement). Sur cette figure sont également portés les résultats théoriques du modèle d'équation pilote utilisant les conditions initiales PWBA, puis provenant d'un calcul d'équations couplées. Nous voyons que la faible différence sur les rapports de branchement (voir tableau XVIII) entraîne ici aussi une différence sensible et systématique sur les résultats expérimentaux, et particulièrement sur $3p_{1/2}/3s_{1/2}$. Cette différence s'élève à 14% pour ce rapport à l'épaisseur de cible la plus fine utilisée, et 11% pour l'épaisseur de cible la plus épaisse. La modification entraînée sur $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ est évidemment toujours la même et vaut 3%. L'utilisation de rapports de branchement non relativistes amène à un bon recouvrement entre les données expérimentales et les résultats prédits par le modèle d'équation pilote utilisant des conditions initiales PWBA. Cette brève étude nous amène donc à des résultats identiques quant à la sensibilité de ce système aux rapports de branchement utilisés à ceux observés sur les 2 systèmes précédents,

et la possibilité d'une erreur systématique liée aux incertitudes sur ces valeurs est envisageable.

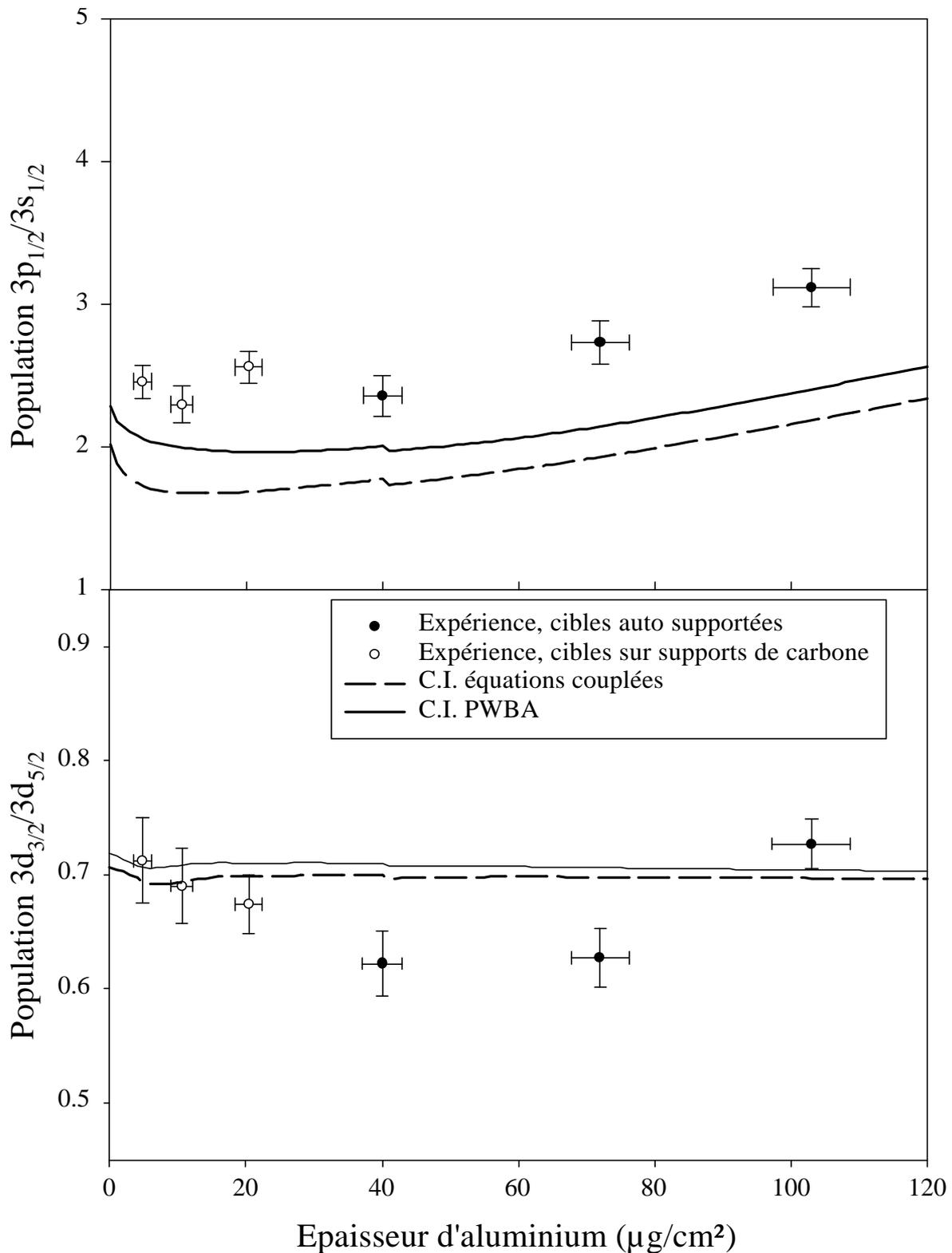


Figure 92 : Evolution des rapports des populations $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée. Système $Kr^{35+} @ Al$ ($E=60$ MeV/A). Expérience et modèle d'équation pilote, utilisant tour à tour des conditions initiales issues d'un calcul PWBA et d'une méthode d'équations couplées.

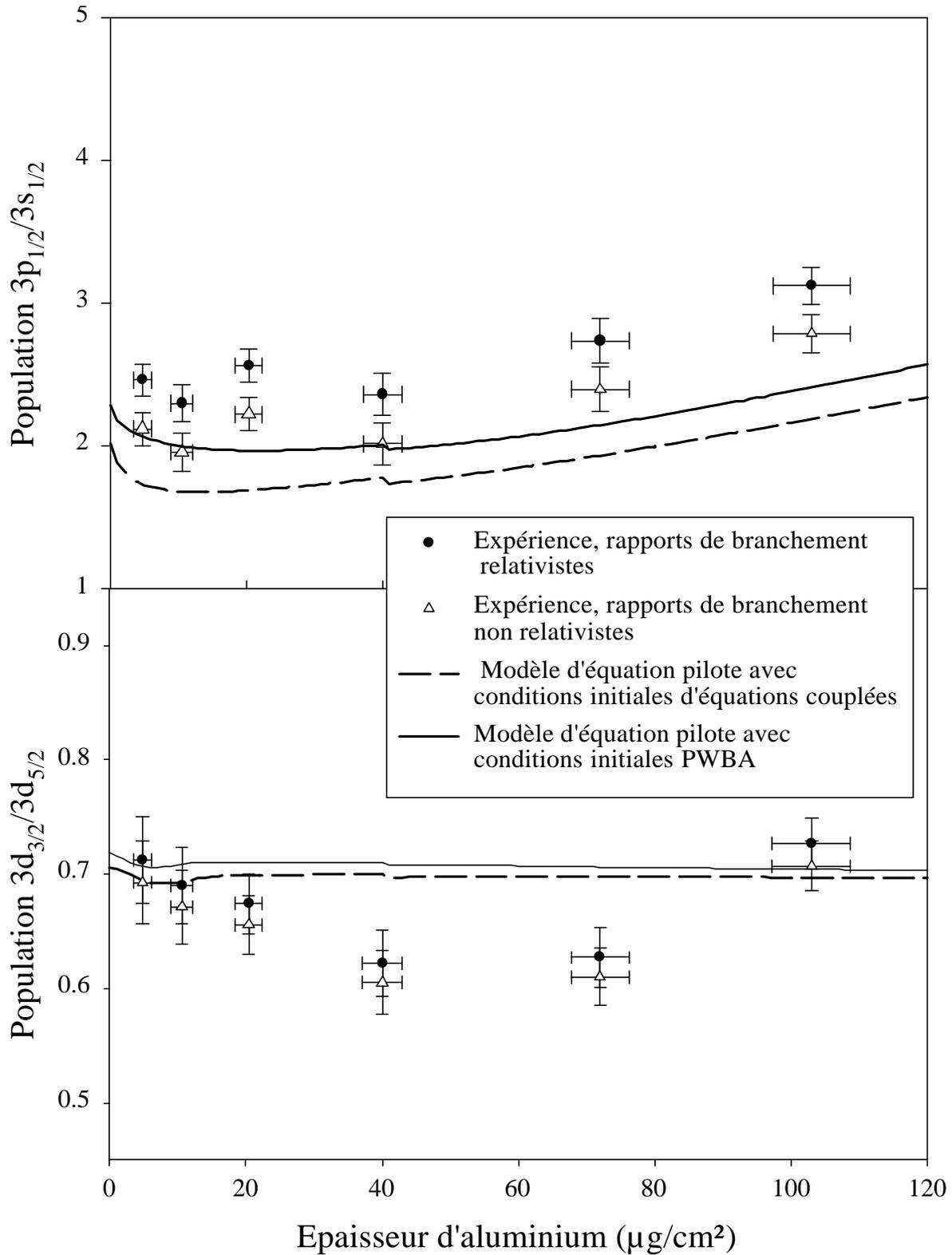


Figure 93 : Points expérimentaux ($3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$) extraits à l'aide des rapports de branchement relativistes ou non. Comparaison avec les prévisions du modèle d'équation pilote utilisant des conditions initiales données par un calcul d'équations couplées d'une part, et PWBA d'autre part. Système $\text{Kr}^{35+} @ \text{Al}$ ($E=60 \text{ MeV/A}$).

◆ Valeur du champ de sillage effectif

Nous ne pouvons pas tester la dépendance du champ électrique effectif en ℓ_j à cause du faible nombre de points expérimentaux dont nous disposons. Mais nous allons cependant discuter ici de la valeur du champ de sillage en terme de fréquence plasma du matériau, afin de déterminer quels sont les électrons qui y sont impliqués. La figure 94 montre les valeurs expérimentales extraites avec les rapports de branchement relativistes selon l'expression (167), ainsi que les résultats du modèle d'équation pilote utilisant des conditions initiales PWBA, et dans lequel la fréquence plasma du milieu a été successivement fixée à 28,8 eV (valeur tirée du pouvoir d'arrêt du projectile dans la cible et correspondant à un calcul faisant intervenir les électrons de cœur du matériau comme celui décrit au chap.I§A -III-1-b), et 16 eV (valeur due aux électrons de valence uniquement). Précisons que dans les deux cas la dépendance spatiale du champ électrique est prise en compte.

Nous remarquons que comme attendu, la variation entraînée sur la forme de l'évolution théorique par le changement de fréquence plasma n'est visible que pour les très faibles épaisseurs (en dessous de 10 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$), c'est à dire avant que les processus collisionnels, très importants dans le cas de cible d'aluminium, ne brouillent l'évolution cohérente due au couplage avec le champ de sillage. Passée cette épaisseur de 10 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$, les évolutions sont essentiellement régies par les processus collisionnels et les courbes représentant les deux calculs sont sensiblement identiques ; seul un décalage constant les différencie alors.

Sur le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, ce décalage mesuré à l'épaisseur 120 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ représente 3%, et l'utilisation de la fréquence plasma incluant les électrons de cœur de la cible présente un meilleur accord sur la valeur asymptotique mais un écart plus prononcé avec les valeurs expérimentales aux épaisseurs intermédiaires.

Sur le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$, l'effet est plus important et vaut 8% à 120 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$. Cette fois, l'utilisation de la fréquence plasma prenant en compte l'implication des électrons de cœur dans le champ de sillage amène nettement à un meilleur accord expérience-théorie que l'utilisation de celle représentant uniquement les électrons de valence, et ce sur toute la gamme d'épaisseurs de cible.

Ces observations sont en accord avec les résultats trouvés pour une cible de cuivre : le champ électrique effectif s'appliquant sur le projectile est produit non seulement par la polarisation dynamique des électrons de valence, mais aussi par l'implication de tout ou partie des électrons de cœur de la cible.

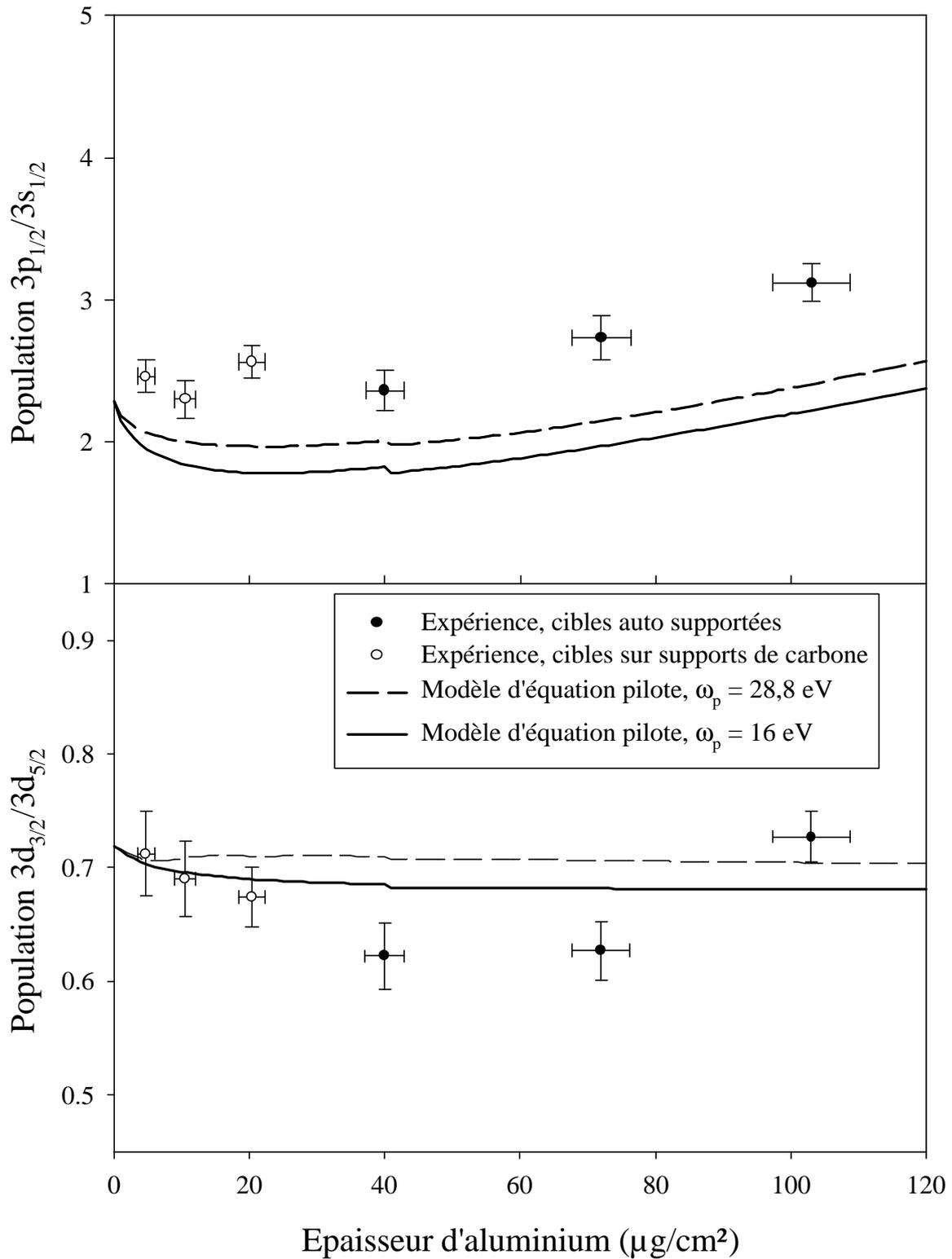


Figure 94 : Evolution des rapports des populations $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ et $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ en fonction de l'épaisseur de cible traversée. Système $Kr^{35+}@Al$ ($E=60$ MeV/A). Etude de l'implication des électrons de cœur dans l'onde de polarisation induite.

◆ Approximations faites dans le modèle d'équation pilote.

L'épaisseur à partir de laquelle les cohérences collisionnelles non prises en compte pendant le transport dans notre modèle pourraient jouer un rôle sensible est d'environ $30 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ d'aluminium (voir tableau VI du chapitre II). Bien que la comparaison précédente entre le modèle d'équation pilote et le modèle Monte Carlo qui, lui, prend en compte les cohérences collisionnelles démontre que ces processus n'ont pas d'effet important dans les cibles de carbone, il pourrait en être autrement *a priori* dans le cas de cibles d'aluminium. En effet, nous avons vu tout au long de ce paragraphe que cette nature de cible favorise l'influence des effets collisionnels. Dans le cas de cibles d'aluminium, le peuplement des cohérences par les processus collisionnels autres que le processus initial de peuplement pourrait donc avoir un rôle sensible sur le rapport de populations $3d_{3/2}/3d_{5/2}$, soit directement, soit indirectement *via* le couplage Stark au champ de sillage des niveaux $3d_{3/2}$ et $3p_{3/2}$.

L'importance de la limitation du modèle à un nombre d'états tel que $n_{\text{max}} = 6$ est sensiblement la même que pour le cas des cibles de carbone. Afin de l'évaluer, nous avons comme précédemment chiffré l'écart entre les valeurs obtenues par le programme en prenant en compte successivement tous les états jusqu'à n_{max} égal à 5 puis à 6. Nous avons mesuré l'écart maximum obtenu dans la gamme d'épaisseurs étudiée, et celui-ci vaut 2% pour le rapport $3p_{1/2}/3s_{1/2}$ à l'épaisseur $120 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ et 0,3% pour le rapport $3d_{3/2}/3d_{5/2}$ à une épaisseur de $60 \mu\text{g}/\text{cm}^2$. Cette dernière valeur extrêmement faible s'explique d'une part par le fait que les états de ce rapport ont les mêmes nombres quantiques n et ℓ et donc la proportion de cascades qu'ils reçoivent est très proche, et d'autre part les effets cohérents dus au champ de sillage n'ont que très peu le temps de se manifester dans les cibles d'aluminium. Pour ce système collisionnel donc, comme pour les précédents, nous pouvons en conclure que la prise en compte de tous les états jusqu'à $n_{\text{max}} = 6$ amène à une description correcte des effets des états supérieurs sur les états de la couche $n = 3$.

En conclusion de l'étude de ce système, nous pouvons dire qu'il n'est pas exclu qu'une erreur systématique, principalement due à la sensibilité aux rapports de branchement utilisés, entache nos résultats expérimentaux. Rappelons que dans ce cas, la position relative de ces points les uns par rapport aux autres, caractéristique du transport ne serait pas modifiée, contrairement à la valeur absolue des rapports, caractéristique en particulier des conditions initiales. Toutefois, il faut garder à l'esprit que le désaccord observé entre l'expérience et la théorie est de l'ordre de 20 % sur ces valeurs absolues, ce qui reste tout à fait raisonnable

particulièrement lorsqu'on traite des populations de structure fine. Les niveaux $3d_{3/2}$ et $3d_{5/2}$ appartiennent à la même sous-couche $n\ell$ ce qui rend le rapport de leur population extrêmement sensible aux processus cohérents intervenant dans le transport, et il n'est pas exclu non plus que dans l'aluminium les cohérences collisionnelles aient un effet sur ce rapport.

Enfin la comparaison entre l'expérience et le modèle d'équation pilote montre un meilleur accord lorsque la fréquence plasma utilisée prend en compte les électrons de cœur de la cible, ce qui confirme les observations précédemment faites sur le système $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{Cu}$ à 33,2 MeV/A.

CONCLUSION

Ce travail de thèse s'articule autour de l'étude théorique et expérimentale de l'interaction entre un ion lourd rapide hydrogénéoï de et une cible solide, en termes de transport des états excités de l'ion. Ce thème très vaste fut l'objet de nombreux travaux dans l'équipe dont on pourra trouver une vision assez complète dans (Despiney, 1994; Lamour, 1997; Vernhet, Rozet, Bailly-Despiney *et al.*, 1998; Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 1999; Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000; Lamour, Vernhet, Rozet *et al.*, 2001). Nous avons réalisé ici de nouveaux développements théoriques, ainsi que l'amélioration de ceux déjà existants. D'un point de vue expérimental, une nouvelle expérience a été effectuée et analysée. Ce travail de thèse permet de faire un bilan sur la compréhension actuelle du transport d'ions hydrogénéoï des rapides dans des cibles solides (Vernhet, Rozet, Lamour *et al.*, 2000; Vernhet, Fourment, Lamour *et al.*, 2001).

Les processus intervenant lors de la dynamique du transport sont classés en deux types : collisionnel binaire d'une part, où les atomes du solide répondent comme des atomes isolés, et collectif d'autre part pour décrire la polarisation dynamique des électrons de la cible. Il s'avère que les deux types de processus interviennent simultanément lors du transport, et qu'on ne peut pas reproduire la totalité des observations expérimentales hors d'un traitement théorique les prenant tous deux en compte. Une étude préliminaire d'un tel calcul avait été présentée (Dubé, Despiney, Rozet *et al.*, 1995) et se montrait très encourageante.

L'étude théorique de ce manuscrit présente en détail les modèles mis au point pour comprendre et simuler les phénomènes intervenant lors du transport des états internes d'un ion hydrogénéoï de rapide. On dispose de codes traitant séparément le transport purement collisionnel d'une part, purement collectif d'autre part, et dorénavant d'un troisième présentant un traitement unifié des deux types de processus. Ces trois modèles s'appuient sur la résolution de systèmes d'équations différentielles issus de l'équation de Liouville décrivant l'évolution de la matrice densité de l'ion hydrogénéoï de, à différents degrés d'approximation. Précisons que ces codes sont construits sans aucun paramètre libre. Les processus collisionnels ont été calculés à partir de plusieurs théories décrivant l'interaction ion-atome,

citons les approximations Plane Wave Born Approximation (PWBA), Continuum Distorted Wave (CDW), et la méthode des équations couplées. Le champ de sillage est calculé à l'aide d'une loi empirique qui tient compte de ses variations à l'échelle des orbites électroniques de l'ion projectile (Rozet, Vernhet, Bailly-Despiney *et al.*, 1999), et qui permet de reproduire les résultats d'un calcul incluant les inhomogénéités de la densité électronique dans les cibles solides (Fuhr, Ponce, Garcia de Abajo *et al.*, 1998; Ponce, 1998).

Le programme simulant le transport purement collisionnel traite maintenant explicitement en base n, ℓ les états jusqu'à $n=10$, et de façon approchée, grâce à des lois d'échelle, les états supérieurs. Ce nombre d'états est suffisant pour traiter les populations d'états internes ($n=2$ à 5 typiquement) en incluant la très large majorité des cascades arrivant sur ces niveaux. Le transport est traité dans le cadre de la Random Phase Approximation (RPA), c'est à dire qu'aucun phénomène cohérent n'est pris en compte.

Le programme traitant le transport purement collectif est construit sur un modèle très simplifié à 2 niveaux. Il permet de mettre en évidence la possibilité d'un mélange Stark entre deux niveaux atomiques suffisamment proches et vérifiant certains critères de sélections qui sont détaillés. Ce mélange est responsable d'un battement quantique visible lorsque l'on étudie l'évolution, en fonction de l'épaisseur de cible traversée, de rapports de populations de structure fine. Le modèle permet de caractériser ce battement en fonction des paramètres décrivant le système : la fréquence du battement dépend de l'intensité du champ de sillage, son amplitude et sa pente à l'origine étant déterminées essentiellement par les termes non diagonaux (cohérences) de la matrice densité initiale (avant transport) de l'ion.

Le programme traitant simultanément les deux types d'effets (modèle appelé "d'équation pilote") prend en compte les phénomènes collisionnels et collectifs jusqu'à $n=6$. Parmi tous les processus collisionnels, les cohérences sont introduites uniquement pour celui peuplant initialement les niveaux excités de l'ion hydrogénéoï de. Cette simplification n'a pas d'effet aux très faibles épaisseurs de cibles où le phénomène cohérent dominant est le mélange par effet Stark agissant sur les cohérences du processus initial de peuplement, effectivement prises en compte. Elle n'a pas beaucoup d'importance non plus pour des grandes épaisseurs de cible où tout phénomène cohérent devient négligeable par rapport aux transferts de population collisionnels.

Enfin une description différente s'appuyant sur une résolution stochastique par une méthode Monte-Carlo du transport est succinctement présentée. Si le système étudié s'y prête (i.e. l'ion n'est pas trop lourd) cette méthode peut être appliquée dans le cadre d'un espace des

phases tant classique que quantique. Dans le cas du système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ ($E=13,6$ MeV/A) l'évolution des populations des états np ($n \leq 5$) en fonction de l'épaisseur de cible traversée prédite par cette méthode est semblable à celle donnée par notre modèle d'équation pilote. Notons que ces états sont la somme de 2 états de structure fine $np_{1/2} + np_{3/2}$. Par contre ils montrent une différence quant à l'évolution de l'état de structure fine $2s_{1/2}$. Le traitement quantique du système $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ ($E=60$ MeV/A) est actuellement en cours. L'évolution des populations relatives des états $3p_{1/2}$ et $3s_{1/2}$ d'une part, et $3d_{3/2}$ et $3d_{5/2}$ d'autre part montre une grande similitude avec les résultats de notre modèle d'équation pilote (Vernhet, Fourment, Lamour *et al.*, 2001). Bien que ces calculs soient très récents et nécessitent encore un certain nombre de vérifications, la comparaison des résultats provenant de 2 méthodes complètement différentes est encourageante quant à la validité des traitements théoriques effectués.

L'expérience présentée a été réalisée au GANIL avec des ions hydrogénéoïdes des Kr^{35+} d'énergie 60 MeV/A entrant en collision avec des cibles de carbone et d'aluminium de différentes épaisseurs. L'évolution des transitions Lyman ($np \rightarrow 1s$) et des composantes de structure fine de la transition Balmer α ($3\ell_j \rightarrow 2\ell'_j$) en fonction de l'épaisseur des cibles a été déterminée. La séparation de ces dernières nécessite l'utilisation d'une technique de spectroscopie X à haute résolution, mise en œuvre par les spectromètres cristallins modulaires élaborés dans l'équipe. La gamme des épaisseurs utilisées permet une étude allant du régime de collision unique jusqu'à l'équilibre des populations.

Le système collisionnel utilisé est tel que les états excités du projectile sont peuplés par le processus de simple excitation. Les conditions initiales avant transport sont alors différentes de celles obtenues avec un peuplement par voie de capture sur un ion incident nu, qui était le choix effectué lors d'études précédentes (Despiney, 1994; Lamour, 1997), et les résultats obtenus sont donc complètement inédits. De plus la simple excitation est un processus *a priori* plus simple à décrire théoriquement. Enfin, ce processus s'inscrit naturellement dans les collisions intervenant lors du transport de l'ion dans la cible et se trouve de ce fait mieux adapté à la description du transport par une méthode Monte Carlo dont nous avons comparé les résultats avec ceux issus de notre modèle d'équation pilote.

Ces mesures nous ont permis d'étudier:

- L'évolution des intensités absolues des transitions Lyman provenant des niveaux np pour n allant de 2 à 5 en fonction de l'épaisseur de cible de carbone. Cette évolution est moins sensible au transport que celles observées lors des études expérimentales précédentes sur les

systèmes $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ ($E=13,6 \text{ MeV/A}$), et $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E=33,2 \text{ MeV/A}$), mais présente néanmoins des caractéristiques similaires.

- L'évolution des rapports des populations relatives des états $3p_{1/2}$ et $3s_{1/2}$ d'une part, et $3d_{3/2}$ et $3d_{5/2}$ d'autre part avec l'épaisseur de carbone et d'aluminium traversée. Cette évolution complète et confirme la seule mesure de ce type déjà effectuée (Despiney, 1994), mais qui différait dans le choix du système collisionnel (le projectile était initialement peuplé par capture). Dans le carbone, l'évolution des rapports de ces populations montre un battement quantique mettant en évidence l'écrantage dynamique du projectile par les électrons de la cible. Dans l'aluminium les processus collisionnels sont beaucoup plus importants que dans le carbone, alors que le champ de sillage est du même ordre de grandeur. L'évolution due à l'écrantage dynamique est donc moins marquée. En revanche, cette nature de cible nous permet de tester le rôle des électrons internes de la cible dans l'établissement du champ de sillage.

La comparaison expérience-théorie recouvre l'ensemble des résultats propres à cette thèse provenant de l'expérience décrite précédemment, et de ceux concernant la production et le transport des états de cœur des études antérieures qu'il est intéressant de confronter aux nouveaux développements théoriques. Dans un premier temps nous avons étudié les évolutions des populations absolues des niveaux np ($n \leq 5$) du projectile Kr^{35+} des systèmes $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E=33,2 \text{ MeV/A}$) et $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ ($E=60 \text{ MeV/A}$), ainsi que des niveaux np ($n \leq 4$) et $2s_{1/2}$ de $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ ($E=13,6 \text{ MeV/A}$). Les résultats originaux issus de ces études sont les suivants :

- Si l'essentiel de l'évolution est reproduit par un modèle collisionnel pur, l'introduction du champ de sillage en plus des processus collisionnels dans la description théorique amène à un accord expérience – théorie remarquable. Le modèle d'équation pilote convient parfaitement pour décrire ces observables.

- L'effet dû au champ de sillage est d'autant plus visible que l'observable est "pure". Par exemple, la population de l'état de structure fine $2s_{1/2}$ du projectile Ar^{17+} est plus sensible que les populations np qui sont des sommes d'états de structure fine ($np_{1/2} + np_{3/2}$). Sur les populations np , l'effet du champ augmente avec le nombre quantique principal n .

- Dans le cas où un calcul de transport Classical Trajectory Monte Carlo (CTMC) est possible (projectile Ar^{17+}), cette méthode classique donne des résultats sensiblement identiques à ceux du modèle d'équation pilote, lui purement quantique, en ce qui concerne

l'évolution des populations np, mais présente des différences de comportement quant à l'évolution de la population de l'état de structure fine $2s_{1/2}$.

- Ayant acquis une bonne compréhension des phénomènes intervenant lors du transport proprement dit, nous sommes en mesure de tester les sections efficaces des processus peuplant initialement les états excités du projectile. Un calcul CDW décrit correctement la capture d'un électron dans les états np lors de la collision $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E=33,2$ MeV/A). Elle décrit très bien la capture en $2s_{1/2}$ pour le système $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ ($E=13,6$ MeV/A), mais sous-estime la capture en np pour ce système. A l'inverse, un calcul CTMC semble plus correct pour décrire la capture en np mais surestime la capture en 2s. Dans le cas de l'excitation, les méthodes PWBA et d'équations couplées donnent toutes les deux des résultats en accord avec l'expérience pour les populations np absolues.

L'évolution des populations relatives des sous états de la couche $n=3$ des systèmes $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E=33,2$ MeV/A) et $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ ($E=60$ MeV/A) présente de façon générale une meilleure sensibilité au champ de sillage. Le très bon accord observé lors de la comparaison expérience – théorie montre que le modèle d'équation pilote traite correctement le mélange Stark (prédominant à faibles épaisseurs de cible) d'une part, et le mélange collisionnel non cohérent (prédominant aux grandes épaisseurs) d'autre part. La bonne prise en compte de ces processus majoritaires s'avère suffisante pour bien décrire le transport de ces observables sur toute la gamme d'épaisseurs étudiée. De plus un calcul quantique s'appuyant sur une méthode de transport Monte Carlo qui décrit les mêmes phénomènes physiques mais d'une manière nettement différente mène à des résultats très proches, ce qui confirme la robustesse et la validité des développements théoriques. En ce qui concerne la comparaison quantitative expérience – théorie, un problème subsiste compte tenu de la grande sensibilité de nos observables aux valeurs des rapports de branchement qui pour un projectile krypton sont soumis à des effets relativistes. Nous avons pu néanmoins établir un certain nombre de résultats :

- En ce qui concerne le champ de sillage, nous avons établi que non seulement les électrons de valence mais aussi une partie des électrons de cœur de la cible sont impliqués dans l'onde de polarisation dynamique. De plus, la variation spatiale du champ à l'échelle des couches électroniques du projectile a été étudiée : la dépendance du champ par rapport au nombre quantique principal n de la couche est maîtrisée, mais nous pouvons mettre en doute la dépendance vis à vis des nombres quantiques ℓ et j .

- En ce qui concerne les conditions initiales du transport, nous avons vu que la théorie CDW semble décrire correctement les cohérences de capture lors de la collision $\text{Kr}^{36+} \rightarrow \text{C}$ ($E=33,2 \text{ MeV/A}$), tandis que les sections efficaces de capture en couche p pourraient être sous-estimées. Pour le processus d'excitation lors de la collision $\text{Kr}^{35+} \rightarrow \text{C}$ ($E=60 \text{ MeV/A}$), le calcul PWBA donne de très bons résultats pour prédire les populations mais les phases des cohérences données par un calcul d'équations couplées sont plus correctes.

Enfin, nous avons maintenant une bonne connaissance de la sensibilité de diverses observables vis à vis des processus intervenant dans le transport:

- la distribution d'états de charge peut être décrite correctement par un modèle purement collisionnel traitant peu d'états et sans aucun effet cohérent, comme le montrent les succès du code ETACHA (Rozet, Stéphan and Vernhet, 1996).

- l'évolution des états de Rydberg d'un ion hydrogénéoïde dans des cibles solides peut aussi être traitée dans le cadre d'un modèle purement collisionnel, mais il est important d'introduire un grand nombre d'états (par exemple, au moins jusqu'à $n=30$ pour la collision $\text{Ar}^{18+} \rightarrow \text{C}$ à $E=13,6 \text{ MeV/A}$).

- L'évolution des états np de cœur montre une sensibilité peu marquée au champ de sillage, essentiellement parce qu'il s'agit de la somme d'états de structure fine $np_{1/2}$ et $np_{3/2}$. Cette sensibilité augmente néanmoins à mesure que n augmente, et que le mélange Stark peut "vider" le niveau np au profit des autres niveaux n, ℓ .

- Enfin les états de structure fine montrent une grande sensibilité au champ de sillage, et sont donc des observables privilégiées pour mettre en évidence et caractériser l'écrantage dynamique du projectile par les électrons de la cible.

Nous avons effectué une expérience en mai 1999 auprès du GANIL sur le système Ar^{18+} à $13,6 \text{ MeV/A}$ en collision avec des cibles de carbone en phase solide et gazeuse (CH_4). Ce système (qui permet un recouvrement des données enregistrées lors d'une expérience antérieure (Lamour, 1997)) autorise entre autre une comparaison entre les traitements théoriques classiques et quantiques. Le travail effectué tant sur les systèmes de détection que sur la faisceaologie nous a permis de mesurer toutes les populations de structure fine de la couche $n=2$ de l'argon, les raies Lyman α héliumoïdes et les raies Lyman hydrogénéoïdes provenant des niveaux jusqu'à $n=12$. Nous attendons beaucoup de ces mesures puisque d'une part les états de structure fine montrent une grande sensibilité au champ de sillage, d'autre

part les états héliumoi des ont des écarts énergétiques et des termes de couplage au champ différents des états hydrogénoi des, et enfin on s'attend à pouvoir étudier le rôle spécifique des électrons externes des atomes de la cible *via* l'étude des populations n_p avec n grand. En particulier, on peut s'interroger sur l'effet de l'onde de polarisation sur les processus d'écrantage et d'antiécrantage intervenant lors des collisions. Enfin la mesure effectuée en cible gazeuse donnera une valeur expérimentale directe des conditions initiales en termes de populations. L'étude de ces nombreux résultats fera l'objet d'une thèse future.

D'un point de vue théorique, la comparaison dans le cadre de cette étude entre les approches classique et quantique reste d'actualité. Il s'agit de mieux définir les limites de validité du modèle classique ; en particulier, le problème concernant l'évolution de la population $2s_{1/2}$ dans le transport CTMC est-il dû à l'aspect classique du traitement ou pas ?

D'autre part, le développement de l'approche quantique Monte Carlo du transport est en cours, et il reste de nombreux aspects à vérifier et analyser. La confrontation de ce type d'approche avec nos modèles et nos expériences est intéressante pour bien des raisons :

- elle utilise une description des conditions initiales différente, ce qui enrichit la discussion à ce sujet.
- le transport est traité différemment : d'une part il contient tous les phénomènes collisionnels et dus au champ de sillage alors que dans notre modèle d'équation pilote nous avons choisi de traiter les processus prédominants, et nous pourrions en particulier étudier le rôle des cohérences collisionnelles. D'autre part, contrairement à ce qui est fait dans nos modèles, l'environnement d'un atome au sein du solide est pris en compte (de façon approchée) dans le potentiel utilisé pour décrire l'interaction de cet atome avec l'ion projectile. La comparaison des sections efficaces issues des deux approches pour tous les processus collisionnels devrait s'avérer riche d'enseignement. A titre d'exemple, on pourrait étudier l'effet de l'onde de polarisation dynamique sur les processus collisionnels (en particulier sur les termes d'écrantage et d'antiécrantage).

ANNEXE A

Calcul général des facteurs de forme pour les états liés d'un ion hydrogénéoï de (Dubé, 1998)

Nous cherchons à calculer numériquement

$$I_{fi}(\vec{K}) \equiv \int d\vec{r} \phi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \phi_i(\vec{r}) \quad (\text{A-1})$$

où f est l'état final (n', ℓ', m') centré sur la charge Z_p

i est l'état initial (n, ℓ, m) centré sur la charge Z_p

et $\phi(\vec{r})$ est une fonction d'onde propre hydrogénéoï de.

Il est commode de passer en coordonnées paraboliques, définies par (Bethe and Salpeter, 1977) :

$$\begin{cases} \xi = r + z \\ \eta = r - z \\ \varphi \end{cases} \quad (\text{A-2})$$

où $r = \|\vec{r}\|$, φ est l'azimut et z la coordonnée de l'axe de quantification.

On a alors

$$d\vec{r} = \frac{1}{4}(\xi + \eta) d\xi d\eta d\varphi. \quad (\text{A-3})$$

Le développement de chaque état (n, ℓ, m) sur les fonctions d'ondes paraboliques $\phi_{n_1 n_2 m}$ est :

$$\phi_{n\ell m}(\vec{r}) = \sum_{n_1=0}^{n-1-|m|} c_{n_1}(n, \ell, m) \phi_{n_1 n_2 m}(\vec{r}) \quad (\text{A-4})$$

où la relation $n_1 + n_2 = n - |m| - 1$ est toujours vérifiée, et les coefficients sont donnés par (Dubé, 1984) :

$$c_{n_1}(n, \ell, m) = (-1)^{n_1 + (|m| - m)/2} \sqrt{2\ell + 1} \begin{pmatrix} (n-1)/2 & (n-1)/2 & \ell \\ (n-1)/2 - n_1 & n_1 + |m| - (n-1)/2 & -|m| \end{pmatrix} \quad (\text{A-5})$$

Le calcul de $I_{\text{fi}}(\vec{K})$ se ramène donc à :

$$I_{\text{fi}}(\vec{K}) = \sum_{n'_1=0}^{n'-1-|m'|} c_{n'_1}(n', \ell', m') \sum_{n_1=0}^{n-1-|m|} c_{n_1}(n, \ell, m) G_{\text{fi}}(\vec{K}) \quad (\text{A-6})$$

avec

$$G_{\text{fi}}(\vec{K}) = \int d\vec{r} \phi_{n'_1, n'_2, m'}^*(\vec{r}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} \phi_{n_1, n_2, m}(\vec{r}) \quad (\text{A-7})$$

Pour calculer (A-7) on peut passer par une intégrale auxiliaire :

$$H_{\text{fi}}(\vec{K}, \lambda) \equiv \int d\vec{r} \phi_{n'_1, n'_2, m'}^*(\vec{r}) \frac{e^{(i\vec{K} \cdot \vec{r} - \lambda r)}}{r} \phi_{n_1, n_2, m}(\vec{r}) \quad (\text{A-8})$$

telle que

$$G_{\text{fi}}(\vec{K}) = - \left. \frac{\partial}{\partial \lambda} H_{\text{fi}}(\vec{K}, \lambda) \right|_{\lambda=0} \quad (\text{A-9})$$

Je ne donnerai pas plus d'étapes de calcul. Le résultat final est, après intégration (A-8) et dérivation par rapport à λ (A-9) :

$$G_{n'_1, n'_2, m'; n_1, n_2, m}(\vec{K}) = \frac{N_{n'_1, n'_2, m'} N_{n_1, n_2, m}}{2} C(\Delta m) \sum_{j=0}^{n'_2} \sum_{j=0}^{n_2} F_{j;j}(n'_2, n_2; \omega) \times \sum_{k=0}^{n'_1} \sum_{k=0}^{n_1} F_{k;k}(n'_1, n_1; \omega_1) (A + B) \quad (\text{A-10})$$

avec

$$N_{n_1, n_2, m} = \frac{Z_p^{\frac{3}{2} + |m|}}{\sqrt{\pi} n^{2 + |m|}} \left[\frac{n_1!}{(n_1 + |m|)!} \frac{n_2!}{(n_2 + |m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A-11})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} C(\Delta m) = 2\pi i^{|\Delta m|} e^{i\Delta m \varphi_K} \frac{2^{-|\Delta m|} K_{\text{ortho}}^{|\Delta m|}}{\Gamma(|\Delta m| + 1)} \\ \Delta m = m - m' \\ \varphi_K \text{ l'angle azimutal de } \vec{K} \\ \text{et } K_{\text{ortho}} \text{ la norme de la composante de } \vec{K} \text{ dans le plan orthogonal à l'axe de} \\ \text{quantification} \end{array} \right. \quad (\text{A-12})$$

$$\left\{ \begin{array}{l}
F_{j',j}(n',n;\omega) = a_{j'}(n',|m'|) a_j(n,|m|) \alpha_f^{j'} \alpha_i^j \frac{\Gamma(\mu+1+j'+j)}{\omega^{\mu+1+j'+j}} \\
a_j(n,|m|) = (-1)^j \frac{(n+|m|)!}{(n-j)!(|m|+j)!} \frac{1}{j!} \\
\alpha_i = \frac{Z_p}{n} \quad ; \quad \alpha_f = \frac{Z_p}{n'} \quad ; \quad \mu = \frac{|\Delta m| + |m| + |m'|}{2} = \sup(|m|, |m'|, |\Delta m|) \\
\omega = \frac{1}{2}(\alpha_i + \alpha_f + iK_{\text{para}}) \quad ; \quad \omega_1 = \omega^* + \frac{K_{\text{ortho}}^2}{4\omega} \\
\text{avec } K_{\text{para}} \text{ la composante de } \vec{K} \text{ suivant l'axe de quantification.}
\end{array} \right. \quad (\text{A-13})$$

$$\left\{ \begin{array}{l}
A = \frac{1}{2} \left[\frac{\mu+1+j'+j}{\omega} + \frac{\mu+1+k'+k}{\omega_1} \left(1 - \frac{K_{\text{ortho}}^2}{4\omega^2} \right) \right] \\
\quad \times {}_2F_1(|\Delta m| - \mu - j' - j, \mu + k' + k + 1, |\Delta m| + 1; X) \\
B = -\frac{1}{2} \left[\frac{(\alpha_i + \alpha_f)X}{\omega \omega_1} \frac{(\mu - |\Delta m| + j' + j)(\mu + k' + k + 1)}{|\Delta m| + 1} \right] \\
\quad \times {}_2F_1(|\Delta m| - \mu - j' - j + 1, \mu + k' + k + 2, |\Delta m| + 2; X) \\
{}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma; X) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_\ell (\beta)_\ell}{(\gamma)_\ell} \frac{X^\ell}{\ell!} \\
\text{qui est une s\u00e9rie hyperg\u00e9om\u00e9trique et un polyn\u00f4me si } \alpha \text{ ou } \beta \text{ est un entier} \\
\text{n\u00e9gatif} \\
(\alpha)_\ell = \frac{\Gamma(\alpha + \ell)}{\Gamma(\alpha)} = \alpha(\alpha+1)\dots(\alpha+\ell-1) \\
X = \frac{K_{\text{ortho}}^2}{4\omega \omega_1}
\end{array} \right. \quad (\text{A-14})$$

ANNEXE B

Résultats expérimentaux obtenus sur le projectile Kr³⁵⁺ (60 MeV/A)

Les incertitudes $\pm \Delta_{\text{épaisseur}}$ portées dans les tableaux suivants sont statistiques. Lors du passage sous faisceau, il apparaît en plus un épaissement systématique de $1\mu\text{g}/\text{cm}^2$.

Dans tous ces tableaux, l'astérisque signifie que cette épaisseur de cible est atteinte avec une cible plus fine, mais inclinée par rapport au plan perpendiculaire au faisceau.

◆ Spectromètre 750 mm et cible de carbone :

Epaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	$\Delta_{\text{épaisseur}}$ ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	$R_1 = \frac{\text{Ba}_2}{\text{Ba}_3}$	$\frac{\Delta R_1}{R_1}$ (%)	$R_2 = \frac{\text{Ba}_4}{\text{Ba}_1}$	$\frac{\Delta R_2}{R_2}$ (%)
3,2	0,25	0,094	18,7	0,836	2,7
7,0	0,26	0,125	20,0	0,756	4,9
7,0	0,26	0,105	16,9	0,837	3,6
9,9 *	0,36	0,108	6,7	0,817	2,4
14 *	0,51	0,108	6,8	0,870	2,4
15	0,66	0,105	6,3	0,847	2,3
21,6	1,2	0,106	3,3	0,857	1,4
22 *	0,98	0,118	3,1	0,891	1,7
32,3 *	1,8	0,101	4,1	0,840	2,2
35	5	0,112	4,1	0,887	2,2
46,6 *	7	0,108	3,7	0,882	2,2
77	3,7	0,111	5,2	0,923	4,1
111	4,3	0,116	4,5	1,00	3,6
166 *	6,4	0,128	4,3	1,16	3,6
200	10	0,121	3,5	1,19	2,6

Spectromètre 1200 mm et cible de carbone

Epaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	Δ épaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	$R_1 = \frac{\text{Ba}_2}{\text{Ba}_3}$	$\frac{\Delta R_1}{R_1}$ (%)
3,2	0,25	0,119	22
15	0,66	0,115	7,9
21,6	1,2	0,117	8,6
21,6	1,2	0,117	6,9
22 *	0,98	0,115	6,3
111	4,3	0,121	6,3
111	4,3	0,119	7,3
166 *	6,4	0,124	6,3
200	10	0,121	6,8

◆ Cible d'aluminium (spectromètre 750 seulement)

Epaisseur d'aluminium ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	Δ épaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	$R_1 = \frac{\text{Ba}_2}{\text{Ba}_3}$	$\frac{\Delta R_1}{R_1}$ (%)	$R_2 = \frac{\text{Ba}_4}{\text{Ba}_1}$	$\frac{\Delta R_2}{R_2}$ (%)
4,8 **	0,28	0,116	5,2	0,875	2,3
10,6 **	0,54	0,112	4,8	0,846	2,7
20,4 **	0,99	0,109	3,9	0,893	2,3
40,0	1,8	0,101	4,6	0,857	3,0
72,0	3,3	0,102	4,1	0,924	3,0
103 *	4,7	0,118	3,1	0,993	2,4

La double astérisque signifie que cette épaisseur d'aluminium est précédée de $13 \mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$ de carbone (cible non autosupportée).

◆ Jonction Si(Li) placée à 120° et cible de carbone :

Nombre d'X par ion pour les transitions **Lyman a** et **b** :

Epaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	Δ épaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	$N_{X/ion}^{\text{Ly } \alpha}$	$\frac{\Delta N_{X/ion}^{\text{Ly } \alpha}}{N_{X/ion}^{\text{Ly } \alpha}}$ (%)	$N_{X/ion}^{\text{Ly } \beta}$	$\frac{\Delta N_{X/ion}^{\text{Ly } \beta}}{N_{X/ion}^{\text{Ly } \beta}}$ (%)
3,2	0,25	$8,01 \text{ e}^{-4}$	7,0	$1,11 \text{ e}^{-4}$	6,0
7,0	0,26	$1,77 \text{ e}^{-3}$	6,7	$2,51 \text{ e}^{-4}$	7,6
7,0	0,26	$1,62 \text{ e}^{-3}$	7,0	$2,31 \text{ e}^{-4}$	8,0
7,0	0,26	$1,67 \text{ e}^{-3}$	7,0	$2,49 \text{ e}^{-4}$	8,0
15	0,66	$2,90 \text{ e}^{-3}$	6,4	$3,95 \text{ e}^{-4}$	7,6
21,6	1,2	$4,06 \text{ e}^{-3}$	7,0	$5,52 \text{ e}^{-4}$	8,0
22 *	0,98	$4,31 \text{ e}^{-3}$	7,0	$5,39 \text{ e}^{-4}$	8,0
32,3 *	1,8	$6,02 \text{ e}^{-3}$	7,0	$7,76 \text{ e}^{-4}$	9,0
35	5	$5,76 \text{ e}^{-3}$	6,5	$7,39 \text{ e}^{-4}$	7,7
46,6 *	7	$8,10 \text{ e}^{-3}$	8,0	$1,03 \text{ e}^{-3}$	9,0
77	3,7	$9,80 \text{ e}^{-3}$	8,0	$1,10 \text{ e}^{-3}$	9,0
111	4,3	$1,45 \text{ e}^{-2}$	8,0	$1,56 \text{ e}^{-3}$	9,0
166 *	6,4	$2,09 \text{ e}^{-2}$	26	$2,17 \text{ e}^{-3}$	31
200	10	$3,25 \text{ e}^{-2}$	8,0	$3,40 \text{ e}^{-3}$	10

◆ Jonction Si(Li) placée à 120° et cible de carbone :

Nombre d'X par ion pour les transitions **Lyman γ** et **d** :

Epaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	Δ épaisseur ($\mu\text{g}\cdot\text{cm}^{-2}$)	$N_{X/ion}^{\text{Ly } \gamma}$	$\frac{\Delta N_{X/ion}^{\text{Ly } \gamma}}{N_{X/ion}^{\text{Ly } \gamma}}$ (%)	$N_{X/ion}^{\text{Ly } \delta}$	$\frac{\Delta N_{X/ion}^{\text{Ly } \delta}}{N_{X/ion}^{\text{Ly } \delta}}$ (%)
3,2	0,25	$3,30 \text{ e}^{-5}$	16	$1,47 \text{ e}^{-5}$	18
7,0	0,26	$7,47 \text{ e}^{-5}$	10	$3,22 \text{ e}^{-5}$	17
7,0	0,26	$7,53 \text{ e}^{-5}$	14	$2,58 \text{ e}^{-5}$	19
7,0	0,26	$7,29 \text{ e}^{-5}$	14	$3,23 \text{ e}^{-5}$	19
15	0,66	$1,13 \text{ e}^{-4}$	9,6	$3,85 \text{ e}^{-5}$	18
21,6	1,2	$1,50 \text{ e}^{-4}$	12	$4,83 \text{ e}^{-5}$	19
22 *	0,98	$1,50 \text{ e}^{-4}$	12	$5,05 \text{ e}^{-5}$	19
32,3 *	1,8	$1,92 \text{ e}^{-4}$	14	$6,60 \text{ e}^{-5}$	15
35	5	$1,93 \text{ e}^{-4}$	11	$6,99 \text{ e}^{-5}$	19
46,6 *	7	$2,55 \text{ e}^{-4}$	14	$8,10 \text{ e}^{-5}$	19
77	3,7	$2,50 \text{ e}^{-4}$	14	$9,05 \text{ e}^{-5}$	19
111	4,3	$3,31 \text{ e}^{-4}$	14	$9,30 \text{ e}^{-5}$	19
166 *	6,4	$4,05 \text{ e}^{-4}$	36	$1,14 \text{ e}^{-4}$	41
200	10	$6,56 \text{ e}^{-4}$	14	$1,37 \text{ e}^{-4}$	23

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Adoui L. (1995). *"Mécanismes d'excitation d'ions Ar¹⁶⁺ en collision avec des cibles gazeuses à vitesse intermédiaire"*. Thèse de l'Université Paris VI, Paris, 324 p.
- Anholt R. (1985). *"Atomic collisions with relativistic heavy ions . II- Light-ion charge states"*. Phys. Rev. A **31**, 3579-3592.
- Anholt R., Stoller C., Molitoris J.D., Spooner D.W., Morenzoni E., Andriamonje S., Meyerhof W.E., Bowman H., Xu J.S., Xu Z.Z., Rasmussen J.O. and Hoffmann D.H.H. (1986). *"Atomic collisions with relativistic heavy ions. IV- Radiative processes"*. Phys. Rev. A **33**, 2270-2280.
- Arbo D.G., Reinhold C.O., Kürpick P., Yoshida S. and Burgdörfer J. (1999). *"Quantum transport theory for atomic states through solids"*. Phys. Rev. A **60**, 1091-1102.
- Ashburn J.R., Cline R.A., van der Burgt P.J.M., Westerveld W.B. and Risley J.S. (1990). *"Experimentally determined density matrice for H (n=3) formed in H⁺ - He collisions from 20 to 100 keV"*. Phys. Rev. A **41**, 2407-2421.
- Baron E. (1975). *"Contribution à l'étude des échanges de charge des ions lourds traversant les solides"*. Thèse d'Etat de l'Université Paris XI, Orsay, 95 p.
- Belkic D., Gayet R. and Salin A. (1979). *"Electron capture in high energy ion-atom collisions"*. Phys. Rep. **56**, 279-369.
- Bernhardt K., Hang E. and Wiesman K. (1983). *"Differential bremsstrahlung cross sections for collisions of electrons with unscreened nuclei of low atomic numbers"*. At. Data Nucl. Tables **28**, 461-475.
- Bethe H.A. and Salpeter E.E. (1977). *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms*. New York, Plenum/Rosetta Edition, Plenum Publishing Corporation.
- Betz H.D., Rösenthaller D. and Rothermel J. (1983). *"Production of highly excited states of fast ions emerging from solid targets"*. Phys. Rev. Lett. **50**, 34-37.
- Beuve M., Gervais B., Lamour E., Rozet J.P., Vernhet D. and Dubé L.J. (2000). *"On stochastic dynamics of hydrogenic ion transport through solids"*. Phys. Lett. A (sous presse).

-
- Biersack J.P. and Ziegler J.F. (1980). *"The stopping and range of ions in solids"*. in . ed. by J.F. Ziegler.
 - Blazevic A., Bohlen H.G. and von Oertzen W. (2000). *"Charge-state changing processes for Ne ions passing through thin carbon foils"*. Phys. Rev. A. **61**, 1-6.
 - Blum K. (1981). *Density Matrix Theory and Applications*. New York, Plenum, .
 - Bouisset P. (1986). *"Comparaison des états excités de Kr^{35+} (35 MeV/u) formés par capture électronique en cibles solides et gazeuses"*. Thèse de l'Université Paris XI, Orsay, 199 p.
 - Braithwaite W.J., Matthews D.L. and Moore C.F. (1975). *"Delayed X-ray emission in the Lyman and Lyman-like series of one and two-electron oxygen"*. Phys. Rev. A **11**, 465.
 - Bransden H.H. and McDowell M.R.C. (1992). *Charge exchange and the theory of ion-atom collisions*, Oxford Science Publications.
 - Breuer H.P., Huber W. and Petruccione F. (1997). *"Stochastic wave-function method versus density matrix : a numerical comparison"*. Computer Physics Communications **104**, 46-58.
 - Briggs J.S. and Dettmann K. (1974). *"Radiative charge transfer from H atoms by fast ions"*. Phys. Rev. Lett. **33**, 1123-1125.
 - Burgdörfer J. (1990). Collisionally induced stochastic dynamics of fast ions in solids, AIP Conf. Proc.
 - Burgdörfer J. (1993). *"Atomic collisions with surfaces"*. in Review of fundamental processes and applications of atoms and ions. ed. by C.D. Lin. Manhattan, World Scientific, 517-610.
 - Burgdörfer J. and Dubé L.J. (1984). *"Multiple-scattering approach to coherent excitation in electron-capture collisions"*. Phys. Rev. Lett. **52**, 2225-2228.
 - Can C., Maurer R.J., Bandong B. and Watson R.L. (1987). *"Investigation of the distribution (n,l) states populated by beam-foil excitation of 32 MeV"*. Phys. Rev. A **35**, 3244-3247.
 - Cheng S., Berry H.G., Dunford R.W., Gemmell D.S., Kanter E.P., Zabransky B.J., Livingston A.E., Curtis L.J., Bailley J. and Jr J.A.N. (1993). *"Branching ratio for the M1 decay of the $2^2S_{1/2}$ state in one-electron krypton"*. Phys. Rev. A **47**, 903-910.
 - Cheshire J.M. (1964). *"Continuum distorted wave approximation : resonant charge transfer by fast protons in atomic hydrogen"*. Proc. Phys. Soc. **84**, 89-98.

-
- Chetioui A., Rozet J.P., Vernhet D., Wohrer K. et Stéphan C. (1985). *"Ions multichargés et tests expérimentaux des effets à trois corps en collisions atomiques à moyenne et haute vitesse d'impact"*. Le Courrier du CNRS, Images de la Physique **Supplément au n°59**.
 - Chetioui A., Wohrer K., Rozet J.P., Jolly A., Stéphan C., Belkic D., Gayet R. and Salin A. (1983). *"State to state charge exchange cross sections in high velocity asymmetric and near symmetric collisions of 400 MeV Fe²⁶⁺ ions."* J.Phys.B : At. Mol. Phys. **16**, 3993-4003.
 - Cohen-Tannoudji C., Diu B. et Laloë F. (1977). *Mécanique Quantique*, Hermann.
 - Cohen-Tannoudji C., Dupont-Roc J. et Grynberg G. (1988). *Processus d'interaction entre photons et atomes*, Inter Editions/Editions du CNRS.
 - Cornille M. (1987). (communication privée)
 - Crothers D.S.F. and Dubé L.J. (1992). *"Continuum distorted wave methods in ion-atom collisions"*. Adv. At. Mol. Opt. Phys. **30**, 287-337.
 - Dalibard J., Castin Y. and Molmer K. (1992). *"Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics"*. Phys.Rev.Lett. **68**, 580-583.
 - Desclaux J.P. (1987). (communication privée)
 - Desclaux J.P. (1991). (communication privée)
 - Despiney I. (1994). *"Mélange cohérent et mélange collisionnel des états de structure fine d'ions lourds rapides en milieux condensés"*. Thèse de l'Université Paris VI, Paris, 244 p.
 - Drepper F. and Briggs J.S. (1976). *"Doubly differential cross sections for electron-loss in ion-atom collisions"*. J. Phys.B : At. Mol. Phys. **9**, 2063-2071.
 - Dubé L.J. (1984). *"Multiple-scattering approaches to the electron transfer process : I-Some calculable approximations"*. J. Phys. B : At. Mol. Phys **17**, 641-658.
 - Dubé L.J. (1998). (communication privée)
 - Dubé L.J., Despiney I, Rozet J.P. and Vernhet D. (1995). XIXth Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Whistler, ed. by J.B.A. Mitchell, J.W. McConkey, C.E. Brion, Vol. **2**, p.730.
 - Dydbal K., Sorensen J., Hvelplund P. and Knudsen H. (1986). *"Rydberg-state formation in fast ions penetration of carbon foils"*. Nucl. Instr. and Meth. B **13**, 581-586.

-
- Echenique P.M., Flores F. and Ritchie R.H. (1990). *"Dynamic screening of ions in condensed matter"*. in Solid State Physics. ed. by H. Ehrenreich and D. Turnbull. New York, Academic Press. **43**, 229.
 - Echenique P.M., Garcia de Abajo F.J., Ponce V.H. and Uranga M.E. (1995). *"Dynamic screening of ions in solids"*. Nucl. Instr. and Meth. B **96**, 583-603.
 - Fritsch W. (1993). *"Progress in atomic collision theory : the semiclassical close-coupling model and the physics it describes"*. in Review of fundamental processes and applications of atoms and ions. ed. by C.D. Lin. Manhattan, World-Scientific, 239-281.
 - Fritsch W. and Lin C.D. (1991). *"The semi-classical close-coupling description of atomic collisions : recent developments and results"*. Phys. Rep. **202**, 1-97.
 - Fuhr J.D., Ponce V.H., Garcia de Abajo F.J. and Echenique P.M. (1998). *"Dynamic screening of fast ions moving in solids"*. Phys. Rev. B **57**, 9329-9335.
 - GANIL (1992). Operation of the accelerator. Nouvelles du GANIL. **42**, 31-34.
 - Gauvin H., Bimbot R., Herault J., Anne R., Bastin G. and Hubert F. (1987). *"Stopping powers of solids for ^{16}O ions at intermediate energies (20-95 MeV/u)"*. Nucl. Instr. and Meth. B **28**, 192-194.
 - Gervais B. (2000). (communication privée)
 - Gervais B., Lamour E., Rozet J.P. and Vernhet D. (2001). *"Rydberg and core states production and transport in ion-solid collisions. Part II - theoretical aspects"*. (en préparation).
 - Hansen J.S., McGeorge J.C., Nix D., Schmidt-Oh W.D., Unus I. and Fink R.W. (1973). *"Accurate efficiency calibration and properties of semiconductor detectors for low energy photons"*. Nucl. Instr. and Meth. **106**, 365-.
 - Havener C.C., Rouze N., Westerveld W.B. and Risley J.S. (1986). *"Experimental determination of the density matrix describing collisionally produced H ($n=3$) atoms"*. Phys. Rev. A **33**, 276-293.
 - Hubbell J.H., Veigele W.J., Briggs E.A., Brown R.T., Cromer D.T. and Howerton R.J. (1975). *"Atomic form factors, incoherent scattering functions, and photon scattering cross sections"*. J. Phys. Chem. Ref. Data **4**, 471-538.

-
- Hubert F., Bimbot R. and Gauvin H. (1990). "*Range and stopping power tables for 2.5-500 MeV/nucleon heavy ions in solids*". *Atom. Data and Nucl. Data Tables* **46**, 1-213.
 - Jolly A., Wohrer K., Chetioui A., Rozet J.P., Stéphan C. and Dubé L.J. (1984). "*Total charge exchange cross sections for 400 MeV bare Fe^{26+} ions with He, N, Ne and Ar targets*". *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **17**, 235-242.
 - Kemmler J., Burgdörfer J. and Reinhold C.O. (1991). "*Theory of the l-state population of Rydberg states formed in ion-solid collisions*". *Phys. Rev. A* **44**, 2993-3000.
 - Kemmler J., Burgdörfer J. and Reinhold C.O. (1992). "*High l-state population in O^{7+} produced in ion-solid collisions*". *Nucl. Instr. and Meth. B* **67**, 168-171.
 - Kittel C. (1983). *Physique de l'état solide*. Paris, Dunod Université.
 - Lamour E. (1997). "*Production et transport des états excités du projectile en interaction ion-solide*". Thèse de l'Université de Caen, Caen, 274 p.
 - Lamour E., Vernhet D., Rozet J.P., Gervais B., Rothard H., Adoui L., Cassimi A., Chevalier M., Dauvergne D., Grandin J.P., Lelièvre D. and Wohrer K. (2001). "*Rydberg and core states production and transport in pre-equilibrium ion-solid collisions. Part I : Experiments*". (en préparation).
 - Lindhard J. and Scharff M. (1953). "*Energy loss in matter by fast particles of low charge*". *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **27**.
 - Martin F. (1998). (communication privée)
 - McDowell M.R.C. and Coleman J.P. (1970). *Introduction to the theory of ion-atom collisions*. Amsterdam, North Holland.
 - McGuire J.H., Stolterfoht N. and Simony P.R. (1981). "*Screening and antiscreening by projectile electrons in high-velocity atomic collisions*". *Phys.Rev.A* **24**, 97-102.
 - Messiah A. (1962). *Mécanique Quantique*. Paris, Dunod.
 - Minchole J.L., Ugalde J.M. and Echenique P.M. (1990). "*Dynamic screening of swift hydrogenlike ions moving in condensed matter*". *Nucl. Instr. and Meth. B* **48**, 21-24.
 - Moneta M., Gwizdalla T., Czerniak J., Wojtczak L. and Kaneko T. (1992). "*Wake potential of an ion in a solid*". *Nucl. Instr. and Meth. B* **69**, 146-149.

-
- Montenegro E.C. and Zouros T.J.M. (1994). *"Relationship between the Born and impulse approximation for the antiscreening process"*. Phys. Rev. A **50**, 3186-3191.
 - Neufeld J. and Ritchie R.H. (1955). *"Passage of charged particles through plasmas"*. Phys. Rev. **98**, 1125.
 - Nicolaï P. (1990). *"Processus de capture d'électrons en milieux condensés"*. Thèse de l'Université Paris 7, Paris, 206 p.
 - Nicolaï P., Chabot M., Rozet J.P., Politis M.F., Chetioui A., Stéphan C., Touati A., Vernhet D. and Wohrer K. (1990). *"Contribution of intrashell excitation to the l mixing of excited states of one-electron ions in solids"*. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **23**, 3609-3627.
 - Omidvar K. (1983). *"Transition probabilities and branching ratios for electric-dipole transitions between arbitrary levels of hydrogen-like atoms"*. Atom. Data and Nucl. Data Tables **28**, 1-20.
 - Pal'chikov V.G. (1998). *"Relativistic transition probabilities and oscillator strengths in hydrogen-like atoms"*. Phys. Scripta **57**, 581-593.
 - Piquemal P. (1984). *"Etude du processus de capture dans les états de Rydberg d'ions multichargés en collisions de haute vitesse"*. Thèse de l'Université Paris VI, Paris, 132 p.
 - Ponce V.H. (1998). (communication privée)
 - Powell C.J. (1960). *"The origin of the characteristic electron energy losses in ten elements"*. Proc. Phys. Soc. **76**, 593-610.
 - Reading J.F., Ford A.L. and Becker R.L. (1981). *"A new atomic orbital method for ion-atom excitation"*. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **14**, 1995-2012.
 - Reading J.F., Hall K.A., Neves A.P. and Ford A.L. (1996). *"An analytic theory of inclusive high-energy atomic reaction cross sections"*. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **29**, 2529-2541.
 - Reinhold C.O., Arbo D.G., Burgdörfer J., Gervais B., Lamour E., Vernhet D. and Rozet J.P. (2000). *"Enhanced population of high-l states due to the interplay between multiple scattering and dynamical screening in ion-solid collisions"*. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **33**, L111-L117.
 - Richard P. (1973). *"Cascading through the $^1P_1(1s)(2p)$ state of fluorine"*. Phys. Lett. A **45A**, 13-14.

-
- Röschenhaler D., Betz H.D., Rothermel J. and Jakubassa-Amundsen D.H. (1983). *"Ionisation of fast Rydberg ions in collision with target atoms"*. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **16**, L233-237.
 - Rothermel J., Betz H.D., Bell F. and Zacek V. (1982). *"Foil excited Rydberg states of fast oxygen and sulfur ions"*. Nucl. Instr. and Meth. **194**, 341-343.
 - Rozet J.P. (1995). (communication privée). Courbes établies à partir de calculs théoriques dans la région des hautes vitesses (PWBA pour l'excitation et l'ionisation, CDW pour la capture), et d'une compilation de données expérimentales dans le domaine des vitesses basses et intermédiaires.
 - Rozet J.P., Chetioui A., Piquemal P., Vernhet D., Wohrer K., Stéphan C. and Tassan-Got L. (1989). *"Charge state distributions of few electron ions deduced from atomic cross sections"*. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **22**, 33-48.
 - Rozet J.P., Chevallier P., Legagneux-Piquemal P., Chetioui A. and Stéphan C. (1985). *"Capture cross sections in highly excited states of Ar^{18+} in high velocity collisions of 250 MeV Ar^{18+} on N"*. J. Phys. B : At. Mol. Phys. **18**, 943.
 - Rozet J.P., Stéphan C. and Vernhet D. (1996). *"ETACHA : a program for calculating charge states at GANIL energies"*. Nucl. Instr. and Meth B **107**, 67-70.
 - Rozet J.P., Vernhet D., Bailly-Despiney I., Fourment C. and Dubé L.J. (1999). *"Dynamical substate mixing of fast ions in solids : a density matrix approach"*. J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **32**, 4677-4696.
 - Veigele J., Briggs E., Bates L., Henry E.M. and Bracewell B. (1971). *"X-ray cross section compilation from 0,1 keV to 1 MeV"*. DNA **1**, 2433 F.
 - Vernhet D. (1990). *"Distribution et anisotropie de moments cinétiques de capture pour des collisions d'ions multichargés de basse vitesse"*. Thèse d'Etat de l'Université Paris VI, Paris, 384 p.
 - Vernhet D., Adoui L., Rozet J.P., Wohrer K., Chetioui A., Cassimi A., Grandin J.P., Ramillon J.M., Cornille M. and Stéphan C. (1997). *"Multielectron processes in heavy ion-atom collisions at intermediate velocity"*. Phys. Rev. Letters **79**, 3625-3628.

-
- Vernhet D., Fourment C., Lamour E., Rozet J.P., Gervais B., Dubé L.J., Martin F., Minami T., Reinhold C.O., Seliger M. and Burgdörfer J. (2001). "*Transport of Kr³⁵⁺ inner-shells through solid carbon foils*". Phys. Script. T, soumis juillet 2000.
 - Vernhet D., Rozet J.P., Bailly-Despiney I., Stéphan C., Cassimi A., Grandin J.P. and Dubé L.J. (1998). "*Observation of dynamical substate mixing of fast ions in solids*". J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **31**, 117-129.
 - Vernhet D., Rozet J.P., Lamour E., Gervais B. and Dubé L.J. (1999). Dynamical and collisional approaches to the transport of core and Rydberg projectile states in solids. XXIst Int. Conf. on the Physics of Electronic and Atomic Collisions, Sendai.
 - Vernhet D., Rozet J.P., Lamour E., Gervais B. and Dubé L.J. (2000). "*Dynamical and collisional approaches to the transport of core and Rydberg projectiles excited states in solids*". in The Physics of Electronic and Atomic Collisions. ed. by Y. Itikawa et al., AIP Conf. Proc. **500**, 666.
 - Vernhet D., Rozet J.P., Lamour E., Gervais B., Fourment C. and Dubé L.J. (1999). "*Core and Rydberg state populations for HCl projectiles in solids*". Phys. Script. **T80A**, 83-86.
 - Vrinceanu D. and Flannery M.R. (1999). "*Classical and quantal atomic form factors for arbitrary transitions*". Phys. Rev. A **60**, 1053-1069.
 - Wohrer K. (1984). "*Ions multichargés et processus collisionnels à perturbation variable ; le cas des hautes vitesses*". Thèse d'Etat, Paris, 306 p.
 - Ziegler J.F., Biersach J.P. and Littmark U. (1985). *The stopping and range of ions in solids*. New York, Pergamon.