



**HAL**  
open science

## Transfert de charge muonique

Arnaud Dupays

► **To cite this version:**

Arnaud Dupays. Transfert de charge muonique. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2004. Français. NNT: . tel-00006442

**HAL Id: tel-00006442**

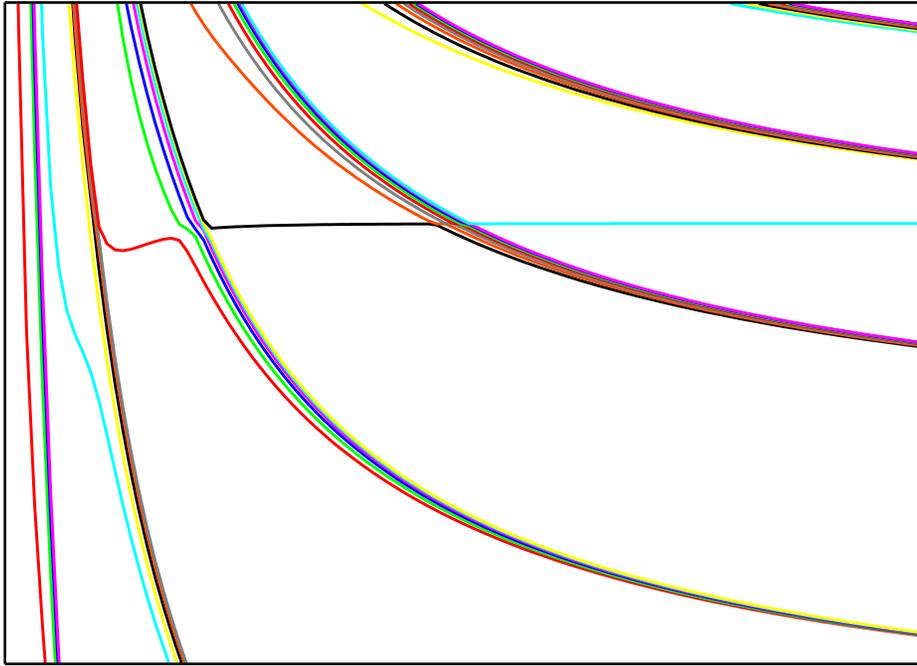
**<https://theses.hal.science/tel-00006442>**

Submitted on 12 Jul 2004

**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.

# Transfert de charge muonique



Arnaud Dupays

2004



# Transfert de charge muonique

Arnaud Dupays



# Transfert de charge muonique

LABORATOIRE COLLISIONS, AGRÉGATS, RÉACTIVITÉ

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PAUL SABATIER  
TOULOUSE III

spécialité : Physique Atomique

présentée par  
Arnaud Dupays

pour obtenir le titre de  
Docteur de l'Université Paul Sabatier

Sujet de la thèse :

TRANSFERT DE CHARGE MUONIQUE

Soutenue le 18 juin 2004 devant le jury composé de :

M. J. M. LAUNAY	Rapporteur
M. D. TAQQU	Rapporteur
M. O. RONCERO	
M. D. BAKALOV	
M. B. LEPETIT	
M. J. A. BESWICK	Directeur de thèse
M. C. RIZZO	Directeur de thèse



- *“Would you tell me, please, which way I ought to go from here?”*
- *“That depends a good deal on where you want to get to”, said the cat.*
- *“I don’t much care where ...”, said Alice,*
- *“Then it doesn’t matter which way you go”, said the cat,*
- *“... so long as get somewhere”, Alice added as an explanation.*
- *“Oh, you’re sure to do that”, said the cat,*  
*“if only you walk long enough...”*

*Alice in wonderland, Lewis Carrol*



# Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier l'ensemble du personnel du laboratoire Collisions Agrégats et Réactivité de toulouse, et particulièrement son directeur Jacques Vigué, pour leur accueil chaleureux.

Je remercie ensuite Jean-Michel Launay et David Taquq d'avoir accepté d'être rapporteurs de mon travail. Merci également à Octavio Roncero d'avoir fait partie des membres du jury.

Durant ces trois années j'ai eu la chance de travailler avec Alberto Beswick et Carlo Rizzo, mes deux directeurs de thèse, mais aussi avec Bruno Lepetit et Dimitar Bakalov. A ces quatre amis, je suis sincèrement reconnaissant pour l'ensemble des apports scientifiques et humains, qu'ils ont su m'apporter.

Merci enfin à Christoph Meier pour nos fructueuses discussions et à Marie-France Rolland et Agnès Cloutour, pour leur disponibilité et leur gentillesse.



# Table des matières

<b>Remerciements</b>	<b>5</b>
<b>Préface</b>	<b>11</b>
<b>1 Le muon et les atomes muoniques</b>	<b>13</b>
1.1 Le muon . . . . .	13
1.1.1 Présentation . . . . .	13
1.1.2 Le muon à l'état naturel . . . . .	14
1.1.3 Le muon en laboratoire . . . . .	14
1.1.4 Le moment magnétique anomal du muon . . . . .	14
1.2 Les atomes muoniques . . . . .	15
1.2.1 Formation . . . . .	15
1.2.2 Principales caractéristiques . . . . .	16
1.2.3 L'hydrogène muonique . . . . .	17
1.3 La fusion froide catalysée par muons . . . . .	18
<b>2 Rayon de Zemach du proton</b>	<b>21</b>
2.1 Structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène . . .	21
2.1.1 Cas du proton sans structure interne . . . . .	22
2.1.2 Séparation hyperfine de Fermi . . . . .	23
2.1.3 Correction de Zemach . . . . .	24
2.1.4 Fonction d'onde corrigée . . . . .	24
2.1.5 Rayon de Zemach . . . . .	26
2.2 Détermination du rayon de Zemach . . . . .	27
2.2.1 Formulation perturbative de $\Delta E_{hf}^{th}$ . . . . .	27
2.2.2 Ordres de grandeur et incertitudes . . . . .	28
2.2.3 Bilan . . . . .	28
2.2.4 Conséquences sur les modèles théoriques de structure interne .	29
2.3 Utilité d'une mesure avec l'hydrogène muonique . . . . .	30
2.3.1 Structure hyperfine de l'hydrogène muonique . . . . .	30
2.3.2 Interêt de la mesure . . . . .	31

<b>3</b>	<b>Expérience proposée</b>	<b>33</b>
3.1	Etude expérimentale du transfert muonique . . . . .	33
3.1.1	Description des processus mis en jeu . . . . .	33
3.1.2	Analyse du spectre de rayons X . . . . .	34
3.1.3	Quelques définitions préliminaires . . . . .	35
3.1.4	Intensité du spectre . . . . .	35
3.1.5	Cas de l'oxygène . . . . .	36
3.1.6	Origine physique des $(p\mu)$ non thermalisés . . . . .	36
3.1.7	Modèle à deux composantes . . . . .	37
3.2	Expérience proposée . . . . .	38
3.2.1	Mode opératoire . . . . .	38
3.3	Nécessité d'une étude théorique du transfert muonique . . . . .	39
<b>4</b>	<b>Modèle colinéaire</b>	<b>41</b>
4.1	Description du processus de transfert . . . . .	41
4.1.1	Modèle théorique . . . . .	41
4.1.2	Paramétrisation du système . . . . .	42
4.1.3	Description qualitative du transfert . . . . .	43
4.2	Méthode numérique utilisée . . . . .	45
4.3	Hamiltonien en coordonnées hypersphériques . . . . .	45
4.3.1	Coordonnées hypersphériques . . . . .	45
4.3.2	Equation de Schrödinger . . . . .	48
4.4	Calcul des états adiabatiques . . . . .	48
4.4.1	Equations couplées . . . . .	48
4.4.2	Base adiabatique . . . . .	49
4.5	Intégration des équations couplées . . . . .	53
4.6	Analyse asymptotique . . . . .	54
4.7	Résultats et discussion . . . . .	55
4.7.1	Modèle Landau-Zener . . . . .	56
4.7.2	Comportement à basse énergie . . . . .	57
4.7.3	Vers un modèle tridimensionnel . . . . .	58
4.7.4	Taux de transfert . . . . .	59
4.8	Conclusion . . . . .	61
<b>5</b>	<b>Calcul 3D : méthode</b>	<b>63</b>
5.1	Paramétrisation du système . . . . .	64
5.1.1	Coordonnées de Jacobi . . . . .	64
5.1.2	Référentiel <i>Body-Fixed</i> (BF) . . . . .	66
5.1.3	Coordonnées hypersphériques de Delves . . . . .	67
5.1.4	Passage aux coordonnées hypersphériques elliptiques . . . . .	67
5.2	Hamiltonien . . . . .	68
5.3	Base adiabatique . . . . .	73
5.3.1	Fonction d'onde interne . . . . .	73

5.3.2	Etats adiabatiques . . . . .	74
5.4	Analyse asymptotique . . . . .	76
<b>6</b>	<b>Calcul 3D : résultats et discussion</b>	<b>79</b>
6.1	Taux de transfert . . . . .	79
6.2	Cas de l'oxygène . . . . .	80
6.2.1	Canaux couplés et approximation du découplage centrifuge . .	80
6.2.2	Analyse des états adiabatiques $J = 0$ . . . . .	81
6.2.3	Probabilité de transfert $J = 0$ . . . . .	84
6.2.4	Populations des états produits . . . . .	85
6.2.5	Taux de transfert . . . . .	87
6.2.6	Discussion . . . . .	88
6.2.7	Faisabilité de l'expérience avec l'oxygène . . . . .	89
6.3	Cas du néon . . . . .	90
6.3.1	Taux de transfert . . . . .	90
6.3.2	Discussion . . . . .	91
6.4	Conclusion . . . . .	93
<b>7</b>	<b>Effets isotopiques</b>	<b>95</b>
7.1	Cas de l'azote . . . . .	95
7.2	Cas du néon . . . . .	97
7.3	Cas de l'oxygène . . . . .	98
7.4	Discussion . . . . .	99
	<b>Conclusion</b>	<b>103</b>
<b>A</b>	<b>Fonction de Green</b>	<b>105</b>
A.1	Définition . . . . .	105
A.2	Expression . . . . .	105
A.3	Expression intégrale de l'équation aux valeurs propres . . . . .	106
<b>B</b>	<b>Expression du rayon de Zemach</b>	<b>107</b>
B.1	Expression intégrale . . . . .	107
B.1.1	Facteurs de forme . . . . .	107
B.1.2	Rayon de Zemach . . . . .	107
B.2	Démonstration . . . . .	108
<b>C</b>	<b>Expression des opérateurs aux dérivées partielles</b>	<b>111</b>
C.1	Coordonnées hypersphériques . . . . .	111
C.2	Dérivée seconde par rapport à $R_1$ . . . . .	111
C.3	Dérivée seconde par rapport à $r_1$ . . . . .	112

<b>D Fonctions de Legendre associées</b>	<b>113</b>
D.1 Définition . . . . .	113
D.2 Propriétés . . . . .	113
D.2.1 Orthogonalité . . . . .	113
D.2.2 Parité . . . . .	113
D.2.3 Relations de récurrence . . . . .	114
<b>E Utilisation mixte FBR-DVR</b>	<b>115</b>
E.1 FBR . . . . .	115
E.2 Méthode mixte FBR-DVR . . . . .	116
E.2.1 La base DVR . . . . .	116
E.2.2 Quelques propriétés . . . . .	117
E.2.3 Expression mixte . . . . .	118
<b>F Quadratures Gaussiennes</b>	<b>119</b>
F.1 Position du problème . . . . .	119
F.2 Approche qualitative . . . . .	119
F.3 Exemples de quadratures Gaussiennes . . . . .	121
<b>G Méthode de de Vogelaere</b>	<b>123</b>
<b>H Potentiel asymptotique</b>	<b>125</b>
H.1 Modèle colinéaire . . . . .	125
H.2 Cas tridimensionnel . . . . .	127
H.2.1 Etats paraboliques . . . . .	127
H.2.2 Potentiel asymptotique . . . . .	128
<b>I Tenseur métrique</b>	<b>129</b>
I.1 Formule de Podolsky . . . . .	129
I.1.1 Energie cinétique classique . . . . .	129
I.1.2 Energie cinétique quantique . . . . .	130
I.1.3 Changement de coordonnées curvilignes . . . . .	131
I.2 Tenseur métrique des coordonnées hypersphériques elliptiques . . . . .	131
I.3 Passage par les coordonnées de Jacobi . . . . .	135
<b>J Base des fonctions de Legendre</b>	<b>139</b>
J.1 Opérateur $\hat{D}_{\bar{\Omega}}(u)$ . . . . .	139
J.2 Similitude avec les fonctions de Legendre . . . . .	139
<b>Listes des publications</b>	<b>143</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>145</b>

# Préface

Le transfert de muon entre un atome exotique (par exemple l'hydrogène muonique) et un autre atome ou une autre molécule, a été intensivement étudié dans le cadre de la *fusion nucléaire froide catalysée par muon* (voir la référence [1] et la littérature citée). L'analyse des résultats expérimentaux obtenus sur l'oxygène, a conduit A. Werthmüller *et al.* [2] à proposer un modèle selon lequel le taux de transfert muonique sur l'oxygène depuis l'hydrogène muonique, augmente d'un facteur 3 ou 4 lorsque l'énergie de collision passe de 0.04 eV (énergie thermique) à environ 0.2 eV (on parle alors d'énergie épithermique). Très récemment, A. Adamczak *et al.* ont eu l'idée de mettre à profit cette dépendance pour mesurer la structure hyperfine de l'hydrogène muonique [3].

Cependant jusqu'ici, aucune des études théoriques réalisées (qui utilisaient toutes des méthodes approchées) n'a confirmé l'augmentation prévue aux énergies épithermiques [4, 5, 6]. De plus, les expériences avec d'autres espèces comme le soufre [7] ou le méthane (CH<sub>4</sub>) [8] montrent même une décroissance du taux de transfert dans le domaine d'énergies considéré : *l'oxygène aurait-il alors un comportement singulier ?*

Pour répondre à cette question, il apparaissait nécessaire de réaliser un calcul précis permettant d'analyser le comportement du taux de transfert en fonction de l'énergie de collision. C'est cette étude qui a constitué l'essentiel de mon travail de thèse.

Les trois premiers chapitres de ce manuscrit sont consacrés à la présentation du problème que nous avons considéré. Après un aperçu de la physique muonique (chapitre 1), nous verrons l'intérêt que présente la mesure de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique (chapitre 2), puis nous détaillerons l'expérience proposée pour réaliser cette mesure (chapitre 3). Dans les chapitres suivants, nous présenterons les résultats obtenus sur le transfert de muon. Le chapitre 4 sera consacré à un modèle colinéaire alors que les chapitres 5 et 6 exposeront respectivement la méthode et les résultats du calcul complet. Comme nous le verrons, ce calcul nous a permis de statuer sur la faisabilité de l'expérience envisagée avec l'oxygène. Pour finir, nous présenterons une étude complémentaire sur les effets isotopiques qui apparaissent dans le transfert muonique (chapitre 7).



# Chapitre 1

## Le muon et les atomes muoniques

Habituellement, le terme *atome* désigne un système lié constitué d'un noyau en interaction électromagnétique avec un nuage électronique. Lorsqu'un ou plusieurs électrons, ou le noyau, sont remplacés par une autre particule, on obtient ce qu'on appelle un atome *exotique*. On parle d'atome *muonique* lorsqu'un électron d'un atome est remplacé par un muon. La physique muonique, qui constitue le cadre de notre étude théorique, comprend l'étude des atomes et molécules muoniques ainsi que leurs interactions mutuelles ou avec d'autres systèmes.

Ce premier chapitre est donc consacré à une présentation des principaux acteurs de la physique muonique : le muon et les atomes muoniques.

### 1.1 Le muon

#### 1.1.1 Présentation

Découvert en 1937 par Anderson et Blackett dans le rayonnement cosmique, le muon est une particule élémentaire de la famille des leptons. Fermion insensible aux interactions nucléaires fortes et dépourvu de structure interne, le muon est parfois appelé *électron lourd*. En effet, il ne se distingue de l'électron que par sa masse qui est environ 206.76 fois celle de ce dernier. Le muon possède donc la même charge ( $q_\mu = q_e = 1.602\,177\,10^{-19}$  C) et le même spin ( $S = 1/2$ ) que l'électron.

Du fait de sa masse importante, le muon est une particule instable qui se désintègre en un électron et deux neutrinos suivant la réaction :

$$\mu \rightarrow e + \bar{\nu}_e + \nu_\mu \tag{1.1}$$

où  $\bar{\nu}_e$  et  $\nu_\mu$  sont respectivement un anti-neutrino électronique et un neutrino muonique. La durée de vie du muon  $\tau$  dans son référentiel propre est d'environ  $2.2\,10^{-6}$  s [9].

### 1.1.2 Le muon à l'état naturel

Les muons, qui bombardent naturellement la surface de la terre, résultent de l'interaction de protons de haute énergie provenant du rayonnement cosmique, avec l'atmosphère terrestre. Ils sont créés à une soixantaine de kilomètres d'altitude avec une vitesse proche de celle de la lumière. A cette vitesse, leur durée de vie devrait leur permettre de parcourir une distance de l'ordre de  $\tau.c \sim 600$  m. Il ne devrait donc rester au sol qu'une fraction négligeable de la population initialement formée dans la haute atmosphère. Pourtant, le muon est l'une des plus nombreuses particules chargées présentes au niveau de la mer. A cette altitude, on mesure en effet un flux d'environ  $10^4$  muons par  $m^2$  et par minute. Cela s'explique en tenant compte de la dilatation des temps prévue par la théorie de la relativité restreinte. Ainsi, de notre point de vue d'observateur immobile à la surface de la terre, le muon vit en fait 2 ms et peut parcourir environ 600 km avant de se désintégrer<sup>1</sup>.

Notons enfin que la grande énergie des ces particules ( $\sim 4$  GeV) rend leur interaction avec la matière très peu efficace : le bombardement muonique est donc inoffensif pour l'homme.

### 1.1.3 Le muon en laboratoire

En laboratoire, les muons sont créés en réalisant des collisions inélastiques de haute énergie proton-proton. Au cours de ces collisions, des *pions*  $\pi^+$ ,  $\pi^-$  sont produits selon les réactions :

$$p + p \rightarrow \begin{cases} p + p + \pi^- + \pi^+ + \dots \\ p + n + \pi^+ + \dots \end{cases} \quad (1.2)$$

Les pions, qui sont des particules chargées, sont ensuite séparées à l'aide d'un champ magnétique. A cause de l'interaction faible, les pions  $\pi^-$  se désintègrent très rapidement ( $\tau \sim 10^{-8}$  s) en muon selon :

$$\pi^- \rightarrow \mu + \nu_\mu \quad (1.3)$$

Les muons ainsi obtenus peuvent alors être ralentis et envoyés sur une cible d'atomes pour former des atomes muoniques. C'est sur ce principe que des faisceaux de muons sont par exemple produits au Paul Scherrer Institut de Villigen (PSI), laboratoire où ont été obtenus la quasi totalité des résultats expérimentaux que nous allons présenter dans cette thèse.

### 1.1.4 Le moment magnétique anomal du muon

Toute particule de spin  $\mathbf{S}$  possède un moment magnétique  $\mu$  qui peut se mettre sous la forme :

$$\mu = g \left( \frac{q}{2mc} \right) \mathbf{S} \quad (1.4)$$

---

<sup>1</sup>La vérification expérimentale de ce phénomène a d'ailleurs constitué l'un des premiers tests importants de la théorie de la relativité d'Einstein [10].

où  $q$  est la charge électrique de la particule,  $m$  sa masse et  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide.  $g$  est appelé le facteur de Landé. En 1928, Dirac, à l'aide de l'équation relativiste qui porte son nom, calcule que pour les particules de spin  $1/2$ ,  $g = 2$  [11]. En 1948, Kusch et Foley [12] mesurent que pour l'électron  $g = 2(1.00119 \pm 0.00005)$  et découvrent alors ce que l'on appelle le *moment magnétique anomal* de l'électron. La déviation du facteur de Landé par rapport à la valeur prédite par Dirac est souvent exprimée sous la forme :

$$a = \left( \frac{g - 2}{2} \right) \quad (1.5)$$

Actuellement, les calculs d'électrodynamique quantique (QED) permettent de bien comprendre cette anomalie pour l'électron en tenant compte des effets de polarisation du vide.

Comme pour l'électron, une déviation du facteur de Landé a pu être mise en évidence pour le muon. Les premières mesures de  $a_\mu$  furent réalisées au CERN (Centre Européen de Recherche Nucléaire) en 1965 [13]. Les résultats expérimentaux les plus récents obtenus au BNL (Brookhaven National Lab) donnent [14] :

$$a_\mu^{exp} = 1\,165\,920.2\,10^{-9} \quad (1.6)$$

avec une erreur de 1.34 ppm. Actuellement, les prévisions théoriques diffèrent de  $(3.7 \pm 1.4)$  ppm avec la valeur expérimentale [15]. La raison de ce désaccord reste aujourd'hui une question ouverte qui suscite l'intérêt de toute la communauté des physiciens des particules. En effet, si les calculs théoriques menés dans le cadre du Modèle Standard (SM) s'avèrent corrects et suffisamment précis, il faudra alors proposer une théorie plus complète pour expliquer ce phénomène. Dans cette voie, la théorie de la super symétrie [16] permet de bien rendre compte des données expérimentales. Cependant ces calculs sont menés en postulant l'existence de nouvelles particules dans le vide quantique qu'il reste à prouver et à explorer plus précisément.

## 1.2 Les atomes muoniques

### 1.2.1 Formation

Pour former des atomes muoniques (voir figure (1.1)), on bombarde un gaz atomique par un jet de muons préalablement refroidis. L'interaction avec les électrons des atomes ralentit le muon dans le gaz alors que des électrons seront éjectés des atomes. Finalement, lorsqu'il sera suffisamment lent, le muon pourra être capturé par un noyau atomique et former un état lié muonique avec celui-ci. L'orbite de capture du muon correspond à un état très excité de l'atome muonique. Dans un premier temps, l'atome muonique se désexcite suivant un processus de transfert d'énergie entre le muon et des électrons situés sur des niveaux inférieurs, provoquant ainsi l'émission d'électrons Auger. Il atteint ensuite son état fondamental par transitions radiatives (émission  $\gamma$ ).

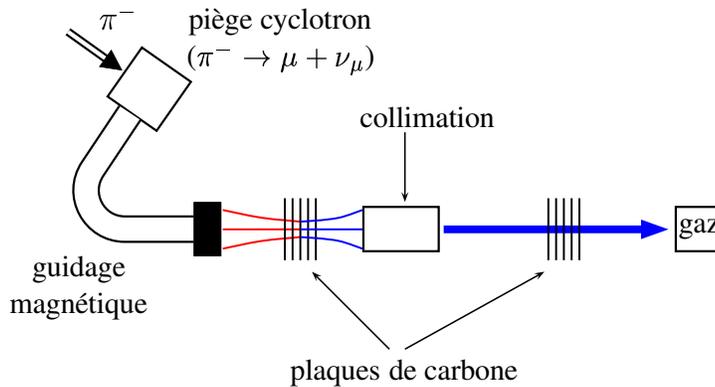


FIG. 1.1 – Principe de production d’atomes muoniques en laboratoire.

### 1.2.2 Principales caractéristiques

Dans un atome hydrogénoïde formé d’électrons en interaction Coulombienne avec un noyau de numéro atomique  $Z$ , le rayon moyen d’une orbite électronique  $(n, l)$  est approximativement donné par [17] :

$$\bar{r}_{n,l} = \frac{\hbar^2}{2Zm_e e^2} (3n^2 - l(l+1)) \quad (1.7)$$

où  $e^2 = q_e^2/4\pi\epsilon_0$ . Ce rayon est donc inversement proportionnel à la masse de l’électron. En remplaçant la masse de l’électron par celle du muon dans la formule ci-dessus, on voit que dans un atome muonique le muon est environ 207 fois plus proche du noyau que ne l’est un électron dans un atome classique. La probabilité de présence du muon à l’intérieur de la distribution nucléaire peut même être très importante pour des atomes de  $Z$  élevés<sup>2</sup>. Le muon est alors très sensible à la distribution de charge des noyaux ainsi qu’à leur déformation. L’étude spectroscopique des atomes muoniques permet donc d’étudier la structure interne des noyaux en utilisant le muon comme une sonde nucléaire.

De même, on peut montrer que l’énergie des niveaux électroniques d’un atome est donnée par :

$$E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (1.8)$$

Ainsi, les énergies des états liés d’un atome muonique seront 207 fois plus élevées que celles des niveaux électroniques similaires.

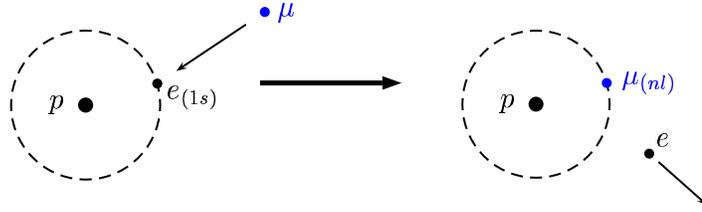


FIG. 1.2 – Formation de l'hydrogène muonique.

### 1.2.3 L'hydrogène muonique

Sur la figure (1.2) nous avons schématisé la capture d'un muon par un atome d'hydrogène dans son état fondamental. Le muon vient se placer sur l'orbite de nombre quantique principal  $n$  correspondant à l'énergie de l'électron éjecté. On peut donc écrire d'après (1.8) :

$$\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \simeq \frac{m_\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (1.9)$$

où  $m_e$  et  $m_\mu$  sont respectivement la masse de l'électron et celle du muon, et  $\alpha$  la constante de structure fine. Il vient donc :

$$n = \sqrt{\frac{m_\mu}{m_e}} \sim 14 \quad (1.10)$$

Par désexcitation radiative, l'hydrogène muonique formé retombe dans son état fondamental. Le rayon de Bohr  $a_\mu$ <sup>3</sup> de cet atome vaut :

$$a_\mu \simeq a_0/206.76 \simeq 255 \text{ fm} \quad (1.11)$$

où  $a_0$  est le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène.  $a_\mu$  constitue l'unité muonique de longueur. L'unité muonique d'énergie correspond à l'énergie de l'état fondamental de l'hydrogène muonique, elle vaut :

$$\frac{m_\mu e^4}{\hbar^2} \simeq 5626 \text{ eV} \quad (1.12)$$

#### Remarque

Nous utiliserons souvent par la suite les unités muoniques qui sont les analogues des unités atomiques utilisées en physique atomique. Ce système d'unités permet

<sup>2</sup>Par exemple, pour le plomb ( $Z = 82$ ), le rayon du noyau est  $R \simeq 8.5 \text{ fm}$  et la formule (1.7) donne  $\bar{r}_{1s} \simeq 3.1 \text{ fm}$

<sup>3</sup>Dans la suite de notre étude, nous noterons toujours  $a_\mu$  le rayon de Bohr de l'hydrogène muonique qu'il ne faut donc pas confondre avec la déviation du facteur de Landé présentée précédemment.

d'alléger sensiblement l'écriture des équations que nous aurons à traiter numériquement. Formellement, les unités muoniques sont définies en posant :  $\hbar = 1$ ,  $e = 1$  et  $m_\mu = 1$ .

Une caractéristique de l'hydrogène muonique qui nous intéressera particulièrement par la suite est la structure hyperfine de son état fondamental, schématisée sur la figure (1.3). Comme nous le verrons au prochain chapitre, on peut montrer que cet écart hyperfin est environ  $(207)^2$  fois plus important que l'écart hyperfin de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. On trouve alors  $\Delta E_{h.f} \simeq 0.18$  eV, ce qui correspond à une transition de longueur d'onde  $\lambda \simeq 6.7 \mu\text{m}$ , à comparer à la raie à 21 cm de la transition hyperfine de l'atome d'hydrogène. Cet effet est là encore dû à la proximité du muon avec le proton qui renforce leur interaction magnétique.

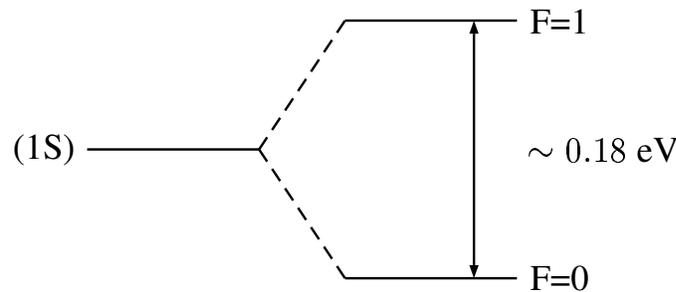


FIG. 1.3 – Structure hyperfine de l'état fondamental de l'hydrogène muonique.

### 1.3 La fusion froide catalysée par muons

Les réactions de fusion de noyaux légers libèrent une énergie extraordinaire. Depuis une vingtaine d'années, un important programme de recherche a été mis en place pour étudier et maîtriser ces réactions afin d'en faire la source d'énergie propre de demain. Pour que la fusion puisse se réaliser, les noyaux doivent se rapprocher suffisamment l'un de l'autre. Dans le soleil, qui constitue un laboratoire naturel d'étude de ces réactions thermonucléaires, les températures qui règnent (plusieurs millions de degrés) fournissent suffisamment d'énergie aux noyaux pour vaincre les répulsions électrostatiques qui augmentent lors de leur rapprochement, et permettre la fusion : ce processus est qualifié de *fusion chaude*.

Les mêmes réactions à température ambiante sont de la *fusion froide* [1]. Une voie de recherche s'est donc tournée vers la possibilité d'utiliser le muon comme catalyseur de ces réactions nucléaires : on parle alors de *fusion froide catalysée par*

*muons*. L'idée est d'utiliser le fait que dans un atome muonique le muon est très proche du noyau et va ainsi écranter la charge nucléaire pour permettre l'approche d'un autre noyau jusqu'à une distance suffisante pour qu'il puisse fusionner avec le noyau de l'atome muonique. Après la fusion, le muon peut être libéré et être capté par un autre noyau pour produire une nouvelle réaction. La fusion catalysée par muons sera rentable énergétiquement si le nombre de réactions catalysées par un muon est suffisamment important pour libérer une énergie supérieure à celle de formation de ce muon.

Jusqu'à aujourd'hui, ce mode de fusion n'a jamais été réalisé de manière rentable. En effet, il est possible qu'une partie des muons soit perdue pour la catalyse en étant captés par des impuretés du mélange réactionnel. Cette hypothèse continue d'être étudiée. En particulier, il est important de déterminer les taux de transfert du muon sur les différentes impuretés afin d'évaluer les concentrations maximales de ces espèces que l'on doit obtenir, pour qu'elles n'entravent pas le processus de fusion.



# Chapitre 2

## Rayon de Zemach du proton

La structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène est une des quantités physiques connue expérimentalement, avec le plus grand nombre de chiffres significatifs. Sa valeur est de [18, 19] :

$$\Delta E_{hf}^{exp} = 1\,420\,405\,751.7667 \pm 0.0009 \text{ Hz} \quad (2.1)$$

Les prévisions théoriques qui nécessitent l'utilisation de l'électrodynamique quantique (QED) sont beaucoup moins précises. La précision de ces calculs est surtout limitée par notre connaissance de la structure interne du proton.

Dans ce chapitre, nous montrons comment la contribution de cette structure interne peut être prise en compte dans le calcul de  $E_{hf}$ . Cela nous amènera à définir le rayon de Zemach du proton  $R_p$  qui rend compte de sa distribution électromagnétique interne. En analysant les différents termes apparaissant dans l'expression théorique de la structure hyperfine, nous déterminons la première valeur *expérimentale* de ce rayon et montrons l'intérêt de réaliser une mesure de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique.

### 2.1 Structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène

La structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène résulte des interactions magnétiques entre l'électron et le proton. Elle se traduit principalement par la levée de dégénérescence de ce niveau qui se scinde en deux sous niveaux hyperfins. Cette levée de dégénérescence provient du couplage entre le moment magnétique de spin de l'électron et le champ magnétique interne du proton [20]. Appelée aussi terme de *contact*, on peut mettre cette interaction sous la forme :

$$W_{hf}^c = 2\mu_B \left( \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \right) \cdot \mathbf{B}_{in}(\mathbf{R}) \quad (2.2)$$

où  $\mu_B = \frac{|q_e|\hbar}{2m_e}$  est le magnéton de Bohr de l'électron,  $\mathbf{S}$  l'opérateur de spin de l'électron et  $\mathbf{B}_{in}$  le champ magnétique créé par le proton à l'intérieur de lui-même.

### 2.1.1 Cas du proton sans structure interne

Si l'on sait actuellement que le proton possède une certaine extension spatiale, on sait aussi qu'elle est très petite devant le rayon de bohr  $a_0^1$  de l'atome d'hydrogène. Il semble donc légitime dans un premier temps de le considérer comme une particule ponctuelle. D'un point de vue théorique, cela revient à modéliser le proton par une sphère uniformément magnétisée dont on fera tendre le rayon  $r_0$  vers 0 à la fin du calcul.

Si on note  $\mathbf{M}$  le vecteur aimantation volumique de cette sphère, son moment magnétique est donné par :

$$\mathbf{M}_I = \frac{4\pi}{3}r_0^3 \cdot \mathbf{M} \quad (2.3)$$

le champ magnétique à l'intérieur de cette distribution est alors :

$$\mathbf{B}_{in} = \frac{2}{3}\mu_0 \mathbf{M} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2}{r_0^3} \mathbf{M}_I \quad (2.4)$$

il vient :

$$W_{hf}^c = \frac{\mu_0}{4\pi} 2\mu_B \left( \frac{\mathbf{S}}{\hbar} \right) \cdot \frac{2}{r_0^3} \mathbf{M}_I \quad (2.5)$$

$\mathbf{M}_I$  étant un vecteur constant, on peut poser sans restreindre la généralité du problème :

$$\mathbf{M}_I = M_I \cdot \mathbf{u}_z \quad (2.6)$$

et finalement :

$$W_{hf}^c = \frac{\mu_0}{4\pi} 2\mu_B \left( \frac{S_z}{\hbar} \right) \cdot \frac{2}{r_0^3} M_I \quad (2.7)$$

Calculons maintenant les éléments de matrice de cet opérateur dans la base des états Coulombiens  $|k l m, \varepsilon\rangle$  où  $\varepsilon$  est le nombre quantique associé au spin de l'électron. On a :

$$\begin{aligned} \langle k l m, \varepsilon | W_{hf}^c | k' l' m', \varepsilon' \rangle &= \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{2\mu_B M_I}{\hbar} \langle \varepsilon | S_z | \varepsilon' \rangle \\ &\times \frac{2}{r_0^3} \int_{r < r_0} d^3 r \varphi_{klm}^*(\mathbf{r}) \varphi_{k'l'm'}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

---

<sup>1</sup>On rappelle que  $a_0 = \frac{\hbar}{\alpha m_{ep} c}$ , avec  $m_{ep} = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p}$  la masse réduite du système à deux corps proton-électron et  $\alpha = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c} = \frac{e^2}{\hbar c}$  la constante de structure fine où on a posé  $e^2 \equiv \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ .

Faisons maintenant tendre  $r_0$  vers zéro :

$$\begin{aligned} \lim_{r_0 \rightarrow 0} \frac{2}{r_0^3} \int_{r < r_0} d^3r \varphi_{klm}^*(\mathbf{r}) \varphi_{k'l'm'}(\mathbf{r}) &= \frac{2}{r_0^3} \frac{4\pi}{3} r_0^3 \varphi_{klm}^*(\mathbf{0}) \varphi_{k'l'm'}(\mathbf{0}) \\ &= \frac{8\pi}{3} \varphi_{klm}^*(\mathbf{0}) \varphi_{k'l'm'}(\mathbf{0}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

on en déduit l'expression du terme de contact :

$$W_{hf}^c = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} \mathbf{M}_I \cdot \left( \frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \right) \delta(\mathbf{r}) \quad (2.10)$$

### 2.1.2 Séparation hyperfine de Fermi

Pour obtenir la structure hyperfine de l'état (1s) il nous suffit maintenant de diagonaliser  $W_{hf}^c$  dans la multiplicité correspondante. On a :

$$\mathbf{M}_I = g_p \frac{\mu_n}{\hbar} \mathbf{I} \quad (2.11)$$

où  $\mathbf{I}$  est le spin du proton,  $\mu_n = \frac{g_p \hbar}{2M_p}$  le magnéton de Bohr nucléaire et  $g_p$  le facteur de Landé du proton. Les éléments de matrice du terme de contact s'écrivent donc :

$$\langle 1s | W_{hf}^c | 1s \rangle = A \langle m_{s'}, m_{I'} | \mathbf{I} \cdot \mathbf{S} | m_s, m_I \rangle \quad (2.12)$$

avec :

$$A = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} \frac{2\mu_B}{\hbar} \frac{g_p \mu_n}{\hbar} \langle l=0, m_l=0 | \delta(\mathbf{R}) | l=0, m_l=0 \rangle \quad (2.13)$$

On a :

$$\langle l=0, m_l=0 | \delta(\mathbf{R}) | l=0, m_l=0 \rangle = \frac{1}{4\pi} |R_{10}(0)|^2 \quad (2.14)$$

où  $R_{10}(r)$  est la partie radiale de la fonction d'onde de l'état fondamental donnée par :

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \quad (2.15)$$

Finalement :

$$A = \frac{4}{3} g_p \frac{m_e}{M_p} m_e c^2 \alpha^4 \left( 1 + \frac{m_e}{M_p} \right)^{-3} \frac{1}{\hbar^2} \quad (2.16)$$

Pour diagonaliser l'opérateur  $\mathbf{I} \cdot \mathbf{S}$  qui apparaît dans l'équation (2.12) on compose les deux moments cinétiques de spin en posant  $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{S}$ . La base obtenue est formée des quatre états  $|S = 1/2, I = 1/2, F m_F\rangle$  avec  $(F = 0, m_F = 0)$  et  $(F = 1, m_F = -1, 0, 1)$ . En remarquant que

$$\mathbf{I} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (2.17)$$

les valeurs propres ne dépendent que de  $F$  et valent :

$$\frac{\hbar^2}{2} \left( F(F+1) - \frac{3}{2} \right) \quad (2.18)$$

On obtient ainsi deux niveaux de structure hyperfine : un état non dégénéré ( $F = 0, m_F = 0$ ) et un second ( $F = 1, m_F = -1, 0, 1$ ) dégénéré trois fois. L'écart hyperfin est alors donné par :

$$\Delta E_{hf}^0 = \frac{A\hbar^2}{2} \left[ \left( 1(1+1) - \frac{3}{2} \right) + \frac{3}{2} \right] = A\hbar^2 \quad (2.19)$$

Cet écart énergétique appelé séparation hyperfine de Fermi [21] s'écrit donc :

$$E^F = \frac{4}{3} g_p \frac{m_e}{M_p} m_e c^2 \alpha^4 \left( 1 + \frac{m_e}{M_p} \right)^{-3} \quad (2.20)$$

### 2.1.3 Correction de Zemach

La correction de Zemach [22] consiste à considérer la structure interne du proton. On définit ainsi le facteur de forme magnétique  $\rho_m(\mathbf{r})$  et le facteur de forme électrique  $\rho_e(\mathbf{r})$  tels que :

$$\vec{M}_I = g_p \frac{\mu_p}{\hbar} \vec{I} \rho_m(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad q_p = q \rho_e(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

avec :

$$\int \rho_m(\mathbf{r}) d^3r = \int \rho_e(\mathbf{r}) d^3r = 1 \quad (2.22)$$

En suivant le même cheminement que précédemment, on arrive à l'expression corrigée de la formule de Fermi (2.20) :

$$\Delta E_{hf} = B\hbar^2 \quad (2.23)$$

où :

$$B = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} 2g_p \frac{\mu_B \mu_n}{\hbar^2} \int d^3r |\varphi(\mathbf{r})|^2 \rho_m(\mathbf{r}) \quad (2.24)$$

où  $\varphi(\mathbf{r})$  représente la fonction d'onde sans spin du nouvel état fondamental d'ordre zéro prenant en compte l'extension spatiale de la charge du proton. Il nous reste donc à déterminer cette fonction.

### 2.1.4 Fonction d'onde corrigée

Nous allons essayer d'exprimer la fonction d'onde modifiée en fonction de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène obtenue dans le cas d'un noyau de charge électrique ponctuelle. Nous affecterons donc un indice  $p$  à toute quantité se rapportant au cas ponctuel, les quantités sans indice se réfèrent

au système comprenant un proton avec une certaine extension spatiale. Ainsi les potentiels d'interaction Coulombienne entre l'électron et le proton sont donnés par :

$$V^p(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{r} \quad (2.25)$$

$$V(\mathbf{r}) = -e^2 \int \frac{\rho_e(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' \quad (2.26)$$

En utilisant les propriétés de la fonction de Green  $G_k(\mathbf{r})$  de l'opérateur  $(\Delta - k^2)$  (voir annexe A), on peut écrire les deux équations intégrales suivantes :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{2m_{ep}}{\hbar^2} \int d^3r' G_{k'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') \quad (2.27)$$

$$\varphi^p(\mathbf{r}) = \frac{2m_{ep}}{\hbar^2} \int d^3r' G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') V^p(\mathbf{r}') \varphi^p(\mathbf{r}') \quad (2.28)$$

avec :

$$k = \frac{\sqrt{2m_{ep}(-E_0)}}{\hbar} \text{ et } k' = \frac{\sqrt{2m_{ep}(-E'_0)}}{\hbar} \quad (2.29)$$

où  $E_0$  (resp.  $E'_0$ ) est l'énergie du niveau fondamental dans l'approximation d'ordre zéro sans prise en compte (resp. avec prise en compte) de l'effet de volume du noyau. Enfin rappelons que  $G_k(\mathbf{r})$  est telle que :

$$(\Delta - k^2)G_k(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

La variation de l'énergie de l'état (1s) de l'atome d'hydrogène liée à l'effet de volume du proton est très faible<sup>2</sup>. Il est donc légitime de considérer que  $G_{k'}(\mathbf{r}) \simeq G_k(\mathbf{r})$ . De même, dans le calcul de l'intégrale apparaissant dans l'équation (2.27) on peut remplacer  $\varphi(\mathbf{r})$  par  $\varphi^p(\mathbf{r})$ . En soustrayant alors l'équation (2.28) de (2.27) on obtient :

$$\varphi(\mathbf{r}) \simeq \varphi^p(\mathbf{r}) + \frac{2m_{ep}}{\hbar^2} \int d^3r' G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') (V(\mathbf{r}') - V^p(\mathbf{r}')) \varphi^p(\mathbf{r}') \quad (2.31)$$

comme  $G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$  et que la différence entre  $V(\mathbf{r})$  et  $V^p(\mathbf{r})$  n'est importante qu'au voisinage direct de l'origine, on peut écrire, en ne considérant que les termes dominants dans l'intégrale de l'équation (2.31) :

$$\varphi(\mathbf{r}) \simeq \varphi^p(\mathbf{r}) + \frac{2m_{ep}e^2}{4\pi\hbar^2} \varphi^p(\mathbf{0}) \int d^3r' \left( \int \frac{\rho_e(\mathbf{u})}{|\mathbf{r}' - \mathbf{u}|} d^3u - \frac{1}{r'} \right) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.32)$$

en utilisant la relation (2.22) cette équation se met sous la forme :

$$\varphi(\mathbf{r}) \simeq \varphi^p(\mathbf{r}) + \frac{2m_{ep}e^2}{4\pi\hbar^2} \varphi^p(\mathbf{0}) \iint d^3u d^3r' \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left( \frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{u}|} - \frac{1}{r'} \right) \right) \rho_e(\mathbf{u}) \quad (2.33)$$

<sup>2</sup>En effet, la variation relative de  $E_0$  est donnée par  $\frac{\delta E_0}{E_0} = \frac{4}{5} \left( \frac{r_0}{a_0} \right)^2$  où  $r_0$  est le rayon du proton [20]. En prenant  $r_0 \sim 1F = 10^{-15}m$ , on trouve  $\frac{\delta E_0}{E_0} \sim 2,8 \cdot 10^{-10}$ .

l'intégration sur  $\mathbf{r}'$  donne alors<sup>3</sup> :

$$\varphi(\mathbf{r}) \simeq \varphi^p(\mathbf{r}) + \frac{m_{ep}e^2}{\hbar^2} \varphi^p(\mathbf{0}) \int d^3u (r - |\mathbf{u} - \mathbf{r}|) \rho_e(\mathbf{u}) \quad (2.34)$$

Un développement limité au premier ordre de  $\varphi^p(\mathbf{r})$  au voisinage de l'origine permet d'écrire d'après (2.15) :

$$\varphi^p(\mathbf{r}) = \varphi^p(r) \simeq \varphi^p(0) + \left( \frac{\partial \varphi^p}{\partial r} \right)_0 r = \varphi^p(0) \left( 1 - \frac{e^2 m_{ep}}{\hbar^2} r \right) \quad (2.35)$$

soit :

$$\varphi(\mathbf{r}) \simeq \varphi^p(0) \left( 1 - \frac{m_{ep}e^2}{\hbar^2} \int d^3u |\mathbf{u} - \mathbf{r}| \rho_e(\mathbf{u}) \right) \quad (2.36)$$

### 2.1.5 Rayon de Zemach

Le terme de droite de l'expression (2.36) apparaît clairement comme la correction liée à l'extension spatiale de la distribution électromagnétique du proton. En utilisant la formule (2.24) on obtient :

$$\Delta E_{hf} \simeq \Delta E^F \left( 1 - 2 \frac{m_{ep}e^2}{\hbar^2} \iint d^3r d^3u |\mathbf{u} - \mathbf{r}| \rho_e(\mathbf{u}) \rho_m(\mathbf{r}) \right) \quad (2.37)$$

Posons :

$$\rho_{em}(\mathbf{r}) = \int d^3u \rho_e(\mathbf{r} - \mathbf{u}) \rho_m(\mathbf{u}) \quad (2.38)$$

Ce produit de convolution entre le facteur de forme électrique et magnétique est appelé facteur de forme électromagnétique. On a bien sûr :

$$\int d^3r \rho_{em}(\mathbf{r}) = \iint d^3r d^3u \rho_e(\mathbf{r} - \mathbf{u}) \rho_m(\mathbf{u}) = 1 \quad (2.39)$$

En effectuant le changement de variables  $\mathbf{r}' = \mathbf{u} - \mathbf{r}$  et  $\mathbf{s} = \mathbf{u} + \mathbf{r}$  dans l'intégrale de l'équation (2.37) on peut mettre la séparation hyperfine de l'état fondamental sous la forme :

$$\Delta E_{hf} \simeq \Delta E^F \left( 1 - 2 \frac{m_{ep}e^2}{\hbar^2} R_p \right) = \Delta E^F (1 + \delta^{\text{Zemach}}) \quad (2.40)$$

avec :

$$\delta^{\text{Zemach}} = -2\alpha m_{ep} c^2 R_p \quad (2.41)$$

où :

$$R_p = \int d^3r' r' \rho_{em}(\mathbf{r}') \quad (2.42)$$

$R_p$  est le *rayon de Zemach* du proton. Premier moment de sa distribution électromagnétique, il détermine l'extension spatiale des phénomènes électromagnétiques au sein du proton.

---

<sup>3</sup>On a en effet :  $\frac{1}{2\pi} \int d^3r' \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \left( \frac{1}{|\mathbf{r}'-\mathbf{u}|} - \frac{1}{r'} \right) = r - |\mathbf{u} - \mathbf{r}|$ .

## Remarque

La détermination de la structure interne du proton passe par la connaissance de l'ensemble des moments des distributions électriques et magnétiques. Le rayon de Zemach est l'un de ces moments. L'expérience de mesure du lamb shift dans l'hydrogène muonique actuellement en cours au PSI, doit permettre par exemple de déterminer entre autre le rayon de charge du proton qui correspond au premier moment de sa distribution électrique.

## 2.2 Détermination du rayon de Zemach

### 2.2.1 Formulation perturbative de $\Delta E_{hf}^{th}$

Si l'expression (2.40) de  $\Delta E_{hf}$  met en évidence le rôle de la structure interne du proton, elle ne prend pas en compte l'ensemble des phénomènes physiques mis en jeu dans la structure hyperfine. Plus précisément, il est possible de mettre  $\Delta E_{hf}$  sous la forme [23] :

$$\Delta E_{hf}^{th} = E^F (1 + \delta^{\text{QED}} + \delta^{\text{Zemach}} + \delta^{\text{recoil}} + \delta^{\text{pol}} + \delta^{\text{hvp}}) \quad (2.43)$$

En plus de la correction  $\delta^{\text{Zemach}}$  liée à la structure interne du proton, on distingue plusieurs autres termes.  $\delta^{\text{QED}}$  est la correction apportée par l'électrodynamique quantique. Aux premiers ordres en  $\alpha$ ,  $\delta^{\text{QED}}$  est donné par [24, 25] :

$$\delta^{\text{QED}} = a_e + \frac{3}{2}\alpha^2 + \alpha^2(\log 2 - \frac{5}{2}) - \frac{8\alpha^3}{3\pi} \log \alpha (\log \alpha - \log 4 + \frac{281}{480}) + 17.676 \times \frac{\alpha^3}{\pi} + \dots \quad (2.44)$$

où  $a_e$  est le moment magnétique anormal de l'électron.  $\delta^{\text{pol}}$  provient de la dynamique interne du proton et peut être évaluée en utilisant les données obtenues par des expériences de diffusion inélastiques sur des protons.  $\delta^{\text{hvp}}$  décrit les effets liés aux interactions fortes au sein du proton (essentiellement la polarisation du vide). Enfin,  $\delta^{\text{recoil}}$  concerne les effets de recul et englobe tous les termes dépendant du rapport de masses  $m_e/m_p$ .

## Remarques

1. Pour des raisons de commodité d'écriture, nous avons utilisé le système d'unités  $\hbar = c = 1$ .
2. Ce développement perturbatif de  $\Delta E_{hf}^{th}$  n'est valable qu'aux premiers ordres en  $\alpha$ . En effet, aux ordres plus élevés, les effets de structure et ceux liés à la (QED) se mélangent, les distinguer devient alors impossible.
3. La prise en compte d'effets radiatifs modifie un peu la contribution de la structure interne du proton. Karshenboim [26] a montré que l'expression de

$\delta^{\text{Zemach}}$  est alors :

$$\delta^{\text{Zemach}} = -1.0152 \times 2\alpha m_{ep} R_p \quad (2.45)$$

## 2.2.2 Ordres de grandeur et incertitudes

Il est intéressant d'examiner l'ordre de grandeur de chacun des termes ci-dessus et de préciser les incertitudes qui leurs sont associées. Les résultats de cette analyse sont présentés dans les deux premières colonnes du tableau (2.1) relatives à l'atome d'hydrogène. Quelques précisions sur les valeurs que l'on trouve dans ce tableau méritent d'être apportées. Considérons tout d'abord le terme de Fermi  $E^F$ . L'incertitude associée est essentiellement liée aux incertitudes sur  $m_e$ ,  $m_p$ ,  $\mu_p$  et  $\alpha$ . D'après [9] elle n'excède pas 0.01 ppm. En ce qui concerne  $\delta^{\text{QED}}$ , l'incertitude provient des termes non calculés d'ordre supérieur à 3 en  $\alpha$ . On peut estimer qu'elle est inférieure à 0.001 ppm [24]. Dans ce tableau, nous donnons la valeur de la contribution liée à la structure interne du proton  $\delta^{\text{rigid}}$ . Englobant les corrections  $\delta^{\text{Zemach}}$  et  $\delta^{\text{recoil}}$ , elle est obtenue à partir des données provenant d'expériences de diffusion élastique sur des protons. Le terme de recul  $\delta^{\text{recoil}}$  a par ailleurs été calculé par [25], il est de l'ordre de 5.68 ppm. La valeur de  $\delta^{\text{pol}}$ , 1.6 ppm, et l'incertitude associée, 0.6 ppm, ont été calculées Faustov *et al.* [27] à partir de données expérimentales sur la polarisabilité du proton. Enfin, on peut remarquer que la correction liée à la polarisation du vide  $\delta^{\text{hvp}} \sim 10^{-8}$  [28] est petite comparée aux autres.

	Hydrogène		Hydrogène muonique	
	Valeur	Incertitude	Valeur	Incertitude
$E^F$	1418.84 MHz	0.01 ppm	182.443 meV	0.1 ppm
$\delta^{\text{QED}}$	$1.13 \cdot 10^{-3}$	$< 0.001 \cdot 10^{-6}$	$1.13 \cdot 10^{-3}$	$10^{-6}$
$\delta^{\text{rigid}}$	$39 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$7.5 \cdot 10^{-3}$	$0.1 \cdot 10^{-3}$
$\delta^{\text{recoil}}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$10^{-8}$	$1,7 \cdot 10^{-3}$	$10^{-6}$
$\delta^{\text{pol}}$	$1.4 \cdot 10^{-6}$	$0.6 \cdot 10^{-6}$	$0.46 \cdot 10^{-3}$	$0.08 \cdot 10^{-3}$
$\delta^{\text{hvp}}$	$10^{-8}$	$10^{-9}$	$0.02 \cdot 10^{-3}$	$0.002 \cdot 10^{-3}$

TAB. 2.1 – Valeur et incertitude correspondante des différents termes contribuant à la structure hyperfine de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène et de l'hydrogène muonique. ( $1 \text{ meV} \simeq 2.41798836 \cdot 10^5 \text{ MHz}$ ).

## 2.2.3 Bilan

Nous pouvons tout d'abord remarquer que c'est le terme calculé par l'électrodynamique quantique qui contribue le plus à la structure hyperfine. Cela étant, la comparaison directe entre la valeur expérimentale de l'écart hyperfin  $\Delta E_{hf}^{\text{exp}}$  et la valeur théorique  $\Delta E_{hf}^{\text{th}}$  ne permet pas de tester la validité du développement perturbatif de  $\delta^{\text{QED}}$ . En effet, nous déduisons des résultats précédents que l'incertitude

associée à l'ensemble des autres corrections ( $\sim 10^{-6}$ ) est beaucoup plus grande que la précision obtenue avec les calculs de (QED) ( $\sim 10^{-9}$ ). En particulier, c'est le terme  $\delta^{\text{rigid}}$  qui apporte la plus grande imprécision dans les calculs théoriques. Cette incertitude est essentiellement liée à la valeur du rayon de Zemach qui, comme nous allons le voir au paragraphe suivant, n'est pas connue de manière théorique à mieux de 5%. Pour tester le calcul de (QED), il faudrait disposer de données très précises sur ce rayon. On pourrait aussi comparer les résultats expérimentaux et théoriques obtenus sur des systèmes hydrogénoïdes formés par deux particules ponctuelles dépourvues de structure interne. Cette analyse a déjà été menée sur le muonium, système formé par un muon positif  $\mu^+$  et un électron. La comparaison directe avec les résultats expérimentaux obtenus par Liu *et al.* [29] a ainsi confirmé la validité de la (QED) jusqu'à une précision de  $0.5 \cdot 10^{-7}$ .

À partir de ces considérations, nous avons adopté un tout autre point de vue : si l'incertitude sur  $\delta^{\text{rigid}}$  ne permet pas de tester l'électrodynamique quantique, la précision obtenue sur les autres contributions peut nous permettre d'extraire de la mesure expérimentale de l'écart hyperfin, une valeur du rayon de Zemach. Cette valeur est alors donnée par :

$$R_p = - (\Delta E_{hf}^{\text{exp}} / E^{\text{F}} - 1 - \delta^{\text{QED}} - \delta^{\text{recoil}} - \delta^{\text{pol}} - \delta^{\text{hvp}}) / (1.0152 \times 2m_{ep}\alpha) \quad (2.46)$$

En utilisant cette équation et les valeurs des différentes contributions présentées dans le tableau (2.1), nous avons obtenu la première valeur *expérimentale* du rayon de Zemach du proton :

$$R_p = 1.037(16) \text{ fm} \quad (2.47)$$

où l'incertitude de  $\pm 0.016$  fm provient de l'incertitude sur la valeur de  $\delta^{\text{pol}}$ .

## 2.2.4 Conséquences sur les modèles théoriques de structure interne

Comme nous l'avons vu précédemment (voir l'équation (B.3)), le rayon de Zemach  $R_p$  est défini comme le premier moment de la distribution électromagnétique du proton. Ainsi, il va rendre compte de l'extension spatiale de cette distribution. En d'autres termes, il donne une valeur du rayon de la sphère à l'intérieur de laquelle on ne peut considérer le proton comme une particule de charge ponctuelle. La valeur expérimentale de  $R_p$  fixe d'importantes restrictions sur les différents modèles théoriques de structure interne du proton. En particulier, cette valeur contraint fortement la paramétrisation des facteurs de formes électriques et magnétiques,  $G_E(k)$  et  $G_M(k)$ . En effet, il est possible d'exprimer  $R_p$  en fonction de ces facteurs de forme selon :

$$R_p = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3p}{\mathbf{p}^4} \left( 1 - \frac{1}{\mu_p} G_E(-\mathbf{p}^2) G_M(-\mathbf{p}^2) \right) \quad (2.48)$$

où  $\mu_p$  est le moment magnétique du proton.

L'équivalence entre cette expression et celle donnée en fonction des distributions électromagnétiques (B.3) est démontrée dans l'annexe B. Actuellement, les expériences de diffusion élastique électron-proton permettent d'obtenir des données sur les facteurs de forme à hautes énergies. Leur valeur aux basses énergies est obtenue en extrapolant la forme analytique qui rend compte des résultats à haute énergie. Considérons par exemple les valeurs de  $R_p$  obtenues en utilisant différentes expressions déjà publiées pour  $G_E(k)$  et  $G_M(k)$ . Avec les formes analytiques déduites de l'approximation dipolaire, on trouve  $R_p = 1.02$  fm. En utilisant les résultats de Simon *et al.* [30],  $R_p = 1.067$  fm. Récemment, ces résultats ont été analysés en incluant en outre, les effets de recul [31]. Avec ses nouvelles données, la valeur de  $R_p$  est maintenant de 1.08 fm. Les expressions trouvées pour  $G_E$  et  $G_M$  prévoient un rapport  $\mu_p G_E(-\mathbf{k}^2)/G_M(-\mathbf{k}^2)$  tendant vers 1 pour  $\mathbf{k}^2 < 5$  GeV<sup>2</sup>/c<sup>2</sup>. Cependant, Gayou *et al.* ont obtenu une expression de ce rapport ne tendant par vers 1 aux très basses énergies. Ils trouvent [32] :

$$\mu_p G_E(-\mathbf{k}^2)/G_M(-\mathbf{k}^2) = 1 - 0.13(-\mathbf{k}^2 - 0.04) \quad (2.49)$$

A partir de la donnée de l'un des facteurs de forme, on peut ainsi calculer l'autre. En utilisant la forme trouvée par Simon *et al.* pour  $G_E$  et en calculant  $G_M$  avec (2.49), on trouve  $R_p = 1.060$  fm. Si maintenant on utilise  $G_M$  pour obtenir  $G_E$ ,  $R_p = 1.073$  fm. Comme nous l'avons indiqué précédemment, l'incertitude présente sur l'ensemble de ces résultats montre que  $R_p$  n'est connu théoriquement qu'à 5% près. Cette incertitude dépasse largement l'incertitude de notre valeur expérimentale. Ainsi, la valeur expérimentale de  $R_p$  peut alors être utilisée pour tester la qualité des ces modèles.

Si cette démarche semble intéressante, il n'en reste pas moins que la valeur que nous avons trouvée est la première et unique estimation expérimentale du rayon de Zemach. Pour que cette quantité puisse servir de grandeur de référence, il apparaît nécessaire d'obtenir d'autres confirmations expérimentales de sa valeur. Nous allons montrer comment la mesure de l'écart hyperfin de l'état fondamental de l'hydrogène muonique pourrait permettre cette confirmation.

## 2.3 Utilité d'une mesure avec l'hydrogène muonique

### 2.3.1 Structure hyperfine de l'hydrogène muonique

Du point de vue théorique, l'expression perturbative de l'écart hyperfin pour l'atome d'hydrogène donnée par l'équation (2.43), reste valable pour l'hydrogène muonique. Si les expressions (2.20) et (2.45) concernant l'écart de Fermi et la correction de Zemach sont directement applicables en remplaçant la masse de l'électron par celle du muon, les autres termes du développement méritent un examen spécifique.

En effet, comme nous l'avons mentionné au précédent chapitre, le muon est beaucoup plus proche du proton dans d'hydrogène muonique que ne l'est l'électron dans l'atome d'hydrogène ( $a_\mu \sim a_0/200$ ). Cette orbite plus resserrée rend le système muonique plus sensible à la structure du proton. Ainsi, les corrections liées à cette structure doivent être modifiées. Les résultats que nous avons pu collecter sur la structure hyperfine de l'hydrogène muonique sont résumés dans les deux colonnes de droite du tableau (2.1). Remarquons d'abord que l'écart hyperfin est environ 40000 fois plus important qu'avec l'atome d'hydrogène. Le rapport  $E^F(p\mu)/E^F(pe)$  est en effet proportionnel à  $(m_\mu/m_e)^2$ . En ce qui concerne la correction apportée par l'électrodynamique quantique  $\delta^{\text{QED}}$ , nous ne connaissons pas de travaux publiés qui en donnent une expression. Même si l'expression théorique (2.44) peut être modifiée dans le cas de l'hydrogène muonique, nous avons conservé la valeur trouvée pour l'atome d'hydrogène afin d'évaluer l'ordre de grandeur de cette contribution.

Les difficultés d'une vérification expérimentale de ce calcul expliquent certainement le manque d'intérêt suscité par cette question. Cependant, nous restons convaincus que l'incertitude liée à ce calcul théorique pourrait être, si nécessaire, abaissée jusqu'à une valeur inférieure à 0.1 ppm.

Le terme de recul  $\delta^{\text{recoil}}$  est plus difficile à évaluer que dans le cas de l'atome d'hydrogène. En effet, le plus grand rapport de masses  $m_\mu/m_p \sim 0.11$  implique de prendre en compte les contributions des termes d'ordre supérieur en  $(m_\mu/m_p)$ . D'après les calculs effectués sur ce problème [33, 34], l'incertitude sur cette contribution peut être prise égale à 1 ppm. L'amplitude de cet effet a été calculée d'après la formule donnée pour le muonium dans le livre de Sapirstein et Yennie [25]. Nous avons alors obtenu  $\delta^{\text{recoil}} \sim -(3\alpha/\pi)(m_\mu/m_p) \ln(m_\mu/m_p) \sim 1.7 \cdot 10^{-3}$ .  $\delta^{\text{pol}}$  a été obtenue par la même méthode que pour l'atome d'hydrogène [35] qui donne :  $\delta^{\text{pol}} = (4.6 \pm 0.8) \times 10^{-4}$ . Enfin, remarquons la contribution plus importante des effets de polarisation du vide, estimée approximativement à 20 ppm [36]. L'ensemble des données présentées dans le tableau (2.1) va nous permettre de discuter la pertinence d'une mesure de l'écart hyperfin de l'état fondamental de l'hydrogène muonique.

### 2.3.2 Interêt de la mesure

Comme avec l'atome d'hydrogène, la mesure de  $\Delta E_{hf}$  dans l'hydrogène muonique ne peut être utilisée pour valider des calculs d'électrodynamique quantique dont la précision est complètement masquée par les effets de structure. Nous arrivons donc à la conclusion suivante : contrairement à ce qu'ont pu penser certains auteurs [37, 38], les mesures de la structure hyperfine de l'atome d'hydrogène et de l'hydrogène muonique ne sont pas complémentaires dans le sens qu'elles fournissent toutes les deux la même information sur la structure du proton. Ainsi, la mesure réalisée avec l'hydrogène muonique doit être perçue comme une seconde expérience permettant d'extraire la valeur du rayon de Zemach. Si les deux valeurs trouvées avec les données sur l'atome d'hydrogène et l'hydrogène muonique sont compatibles, cela affinera l'estimation du rayon de Zemach et confirmera par la même occasion la validité des

calculs concernant la correction liée à la polarisabilité du proton.

La mesure du Lamb shift de l'hydrogène muonique est en cours au Paul Scherrer Institute (PSI) de Villigen. Une extension possible de cette expérience est la détermination du rayon de Zemach par la mesure de la structure hyperfine de l'état  $2s$  de l'hydrogène muonique. Cependant, des estimations théoriques de la correction de polarisation du proton semblent montrer que dans ce cas,  $\delta^{\text{pol}}$  est anormalement élevée et la précision sur la valeur de  $R_p$  devrait être comprise entre 5 et 10%. Afin d'utiliser la valeur de  $R_p$  pour détecter une éventuelle déviation de  $G_E/G_M$  par rapport à 1, il serait nécessaire d'obtenir une précision inférieure à 0.5% sur cette quantité. Actuellement, les erreurs expérimentales prévues dans l'expérience menée au PSI ne permettent pas d'envisager une telle précision sur le rayon de Zemach.

Pour améliorer la précision de cette mesure, une nouvelle méthode permettant la mesure directe de la structure hyperfine de l'état fondamental de  $p\mu$  a été récemment proposée [3]. C'est de cette méthode que nous allons discuter dans le prochain chapitre. Comme nous allons le voir, ce sont les zones d'ombres soulevées par cette proposition qui nous ont amené à travailler sur le transfert de charge muonique.

# Chapitre 3

## Expérience proposée pour mesurer la structure hyperfine de l'hydrogène muonique

Dans le chapitre précédent, nous avons mis en évidence l'intérêt de mesurer la structure hyperfine de l'état fondamental de l'hydrogène muonique. A cause de la faible densité d'hydrogènes muoniques que l'on arrive à obtenir en laboratoire, les techniques utilisées pour mesurer la structure hyperfine de l'atome d'hydrogène ne sont plus applicables. Afin de bien comprendre la méthode de mesure récemment proposée [3], nous commencerons ce chapitre par une description des expériences de transfert muonique. Ensuite nous présenterons le principe de l'expérience envisagée, ce qui nous permettra de comprendre les motivations qui nous ont amené à étudier de manière théorique le processus de transfert de charge muonique.

### 3.1 Etude expérimentale du transfert muonique

#### 3.1.1 Description des processus mis en jeu

Ce premier paragraphe est destiné à décrire une expérience typique permettant d'étudier le processus de transfert de charge muonique.

Dans une telle expérience, un jet de muons est envoyé sur une cellule cible contenant de l'hydrogène avec une petite quantité ( $\sim 1\%$ ) d'un autre élément A de numéro atomique  $Z$  élevé. La durée du pulse de muons est très courte en comparaison des temps caractéristiques des processus de transfert étudiés. Immédiatement après avoir été injectés dans la cellule, les muons sont capturés par l'hydrogène et les A. Les muons capturés dans les états excités de  $(A\mu)$  retombent rapidement dans l'état fondamental en émettant des rayons X. Cette émission est enregistrée par un détecteur accordé sur une des transitions radiatives de l'atome muonique  $(A\mu)_n \rightarrow (A\mu)_{1s}$ . Dans les spectres présentés sur la figure (3.1), le pic d'intensité observé au début de l'enregistrement est caractéristique de ce phénomène de relaxation rapide. Ce-

pendant, les muons sont majoritairement captés par l'hydrogène qui est en grande quantité dans la cellule. L'hydrogène muonique ( $p\mu$ ) ainsi formé se trouve dans un état très excité ( $n \sim 14$ ). En un temps très court, ces atomes reviennent dans leur état fondamental par un (ou une combinaison) des modes de relaxation suivants : désexcitation radiative par émission de rayons X mous, émission non radiative d'un électron Auger, ou encore par relaxation collisionnelle avec l'hydrogène. Une fois dans leur état fondamental, ils peuvent entrer en collision avec des A présents dans la cellule suivant la réaction :



Les  $(A\mu)$  sont formés dans des états très excités. Leur désexcitation produit alors des rayons X durs de fluorescence. A l'aide du détecteur accordé sur la même transition radiative  $(A\mu)_n \rightarrow (A\mu)_{1s}$  on peut suivre l'évolution temporelle de cette émission. Notons que la réaction de transfert n'est pas la seule cause de disparition des hydrogènes muoniques. Deux autres processus entrent principalement en compétition avec le transfert de muon, il s'agit de la disparition des  $(p\mu)$  par désintégration naturelle de muon et de la formation de la molécule  $(pp\mu)$ .

### 3.1.2 Analyse du spectre de rayons X

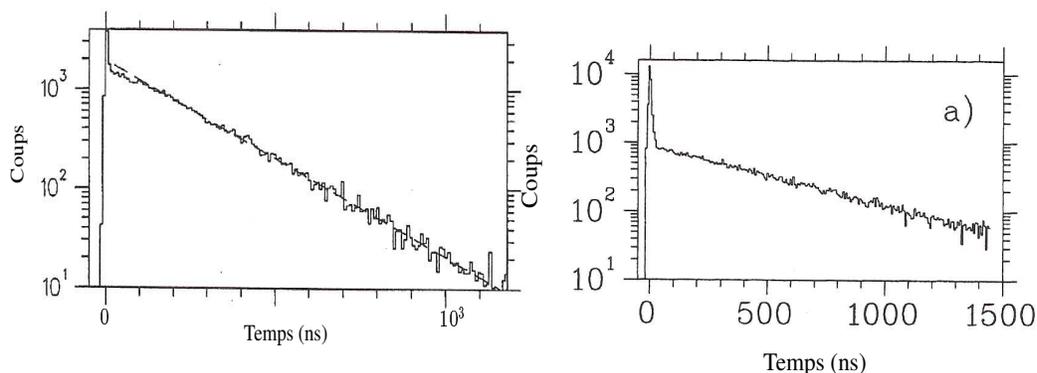


FIG. 3.1 – Spectres de rayons X expérimentaux de désexcitation de  $(Ne\mu)$  (figure de droite, extrait de [39]) et  $(Ar\mu)$  (figure de gauche, extrait de [40]).

Nous allons maintenant montrer comment l'analyse du spectre de rayons X permet de déterminer la valeur du taux de transfert muonique sur l'élément A considéré. L'oxygène est un cas particulier qui sera présenté au paragraphe suivant. Les spectres obtenus avec le néon et l'argon (voir figure (3.1)) montrent tous le même type de comportement : un pic d'intensité centré à  $t = 0$ , suivi d'une décroissance exponentielle (noter l'utilisation d'une échelle logarithmique en ordonnées). Comme nous l'avons vu précédemment, le pic d'intensité est essentiellement dû à la capture

directe des muons par l'élément lourd. Pour comprendre l'allure de ces spectres aux temps ultérieurs, nous allons calculer l'intensité  $I(t)$  des rayons X émis.

### 3.1.3 Quelques définitions préliminaires

Le mélange gazeux ( $H_2 + A$ ) est caractérisé par sa densité atomique initiale notée  $n$  et les concentrations en hydrogène atomique et en élément A, notées respectivement  $c_p$  et  $c_A$ . Le nombre de muons qui interagissent avec ce gaz est suffisamment petit pour que  $n$ ,  $c_p$  et  $c_A$  puissent être considérés comme constants tout au long de la mesure.

Nous noterons  $\lambda_A$  le taux de transfert muonique associé à la réaction (3.1). Ce taux est normalisé à une densité d'atomes A égale à celle de l'hydrogène liquide  $n_0 = 4.25 \cdot 10^{22}$  atomes/cm<sup>3</sup>. Si  $\varphi$  représente la densité atomique relative du mélange gazeux par rapport à  $n_0$  ( $\varphi = n/n_0$ ), le taux de transfert observé expérimentalement est donné par  $c_A \varphi \lambda_A$ . La disparition des ( $p\mu$ ) par formation de la molécule ( $pp\mu$ ) sera de la même manière caractérisé par un taux  $\lambda_{pp\mu}$ , normalisé pour une densité d'atomes d'hydrogène  $n_0$ . Nous noterons enfin  $\lambda_0$  le taux de désintégration radioactive du muon. On peut alors définir un taux global de disparition des hydrogènes muoniques  $\Lambda_p$  :

$$\Lambda_p = \lambda_0 + \varphi(c_p \lambda_{pp\mu} + c_A \lambda_A) \quad (3.2)$$

avec

$$\frac{dN_{p\mu}}{dt}(t) = -\Lambda_p N_{p\mu}(t) \quad (3.3)$$

où  $N_{p\mu}(t)$  est le nombre de ( $p\mu$ ) à l'instant  $t$ .

### 3.1.4 Intensité du spectre

En supposant le processus de désexcitation des ( $A\mu$ ) ultra rapide par rapport aux différents processus de transfert<sup>1</sup>, l'intensité  $I(t)$  est directement proportionnelle au taux de formation des ( $A\mu$ ), soit :

$$I(t) \propto \frac{dN_{A\mu}}{dt}(t) \quad (3.4)$$

où  $N_{A\mu}(t)$  est le nombre de ( $A\mu$ ) à l'instant  $t$ . L'augmentation du nombre de ( $A\mu$ ) est liée à la réaction de transfert (3.1). On a donc :

$$\frac{dN_{A\mu}}{dt}(t) = c_A \varphi \lambda_A N_{p\mu}(t) \quad (3.5)$$

En considérant  $\Lambda_p$  constant on trouve d'après (3.3) :

---

<sup>1</sup>Si on note  $\tau_d$  le temps caractéristique de désexcitation, on a  $\tau_d \sim 10^{-14}$ s.

$$N_{p\mu}(t) = N_{p\mu}^0 e^{-\Lambda_p t} \quad (3.6)$$

avec  $N_{p\mu}^0 = N_{p\mu}(t = 0)$ . Il vient donc

$$I(t) \propto N_{p\mu}^0 c_A \varphi \lambda_A e^{-\Lambda_p t} \quad (3.7)$$

On retrouve bien le comportement exponentiel obtenu expérimentalement. Connaissant  $\lambda_0$  et  $\lambda_{pp\mu}$ , la mesure de la pente de cette courbe tracée en échelle logarithmique, donne la valeur du taux de transfert  $\lambda_p$ . Avec cette méthode on trouve par exemple :  $\lambda_{Ar} = 1.63[9] 10^{11} s^{-1}[40]$  et  $\lambda_{Ne} = 0.849[2] 10^{10} s^{-1}[39]$ .

### 3.1.5 Cas de l'oxygène

Les expériences réalisées en 1993 par F. Mulhauser et H. Schneuwly sur le dioxyde de soufre ( $SO_2$ )[7], ont permis d'étudier le transfert de muon sur l'oxygène. Le spectre de rayons X obtenu est présenté figure (3.2). Cette étude met en évidence une structure particulière à deux exponentielles qui ne correspond pas au comportement trouvé précédemment. Pour tenter d'expliquer ce résultat, Werthmüller et ses collaborateurs supposent que le taux de transfert muonique sur l'oxygène  $\lambda_o$  dépend de l'énergie cinétique des ( $p\mu$ ) [2]. Ainsi, des ( $p\mu$ ) non thermalisés pour qui le processus de transfert serait plus efficace qu'à l'énergie thermique produiraient la décroissance plus rapide observée aux temps courts. Pour des temps plus longs, la thermalisation est totale et le spectre retrouve le comportement observé avec les autres éléments.

### 3.1.6 Origine physique des ( $p\mu$ ) non thermalisés

La première question qui nous vient alors à l'esprit concerne l'origine physique de ces hydrogènes muoniques non thermalisés. Une explication possible est donnée par l'étude des processus de désexcitation des ( $p\mu$ ) formés juste après l'injection des muons dans la cellule. En effet, comme nous l'avons déjà mentionné plus haut, un de ces modes de désexcitation correspond à une collision sur des atomes d'hydrogène du mélange. L'énergie interne des niveaux excités est alors convertie en énergie cinétique qui se répartit entre les deux corps entrant en collision. Des calculs théoriques récents [42] appuyés par des résultats expérimentaux menés avec des atomes d'hydrogène pioniques [42, 43], montrent que la distribution énergétique des ( $p\mu$ ) après désexcitation est loin d'être une distribution thermalisée à la température de la cellule. Plus précisément, elle présente deux composantes principales : une autour de l'énergie thermique  $E_{th} \simeq 0.04$  eV et une autre centrée autour d'une énergie cinétique  $E_c \geq 10$  eV (voir figure (3.3)). La thermalisation progressive de la distribution plus énergétique explique alors la présence de ( $p\mu$ ) encore non thermalisés au début de l'enregistrement du spectre.

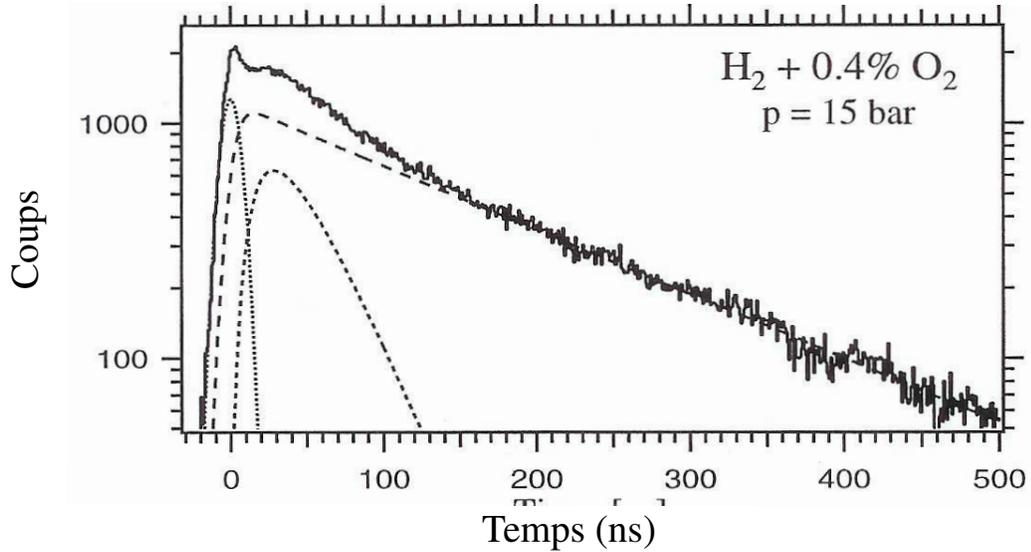


FIG. 3.2 – Spectre de rayons X expérimental de désexcitation de l'oxygène muonique, extrait de [41].

### 3.1.7 Modèle à deux composantes

Privés de toute prévision théorique sur la dépendance du taux de transfert avec l'énergie cinétique de collision, Werthmüller *et al.* proposent un modèle simplifié à deux composantes [2]. Le taux de transfert est alors décrit par la fonction suivante :

$$\lambda_o(E) = \begin{cases} \lambda_o^{th} & \text{pour } E \leq E_1 \\ \lambda_o^e & \text{pour } E_1 \leq E \leq E_2 \end{cases} \quad (3.8)$$

où  $\lambda_o^{th} = 0.85 \cdot 10^{11} s^{-1}$  est la valeur thermique du taux de transfert déterminé par le comportement aux temps longs du spectre de rayons X.  $\lambda_o^e$ ,  $E_1$  et  $E_2$  sont des paramètres ajustables du modèle.  $E_1$  représente l'énergie cinétique en dessous de laquelle les  $(p\mu)$  peuvent être considérés comme thermalisés.  $E_2$  fixe l'énergie maximale des  $(p\mu)$  non thermalisés que l'on nomme *épithermiques* et pour lesquels le taux de transfert est égal à  $\lambda_o^e$ . A partir de ce modèle, des simulations Monte Carlo du spectre de rayons X ont permis d'ajuster les valeurs de ces paramètres. On trouve :  $E_1 \simeq 0.11$  eV,  $E_2 \simeq 0.22$  eV et  $\lambda_o^e \simeq 3.9 \cdot 10^{11} s^{-1}$ . Ces résultats mettent en valeur une dépendance forte du taux de transfert muonique sur l'oxygène avec l'énergie cinétique des  $(p\mu)$  au voisinage de l'énergie thermique.

Nous allons maintenant voir comment cette dépendance peut être mise à profit pour mesurer la structure hyperfine de l'hydrogène muonique.

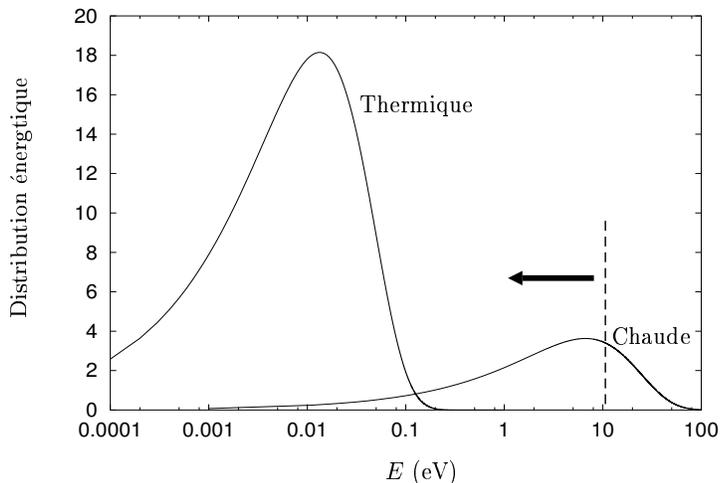


FIG. 3.3 – Distributions énergétiques normalisées des  $(p\mu)$  au début de l'enregistrement de spectre. La flèche indique le sens de la thermalisation de la composante chaude.

## 3.2 Expérience proposée

### 3.2.1 Mode opératoire

Le principe de l'expérience proposée par A. Adamczak *et al.* pour mesurer la structure hyperfine de l'hydrogène muonique est présenté sur la figure (3.4). Comme dans les expériences précédentes de mesure du taux de transfert, un jet de muons est envoyé sur une cellule contenant de l'hydrogène avec une petite quantité d'oxygène. On enregistre alors le spectre de fluorescence des oxygènes muoniques ainsi formés. La thermalisation totale des  $(p\mu)$  est atteinte au bout d'un temps  $t_0$  suffisamment grand ( $\sim 300$  ns). Ces atomes se trouvent alors dans leur état fondamental de structure hyperfine ( $F = 0$ ). Le spectre observé est similaire à celui de la figure (3.2) pour  $t \geq t_0$ .

On suppose maintenant que l'on dispose d'un laser dont la fréquence est accordable autour de la fréquence  $f_{hf}$  de la transition hyperfine  $(p\mu)_{1s}^{F=1} \rightarrow (p\mu)_{1s}^{F=0}$  ( $\Delta E^{\text{HFS}} \simeq 0.18$  eV, soit  $f^{\text{HFS}} \simeq 4.35 \cdot 10^{10}$  KHz). A un instant  $t_1 \geq t_0$ , on envoie le faisceau laser sur la cellule et on balaie sa fréquence autour de  $f_{hf}$ . Lorsque la fréquence du laser passe par  $f_{hf}$ , un certain nombre de  $(p\mu)$  sont excités et passent sur le niveau de structure fine excité ( $F = 1$ ). Par relaxation collisionnelle avec des molécules d'hydrogène, ils retombent ensuite dans leur état fondamental. Par ce processus, ils ont acquis une énergie cinétique supplémentaire de l'ordre de  $0.12$  eV<sup>2</sup>. Ils entrent donc dans le régime épithermique. Le transfert muonique sur l'oxygène

<sup>2</sup>En effet, le transfert d'énergie interne sous forme cinétique est donné pour un hydrogène muonique par :  $[m_{\text{H}_2}/(m_{\text{H}_2} + m_{p\mu})]\Delta E^{\text{HFS}} \sim 0.12$  eV.

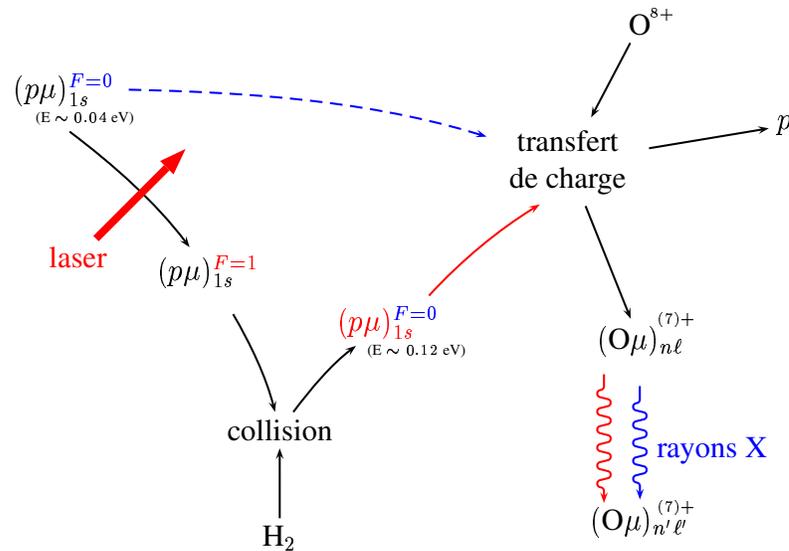


FIG. 3.4 – Principe de l'expérience proposée pour mesurer la structure hyperfine de l'état fondamental de l'hydrogène muonique.

étant plus efficace à cette énergie, on doit observer une augmentation de l'intensité du spectre de rayons X émis par désexcitation des  $(\text{O}\mu)$ . La fréquence du laser pour laquelle est observée cette augmentation correspond donc à la fréquence de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique, dont on obtient ainsi une mesure.

Sur la figure (3.5) nous avons schématisé l'évolution attendue de l'intensité des rayons X lorsque la fréquence du laser passe par  $f_{hf}$ . La variation de l'intensité est directement liée à la variation de l'efficacité du processus de transfert entre les énergies thermiques et épithermiques.

### 3.3 Nécessité d'une étude théorique du transfert muonique

Afin d'étudier l'efficacité de leur méthode, A. Adamczak *et al.* ont réalisé des simulations Monte Carlo du spectre de rayons X des  $(\text{O}\mu)$ , avec et sans laser [3]. En utilisant la dépendance du taux de transfert muonique sur l'oxygène trouvée par Werthmüller *et al.*, ils ont montré que la modification du spectre lorsque le laser entre en résonance avec la transition hyperfine des  $(p\mu)$ , est suffisamment importante pour effectuer une mesure précise de leur structure hyperfine. Cependant, la mise en œuvre d'une telle expérience nécessite des installations spécifiques dont seulement quelques instituts disposent. L'acceptation d'un tel projet de recherche passe par la présentation d'une analyse de faisabilité de l'expérience proposée. Le point

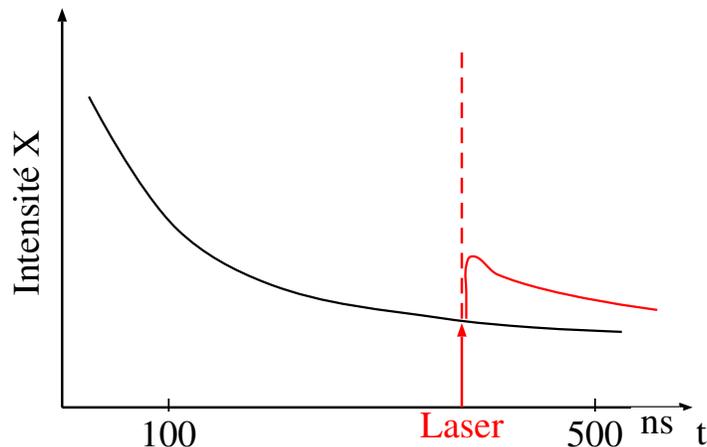


FIG. 3.5 – Schématisation de l'effet attendu sur l'intensité des rayons X émis lorsque le laser passe par la fréquence  $f_{hf}$ .

charnière de la proposition de A. Adamczak et al. est clairement la dépendance du taux de transfert sur l'oxygène avec l'énergie cinétique des ( $p\mu$ ). Si le modèle à deux composantes a permis de reproduire les résultats expérimentaux de manière satisfaisante, il n'est pas suffisant pour se convaincre de la réalité d'une telle dépendance. Seulement deux calculs théoriques avaient été réalisés sur ce sujet ; ils utilisaient des méthodes approchées pour traiter le processus de transfert. Le premier calcul, réalisé par Gershtein en 1962 [4] prévoit un taux de transfert constant égal à  $0.68 \cdot 10^{11} s^{-1}$ . En utilisant un potentiel de type Thomas-Fermi, P. K. Haff *et al.* calculent en 1977, que le taux de transfert doit être croissant en fonction de l'énergie de collision [5]. Plus récemment, Sultanov et Adhikari ont trouvé que ce taux de transfert décroissait avec l'énergie cinétique [6]. Ces résultats contradictoires plaident donc pour la mise en œuvre d'une étude théorique plus précise du processus afin de pouvoir statuer sur cette question cruciale.

# Chapitre 4

## Modèle colinéaire

Dans ce chapitre, nous présentons les premiers résultats que nous avons obtenus sur le transfert de muon entre un hydrogène muonique et une molécule d'oxygène  $O_2$ . Ces résultats correspondent à un calcul quantique exact en dimensionnalité réduite. Cette approche colinéaire nous a permis de bien comprendre les processus physiques qui interviennent dans le transfert muonique.

### 4.1 Description du processus de transfert

#### 4.1.1 Modèle théorique

Le transfert de charge muonique entre un hydrogène muonique et l'oxygène peut être décrit de la manière suivante :

1. Une phase d'*approche* durant laquelle l'hydrogène muonique se rapproche de la molécule d'oxygène.
2. La phase de *transfert* qui correspond à l'échange du muon.
3. La réaction se termine enfin par la *dispersion* des produits formés.

Pendant la phase d'approche, l'hydrogène muonique est soumis au champ électrostatique des noyaux de l'oxygène, plus ou moins écranté par le nuage électronique de la molécule. Cependant, du fait de sa petite taille, l'hydrogène muonique est très peu polarisable. On peut donc considérer qu'il va traverser le nuage électronique de l'oxygène comme une particule neutre, sans interagir avec les électrons. De plus, les premiers travaux menés sur le transfert muonique ont montré que l'échange de charge muonique ne se produit que lorsque l'hydrogène muonique se trouve à une distance très petite d'un des noyaux de l'oxygène ( $\sim 0.05 \text{ \AA}$ ) [4]. C'est pourquoi pour modéliser ce processus de transfert nous avons traité l'oxygène comme un ion  $O^{8+}$  en négligeant les effets moléculaires ainsi que la structure électronique (voir figure (4.1)). Dans la cadre de ces approximations, le transfert de muon entre un hydrogène muonique et un atome d'oxygène peut être décrit par la collision inélastique

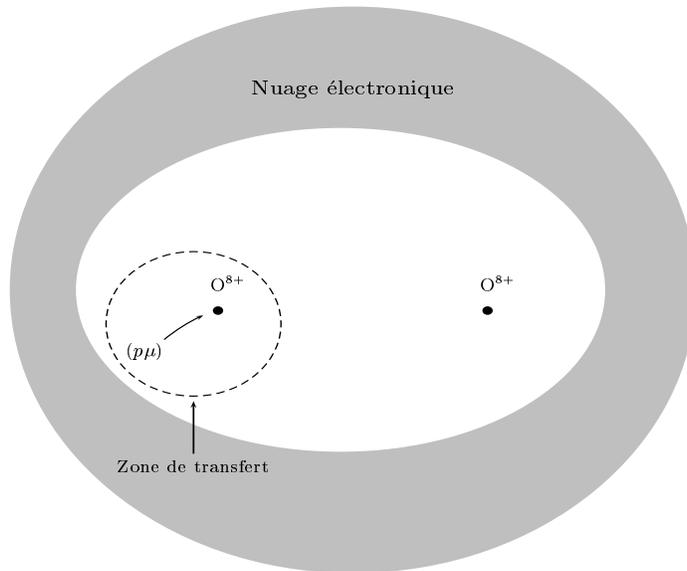


FIG. 4.1 – Schématisation de la zone de transfert.

suivante :



C'est cette réaction que nous avons étudiée en configuration colinéaire. Cette approche simplificatrice correspond au cas où les trois particules se déplacent sur une même droite.

### 4.1.2 Paramétrisation du système

Le problème que nous avons à traiter est un problème à trois corps en interaction électrostatique Coulombienne. Pour décrire ce système, on peut utiliser les coordonnées de Jacobi. Une manière possible de définir ces coordonnées est représentée sur la figure (4.2).

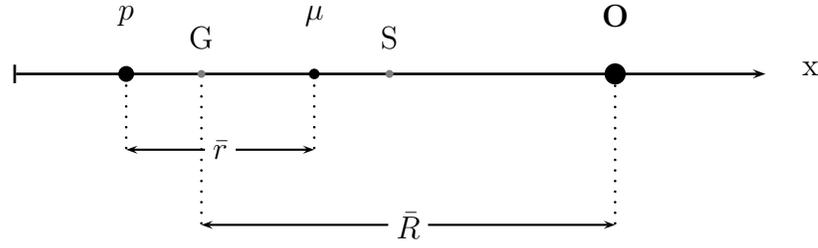
Les coordonnées de Jacobi  $(S, \bar{R}, \bar{r})$  sont alors données par :

$$S = (m_p x_p + m_\mu x_\mu + m_o x_o) / M \quad (4.2)$$

$$\bar{R} = x_o - (m_p x_p + m_\mu x_\mu) / (m_p + m_\mu) \quad (4.3)$$

$$\bar{r} = x_\mu - x_p \quad (4.4)$$

où  $M = m_p + m_\mu + m_o$  est la masse totale du système. Dans le cas d'un système isolé, l'étude du mouvement peut être réduite à celle du mouvement dans le référentiel du centre de masse du système, qui se déplace suivant une trajectoire rectiligne et

FIG. 4.2 – *Coordonnées de Jacobi*

uniforme par rapport au référentiel du laboratoire. Dans ce référentiel, les coordonnées  $\bar{R}$  et  $\bar{r}$  sont suffisantes pour décrire le problème. Comme on peut le voir sur la figure (4.2), ces coordonnées sont particulièrement bien adaptées pour décrire le canal d'entrée de la réaction (4.1) :  $(p\mu)_{n=1} + \text{O}^{8+}$ . En effet, lorsque  $\bar{R} \gg \bar{r}$ , le potentiel d'interaction tend vers celui de l'hydrogène muonique qui sera progressivement perturbé par l'interaction avec le noyau d'oxygène au fur et à mesure que  $\bar{R}$  diminue.

De la même manière, on peut définir un autre système de coordonnées de Jacobi qui sera cette fois bien adapté pour décrire les canaux de sortie  $p + (\text{O}\mu)_{n'}^{7+}$ . La coordonnée  $\bar{r}$  correspond alors à la distance entre le noyau d'oxygène et le muon, et  $\bar{R}$  est la distance du proton au centre de masse du système  $\text{O}^{8+} - \mu$ .

Pour différencier ces deux jeux de coordonnées, nous leur affecterons un indice  $i$ . Ainsi,  $(\bar{R}_1, \bar{r}_1)$  représentera le système de coordonnées bien adapté au canal d'entrée, alors que  $(\bar{R}_2, \bar{r}_2)$  sera celui adapté aux canaux de sortie.

### 4.1.3 Description qualitative du transfert

En utilisant  $(\bar{R}_1, \bar{r}_1)$  le potentiel d'interaction du système se met sous la forme :

$$V = -\frac{e^2 Z}{|x_\mu - x_o|} + \frac{e^2 Z}{|x_p - x_o|} - \frac{e^2}{|x_p - x_\mu|} \quad (4.5)$$

avec :

$$|x_\mu - x_o| = \bar{R}_1 - (1 - \beta)\bar{r}_1 \quad (4.6)$$

$$|x_p - x_o| = \bar{R}_1 + \beta\bar{r}_1 \quad (4.7)$$

$$|x_p - x_\mu| = \bar{r}_1 \quad (4.8)$$

où l'on a posé  $\beta = m_\mu / (m_p + m_\mu)$ .  $Z$  est la charge du noyau d'oxygène ( $Z = 8$ ) et  $e^2 = q_\mu^2 / 4\pi\epsilon_0$  où  $q_\mu$  est la charge électrique du muon, égale à la charge élémentaire de l'électron.

Pour se faire une image du processus de transfert, on peut représenter ce potentiel sous forme de courbes de niveaux. Un exemple est donné figure (4.3).

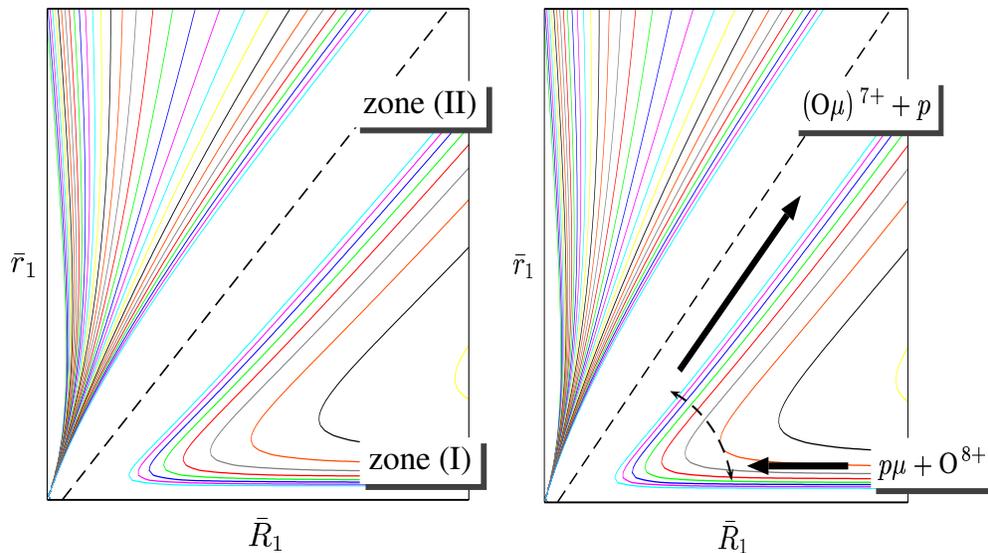


FIG. 4.3 – Potentiel d'interaction à trois corps en coordonnées de Jacobi. Sur la figure de droite les flèches symbolisent l'évolution dynamique du système.

Deux zones se dégagent nettement. La première (zone (I)), est définie par la condition  $\bar{R}_1 \gg \bar{r}_1$  : localisée dans le puits de potentiel de l'hydrogène muonique, elle correspond à l'approche du système sur le canal d'entrée. La seconde (zone (II)), se trouve le long de la ligne en pointillés qui correspond à la singularité Coulombienne de l'ion muonique  $(O\mu)^{7+}$ . Pour des valeurs de  $\bar{R}_1$  suffisamment grandes, on retrouve ici les canaux de sortie de la réaction étudiée. La région située à gauche des pointillés correspond à un arrangement du système dans lequel le muon est passé à droite du noyau d'oxygène. Cette région de potentiel sera toujours considérée inaccessible dans notre approche.

Il est alors possible de donner une description qualitative du processus de transfert que nous avons schématisé sur la figure (4.3). Pendant la phase d'approche, le système est situé dans la zone (I) et évolue vers des valeurs de  $\bar{R}_1$  plus petites. Lorsque la barrière de potentielle est suffisamment abaissée, il entre dans la zone interne où le muon peut se transférer sur l'oxygène. Une fois ce transfert effectué, le système se retrouve dans la zone (II) et évolue vers des valeurs de  $\bar{R}_1$  croissantes, ce qui correspond à la dispersion des produits formés.

### Remarque

Dans une description plus réaliste du phénomène, l'état initial doit être décrit par un paquet d'ondes localisé dans la zone (I) se déplaçant vers la zone interne. Arrivé dans cette région, il peut, suivant une certaine probabilité de transfert que

nous cherchons à déterminer, passer la barrière de potentiel et évoluer ensuite vers la zone (II). La partie du paquet qui n'a pas réagi revient alors vers la zone (I) : c'est la fraction élastique du phénomène collisionnel étudié.

## 4.2 Méthode numérique utilisée

Dans un premier temps, nous avons traité ce problème par une méthode dépendante du temps en propageant des paquets d'onde sur la surface de potentiel. Cette technique s'est avérée particulièrement mal adaptée pour deux raisons essentielles. La première est liée au domaine énergétique qui nous intéresse. Aux énergies très basses, le paquet d'onde est fortement délocalisé spatialement ce qui rend difficile sa description. La seconde raison provient du traitement des singularités Coulombiennes : elles nécessitent en effet des grilles de points très fines qui augmentent de façon critique le domaine spectral à prendre en compte. Par ailleurs, la dynamique d'approche est très lente et augmente considérablement les temps de calcul.

Finalement, nous avons opté pour une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps du type *close-coupling*. Le principe de cette technique consiste à calculer les états stationnaires de diffusion associés à la réaction (4.1), puis à analyser leur comportement asymptotique. On peut ainsi déterminer la matrice de collision  $\mathbf{S}$  et extraire les probabilités de transfert.

Comme nous l'avons vu précédemment, les coordonnées de Jacobi sont particulièrement bien adaptées pour décrire le système dans les zones asymptotiques. Cependant, pour calculer avec précision le transfert muonique, nous avons besoin de bien décrire l'évolution du système dans la zone interne. Ainsi, pour traiter numériquement ce processus, nous avons préféré utiliser les coordonnées hypersphériques qui ont déjà montré leur efficacité dans des problèmes similaires. Les principales étapes du calcul peuvent être résumées ainsi :

1. Ecriture de l'hamiltonien
2. Calcul des états adiabatiques
3. Intégration des équations couplées
4. Analyse asymptotique

Avant de présenter les résultats de cette étude, nous allons d'abord détailler la mise en œuvre de ces différentes étapes.

## 4.3 Hamiltonien en coordonnées hypersphériques

### 4.3.1 Coordonnées hypersphériques

Pour définir les coordonnées hypersphériques, on part de l'un des systèmes de coordonnées de Jacobi. Choisissons par exemple le système  $(\bar{R}_1, \bar{r}_1)$  bien adapté pour

décrire le canal d'entrée  $(p\mu) + O^{8+}$  de la réaction (4.1). Dans le référentiel du centre de masse, si on note  $V$  le potentiel d'interaction entre les trois corps, l'Hamiltonien du problème est donné par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{o,p\mu}} \frac{\partial^2}{\partial \bar{R}_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_{p,\mu}} \frac{\partial^2}{\partial \bar{r}_1^2} + V(\bar{R}_1, \bar{r}_1) \quad (4.9)$$

avec  $m_{o,p\mu} = m_o(m_p + m_\mu)/(m_o + m_p + m_\mu)$  et  $m_{p,\mu} = m_p m_\mu/(m_p + m_\mu)$ . On définit alors de nouvelles coordonnées  $(R_1, r_1)$  dites *coordonnées pondérées par les masses* :

$$R_1 = \sqrt{\frac{m_{o,p\mu}}{m}} \bar{R}_1 \quad (4.10)$$

$$r_1 = \sqrt{\frac{m_{p,\mu}}{m}} \bar{r}_1 \quad (4.11)$$

avec :

$$m = \left( \frac{m_p m_\mu m_o}{m_p + m_\mu + m_o} \right)^{1/2} \quad (4.12)$$

L'Hamiltonien prend alors la forme :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} \right) + V(R_1, r_1) \quad (4.13)$$

Les coordonnées hypersphériques  $(\rho, \theta)$  sont définies à partir de  $(R_1, r_1)$  de la manière suivante :

$$R_1 = \rho \cos \theta \quad (4.14)$$

$$r_1 = \rho \sin \theta \quad (4.15)$$

soit :

$$\rho = \sqrt{R_1^2 + r_1^2} \quad (4.16)$$

$$\tan \theta = \frac{r_1}{R_1} \quad (4.17)$$

Dans ce système de coordonnées, l'Hamiltonien (4.13) devient :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + V(\rho, \theta) \quad (4.18)$$

La transformation permettant de passer de l'expression (4.13) à (4.18) est détaillée dans l'annexe C.

### Remarque

On peut aussi définir les coordonnées pondérées par les masses du système  $(\bar{R}_2, \bar{r}_2)$  bien adaptées aux canaux de sortie. Ces coordonnées  $(R_2, r_2)$  sont données par :

$$R_2 = \sqrt{\frac{m_{p,o\mu}}{m}} \bar{R}_2 \quad (4.19)$$

$$r_2 = \sqrt{\frac{m_{o,\mu}}{m}} \bar{r}_2 \quad (4.20)$$

où  $m_{p,o\mu} = m_p(m_o + m_\mu)/(m_o + m_p + m_\mu)$  et  $m_{o,\mu} = m_o m_\mu/(m_o + m_\mu)$ . On passe de  $(R_1, r_1)$  à  $(R_2, r_2)$  par la transformation suivante :

$$\begin{pmatrix} R_2 \\ r_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta_s & \sin \theta_s \\ \sin \theta_s & -\cos \theta_s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_1 \\ r_1 \end{pmatrix} \quad (4.21)$$

où  $\theta_s = \arctan(m_\mu/m)$  est appelé l'angle de *rotation cinématique*. Sur la figure (4.4) nous avons représenté ces deux systèmes de coordonnées avec les coordonnées hypersphériques  $(\rho, \theta)$ . L'axe  $R_2$  correspond à la singularité Coulombienne en  $r_2 = |x_\mu - x_o| = 0$ .

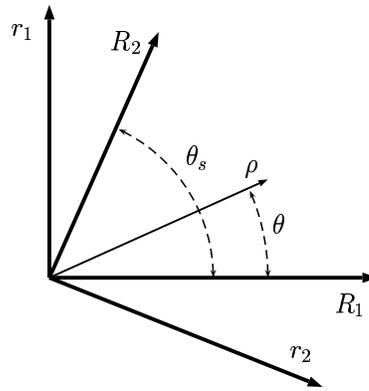


FIG. 4.4 – Représentation spatiale des systèmes de coordonnées de Jacobi pondérées par les masses.

Pour décrire l'ensemble des configurations accessibles au système, l'angle  $\theta$  varie dans l'intervalle  $[0, \theta_s]$ . On a alors :

$$R_2 = \rho \cos(\theta_s - \theta) \quad (4.22)$$

$$r_2 = \rho \sin(\theta_s - \theta) \quad (4.23)$$

Le rayon hypersphérique  $\rho = \sqrt{R_1^2 + r_1^2} = \sqrt{R_2^2 + r_2^2}$  est donc indépendant de l'arrangement considéré. C'est cette propriété qui permet de bien décrire la dynamique du système dans la zone interne.

### 4.3.2 Equation de Schrödinger

La recherche des états propres de collision  $\psi^E$  d'énergie  $E$  passe par la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H\psi^E = E\psi^E \quad (4.24)$$

en effectuant la transformation  $\psi^E \rightarrow \psi^E \sqrt{\rho}$  cette équation s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \psi^E(\rho, \theta) + \left( V(\rho, \theta) - \frac{\hbar^2}{8m\rho^2} \right) \psi^E(\rho, \theta) = E\psi^E(\rho, \theta) \quad (4.25)$$

où le potentiel d'interaction est donné par :

$$V = -\frac{e^2 Z}{|x_\mu - x_o|} + \frac{e^2 Z}{|x_p - x_o|} - \frac{e^2}{|x_p - x_\mu|} \quad (4.26)$$

avec :

$$|x_\mu - x_o| = \left( \frac{m}{m_{o,p\mu}} \right)^{1/2} \rho \cos \theta + (1 - \beta) \left( \frac{m}{m_{p,\mu}} \right)^{1/2} \rho \sin \theta \quad (4.27)$$

$$|x_p - x_o| = \left( \frac{m}{m_{o,p\mu}} \right)^{1/2} \rho \cos \theta + \beta \left( \frac{m}{m_{p,\mu}} \right)^{1/2} \rho \sin \theta \quad (4.28)$$

$$|x_p - x_\mu| = \left( \frac{m}{m_{p,\mu}} \right)^{1/2} \rho \sin \theta \quad (4.29)$$

## 4.4 Calcul des états adiabatiques

### 4.4.1 Equations couplées

Pour résoudre l'équation (4.25) nous avons utilisé la méthode *diabatique par secteur* [44]. Le domaine d'intégration  $[\rho_0, \rho_{end}]$  est divisé en  $N_\rho$  secteurs. Le  $n^{ième}$  secteur est ainsi défini par la donnée de son centre  $\rho_n$  et de sa taille  $2\delta\rho_n$ , telle que si  $\rho$  appartient à ce secteur :  $\rho_n - \delta\rho_n \leq \rho < \rho_n + \delta\rho_n$ . Dans chaque secteur la fonction d'onde est développée sur une base de fonctions diabatiques ne dépendant que de l'angle hypersphérique  $\theta$ . Ces fonctions correspondent aux états  $\phi_i(\theta, \rho_n)$ , vecteurs propres de l'Hamiltonien calculés à  $\rho = \rho_n$  fixé. A l'intérieur du secteur numéro  $n$ , on écrira donc :

$$\psi^E(\rho, \theta) = \sum_{i=1}^N f_i(\rho) \phi_i(\theta, \rho_n) \quad (4.30)$$

où  $N$  représente le nombre de fonctions de base utilisées. En injectant (4.30) dans l'équation (4.25), on obtient un système équivalent de  $N_{ch}$  équations couplées :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - E \right) f_j(\rho) + \sum_{i=1}^N Q_{ji}(\rho_n; \rho) f_i(\rho) = 0 \quad (4.31)$$

avec :

$$Q_{ji}(\rho_n; \rho) = \langle \phi_j(\theta, \rho_n) | -\frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V(\rho, \theta) - \frac{\hbar^2}{8m\rho^2} | \phi_i(\theta, \rho_n) \rangle \quad (4.32)$$

#### 4.4.2 Base adiabatique

L'écriture des équations couplées nécessite de calculer les états adiabatiques du système  $\phi_i(\theta, \rho)$ , solutions de l'équation à  $\rho$  fixé :

$$H_\mu(\rho) \phi_i(\theta, \rho) = \epsilon_i(\rho) \phi_i(\theta, \rho) \quad (4.33)$$

avec :

$$H_\mu(\rho) = -\frac{1}{2m\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + V(\rho, \theta) - \frac{1}{8m\rho^2} \quad (4.34)$$

Le problème consiste maintenant à rechercher les états liés d'un potentiel présentant deux singularités Coulombiennes : l'une en  $\theta = 0$  qui correspond au cas où le proton et le muon sont confondus, et l'autre pour  $\theta = \theta_\mu = \arctan(m_\mu/m)$  lorsque la distance muon-oxygène est nulle. De nombreuses méthodes numériques comme l'interpolation de Schwartz [45, 46] ou de Lagrange [47], ou encore des techniques de mapping [48, 49], permettent de traiter le problème Coulombien à une singularité. Ces méthodes spécifiques visent à augmenter la densité de points de grille au voisinage de la singularité. Pour traiter le cas des deux singularités présentes dans notre problème, nous avons utilisé une autre méthode en cherchant une transformation permettant de régulariser ce potentiel.

#### Régularisation du potentiel

En utilisant les relations (4.21) entre les systèmes de coordonnées de Jacobi, on peut mettre le potentiel sous la forme :

$$V = -\frac{e^2}{k_1 \rho \sin \theta} - \frac{Ze^2}{k_2 \rho \sin(\theta_s - \theta)} + \frac{Ze^2}{K_1 \rho \cos \theta + \beta k_1 \rho \sin \theta} \quad (4.35)$$

où :

$$k_i = \left( \frac{m}{m_{\beta,\gamma}} \right)^{1/2} \quad (4.36)$$

$$K_i = \left( \frac{m}{m_{\alpha,\beta\gamma}} \right)^{1/2} \quad (4.37)$$

avec  $(\alpha, \beta, \gamma) = (O, p, \mu)$  si  $i = 1$  et  $(\alpha, \beta, \gamma) = (p, O, \mu)$  si  $i = 2$ . En posant alors  $x = 2\theta_o/\theta_\mu - 1$ , on obtient :

$$V = V_1 + V_2 \quad (4.38)$$

avec :

$$V_1 = \left( \frac{2e^2}{\rho} \right) \frac{-(1/k_1) \sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(1-x) \right] - (Z/k_2) \sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(1+x) \right]}{\cos(\theta_\mu x) - \cos(\theta_\mu)} \quad (4.39)$$

et

$$V_2 = \left( \frac{e^2}{\rho} \right) \frac{Z}{K_1 \cos \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(1+x) \right] + \beta_o k_1 \sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(1+x) \right]} \quad (4.40)$$

Ce nouvel ensemble  $(\rho, x)$  est équivalent aux coordonnées hypersphériques mais désormais, le domaine de variation de la coordonnée angulaire se réduit à l'intervalle  $[-1, 1]$  et les singularités du potentiel se trouvent aux bornes de celui-ci en  $x = \pm 1$ . L'hamiltonien  $H_\mu$  prend la forme :

$$H_\mu = -\frac{2\hbar^2}{m\theta_\mu^2 \rho^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1 + V_2 - \frac{1}{8m\rho^2} \quad (4.41)$$

En posant  $\phi_i(\theta, \rho) = (1-x^2)^{\frac{1}{2}} \varphi_i(x, \rho)$ , l'équation aux valeurs propres (4.33) devient :

$$\left( -\frac{2\hbar^2}{m\theta_\mu^2 \rho^2} \mathbf{D} + (1-x^2)(V_1 + V_2 - \frac{1}{8m\rho^2}) \right) \varphi_i(x, \rho) = (1-x^2)\epsilon_i(\rho)\varphi_i(x, \rho) \quad (4.42)$$

où  $\mathbf{D}$  est l'opérateur :

$$\mathbf{D} = (1-x^2) \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{1-x^2} \quad (4.43)$$

D'après l'expression (4.40) de  $V_2$ , le terme  $(1-x^2)(V_2 - \frac{1}{8m\rho^2})$  ne présente pas de singularité en  $x = \pm 1$ , montrons que c'est aussi le cas pour  $(1-x^2)V_1$ . En examinant (4.39), il nous suffit de montrer que la fonction  $F(x)$  définie par :

$$F(x) = \frac{(1-x^2)}{\cos(\theta_\mu x) - \cos(\theta_\mu)} \quad (4.44)$$

possède une limite finie en  $x = \pm 1$ . Or,

$$\frac{1}{\cos(\theta_\mu x) - \cos(\theta_\mu)} = -\frac{1}{2 \sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(x+1) \right] \sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(x-1) \right]} \quad (4.45)$$

soit

$$F(x) = \frac{1}{2} \frac{1+x}{\sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(1+x) \right]} \frac{1-x}{\sin \left[ \frac{\theta_\mu}{2}(1-x) \right]} \quad (4.46)$$

il vient donc :

$$\lim_{x \rightarrow \pm 1} F(x) = \frac{2}{\theta_\mu \sin \theta_\mu} \quad (4.47)$$

Cette fonction est donc bien régulière en  $x = \pm 1$ . Nous avons donc trouvé une transformation permettant d'obtenir une équation sans point divergent. Cette renormalisation nous a permis de calculer efficacement les niveaux adiabatiques sans avoir recours aux méthodes spécifiques de traitement des singularités Coulombiennes.

### Résolution de l'équation aux valeurs propres

Les fonctions  $\varphi_i(x, \rho)$  sont développées sur les  $n_L$  premiers états propres de l'opérateur  $\mathbf{D}$ . Ces états correspondent aux fonctions de Legendre associées  $P_n^1(x)$  (voir annexe D). On obtient alors l'équation aux valeurs propres généralisée suivante :

$$\left( -\frac{2\hbar^2}{m\theta_\mu^2 \rho^2} \mathbf{D} + \mathbf{W} \right) \Phi_i(\rho) = \epsilon_i(\rho) \mathbf{O} \Phi_i(\rho) \quad (4.48)$$

où  $\Phi_i(\rho)$  est le vecteur des composantes de la fonction  $\varphi_i(x, \rho)$  dans la base des fonctions de Legendre.  $\mathbf{D}$  est la représentation de l'opérateur (4.43), elle est donnée par la matrice diagonale  $\mathbf{D}_{nn'} = -n(n+1)\delta_{nn'}$ .  $\mathbf{W}$  est la matrice correspondant aux termes potentiels et  $\mathbf{O}$  celle de la fonction  $(1-x^2)$ . Dans la base DVR (voir annexe E), les matrices des termes potentiels et de  $(1-x^2)$  sont diagonales. La matrice de passage de la base DVR à la base des fonctions de Legendre permet alors de calculer facilement par simple multiplication matricielle les représentations  $\mathbf{W}$  et  $\mathbf{O}$ . Pour transformer (4.48) en une équation aux valeurs propres standard, multiplions la matriciellement à gauche par  $\mathbf{O}^{-\frac{1}{2}}$ . Il vient,

$$\mathbf{O}^{-\frac{1}{2}} \left( -\frac{2\hbar^2}{m\theta_\mu^2 \rho^2} \mathbf{D} + \mathbf{W} \right) \Phi_i(\rho) = \epsilon_i(\rho) (\mathbf{O}^{\frac{1}{2}} \Phi_i(\rho)) \quad (4.49)$$

en utilisant la relation  $\mathbf{O}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{O}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{1}$  on obtient :

$$\mathbf{O}^{-\frac{1}{2}} \left( -\frac{2\hbar^2}{m\theta_\mu^2 \rho^2} \mathbf{D} + \mathbf{W} \right) \mathbf{O}^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{O}^{\frac{1}{2}} \Phi_i(\rho)) = \epsilon_i(\rho) (\mathbf{O}^{\frac{1}{2}} \Phi_i(\rho)) \quad (4.50)$$

il ne reste plus qu'à diagonaliser l'opérateur

$$\mathbf{O}^{-\frac{1}{2}} \left( -\frac{2\hbar^2}{m\theta_\mu^2 \rho^2} \mathbf{D} + \mathbf{W} \right) \mathbf{O}^{-\frac{1}{2}} \quad (4.51)$$

### Convergence et résultats

La convergence de cette méthode est directement liée à la densité de points produite par la quadrature de Gauss-Legendre (voir annexe F) utilisée pour définir la base DVR. Cette densité doit être adaptée à la description du système. Lorsque

l'énergie est basse ou lorsque le rayon hypersphérique  $\rho$  est grand, les fonctions d'onde correspondent à des états localisés autour d'un des noyaux : elles sont donc concentrées au voisinage des bords de l'intervalle d'intégration. Nous nous attendons par conséquent à ce que la méthode converge plus difficilement dans ces conditions. De même lorsque  $\rho$  est grand, il est raisonnable de penser que les niveaux correspondant à l'arrangement  $p+((O\mu)^{7+})$  soient plus lents à converger, puisque les états de l'ion  $(O\mu)^{7+}$  sont plus compacts que ceux de  $(p\mu)$ <sup>1</sup>. Afin d'étudier la convergence de la base adiabatique en fonction du nombre  $n_L$  de fonctions de Legendre utilisées, nous avons évalué l'erreur relative sur les différents niveaux énergie calculés, en prenant comme référence la base adiabatique obtenue avec  $n_L = 450$ .

Avec 150 fonctions de Legendre, 86 états convergent avec une erreur relative inférieure à  $10^{-8}$  pour des valeurs de  $\rho \sim a_0$ . Lorsque  $\rho$  augmente, la convergence se détériore, d'abord pour l'état fondamental de  $(O\mu)$ , puis pour le premier état excité  $n = 2$  vers  $\rho \sim 2a_0$ . Pour repousser la valeur limite du rayon hypersphérique au-delà de laquelle la convergence se dégrade, on augmente le nombre de fonctions de Legendre. Ainsi avec  $n_L = 250$ , l'état fondamental est convergé avec une précision relative de  $10^{-8}$  jusqu'à  $\rho \sim 5a_0$ , et jusqu'à  $\rho \sim 10a_0$  en utilisant 350 fonctions. C'est cette dernière valeur de  $n_L$  que nous avons utilisée pour générer la base adiabatique du calcul. A l'exception des quatre premiers états de  $(O\mu)^{7+}$  qui ne jouent pas un rôle très important dans le processus de transfert, tous les autres états de l'oxygène muonique restent convergés avec une précision relative de l'ordre de  $10^{-4}$  jusqu'à des valeurs de  $\rho$  de l'ordre de  $40a_0$ . Comme nous nous y attendions, les états de l'hydrogène muonique sont plus facilement convergés : l'erreur relative à  $\rho \sim 40a_0$  est de  $10^{-10}$  pour l'état fondamental avec  $n_L = 250$  et atteint  $10^{-12}$  quand  $n_L = 350$ .

La figure (4.5) représente les énergies adiabatiques  $\epsilon_i$  en fonction du rayon hypersphérique  $\rho$ . L'origine des énergies a été choisie pour coïncider avec la limite asymptotique du canal d'entrée  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$ . Les canaux ouverts qui sont susceptibles d'être peuplés sont ceux pour lesquels l'énergie asymptotique est inférieure à l'énergie cinétique de collision  $E$ . Ces courbes permettent déjà de comprendre qualitativement la dynamique du processus de transfert. Partant du canal d'entrée, le système croise diabatiquement le canal de sortie  $p + (O\mu)_{n=7}^{7+}$  sur lequel le transfert sera donc négligeable. Les couplages avec les canaux  $p + (O\mu)_{n=5}^{7+}$  et  $p + (O\mu)_{n=6}^{7+}$  sont plus importants. Cela se manifeste par des croisements évités au niveau desquels le transfert de muon s'opère. Enfin, les canaux  $p + (O\mu)_{n<5}^{7+}$ , qui sont faiblement couplés avec le canal initial, risquent de ne pas être peuplés de manière significative.

### Remarque

La grande précision obtenue pour l'énergie du canal d'entrée est nécessaire dès lors que nous nous intéressons à des processus dans lesquels l'énergie cinétique relative initiale du système est de l'ordre de  $10^{-6}$  eV. En effet, si l'on compare cette

<sup>1</sup>En effet, dans le cas d'un problème Coulombien pur, le rayon moyen des états liés d'un système muonique est donné (en unités muoniques) par  $\langle r \rangle_{nl} = \frac{1}{2z}[3n^2 - l(l+1)]$ .

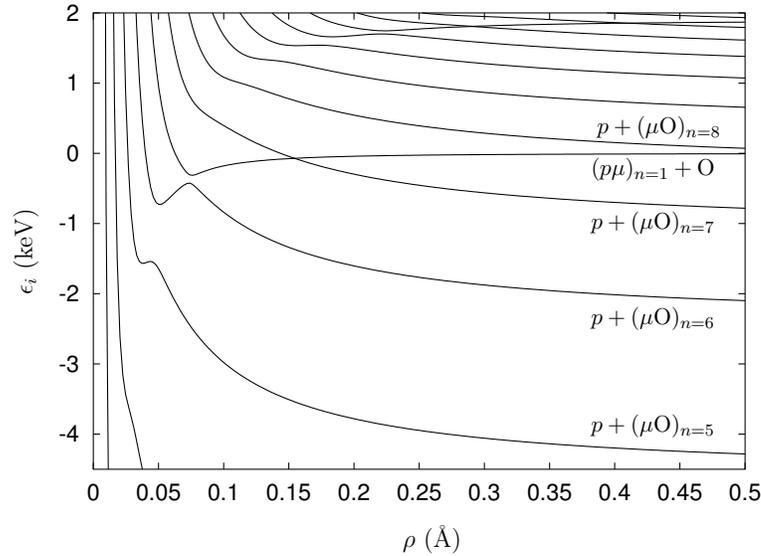


FIG. 4.5 – *Energies adiabatiques en fonction du rayon hypersphérique.*

valeur à celle de l'énergie moyenne du canal d'entrée ( $\sim$  KeV), on peut considérer que le transfert muonique étudié correspond à une *collision ultra froide*, même aux énergies thermiques. Les effets à très basse énergie ne seront donc bien reproduits que si les variations de l'énergie cinétique dans l'intervalle d'étude, ne sont pas masquées par l'imprécision du calcul des états adiabatiques.

## 4.5 Intégration des équations couplées

L'intégration des équations couplées (4.31) est réalisée secteur par secteur en utilisant l'algorithme de De Vogaelere (voir annexe G). La solution obtenue à l'extrémité du secteur  $n$  en  $\rho = \rho_n + \delta_n$  est projetée sur la base diabatique  $\{\phi_i(\theta, \rho_{n+1})\}_{i=1,N}$ . Cette projection sert de condition initiale pour la propagation dans le secteur  $n + 1$ . On propage simultanément  $N$  solutions linéairement indépendantes et leurs dérivées. Ces fonctions correspondent à des conditions initiales en  $\rho = \rho_0$  différentes et s'écrivent comme en (4.30) :

$$\psi_j^E(\rho, \theta) = \sum_{i=1}^N f_{ij}(\rho) \phi_i(\theta, \rho_n) \quad (4.52)$$

On obtient une matrice  $\mathbf{F}$  de dimension  $N \times N$  et sa dérivée  $\mathbf{F}'$  dont le vecteur colonne d'indice  $j$  est formé des composantes de la solution correspondant à la condition initiale  $f_{ij}(\rho_0) = \delta_{ij}$  (c'est à dire, seul le canal  $j$  peuplé en  $\rho = \rho_0$ ). La propagation est effectuée jusqu'à  $\rho = \rho_M$ . Au-delà de cette valeur on parle de *région asymptotique*, qui correspond à des valeurs de  $\rho$  suffisamment grandes pour pouvoir négliger les couplages entre états.

## 4.6 Analyse asymptotique

Pour obtenir la matrice de diffusion  $S$  nous avons utilisé une procédure de *raccordement* usuelle [44]. Pour une énergie  $E$  donnée, les solutions linéairement indépendantes obtenues ne correspondent pas aux solutions physiques du problème. Soit  $N_0$  le nombre de canaux effectivement ouverts à cette énergie. L'analyse asymptotique consiste formellement à construire  $N_0$  combinaisons linéaires des  $\psi_j^E$  que l'on compare à la forme asymptotique des  $N_0$  solutions physiques. Les solutions physiques peuvent s'écrire à l'aide de la matrice de réaction  $\mathbf{K}$  suivant :

$$F_{ij}^K = f_j^s \delta_{ij} + f_i^c K_{ij} \quad (4.53)$$

avec  $1 \leq i \leq N$ ,  $1 \leq j \leq N_0$  et pour les canaux ouverts :

$$f_i^s(R_i) = \frac{1}{\sqrt{k_i}} \sin(k_i R_i) \quad (4.54)$$

$$f_i^c(R_i) = \frac{1}{\sqrt{k_i}} \cos(k_i R_i) \quad (4.55)$$

où  $k_i = \sqrt{2m(E - \epsilon_i)}/\hbar$ , et  $R_i$  représente la coordonnée du système de Jacobi bien adapté à la nature du canal  $i$ . Pour les canaux fermés, on pose  $\kappa_i = \sqrt{2m(\epsilon_i - E)}/\hbar$  et on a :

$$f_i^c(R_i) = e^{-\kappa_i R_i} \quad (4.56)$$

Afin de pouvoir les comparer aux solutions calculées qui sont connues en coordonnées hypersphériques, on projette les  $F_{ij}^K$  le long du rayon hypersphérique  $\rho = \rho_M$ . Si on note  $\mathbf{A}$  la matrice  $N \times N_0$  des combinaisons linéaires des  $\psi_j^E$ , on a :

$$\mathbf{FA} = \mathbf{F}^K \quad (4.57)$$

$$\mathbf{F}'\mathbf{A} = \mathbf{F}'^K \quad (4.58)$$

l'élimination de  $\mathbf{A}$  entre les équations (4.57) et (4.58) permet d'obtenir la matrice  $\mathbf{K}$ . En notant  $\mathbf{Z} = \mathbf{FF}^{-1}$  la matrice dérivée logarithmique de  $\mathbf{F}$ , on obtient :

$$\mathbf{K} = -(\mathbf{ZF}^c - \mathbf{F}'^c)^{-1} (\mathbf{ZF}^s - \mathbf{F}'^s) \quad (4.59)$$

où on a posé :  $\mathbf{F}^K = \mathbf{F}^s + \mathbf{F}^c \mathbf{K}$ . La matrice de diffusion  $\mathbf{S}$  se calcule ensuite à l'aide de la sous-matrice  $\mathbf{K}_o$ , qui correspond aux canaux ouverts de  $\mathbf{K}$  :

$$\mathbf{S} = \frac{1 + i\mathbf{K}_o}{1 - i\mathbf{K}_o} \quad (4.60)$$

Les probabilités de transfert sont alors données par :

$$P_{ij} = |S_{ij}|^2 \quad (4.61)$$

### Remarque

Comme l'énergie translationnelle initiale est très petite, le canal d'entrée mérite un traitement particulier si l'on ne veut pas avoir à intégrer jusqu'à des valeurs trop élevées de  $\rho$  pour d'atteindre les formes asymptotiques (4.54) et (4.55). En effet, pour  $\rho_M \sim 30 a_0$ , le potentiel à longue distance en  $1/R^2$  n'est pas encore négligeable devant l'énergie de collision : la solution correcte de l'équation de Schrödinger est une combinaison linéaire de fonctions de Bessel d'ordre imaginaire [50] que nous avons utilisées pour ce canal. Pour les autres canaux, l'énergie cinétique acquise lors de la collision ( $\geq$  KeV) est suffisamment grande pour analyser ces états avec des sinus et cosinus.

## 4.7 Résultats et discussion

La figure (4.6) représente les probabilités partielles de transfert sur les canaux  $p+(O\mu)_{n=5,6}^{7+}$  ainsi que la probabilité totale de transfert pour des énergies de collision allant de  $10^{-6}$  eV à  $10^3$  eV. La probabilité  $w$  correspond à un calcul mené avec un modèle simplifié que nous présenterons dans le paragraphe suivant. Comme nous l'avions déjà prévu en examinant les courbes adiabatiques, les canaux  $p+(O\mu)_{n=5}^{7+}$  et  $p+(O\mu)_{n=6}^{7+}$  sont très majoritairement peuplés par le processus. Ces calculs montrent aussi une forte probabilité totale de transfert ( $\sim 0.8$ ) indépendante de l'énergie de collision jusqu'à environ 100 eV.

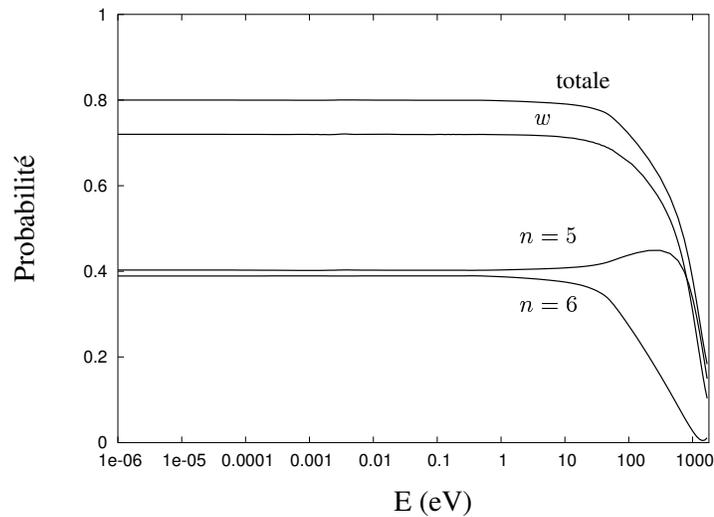


FIG. 4.6 – Probabilités partielles et totale de transfert. Le modèle Landau-Zener est aussi présenté.

### 4.7.1 Modèle Landau-Zener

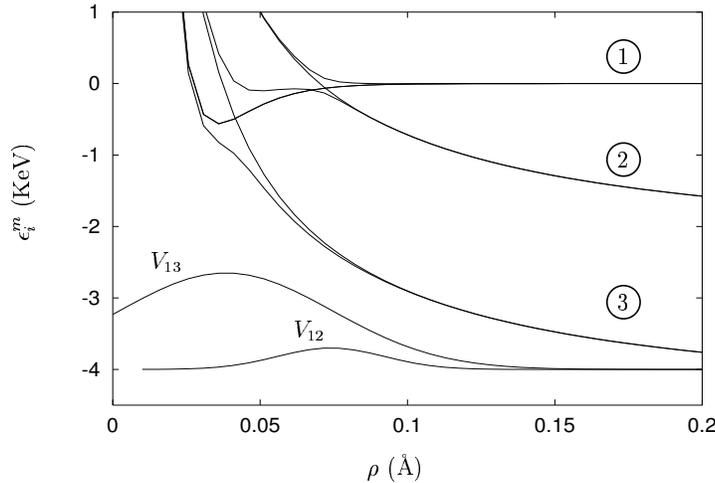


FIG. 4.7 – Modèle Landau-Zener à trois canaux. Les courbes diabatiques et adiabatiques sont représentées. Pour le canal n°1, le niveau diabatique est raccordé à un potentiel de Morse aux petites valeurs de  $\rho$  pour rendre compte de la répulsion à courte distance entre les noyaux. Sur cette figure, les couplages ont été représentés en unité arbitraire mais leur intensité relative est respectée.

Pour vérifier que toute la dynamique de transfert est gouvernée par les croisements entre le canal d'entrée et les deux niveaux de sortie peuplés, nous avons effectué un calcul de type Landau-Zener sur un modèle simplifié de ces trois niveaux. Les croisements évités ont été reproduits en utilisant les formes asymptotiques des différents canaux (voir figure (4.7) et annexe H). Ainsi, l'énergie du canal d'entrée (niveau n°1 du modèle) a été modélisée par :

$$\epsilon_1^m(\rho) = -\alpha \frac{Z}{R_1^2} \sim -\alpha \frac{Z}{\rho^2} \quad (4.62)$$

avec  $\alpha = 3\hbar^2/(2m_{p\mu})$ . Ce terme correspond à une interaction à longue distance ion-dipôle entre  $(p\mu)$  et  $O^{8+}$ . Pour les canaux de sortie c'est l'interaction répulsive Coulombienne entre le proton et l'ion  $(O\mu)^{7+}$  qui domine et donne une énergie asymptotique de la forme :

$$\epsilon_{2,3}^m(\rho) = \frac{Z-1}{R_2} + \epsilon_{6,5} \sim \frac{Z-1}{\rho} + \epsilon_{6,5} \quad (4.63)$$

où  $\epsilon_{6,5}$  sont les énergies asymptotiques des canaux de sortie  $p + (O\mu)_{n=6,5}^{7+}$ . Les couplages entre ces états ont été pris de forme Gaussienne centrée au point de croisement des niveaux. L'amplitude et la largeur des couplages ont été ajustées pour reproduire

qualitativement les énergies adiabatiques du calcul exact. A l'aide de ces courbes, on peut alors calculer la probabilité de transfert totale en utilisant les résultats du modèle Landau-Zener [17]. En tenant compte des différents chemins possibles, cette probabilité  $w$  s'écrit :

$$w = w_{1 \rightarrow 2} + w_{1 \rightarrow 3} \quad (4.64)$$

avec

$$w_{1 \rightarrow 2} = 2P_{1 \rightarrow 2}(1 - P_{1 \rightarrow 2})(1 - P_{2 \rightarrow 3} + P_{2 \rightarrow 3}^2) \quad (4.65)$$

$$w_{1 \rightarrow 3} = 2P_{1 \rightarrow 2}P_{2 \rightarrow 3}(1 - P_{2 \rightarrow 3}) \quad (4.66)$$

$w_{1 \rightarrow 2}$  et  $w_{1 \rightarrow 3}$  sont les probabilités de transfert vers les niveaux 2 et 3 du modèle. Les probabilités de passer de l'état  $i$  à l'état  $j$  (en un passage) sont données par :

$$P_{i \rightarrow j} = e^{-\tau_{ij}} \quad (4.67)$$

avec :

$$\tau_{ij} = \frac{2\pi V_c^2}{v|F_i - F_j|} \quad (4.68)$$

où  $V_c$  est l'amplitude du couplage entre les états considérés,  $v$  la vitesse au niveau du croisement  $\rho_c$  et  $F_i = (d\epsilon_i^m/d\rho)_{\rho_c}$ . L'expression (4.67) de la probabilité Landau-Zener est obtenue en traitant de manière quasi classique la dynamique au voisinage d'un croisement évité [17]. Cette approche n'est donc valable que lorsque la longueur d'onde de de Broglie du système  $\lambda_{dB}$  est petite devant la distance caractéristique sur laquelle le potentiel varie significativement. Notons  $d$  cette distance. La condition précédente s'écrit :

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_{o,p\mu}E}} \ll d \quad (4.69)$$

Dans notre cas, avec  $d \sim 0.05 \text{ \AA}$ , on trouve que ce modèle n'est valable que pour des énergies de collision  $E \geq 10 \text{ eV}$ .

La probabilité  $w$  est présentée sur la figure (4.6). On retrouve bien le comportement observé avec un calcul complet. Ce résultat montre donc que la dynamique du système est bien gouvernée par ces trois niveaux pour des énergies de collisions supérieures à 10 eV.

## 4.7.2 Comportement à basse énergie

Aux basses énergies, la probabilité de transfert reste constante. Ce palier est aussi bien reproduit par le modèle précédent : tout semble donc se passer comme si la dynamique de transfert continuait à être bien décrite par des transitions Landau-Zener. Pour comprendre un peu mieux ce comportement, nous avons supposé qu'on pouvait décrire le processus de transfert par un mécanisme en deux étapes : une transmission dans le canal d'entrée déterminée par l'interaction à longue portée,

suivie de transitions non adiabatiques dans la zone de couplage. La probabilité totale de transfert peut alors s'écrire :

$$P(E) = |T(E)|^2 P_{max} \quad (4.70)$$

où  $T(E)$  est la fonction de transmission dans le canal d'entrée et  $P_{max}$  la valeur du palier à  $E = 10$  eV.

Pour calculer  $T(E)$ , nous avons utilisé un modèle à un canal séparé en deux régions :

1.  $R > R_0$  :  $V(R)$  a la forme analytique de l'interaction à longue distance dans le canal d'entrée.
2.  $R \leq R_0$  :  $V(R) = V(R_0)$ . Cette zone correspond à la région des croisements.

$R_0$  est choisi en fonction des courbes adiabatiques calculées précédemment. D'après la figure (4.5), on a  $R_0 \sim 0.1$  Å. Pour une énergie donnée, la fonction de transmission dans la zone interne est :

$$T(E) = \frac{A[\varphi(R \rightarrow 0)]}{A[\varphi(R \rightarrow +\infty)]} \sqrt{\frac{k_0}{k_\infty}} \quad (4.71)$$

où  $A[\varphi(R \rightarrow 0)]$  et  $k_0$  (resp.  $A[\varphi(R \rightarrow +\infty)]$  et  $k_\infty$ ) sont l'amplitude de la fonction d'onde et le vecteur d'onde associé dans la zone interne (resp. dans la zone asymptotique). Dans le cas de l'interaction ion-dipôle colinéaire de notre modèle,  $V(R \rightarrow +\infty) = -\alpha Z/R^2$ . Le calcul de  $\varphi$  se fait par intégration numérique de l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dR^2} + V(R) \right) \varphi(R) = E\varphi(R) \quad (4.72)$$

Le résultat de cette intégration est présenté figure (4.8).

Quelle que soit l'énergie de collision  $E$ , la transmission sur la canal d'entrée est totale ce qui donne  $T(E) = 1$ . Ce comportement est en parfait accord avec le calcul exact. Pour interpréter physiquement ce résultat, on peut dire que l'énergie cinétique de collision est négligeable devant l'énergie acquise au niveau des croisements et ne modifie pas le processus de transfert.

### 4.7.3 Vers un modèle tridimensionnel

Le modèle en deux étapes va nous permettre d'estimer la dépendance énergétique du taux de transfert dans le cas tridimensionnel (3D). En effet, la forme asymptotique du canal d'entrée (4.62) n'a pas de réalité physique, puisque dans le modèle colinéaire, toutes les dépendances angulaires ont été négligées. Comme nous montrons dans l'annexe H, le potentiel asymptotique dans le cas (3D) s'écrit :

$$V = -\beta \frac{Z^2}{R_1^4} \quad (4.73)$$

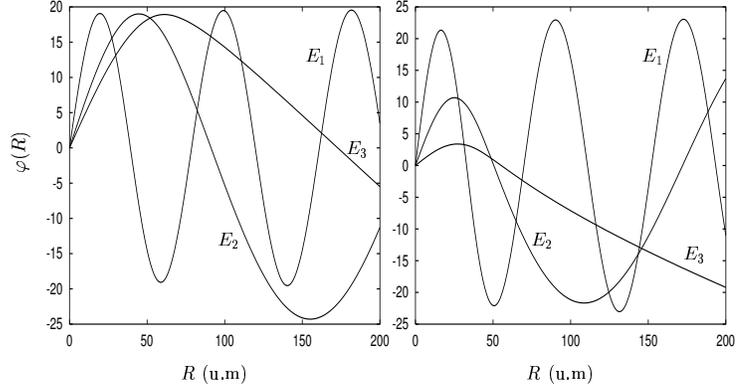


FIG. 4.8 – Fonction d’onde sur le canal d’entrée en fonction de l’énergie de collision. La figure de gauche (resp. droite) correspond à un potentiel en  $1/R^2$  (resp.  $1/R^4$ ). Les énergies représentées sont  $E_1 = 1$  eV,  $E_2 = 10^{-3}$  eV et  $E_3 = 10^{-5}$  eV. La coordonnée  $R$  est exprimée en unité muonique. La zone interne correspond à  $R \leq R_0 \simeq 40$  u.m.

avec  $\beta = 9\hbar^4/(4m_{p\mu}^2)$ .

En utilisant cette forme dans le modèle précédent, on peut déterminer la fonction de transmission sur le canal d’entrée. Le résultat de ce calcul est présenté sur la figure (4.9). Dans la formule (4.70) nous avons gardé  $P_{max} = 0.8$ , qui correspond à la valeur du palier dans le cas colinéaire. Le processus de transfert étant évidemment favorisé dans la configuration colinéaire, l’estimation obtenue doit être vue comme une majoration de la probabilité attendue dans le cas (3D).

Aux basses énergies, on observe un phénomène de décroissance de la probabilité de transfert caractéristique d’une *loi de seuil* apparaissant dans le cas d’interactions à très longue portée. On peut montrer de manière théorique que lorsque le potentiel est en  $1/R^\alpha$  avec  $\alpha > 2$ ,  $P(E) \sim \sqrt{E}$  lorsque  $E \rightarrow 0$  [17]. C’est ce comportement que nous avons retrouvé numériquement. Sur la figure (4.8) on voit que lorsque l’énergie de collision diminue, la fonction d’onde ne pénètre plus dans la zone de croisements ce qui explique la diminution du transfert muonique.

#### 4.7.4 Taux de transfert

Pour comparer nos résultats au modèle à deux composantes extrait par Wertmüller des données expérimentales sur l’oxygène (voir Chapitre 3), nous avons calculé le taux de transfert donné par :

$$\lambda(E) = Nv\sigma(E) \quad (4.74)$$

où  $N = 4.25 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$  est la densité atomique de l’hydrogène liquide,  $v = \sqrt{2E/m_{O,p\mu}}$  la vitesse relative de collision et

$$\sigma(E) = \frac{\pi}{k^2} P(E) \quad (4.75)$$

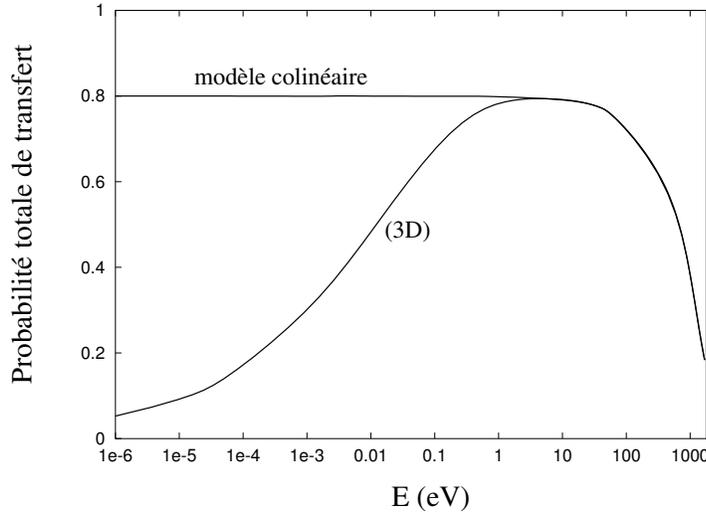


FIG. 4.9 – Probabilité totale de transfert dans le cas colinéaire et estimation pour le cas tridimensionnel (3D).

est la section efficace du processus de transfert de muon avec  $k = \sqrt{2m_{\text{o},p\mu}E}/\hbar$ . Sur la figure (4.10) nous avons représenté le taux de transfert obtenu par notre calcul et celui du modèle à deux composantes (2C). Dans l'expression (4.75) nous avons utilisé la probabilité de transfert du modèle (3D) précédent. Si l'accord aux énergies thermiques ( $E \sim 0.04$  eV) semble satisfaisant, il en est tout autrement aux énergies plus élevées. En effet, alors que le modèle (2C) prévoit une augmentation du taux de transfert aux énergies épithermiques ( $E > 0.12$  eV), le taux estimé par notre modèle (3D) décroît avec l'énergie de collision.

### Remarque

En écrivant l'expression (4.75) pour la section efficace nous avons supposé que seule l'onde  $J = 0$  contribuait au transfert pour les énergies considérées. Pour vérifier cette hypothèse on peut estimer la barrière centrifuge présente sur le canal d'entrée pour les ondes partielles  $J \neq 0$ . En ajoutant le terme centrifuge, le potentiel effectif dans le canal d'entrée prend la forme asymptotique :

$$V_{eff} = -\beta \frac{Z^2}{R^4} + \frac{J(J+1)}{2m_{\text{o},p\mu}R^2} \quad (4.76)$$

Le maximum de la barrière de potentiel est alors donné par :

$$V_{eff}^{max} = \left( \frac{J(J+1)}{6Zm_{\text{o},p\mu}} \right)^2 \quad (4.77)$$

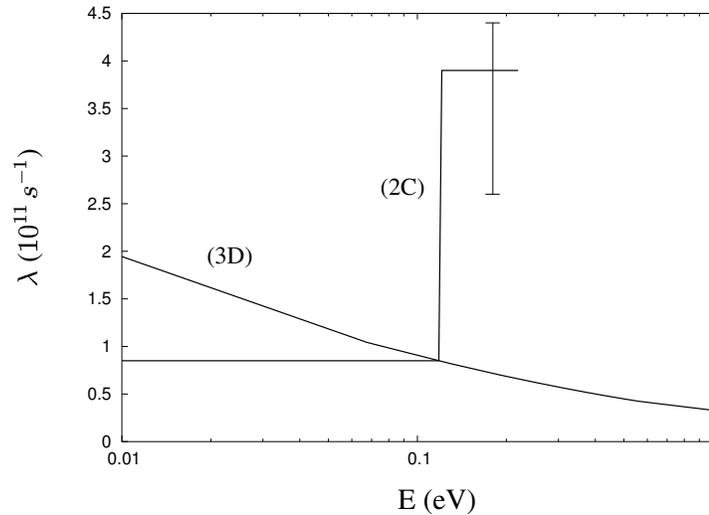


FIG. 4.10 – Comparaison entre l'estimation du taux de transfert en géométrie tridimensionnelle (3D) et le modèle à deux composantes (2C) [2].

Pour  $J = 1$ , on trouve  $V_{eff}^{max} \sim 0.1$  eV. Pour les énergies épithermiques, l'hypothèse précédente n'est donc plus justifiée. On voit alors apparaître la nécessité de mener un calcul exact tridimensionnel qui permet de traiter correctement les ondes partielles  $J \neq 0$ .

## 4.8 Conclusion

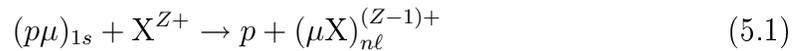
Cette première étude menée dans le cadre de l'approximation colinéaire, nous a permis de bien comprendre le processus de transfert de charge muonique. Pour calculer le taux de transfert du muon sur l'oxygène, nous avons mis en œuvre une méthode d'intégration de l'équation de Schrödinger indépendante du temps en utilisant une base d'états diabatiques par secteur. Aux énergies considérées, le problème est similaire à celui d'une collision froide et nécessite un calcul très précis des états adiabatiques du système. Cette grande précision a pu être obtenue en renormalisant l'équation aux valeurs propres écrite en coordonnées hypersphériques. Les résultats obtenus ne sont pas en accord avec le modèle à deux composantes extrait de l'analyse des données expérimentales : selon ce modèle le taux de transfert doit augmenter lorsque l'énergie cinétique de collision  $E$  passe de 0.04 eV à 0.12 eV, alors que nos calculs prévoient, dans cette gamme d'énergies, une décroissance de ce taux en fonction de  $E$ . Nous avons cependant mis en évidence la nécessité de mener un calcul exact tridimensionnel qui permet de traiter correctement les ondes partielles  $J \neq 0$  qui semblent jouer un rôle important dans le processus de transfert.



# Chapitre 5

## Calcul tridimensionnel : méthode

Ce chapitre est consacré à la présentation de la méthode numérique que nous avons mise en œuvre pour étudier la dynamique du transfert muonique dans le cas tridimensionnel. D'un point de vue théorique, le processus que nous étudions correspond à la réaction :



où X représente le noyau d'un élément lourd sur lequel peut se transférer le muon de l'hydrogène muonique.

Avec le formalisme hypersphérique, la procédure de calcul est très similaire à celle utilisée dans le cas unidimensionnel : on intègre l'équation de Schrödinger indépendante du temps le long du rayon hypersphérique sur une base de canaux adiabatiques, et on génère la matrice de collision en effectuant l'analyse asymptotique des solutions calculées. Les états adiabatiques sont maintenant des fonctions de cinq variables (deux angles hypersphériques et trois angles d'Euler). La difficulté majeure du calcul réside dans la possibilité d'utiliser une description adaptée du processus afin d'obtenir une précision suffisante permettant de traiter ce problème qui, comme nous l'avons vu au chapitre précédent, peut être assimilé à une collision ultra froide.

Nous commençons donc par décrire la paramétrisation du système étudié. Cela va nous permettre d'introduire les coordonnées hypersphériques elliptiques qui sont particulièrement bien adaptées pour traiter un système à trois corps en interaction Coulombienne. Ensuite, nous verrons comment on peut exprimer l'Hamiltonien du système à l'aide de ces coordonnées et nous présenterons la méthode que nous avons développée pour calculer les états adiabatiques. Nous terminerons enfin ce chapitre, en explicitant les fonctions utilisées pour réaliser l'analyse asymptotique.

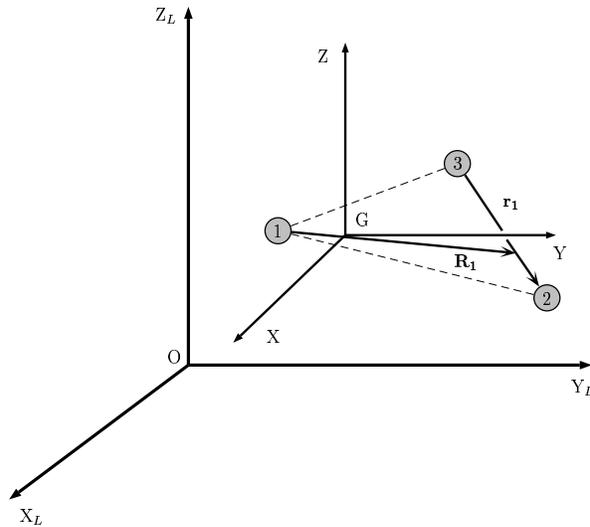


FIG. 5.1 – *Système à trois corps dans le référentiel du laboratoire.*

## 5.1 Paramétrisation du système

### 5.1.1 Coordonnées de Jacobi

L'espace des configurations d'un système à trois corps est de dimension neuf (trois degrés de liberté pour chaque particule). Le référentiel d'étude, appelé référentiel du laboratoire, est supposé Galiléen. Nous lui associons le repère d'espace Cartésien  $(O, X_L, Y_L, Z_L)$ . Le système peut être décrit dans ce référentiel par les vecteurs de Jacobi  $(\mathbf{OG}, \mathbf{R}_i, \mathbf{r}_i)$ , où  $G$  est le centre de masse du système.  $\mathbf{R}_i$  et  $\mathbf{r}_i$  indiquent l'orientation et la configuration interne du triangle formé par les trois particules (voir figure (5.1)). Nous utilisons directement les coordonnées de Jacobi pondérées par les masses à partir desquelles sera défini le formalisme hypersphérique.

La figure (5.2) représente les deux systèmes de coordonnées de Jacobi pondérées par les masses  $(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1)$  et  $(\mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2)$ , adaptés respectivement au canal d'entrée et au canaux de sortie de la réaction (5.1). Ils sont définis par :

$$\mathbf{R}_i = \sqrt{\frac{m_{i,jk}}{m}} \left( \frac{m_j \mathbf{OM}_j + m_k \mathbf{OM}_k}{m_j + m_k} - \mathbf{OM}_i \right) \quad (5.2)$$

$$\mathbf{r}_i = \sqrt{\frac{m_{j,k}}{m}} (\mathbf{OM}_j - \mathbf{OM}_k) \quad (5.3)$$

où  $(i = 1, j = 2, k = 3)$  correspond à  $(X, p, \mu)$  et  $(i = 2, j = 3, k = 1)$  à  $(p, \mu, X)$ .

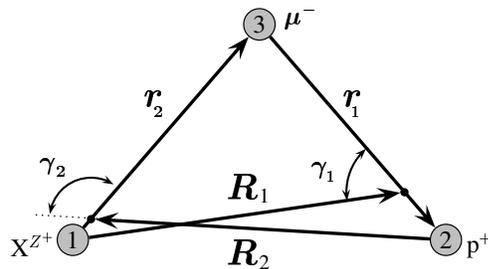


FIG. 5.2 – Coordonnées de Jacobi pondérées par les masses. Les positions des centres de masse des systèmes  $(p\mu)$  et  $(O\mu)$  ne sont pas à l'échelle.

Les masses réduites  $m_{i,jk}$  et  $m_{j,k}$  des équations (5.2) et (5.3) sont données par :

$$m_{i,jk} = \frac{m_i (m_j + m_k)}{m_i + m_j + m_k}, \quad m_{j,k} = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k} \quad (5.4)$$

avec :

$$m = \left( \frac{m_i m_j m_k}{m_i + m_j + m_k} \right)^{1/2} \quad (5.5)$$

Ces coordonnées sont la généralisation des coordonnées de Jacobi présentées au chapitre 4. Le cas colinéaire correspond à  $\gamma_i = 0$ . Les deux jeux de coordonnées  $(\mathbf{R}_1, \mathbf{r}_1)$  et  $(\mathbf{R}_2, \mathbf{r}_2)$ , sont reliés par la transformation orthogonale [51] :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{R}_2 \\ \mathbf{r}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \theta_\mu & -\sin \theta_\mu \\ \sin \theta_\mu & -\cos \theta_\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{r}_1 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

où

$$\tan \theta_\mu = \frac{m_\mu}{m} \quad (5.7)$$

Dans le cas où  $X = O$ ,  $\theta_\mu \simeq 19^\circ$ . Cette transformation est équivalente à une rotation<sup>1</sup> dans le plan contenant les vecteurs  $\mathbf{R}_1$  et  $\mathbf{r}_1$ . On a donc :

$$\mathbf{R}_1^2 + \mathbf{r}_1^2 = \mathbf{R}_2^2 + \mathbf{r}_2^2 \quad (5.8)$$

### Remarque

Il est évidemment possible de définir un troisième système de coordonnées  $(\mathbf{R}_3, \mathbf{r}_3)$  adapté à l'arrangement  $(X-p)+\mu$ . Cependant, à cause de la répulsion Coulombienne entre les deux centres chargés positivement, cet arrangement n'est pas pertinent pour décrire la dynamique de la réaction (5.1).

<sup>1</sup>On parle de rotation cinématique.

### 5.1.2 Référentiel *Body-Fixed* (BF)

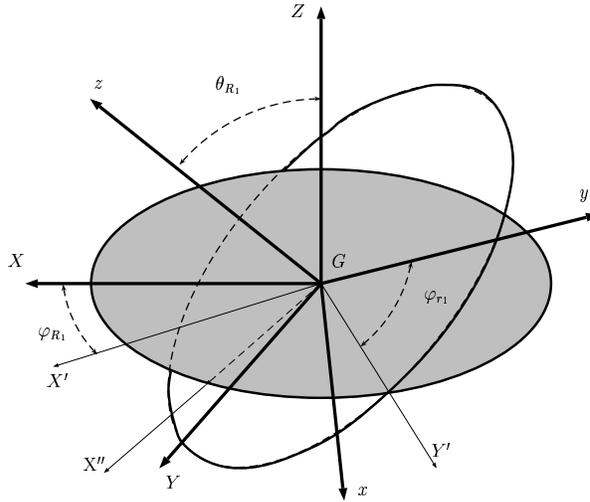


FIG. 5.3 – Orientation du référentiel tournant (BF) par rapport au référentiel du centre de masse (SF).

Pour un système isolé, le mouvement du centre de masse dans le référentiel du laboratoire est rectiligne et uniforme. Il est donc possible de restreindre la dimensionnalité de problème à étudier en se plaçant dans le référentiel du centre de masse, souvent appelé référentiel *Space-Fixed* (SF). Le repère Cartésien associé est  $(G, X, Y, Z)$ . Le système peut également être décrit dans un référentiel tournant, encore appelé *Body-Fixed* (BF), lié aux trois particules. Nous noterons  $(G, x, y, z)$ , le repère Cartésien que nous utiliserons dans ce dernier référentiel. La figure (5.3) montre l'orientation relative des référentiels (BF) et (SF). En pratique, on passe de  $(G, X, Y, Z)$  à  $(G, x, y, z)$  par trois rotations successives. Si  $M$  est un point quelconque de l'espace on a :

$$\mathbf{GM} = \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix}_{(SF)} \xrightarrow{\mathcal{R}_{\mathbf{u}_Z(\varphi_{R_1})}} \begin{pmatrix} X' \\ Y' \\ Z \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{R}_{\mathbf{u}_{Y'}(\theta_{R_1})}} \begin{pmatrix} X'' \\ Y' \\ z \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathcal{R}_{\mathbf{u}_z(\varphi_{r_1})}} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}_{(BF)} \quad (5.9)$$

où  $\mathbf{u}_Z$ ,  $\mathbf{u}_{Y'}$  et  $\mathbf{u}_z$ , sont respectivement les vecteurs unitaires des axes  $(GZ)$ ,  $(GY')$  et  $(Gz)$ .  $\mathcal{R}_{\mathbf{u}}(\epsilon)$  est la rotation d'angle  $\epsilon$  autour de l'axe  $\mathbf{u}$ . L'axe  $(Gz)$  est confondu avec  $\mathbf{R}_1$ , alors que  $(Gy)$  est perpendiculaire au plan  $(xGz)$  qui contient les trois corps. Dans le référentiel (BF), les coordonnées sphériques des vecteurs de Jacobi sont donc  $\mathbf{R}_1 = (R_1, 0, 0)$  et  $\mathbf{r}_1 = (r_1, \gamma_1, 0)$ .  $(\varphi_{R_1}, \theta_{R_1}, \varphi_{r_1})$  sont les angles d'Euler qui définissent l'orientation du référentiel (BF).

### 5.1.3 Coordonnées hypersphériques de Delves

Plaçons nous dans le référentiel (BF). L'espace des configurations internes est maintenant de dimension trois et peut être paramétrisé par les coordonnées Cartésiennes suivantes [52] :

$$X_i = \frac{2\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{r}_i}{\rho} \quad (5.10)$$

$$Y_i = \frac{2|\mathbf{r}_i \wedge \mathbf{R}_i|}{\rho} \quad (5.11)$$

$$Z_i = \frac{\mathbf{R}_i^2 - \mathbf{r}_i^2}{\rho} \quad (5.12)$$

où l'on a utilisé l'invariant (5.8) des coordonnées de Jacobi pour définir le rayon hypersphérique :

$$\rho = \sqrt{R_i^2 + r_i^2}, \quad i = 1, 2 \quad (5.13)$$

Ce rayon rend compte de la taille globale du triangle. Les coordonnées hypersphériques de Delves  $(\rho, \chi_i, \gamma_i)$  [53] associées à l'arrangement  $i$ , correspondent aux coordonnées sphériques définies à partir de  $(X_i, Y_i, Z_i)$ . Elles sont données par :

$$\tan(\chi_i/2) = \frac{r_i}{R_i}, \quad 0 \leq \chi_i \leq \pi \quad (5.14)$$

et

$$\cos(\gamma_i) = \frac{\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{R}_i}{r_i R_i}, \quad 0 \leq \gamma_i \leq \pi \quad (5.15)$$

La relation entre les deux systèmes de coordonnées de Delves s'exprime par :

$$\begin{pmatrix} \sin \chi_2 \cos \gamma_2 \\ \sin \chi_2 \sin \gamma_2 \\ \cos \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(2\theta_\mu) & 0 & \cos(2\theta_\mu) \\ 0 & 1 & 0 \\ \cos(2\theta_\mu) & 0 & \sin(2\theta_\mu) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \chi_1 \cos \gamma_1 \\ \sin \chi_1 \sin \gamma_1 \\ \cos \chi_1 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

Le passage de  $(\rho, \chi_1, \gamma_1)$  à  $(\rho, \chi_2, \gamma_2)$  s'obtient donc par une rotation d'angle  $2\theta_\mu$  autour de l'axe portant la coordonnée  $Y_1$ . Sur la figure (5.4) nous avons représenté l'espace des configurations internes pour une valeur de  $\rho$  fixée en utilisant les coordonnées sphériques  $(\rho, \chi_1, \gamma_1)$ . L'espace accessible correspond à la demi-sphère frontale de la figure.

### 5.1.4 Passage aux coordonnées hypersphériques elliptiques

Les coordonnées hypersphériques elliptiques  $(\rho, \xi, \eta)$  sont définies à partir des coordonnées de Delves [54] par :

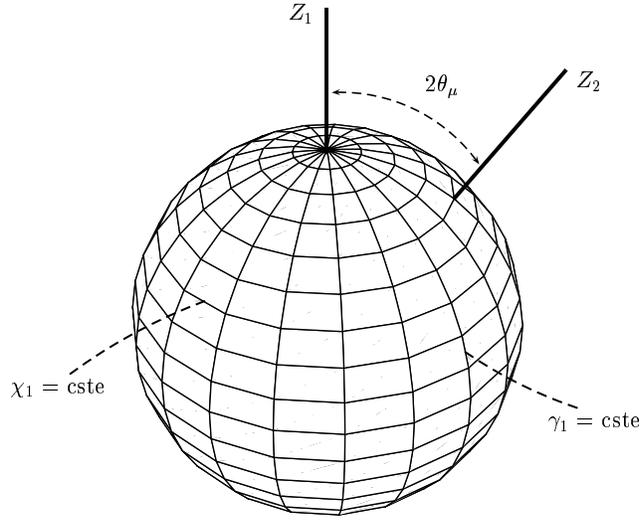


FIG. 5.4 – Espace des configurations internes représenté en coordonnées hypersphériques de Delves pour une valeur de  $\rho$  fixée.

$$\xi = \chi_1 + \chi_2, \quad 2\theta_\mu \leq \xi \leq 2\pi - 2\theta_\mu \quad (5.17)$$

$$\eta = \chi_1 - \chi_2, \quad -2\theta_\mu \leq \eta \leq 2\theta_\mu \quad (5.18)$$

Ces coordonnées permettent de donner une autre représentation sphérique de l'espace des configurations internes (voir figure (5.5)). En outre, elles décrivent de manière équivalente les deux arrangements du système. Le cas colinéaire (où le muon est situé entre le proton et l'autre élément) correspond au segment joignant les deux axes portant les coordonnées  $Z_1$  et  $Z_2$ . Au cours de la réaction, les déviations par rapport à la géométrie colinéaire correspondent à des valeurs de  $\xi > 2\theta_\mu$ .

## 5.2 Hamiltonien

Nous cherchons à écrire l'Hamiltonien du système dans le référentiel du centre de masse (SF) en décrivant la dynamique interne à l'aide des coordonnées hypersphériques elliptiques  $(\rho, \xi, \eta)$ . Le détail des calculs est présenté dans l'annexe I.

Nous commençons par écrire l'énergie cinétique du système à l'aide de la formule de Podolsky [55] :

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left( \sqrt{g} g_{ij}^{-1} \frac{\partial}{\partial q_j} \right) \quad (5.19)$$

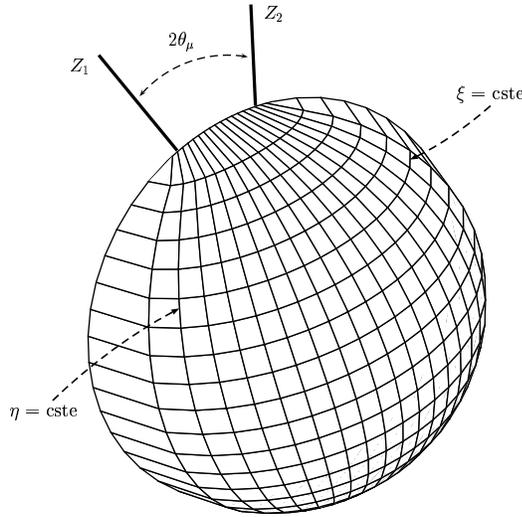


FIG. 5.5 – Espace des configurations internes représenté en coordonnées hypersphériques elliptiques pour une valeur de  $\rho$  fixée.

où  $\mathbf{g}^{-1}$  est la matrice inverse du tenseur métrique  $\mathbf{g}$  permettant de passer d'un système de coordonnées Cartésiennes à des coordonnées curvilignes généralisées  $q_i$ .  $g$  est le déterminant du tenseur métrique et  $N$  la dimension de l'espace des états, égale à six dans notre cas.

Comme coordonnées Cartésiennes de départ, nous choisissons les composantes  $(R_{1x}, R_{1y}, R_{1z}, r_{1x}, r_{1y}, r_{1z})$  des vecteurs de Jacobi dans le repère associé au référentiel (BF). Les coordonnées curvilignes généralisées que nous souhaitons utiliser sont  $(\rho, \xi, \eta, \omega_x, \omega_y, \omega_z)$  où :

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}_{(BF)} = \begin{pmatrix} \dot{\Omega}_x \\ \dot{\Omega}_y \\ \dot{\Omega}_z \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

est le vecteur instantané de rotation du référentiel (BF) par rapport au référentiel (SF). Si  $\mathbf{M}$  est un vecteur quelconque de  $\mathbb{R}^3$ , la relation de changement de référentiel s'écrit :

$$\left( \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right)_{(SF)} = \left( \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right)_{(BF)} + \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{M} \quad (5.21)$$

Les angles de rotation instantanée  $\Omega_x, \Omega_y$  et  $\Omega_z$ , respectivement autour des axes  $(Gx), (Gy)$  et  $(Gz)$ , permettent d'exprimer le moment cinétique total du système  $\mathbf{J}$

sous la forme :

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix}_{(BF)} = -i\hbar \begin{pmatrix} \partial/\partial\Omega_x \\ \partial/\partial\Omega_y \\ \partial/\partial\Omega_z \end{pmatrix} \quad (5.22)$$

On trouve :

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22}^{-1} & 0 & 0 & g_{25}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & g_{33}^{-1} & 0 & g_{35}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{44}^{-1} & 0 & g_{46}^{-1} \\ 0 & g_{52}^{-1} & g_{53}^{-1} & 0 & g_{55}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{64}^{-1} & 0 & g_{66}^{-1} \end{pmatrix} \quad (5.23)$$

avec :

$$g_{22}^{-1} = \frac{16}{\rho^2} \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \quad (5.24)$$

$$g_{25}^{-1} = g_{52}^{-1} = -\frac{4}{\rho^2} \tan\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha + \beta} \quad (5.25)$$

$$g_{33}^{-1} = \frac{16}{\rho^2} \frac{\beta}{\alpha + \beta} \quad (5.26)$$

$$g_{35}^{-1} = g_{53}^{-1} = \frac{4}{\rho^2} \tan\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha + \beta} \quad (5.27)$$

$$g_{44}^{-1} = g_{55}^{-1} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right)} \quad (5.28)$$

$$g_{46}^{-1} = g_{64}^{-1} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right)} \cot \gamma_1 \quad (5.29)$$

$$g_{66}^{-1} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1 - \sin^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin^2 \gamma_1}{\sin^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin^2 \gamma_1} \quad (5.30)$$

où l'on a posé :

$$\alpha = \cos 2\theta_\mu - \cos \xi \quad (5.31)$$

$$\beta = \cos \eta - \cos 2\theta_\mu \quad (5.32)$$

et l'on a aussi :

$$\sin \gamma_1 = \frac{\alpha\beta}{\sin 2\theta_\mu \sin\left(\frac{\xi + \eta}{2}\right)} \quad (5.33)$$

$$\cot \gamma_1 = \frac{2}{\alpha + \beta} \sin\left(\frac{\xi + \eta}{2}\right) \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} \sqrt{\alpha\beta} - \frac{\partial}{\partial \eta} \sqrt{\alpha\beta} \right] \quad (5.34)$$

Le déterminant du tenseur métrique vaut :

$$g = \left[ \left( \frac{\rho^5}{32} \right) \frac{\alpha + \beta}{\sin 2\theta_\mu} \right]^2 \quad (5.35)$$

La formule (5.19) donne alors :

$$\begin{aligned} T = & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{8\hbar^2}{m\rho^2} \frac{1}{\alpha + \beta} \frac{\partial}{\partial \xi} \alpha \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{8\hbar^2}{m\rho^2} \frac{1}{\alpha + \beta} \frac{\partial}{\partial \eta} \beta \frac{\partial}{\partial \eta} \\ & - \frac{\hbar^2}{2m\rho^2 \cos^2(\frac{\xi+\eta}{4})} \frac{\partial^2}{\partial \Omega_x^2} - \frac{\hbar^2}{2m\rho^2 \cos^2(\frac{\xi+\eta}{4})} \frac{\partial^2}{\partial \Omega_y^2} \\ & - \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \left( \frac{1 - \sin^2(\frac{\xi+\eta}{4}) \sin^2 \gamma_1}{\sin^2(\frac{\xi+\eta}{4}) \cos^2(\frac{\xi+\eta}{4}) \sin^2 \gamma_1} \right) \frac{\partial^2}{\partial \Omega_z^2} \\ & - \frac{\hbar^2 \cot \gamma_1}{2m\rho^2 \cos^2(\frac{\xi+\eta}{4})} \left( \frac{\partial}{\partial \Omega_x} \frac{\partial}{\partial \Omega_z} + \frac{\partial}{\partial \Omega_z} \frac{\partial}{\partial \Omega_x} \right) \\ & + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\alpha + \beta} \left( \frac{4}{\rho^2} \right) \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} (\tan(\frac{\xi+\eta}{4}) \sqrt{\alpha\beta}) \frac{\partial}{\partial \Omega_y} + \frac{\partial}{\partial \Omega_y} (\tan(\frac{\xi+\eta}{4}) \sqrt{\alpha\beta}) \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\alpha + \beta} \left( \frac{4}{\rho^2} \right) \left[ \frac{\partial}{\partial \eta} (\tan(\frac{\xi+\eta}{4}) \sqrt{\alpha\beta}) \frac{\partial}{\partial \Omega_y} + \frac{\partial}{\partial \Omega_y} (\tan(\frac{\xi+\eta}{4}) \sqrt{\alpha\beta}) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] \end{aligned} \quad (5.36)$$

En utilisant la définition (5.22) et la relation de commutation<sup>2</sup> :

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = -i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (5.37)$$

où  $\epsilon_{ijk}$  est le tenseur antisymétrique standard, on peut mettre l'Hamiltonien du système sous la forme :

$$H = T + V(\rho, \xi, \eta) \quad (5.38)$$

avec :

$$\begin{aligned} T = & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} \\ & + \frac{8\hbar^2}{m\rho^2} \frac{1}{\cos(\eta) - \cos(\xi)} \left[ -\frac{\partial}{\partial \eta} (\cos(\eta) - \cos(2\theta_\mu)) \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{\partial}{\partial \xi} (\cos(2\theta_\mu) - \cos(\xi)) \frac{\partial}{\partial \xi} \right. \\ & \left. + \left( \frac{1}{\cos(\eta) - \cos(2\theta_\mu)} + \frac{1}{\cos(2\theta_\mu) - \cos(\xi)} \right) \sin^2(\theta_\mu) \cos^2(\theta_\mu) \left( \frac{\hat{J}_z}{\hbar} \right)^2 \right] + T_R + T_C \end{aligned} \quad (5.39)$$

où

$$T_R = \frac{\hat{J}^2 - 2\hat{J}_z^2}{2m\rho^2 \cos^2(\frac{\xi+\eta}{4})} \quad (5.40)$$

<sup>2</sup>Cette relation est différente de la relation standard de commutation des moment cinétiques : on parle souvent de relation de commutation *anormale* dans le référentiel (BF)[56].

$$T_C = \frac{2 \tan\left(\frac{\xi+\eta}{4}\right) (\cos(\eta) - \cos(2\theta_\mu))^{\frac{1}{2}} (\cos(2\theta_\mu) - \cos(\xi))^{\frac{1}{2}}}{m\rho^2 (\cos(\eta) - \cos(\xi))} \times \left[ 2i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \hat{J}_y + \hat{J}_x \hat{J}_z \left( \frac{\sin(\xi)}{\cos(2\theta_\mu) - \cos(\xi)} + \frac{\sin(\eta)}{\cos(\eta) - \cos(2\theta_\mu)} \right) \right] \quad (5.41)$$

$T_R$  décrit la rotation globale du système, alors que  $T_C$  correspond aux couplages de Coriolis. Pour  $(\xi + \eta)/4 = \pi/2$  (ou encore  $R_1 = 0$ ), le terme de couplage diverge. Cependant, à cause de la répulsion Coulombienne entre les particules de même charge, cette configuration du système n'est pas accessible aux énergies que nous considérerons. Le terme potentiel, qui ne dépend que des coordonnées internes, s'écrit :

$$V(\rho, \xi, \eta) = \frac{e^2 Z}{r_{12}} - \frac{e^2 Z}{r_{13}} - \frac{e^2}{r_{23}} \quad (5.42)$$

où les distances entre particules  $r_{ij} = |\mathbf{OM}_j - \mathbf{OM}_i|$  sont données par :

$$r_{12} = \sqrt{\frac{m_1 + m_2}{2m_1 m_2}} \rho \sqrt{1 + \varepsilon_+ \cos(\xi/2) \cos(\eta/2) - \varepsilon_- \sin(\xi/2) \sin(\eta/2)} \quad (5.43)$$

$$r_{13} = \sqrt{\frac{m_1 + m_3}{m_1 m_3}} \rho \sin\left(\frac{\xi - \eta}{4}\right) \quad (5.44)$$

$$r_{23} = \sqrt{\frac{m_2 + m_3}{m_2 m_3}} \rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \quad (5.45)$$

$Z$  est la charge du noyau  $X$  ( $Z = 8$  dans le cas de l'oxygène),  $e^2 = q_\mu^2/4\pi\epsilon_0$  où  $q_\mu$  est la charge électrique du muon, et on a posé :

$$\varepsilon_+ = 1 + \frac{2m_3}{m_1 + m_2}, \quad \varepsilon_- = \frac{m_2 - m_3}{m_1 + m_2} \quad (5.46)$$

## Remarques

1. Dans la suite de notre étude, nous négligerons le terme de couplage  $T_C$ . Cette approximation trouvera sa justification dans le prochain chapitre.
2. Dans la dernière partie de l'annexe I, nous présentons une autre méthode pour obtenir l'expression (5.39) de l'opérateur énergie cinétique. On utilise un système intermédiaire de coordonnées curvilignes  $(R_1, r_1, \gamma_1, \omega_x, \omega_y, \omega_z)$  qui permet d'écrire une première expression de  $T$  en coordonnées de Jacobi. Un changement de variables internes  $(R_1, r_1, \gamma_1) \rightarrow (\rho, \xi, \eta)$  conduit ensuite à la formule (5.39). Si cette méthode nécessite deux fois la mise en œuvre de la technique précédente (successivement en dimension six et trois), les calculs sont néanmoins plus simples à chaque étape.

## 5.3 Base adiabatique

### 5.3.1 Fonction d'onde interne

Afin de travailler dans le référentiel tournant (BF), nous avons développé la fonction d'onde du système sur une base usuelle [58], formée de fonctions propres communes aux opérateurs  $\hat{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hat{J}_Z$ ,  $\hat{\Pi}$  et  $|\hat{J}_z|$ , où  $\hat{\Pi}$  est l'opérateur d'inversion par rapport au centre de masse  $G$ . Si l'on note  $J, M, \Pi (= \pm 1)$  et  $\bar{\Omega}$  les nombres quantiques<sup>3</sup> correspondants, ces fonctions s'écrivent :

$$\psi^{JM\Pi\bar{\Omega}} = N_{M\bar{\Omega}}^{J\Pi}(\varphi_{R_1}, \theta_{R_1}, \varphi_{r_1})\phi^{J\bar{\Omega}}(\rho, \xi, \eta) \quad (5.47)$$

où

$$N_{M\bar{\Omega}}^{J\Pi} = \frac{1}{\sqrt{2(1 + \delta_{\Omega 0})}} (D_{M\bar{\Omega}}^{J*} + \Pi(-1)^{J+\Omega} D_{M-\Omega}^{J*}) \quad (5.48)$$

sont des fonctions de parité bien définie construites à l'aide des matrices de rotation  $\mathbf{D}$  [59].  $\Omega$  est la projection du moment cinétique sur l'axe ( $Gz$ ) du repère lié au référentiel (BF) :  $-J \leq \Omega \leq J$ .  $\bar{\Omega}$  ne prend que des valeurs positives. Si  $\Pi = -1$ , seuls les états pour lesquels  $J$  est impair contiennent  $\bar{\Omega} = 0$ .

Cette procédure permet de restreindre la dimensionnalité du problème à étudier, en regroupant l'effet d'orientation du plan formé par les trois particules dans les fonctions  $N_{M\bar{\Omega}}^{J\Pi}$ . En effet, pour une valeur donnée du moment cinétique total  $J$ , la dynamique interne ne dépend pas de cette orientation : il nous suffit donc de calculer les fonctions  $\phi^{J\bar{\Omega}}(\rho, \xi, \eta)$  dans la gamme d'énergies considérée.

En appliquant  $H$  sur la fonction d'onde (5.47), on trouve que  $\phi^{J\bar{\Omega}}(\rho, \xi, \eta)$  est solution de l'Hamiltonien réduit  $H_{J\bar{\Omega}}$  :

$$\begin{aligned} H_{J\bar{\Omega}} = & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho^5} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho^5 \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{8\hbar^2}{m\rho^2} \frac{1}{\cos(\eta) - \cos(\xi)} \left( D_{\bar{\Omega}}(\xi) + D_{\bar{\Omega}}(\eta) \right) \\ & + \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \frac{J(J+1) - 2\bar{\Omega}^2}{\cos^2\left(\frac{\eta+\xi}{4}\right)} + V(\rho, \xi, \eta) \end{aligned} \quad (5.49)$$

avec :

$$\hat{D}_{\bar{\Omega}}(u) = -\epsilon \frac{\partial}{\partial u} (\cos u - \cos(2\theta_\mu)) \frac{\partial}{\partial u} + \epsilon \frac{\bar{\Omega}^2 \sin^2(\theta_\mu) \cos^2(\theta_\mu)}{\cos u - \cos(2\theta_\mu)} \quad (5.50)$$

où  $\epsilon = 1$  si  $u = \eta$ , et  $\epsilon = -1$  pour  $u = \xi$ .

---

<sup>3</sup>Les quatre opérateurs commutant avec  $H$ , les nombres quantiques associés se conservent durant la collision.

### 5.3.2 Etats adiabatiques

Comme pour le calcul unidimensionnel, la fonction d'onde  $\phi^{J\bar{\Omega}}(\rho, \xi, \eta)$  est développée sur une base de  $N$  fonctions  $\chi_i^{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho)$  qui ne dépendent que des angles hypersphériques  $\xi$  et  $\eta$ . On écrit donc :

$$\phi^{J\bar{\Omega}}(\rho, \xi, \eta) = \frac{1}{\rho^{5/2}} \sum_{i=1}^N F_i^{J\bar{\Omega}}(\rho) \chi_i^{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho) \quad (5.51)$$

Les états adiabatiques  $\chi_i^{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho)$  sont les états propres de l'Hamiltonien réduit  $H_{J\bar{\Omega}}$ , calculés pour une valeur du rayon hypersphérique  $\rho$  fixée. On a :

$$\left\{ \frac{8\hbar^2}{m\rho^2} \frac{1}{\cos(\eta) - \cos(\xi)} \left( \hat{D}_{\bar{\Omega}}(\xi) + \hat{D}_{\bar{\Omega}}(\eta) \right) + \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \frac{J(J+1) - 2\bar{\Omega}^2}{\cos^2\left(\frac{\eta+\xi}{4}\right)} + V(\rho, \xi, \eta) \right\} \chi_i^{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho) = \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho) \chi_i^{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho) \quad (5.52)$$

En multipliant cette équation aux valeurs propres par  $\cos(\eta) - \cos(\xi)$ , on obtient l'équation différentielle suivante :

$$\left\{ \frac{8\hbar^2}{m\rho^2} \left( \hat{D}_{\bar{\Omega}}(\xi) + \hat{D}_{\bar{\Omega}}(\eta) \right) + W_{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) \right\} \chi_i^{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho) = 0 \quad (5.53)$$

où :

$$W_{J\bar{\Omega}}(\eta, \xi; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) = (\cos(\eta) - \cos(\xi)) \left( \frac{\hbar^2}{2m\rho^2} \frac{J(J+1) - 2\bar{\Omega}^2}{\cos^2\left(\frac{\eta+\xi}{4}\right)} + V(\rho, \eta, \xi) - \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho) \right) \quad (5.54)$$

Le potentiel renormalisé  $W_{J\bar{\Omega}}(\eta, \xi; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho))$  possède trois caractéristiques importantes. Tout d'abord, deux des singularités Coulombiennes ont été régularisées par le terme  $\cos(\eta) - \cos(\xi)$ . Cette caractéristique essentielle, mise en évidence par O. I. Tolstikhin et H. Matsuzawa [60], est à l'origine du succès remporté par les coordonnées hypersphériques elliptiques pour traiter le problème Coulombien à trois corps. En effet :

$$(\cos(\eta) - \cos(\xi)) V(\rho, \xi, \eta) = (\cos(\eta) - \cos(\xi)) \left( \frac{e^2 Z}{r_{12}} - \frac{e^2 Z}{r_{13}} - \frac{e^2}{r_{23}} \right) \quad (5.55)$$

En utilisant la relation

$$\cos(\eta) - \cos(\xi) = 2 \sin\left(\frac{\xi + \eta}{2}\right) \sin\left(\frac{\xi - \eta}{2}\right) \quad (5.56)$$

et les expressions (5.44) et (5.45), (5.55) deviennent :

$$\begin{aligned} (\cos(\eta) - \cos(\xi)) V(\rho, \xi, \eta) &= -\frac{e^2 Z}{\rho \sqrt{\frac{m_1+m_3}{m_1 m_3}}} 4 \sin\left(\frac{\xi + \eta}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi - \eta}{4}\right) \\ &\quad - \frac{e^2}{\rho \sqrt{\frac{m_2+m_3}{m_2 m_3}}} 4 \sin\left(\frac{\xi - \eta}{2}\right) \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \\ &\quad + (\cos(\eta) - \cos(\xi)) \frac{e^2 Z}{r_{12}} \end{aligned} \quad (5.57)$$

Les deux singularités  $r_{13} = 0$  et  $r_{23} = 0$  qui correspondent respectivement à  $\xi = \eta = 2\theta_\mu$  et  $\xi = -\eta = 2\theta_\mu$ , ont disparu de cette expression. Seule subsiste la singularité  $r_{12} = 0$ . Physiquement, cette dernière correspond à la coïncidence du noyau  $X^{Z+}$  avec le proton, or aux énergies de collision considérées, l'interaction répulsive entre ces deux particules interdit au système de se placer dans cette configuration.

La seconde caractéristique de ce potentiel renormalisé est qu'il dépend paramétriquement de l'énergie  $\epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)$  des états adiabatiques que nous cherchons à calculer. Enfin, la dernière propriété que nous allons exploiter est que ce potentiel renormalisé est approximativement séparable en  $\xi$  et  $\eta$ . Nous écrivons donc  $W_{J\bar{\Omega}}(\eta, \xi; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho))$  sous la forme :

$$W_{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) = W_{J\bar{\Omega}}^s(\xi, \eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) + \Delta W_{J\bar{\Omega}}(\xi, \eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) \quad (5.58)$$

où  $W_{J\bar{\Omega}}^s$  correspond à la partie séparable du potentiel et  $\Delta W_{J\bar{\Omega}}$  au résidu non séparable. À ce stade, de multiples choix sont possibles pour obtenir l'expression (5.58). Pour la partie séparable, nous avons choisi de privilégier l'arrangement  $(p\mu)_{1s} + X^{Z+}$  qui correspond à l'approche des réactifs. Nous avons donc pris :

$$W_{J\bar{\Omega}}^s(\xi, \eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) = W_{J\bar{\Omega}}^\xi(\xi; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) + W_{J\bar{\Omega}}^\eta(\eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) \quad (5.59)$$

avec

$$\begin{aligned} W_{J\bar{\Omega}}^\xi(\xi; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) &= W_{J\bar{\Omega}}(\xi, -2\theta_\mu, \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) - W_{J\bar{\Omega}}(2\theta_\mu, -2\theta_\mu; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) \\ W_{J\bar{\Omega}}^\eta(\eta; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) &= W_{J\bar{\Omega}}(\eta, 2\theta_\mu; \rho, \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)) \end{aligned} \quad (5.60)$$

Nous commençons par résoudre l'équation (5.53) en remplaçant  $W_{J\bar{\Omega}}$  par  $W_{J\bar{\Omega}}^s$ . L'équation différentielle ainsi obtenue peut être transformée en deux équations aux valeurs propres à une dimension en  $\xi$  et  $\eta$ . Pour une valeur arbitraire de  $\epsilon = \epsilon_i^{J\bar{\Omega}}(\rho)$ , on a par exemple :

$$\frac{8\hbar^2}{m\rho^2} [\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\xi) + W_{J\bar{\Omega}}^\xi(\xi; \rho, \epsilon)] \varphi_j^{\xi\bar{\Omega}}(\xi; \rho, \epsilon) = E_j^{\xi\bar{\Omega}}(\rho, \epsilon) \varphi_j^{\xi\bar{\Omega}}(\xi; \rho, \epsilon) \quad (5.61)$$

Dans l'annexe I, nous montrons comment on peut résoudre efficacement ce problème en utilisant une base de  $N_L$  fonctions de Legendre. Une équation similaire en  $\eta$  permet d'obtenir les fonctions propres  $\varphi_k^{\eta\bar{\Omega}}(\eta; \rho, \epsilon)$  de valeurs propres associées  $E_k^{\eta\bar{\Omega}}(\rho, \epsilon)$ . Les fonctions produit  $\varphi_j^{\xi\bar{\Omega}}(\xi; \rho, \epsilon) \varphi_k^{\eta\bar{\Omega}}(\eta; \rho, \epsilon)$  sont donc états propres de l'opérateur :

$$\frac{8\hbar^2}{m\rho^2} [\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\xi) + \hat{D}_{\bar{\Omega}}(\eta)] + W_{J\bar{\Omega}}^s \quad (5.62)$$

avec les valeurs propres  $E_j^{\xi\bar{\Omega}}(\rho, \epsilon) + E_k^{\eta\bar{\Omega}}(\rho, \epsilon)$ . Pour chaque couple  $(j, k)$ , nous procédons par dichotomie pour trouver la valeur de  $\epsilon$  telle que  $E_j^{\xi\bar{\Omega}}(\rho, \epsilon) + E_k^{\eta\bar{\Omega}}(\rho, \epsilon) = 0$ . A ces valeurs  $\epsilon_{jk}(\rho) = \epsilon$  correspondent les fonctions :

$$\varphi_j^{\xi\bar{\Omega}}(\xi; \rho, \epsilon_{jk}(\rho)) \varphi_k^{\eta\bar{\Omega}}(\eta; \rho, \epsilon_{jk}(\rho)) \quad (5.63)$$

Ce sont les états propres de l'Hamiltonien (5.52) à  $\rho$  fixé, dans lequel le potentiel  $V(\rho, \xi, \eta)$  exact a été remplacé par sa partie séparable. Les états adiabatiques correspondant aux états propres de l'Hamiltonien exact à  $\rho$  fixé, sont ensuite obtenus en diagonalisant la représentation de cet opérateur dans une base suffisamment grande, constituée de  $N_p$  fonctions produits de la forme (5.63).

## 5.4 Analyse asymptotique

En injectant la fonction d'onde (5.51) dans l'équation de Schrödinger indépendante du temps, on obtient un système de  $N$  équations couplées que l'on intègre le long de rayon hypersphérique  $\rho$  en utilisant toujours l'algorithme de de Vogelaere (voir annexe G). Nous calculons ainsi la matrice dérivée logarithmique  $\mathbf{Z}$  en  $\rho = \rho_M$ , qui correspond au rayon maximum d'intégration. L'analyse asymptotique est réalisée en utilisant le système de coordonnées de Jacobi adapté à la nature du canal considéré. Pour chaque arrangement  $\lambda = 1, 2$ , les fonctions asymptotiques élémentaires sont écrites sous la forme :

$$\psi_{n\ell\lambda}(R_\lambda, r_\lambda, \gamma_\lambda) = f_{n\ell}(R_\lambda) C_{n\ell}(r_\lambda) \bar{P}_\ell(\cos \gamma_\lambda) \quad (5.64)$$

où  $f_{n\ell}(R_\lambda)$  est une fonction translationnelle similaire à celles utilisées au chapitre précédent,  $C_{n\ell}(r_\lambda)$  une fonction d'onde Coulombienne, et  $\bar{P}_\ell(\cos \gamma_\lambda)$  un polynôme de Legendre normalisé. A partir de ces fonctions, on forme  $N_0$  solutions physiques données par :

$$\Psi^{(a)} = \psi_{n\ell\lambda}^S(R_\lambda, r_\lambda, \gamma_\lambda) + \sum_{n'\ell'\lambda'} \psi_{n'\ell'\lambda'}^C(R_{\lambda'}, r_{\lambda'}, \gamma_{\lambda'}) K_{n'\ell'\lambda' - n\ell\lambda} \quad (5.65)$$

où les indices  $S$  et  $C$  se réfèrent au type de fonction translationnelle utilisée ( $S$  pour une fonction en sinus pour les canaux ouverts et de type exponentielle croissante pour les fermés, alors que  $C$  correspond à une fonction en cosinus pour les canaux ouverts et de type exponentielle décroissante pour les canaux fermés).

Si l'on note  $\mathbf{F}$  et  $\mathbf{F}'$  les matrices correspondant à la projection des fonctions asymptotiques sur la base des états hypersphériques à  $\rho = \rho_M$ , on a :

$$\begin{aligned} F_{i,n\ell\lambda} &= \langle \phi_i | \psi_{n\ell\lambda} \rangle_{\rho=\rho_M} \\ &= \int d\eta d\xi [\cos(\eta) - \cos(\xi)] \phi_i(\eta, \xi; \rho_M) \psi_{n\ell\lambda}(R_\lambda, r_\lambda, \gamma_\lambda)|_{\rho_M} \quad (5.66) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} F'_{i,n\ell\lambda} &= \langle \phi_i | \partial \psi_{n\ell\lambda} / \partial \rho \rangle_{\rho=\rho_M} \\ &= \int d\eta d\xi [\cos(\eta) - \cos(\xi)] \phi_i(\eta, \xi; \rho_M) \partial \psi_{n\ell\lambda}(R_\lambda, r_\lambda, \gamma_\lambda) / \partial \rho |_{\rho_M} \quad (5.67) \end{aligned}$$

Pour calculer ces intégrales, nous utilisons des grilles de points de Gauss-Legendre qui sont particulièrement bien adaptées pour décrire les fonctions *hyperangulaires* principalement localisées au voisinage des singularités du potentiel. Ces matrices de projection nous permettent d'écrire les solutions physiques (5.65) le long du rayon  $\rho_M$ , afin de les comparer aux solutions hypersphériques calculées numériquement. Par une procédure analogue à celle décrite dans le cas unidimensionnel, on extrait la matrice de réaction  $\mathbf{K}$ , puis la matrice de collision  $\mathbf{S}$ .



# Chapitre 6

## Calcul tridimensionnel : résultats et discussion

Dans ce chapitre, nous donnons les résultats obtenus sur l'oxygène et le néon. Pour l'oxygène nous détaillons d'abord la contribution de l'onde partielle  $J = 0$  afin d'étudier la distribution des états produits de la réaction de transfert. Ensuite, nous présentons les taux de transfert muoniques sur les deux éléments pour des énergies de collision comprises entre  $10^{-3}$  et  $10$  eV. Nous confrontons enfin ces résultats avec les valeurs expérimentales et théoriques obtenues par d'autres groupes sur ce sujet.

### 6.1 Taux de transfert

La procédure de calcul décrite au chapitre précédent, permet d'obtenir la matrice de collision  $\mathbf{S}$  d'où sont extraites les probabilités de transfert  $P_J(E)$ . En répétant cette méthode pour chaque onde partielle  $J$ , on peut calculer la section efficace du transfert muonique définie par :

$$\sigma(E) = \frac{\pi \hbar^2}{2m_{X,p\mu} E} \sum_J (2J + 1) P_J(E) \quad (6.1)$$

Le taux de transfert est alors donné par :

$$\lambda(E) = N \left( \frac{2E}{m_{X,p\mu}} \right)^{\frac{1}{2}} \sigma(E) \quad (6.2)$$

où  $N$  est la densité atomique de l'Hydrogène liquide ( $4.25 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ). On peut aussi définir les taux de transfert partiels  $\lambda_J(E)$  tels que :

$$\lambda(E) = \sum_J \lambda_J(E) \quad (6.3)$$

$\lambda_J(E)$  est obtenu en remplaçant la sommation dans l'équation (6.1) par la seule contribution de l'onde partielle  $J$ .

Afin de comparer directement nos résultats avec les données expérimentales disponibles, nous avons défini un taux de transfert moyen  $\lambda(T)$  :

$$\lambda(T) = \int_0^{+\infty} \lambda(E)n(E;T)dE \quad (6.4)$$

où  $n(E;T)$  est la distribution cinétique des  $(p\mu)_{1s}$  thermalisés à la température  $T$ . Dans nos calculs, nous avons utilisé une distribution Maxwellienne de vitesses donnée par :

$$n(E;T) = \left(\frac{1}{kT}\right)^{3/2} \sqrt{2E} e^{-E/kT} \quad (6.5)$$

## 6.2 Cas de l'oxygène

L'intégration des équations couplées est réalisée jusqu'à un rayon hypersphérique  $\rho_{max} \sim 200a_\mu (\sim 1\text{\AA})$ . Pour trouver les énergies propres des problèmes séparables en  $\xi$  et  $\eta$  (voir chapitre 5), nous avons utilisé  $N_L = 150$  fonctions de Legendre associées. Les canaux adiabatiques ont ensuite été obtenus en diagonalisant la représentation de l'Hamiltonien hypersphérique à  $\rho$  fixé dans une base extraite constituée de  $N_P = 209$  produits de fonctions séparables.

Afin d'étudier la précision des énergies adiabatiques ainsi calculées, nous nous sommes placés à  $\rho = \rho_{max}$  et avons comparé les résultats correspondant à  $N_L = 150$  avec ceux obtenus pour  $N_L = 300$ . Nous avons ainsi vérifié que l'état produit  $p + (O\mu)_{n'=4}^{7+}$  est convergé avec dix chiffres significatifs, soit une précision absolue de  $5 \cdot 10^{-7}$  eV. Cet état est le plus bas en énergie que nous ayons inclu dans le calcul. Comme dans le cas colinéaire, c'est pour ce canal que la convergence est la plus difficile à obtenir. Pour l'énergie du canal d'entrée  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$ , la précision est égale à la précision de la machine (seize chiffres significatifs en calcul double précision).

### 6.2.1 Canaux couplés et approximation du découplage centrifuge

La figure (6.1) présente les énergies adiabatiques  $\epsilon_i^{J\bar{\Omega}}$  du système  $(p, \mu, O^{8+})$  en fonction du rayon hypersphérique  $\rho$  pour  $J = 1$ . La figure de gauche correspond à  $\bar{\Omega} = 0$  et celle de droite à  $\bar{\Omega} = 1$ . Le comportement des ces courbes sera analysé en détail dans la section suivante. Remarquons simplement qu'une multiplicité donnée ( $n'$  fixé) comprend  $n' - \bar{\Omega}$  sous-niveaux complètement dégénérés asymptotiquement. Chaque multiplicité ( $n', \bar{\Omega} = 0$ ) comporte donc un état de plus que la multiplicité ( $n', \bar{\Omega} = 1$ ). En particulier, l'état initial  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$  n'apparaît pas dans le cas  $\bar{\Omega} = 1$ . C'est pour cette raison que nous avons pu calculer les contributions des différentes ondes partielles en ne considérant que les états  $(J, \bar{\Omega} = 0)$ . Cette approximation

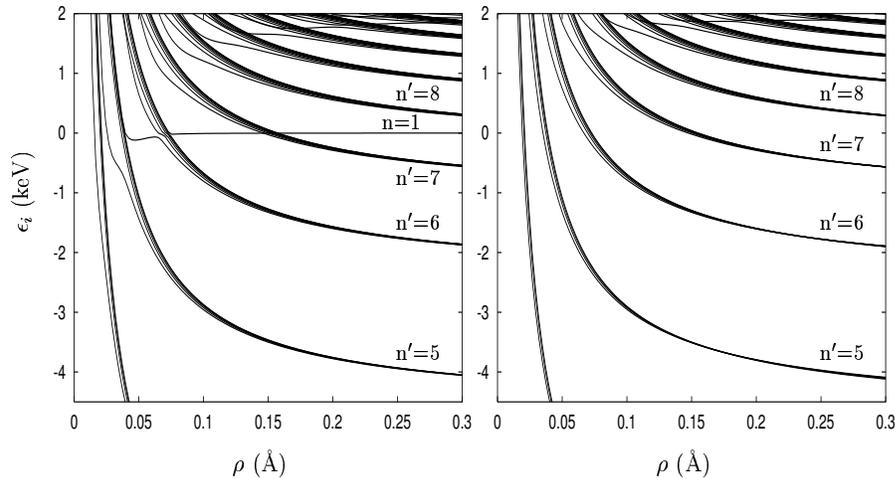


FIG. 6.1 – Energies adiabatiques  $\epsilon_i^{J\bar{\Omega}}$  en fonction du rayon hypersphérique pour  $J = 1$  (à gauche  $\bar{\Omega} = 0$ , à droite  $\bar{\Omega} = 1$ ). L'origine des énergies est choisie de façon à coïncider avec l'énergie asymptotique du canal d'entrée.  $n$  et  $n'$  sont les nombres quantiques principaux des états hydrogénoïdes de  $(p\mu)$  et  $(O\mu)^{7+}$ .

revient à négliger l'effet des couplages de Coriolis entre les états de  $\bar{\Omega}$  différents. Ces couplages sont en effet très faibles, et ne peuvent induire des transitions qu'à très basse énergie, c'est-à-dire lorsque le système évolue le long de l'état initial. Comme le canal  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$  n'apparaît que dans le cas  $\bar{\Omega} = 0$ , cet état se trouve être le seul accessible pendant la phase d'approche : aucune transition n'est donc possible jusqu'à la zone de croisements. L'énergie cinétique acquise lors de la collision rend ces couplages d'autant plus inefficaces dans la suite du processus. Une approximation similaire a déjà été utilisée par Tolstikhin *et al.* pour étudier l'état métastable de l'Hélium antiprotonique et a permis d'obtenir une bonne précision sur les niveaux d'énergie de ce système [61].

Les résultats que nous allons maintenant présenter correspondent à des calculs incluant 88 canaux couplés  $[(p\mu)_{n=1-2} + O$  et  $p + (\mu O)_{n'=4-13}]$  et une taille des secteurs de  $\delta\rho=0.5 a_\mu$ . Ces paramètres nous ont permis de converger les probabilités de transfert à mieux que 0.1%.

### 6.2.2 Analyse des états adiabatiques $J = 0$

Dans un premier temps, nous nous intéressons uniquement à la contribution de l'onde partielle  $J = 0$ .

Sur la figure (6.2) nous avons représenté les énergies adiabatiques  $\epsilon_i$  en fonction du rayon hypersphérique. Le comportement asymptotique de l'état initial  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$  correspond à une interaction ion-dipôle qui varie approximativement en  $-\alpha Z^2/\rho^4$ , où  $\alpha$  est la polarisabilité de l'hydrogène muonique. La forme explicite de cette courbe

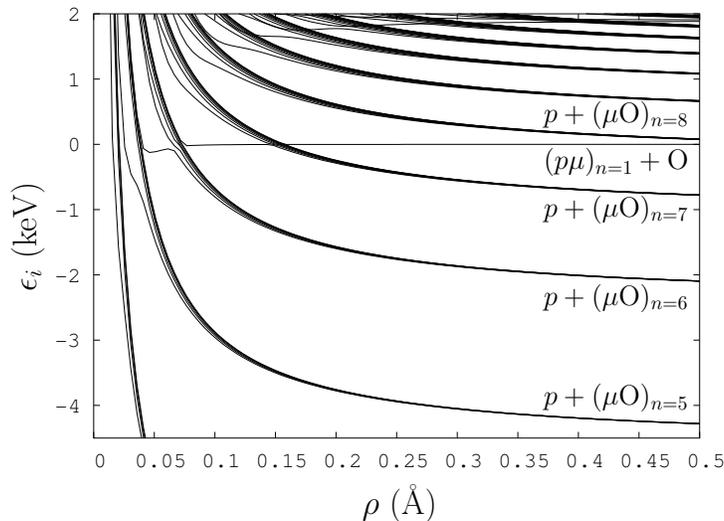


FIG. 6.2 – *Energies adiabatiques  $\epsilon_i$  en fonction du rayon hypersphérique pour  $J = 0$ . L'origine des énergies est choisie de façon à coïncider avec l'énergie asymptotique du canal d'entrée.*

est calculée dans l'annexe H. Ce niveau croise les multiplicités  $n'$  des canaux de sortie  $(O\mu)_{n'}^{7+} + p$ . Les énergies adiabatiques associées décroissent approximativement en  $1/\rho$  pour les grandes valeurs de  $\rho$ . Cette décroissance résulte de la répulsion Coulombienne entre le proton et l'ion muonique  $(O\mu)_{n'}^{7+}$ .

Considérons plus précisément une multiplicité  $n'$  d'états produits (par exemple  $n' = 6$ ). Sur la figure (6.3) on remarque que les états de cette multiplicité, parfaitement dégénérés à l'infini, se séparent lorsque  $\rho$  diminue. De plus, cette levée de dégénérescence ne provoque pas un écart constant entre les différents niveaux. Ce comportement est dû à l'effet Stark provoqué par le champ électrique du proton qui vient perturber les niveaux de  $(O\mu)_{n'}^{7+}$ . Si l'on se limite au terme d'interaction dipolaire, les états propres de l'Hamiltonien Stark correspondent approximativement aux états paraboliques du potentiel Coulombien (voir annexe H). Ce résultat est en accord avec le fait que les coordonnées hypersphériques elliptiques tendent vers les coordonnées paraboliques pour des grandes valeurs de  $\rho$  [60]. Cependant, si l'on utilise la formule (H.25) qui donne l'expression perturbative à l'ordre deux de l'énergie de ces états perturbés, on trouve que l'écart entre deux niveaux successifs devrait être constant. En fait, lorsque  $\rho$  diminue, il faut prendre en compte les termes supérieurs du développement du potentiel (termes quadripolaires) pour voir effectivement apparaître un clivage non équidistant de ces états. En conclusion, lorsque  $\rho$  augmente, les énergies adiabatiques d'une même multiplicité se resserrent et deviennent progressivement équidistantes jusqu'à se confondre en un état  $n'$  fois dégénéré à l'infini.

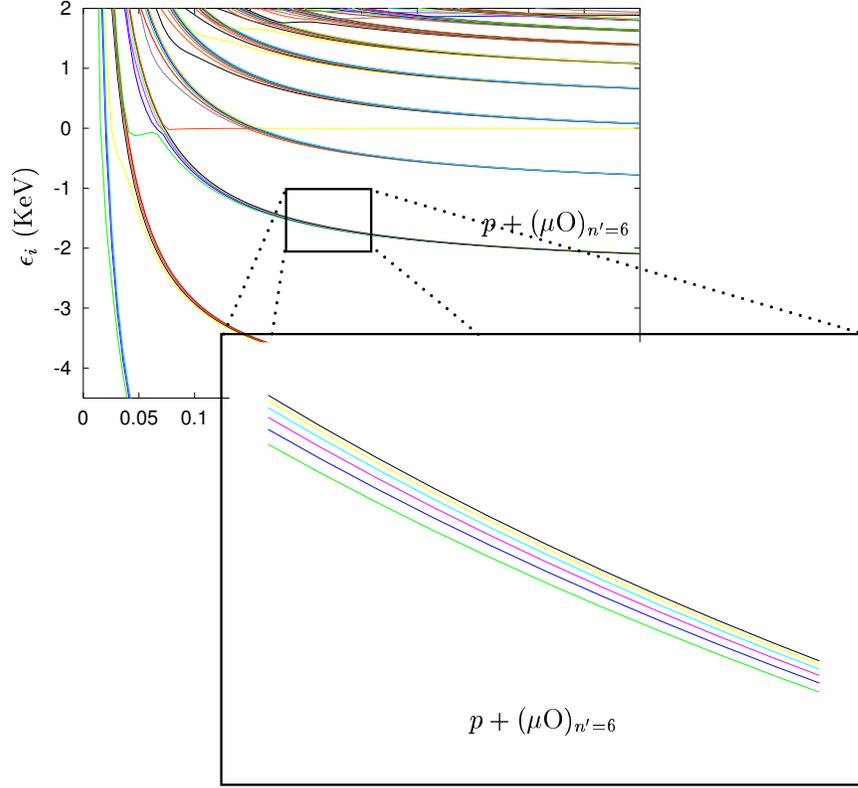


FIG. 6.3 – Levée de dégénérescence liée à l'effet Stark.

Comme dans le cas colinéaire, on remarque que ce sont les multiplicités  $n' = 5$  et  $n' = 6$  qui présentent le couplage avec l'état initial le plus important. Pour chacune de ces multiplicités, un état semble plus couplé que les autres. Pour interpréter ce phénomène, nous assimilerons les états adiabatiques aux fonctions séparables utilisées comme base de diagonalisation de l'Hamiltonien exact (voir chapitre précédent). Cette approximation, qui revient à négliger le terme non séparable du potentiel, nous permet d'associer à chacun de ces états un ensemble de nombres quantiques approchés  $(n_\xi, n_\eta)$ . Les états  $(n_\xi = 0, n_\eta)$  possèdent une extension spatiale limitée en  $\xi$  autour de sa valeur minimale  $\xi = 2\theta_\mu$  (état fondamental du problème en  $\xi$ ) : ils sont donc très proches de la configuration colinéaire. Asymptotiquement, c'est le cas de l'état initial  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$ . On observe alors que l'état final le plus fortement couplé correspond lui aussi à  $n_\xi = 0$ . Cette sélection géométrique ( $n_\xi = 0$ ) montre donc que le processus de transfert est favorisé dans le cas colinéaire.

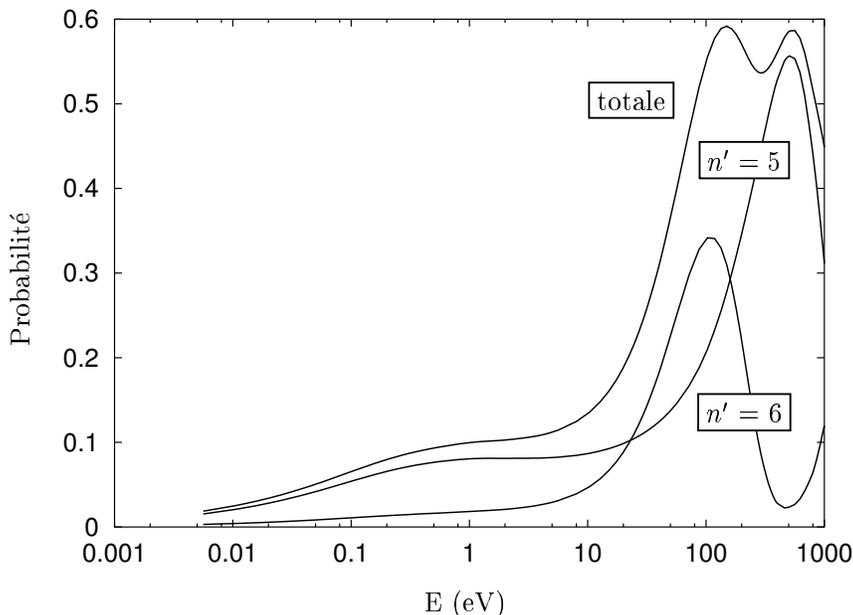


FIG. 6.4 – Probabilités de transfert partielles et totale en fonction de l'énergie de collision pour  $J = 0$ .

### 6.2.3 Probabilité de transfert $J = 0$

La figure (6.4) présente les probabilités de transfert partielles et totale en fonction de l'énergie de collision. Ces résultats montrent que la dynamique est essentiellement dominée, comme dans le modèle colinéaire, par les croisements évités entre l'état initial et les multiplicités  $n' = 5$  et  $n' = 6$ . Ces multiplicités apparaissent en effet comme étant les seules significativement peuplées.

Aux énergies très basses on retrouve une décroissance de la probabilité de transfert caractéristique d'une loi de seuil, déjà observée dans le modèle proposé au chapitre 4. Plus précisément, la probabilité totale de transfert est proportionnelle à  $\sqrt{E}$ . La région du seuil à partir de laquelle cette loi apparaît correspond à [17] :

$$ka \ll 1 \quad (6.6)$$

où  $k = \sqrt{2m_{o,p\mu}E}/\hbar$  et  $a$  est la portée du potentiel asymptotique du canal d'entrée. La définition de  $a$  reste assez subjective. On peut par exemple considérer que la portée du potentiel est la distance à partir de laquelle ce potentiel est inférieur à l'énergie de collision :

$$|V(a)| \leq E \quad (6.7)$$

La forme asymptotique du canal d'entrée est calculée dans l'annexe H. On

trouve :

$$V(\bar{R}_1) = -\beta \frac{Z^2}{\bar{R}_1^4} \quad (6.8)$$

avec :

$$\beta = 9\hbar^4 / (4m_{p\mu}^2) \quad (6.9)$$

La relation (6.6) devient alors :

$$E \ll \frac{1}{\beta Z^2} \left( \frac{\hbar^2}{2m_{o,p\mu}} \right)^2 \quad (6.10)$$

En utilisant cette relation, on trouve que la région du seuil est donnée par :

$$E \ll 0.1 \text{ eV} \quad (6.11)$$

C'est précisément ce que nous obtenons dans le calcul présenté figure (6.4).

## 6.2.4 Populations des états produits

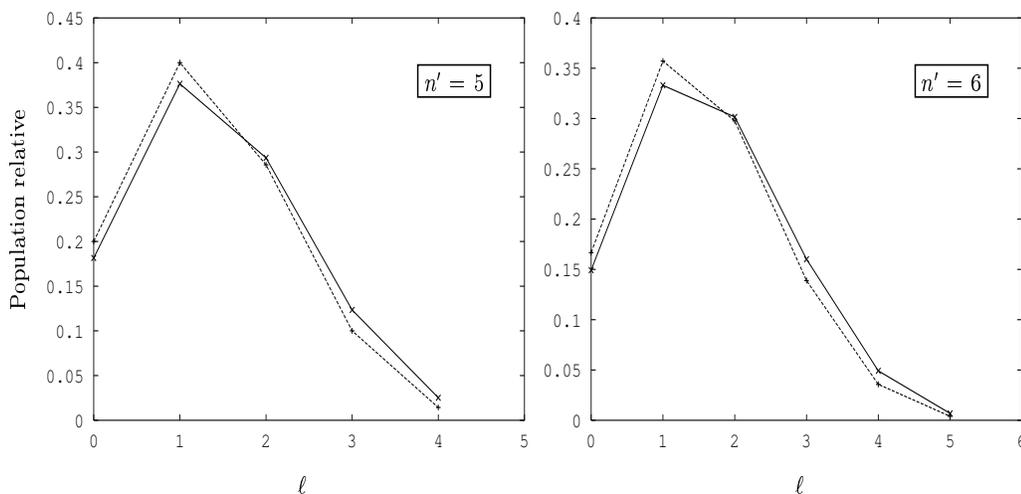


FIG. 6.5 – Populations relatives des niveaux finaux  $(n', \ell)$  pour une énergie de collision  $E = 0.1 \text{ eV}$ . La courbe en trait plein correspond au calcul exact, celle en pointillé au modèle approché.

L'analyse asymptotique réalisée avec les coordonnées de Jacobi bien adaptées aux canaux de sortie de la réaction de transfert, nous permet d'obtenir les populations des états finaux de l'ion  $(O\mu)^{7+}$ . Sur la figure (6.5), nous avons représenté les populations relatives des niveaux  $(n', \ell)$  pour  $n' = 5$  et  $n' = 6$ . Si l'on utilise la règle de sélection approchée trouvée précédemment, on peut supposer que pour une multiplicité  $n'$

donnée, seul l'état hypersphérique ( $n_\xi = 0, n_\eta$ ) se peuple de manière significative. Asymptotiquement ce canal tend vers l'état parabolique ( $\bar{n}_\xi = 0, \bar{n}_\eta = n' - 1$ ). Pour vérifier cette hypothèse, nous avons projeté l'état parabolique sur la base sphérique des états liés ( $n', \ell$ ). La population d'un état  $\ell$  est alors donnée par [62] :

$$P_{n'\ell}^{app} \propto |C((n' - 1)/2, (n' - 1)/2, -n'/2, -n'/2; \ell, 0)|^2 \quad (6.12)$$

où  $C$  est un coefficient de Clebsh-Gordan. Nous avons présenté cette approximation sur la figure (6.5). Il apparaît clairement que la règle de sélection  $n_\xi = 0$  correspond à une très bonne approximation permettant d'extraire les niveaux impliqués dans la dynamique de transfert.

Expérimentalement, seules les populations des états de structure fine sont éventuellement mesurables. La relation entre les probabilités de transfert sur un état de structure fine ( $n', j$ ) et les  $P_{n'\ell}$  est donnée par :

$$P_{n',j} \propto \sum_{\ell} \frac{P_{n',\ell}}{2\ell + 1} \sum_{m_j, m_\ell} |C(\ell, 1/2, m_\ell, m_j - m_\ell; j, m_j)|^2 \quad (6.13)$$

$$= (2j + 1) \sum_{|j - \frac{1}{2}| \leq \ell \leq j + \frac{1}{2}} \frac{P_{n',\ell}}{2\ell + 1} \quad (6.14)$$

Les populations des états de structure fine des multiplicités  $n' = 5$  et  $n' = 6$  sont présentées sur la figure (6.6).

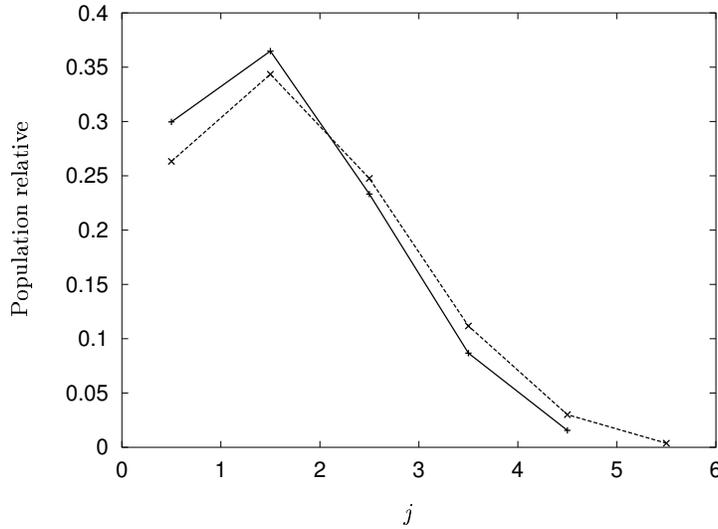


FIG. 6.6 – Populations relatives des niveaux fins ( $n', j$ ) pour une énergie de collision  $E = 0.1$  eV. La courbe en trait plein correspond à  $n' = 6$ , celle en pointillé à  $n' = 5$ .

### Remarque

G. Holzwarth et H. J. Pfeiffer ont déjà utilisé cette méthode pour déterminer les populations des états produits de la réaction de transfert muonique sur le fluor [63]. Après avoir déterminé les états adiabatiques pertinents de la dynamique, ils utilisent les états paraboliques correspondants pour calculer les populations. Le très bon accord entre leurs résultats et les données expérimentales disponibles ont prouvé l'efficacité de cette technique pour interpréter les spectres de cascades radiatives observés.

### 6.2.5 Taux de transfert

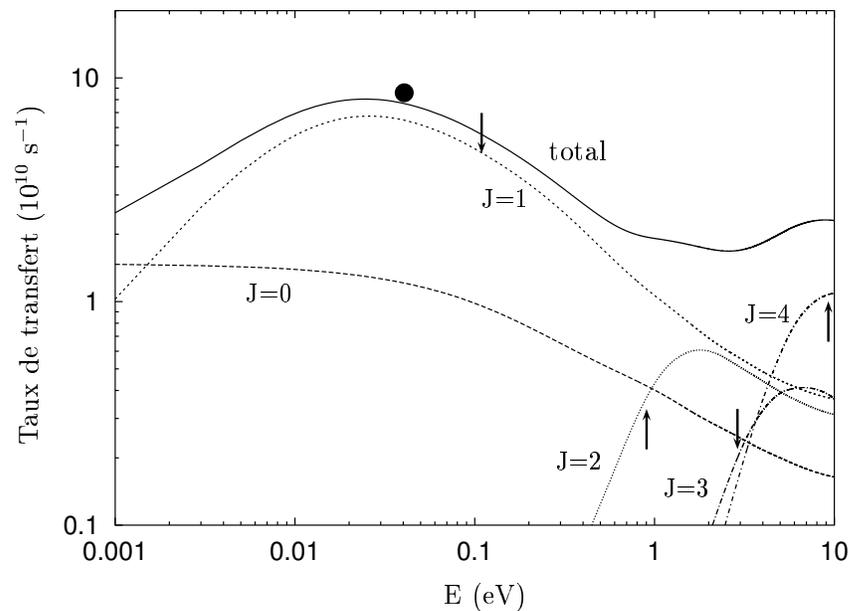


FIG. 6.7 – Taux de transfert partiels et total sur l'oxygène en fonction de l'énergie de collision. Les flèches verticales indiquent l'énergie de la barrière centrifuge. Le point correspond au résultat expérimental de [2].

La figure (6.7) présente les taux de transfert partiels et total obtenus avec l'oxygène pour des énergies de collision comprises entre  $10^{-3}$  et 10 eV. Le point indique la valeur expérimentale mesurée par A. Werthmüller *et al* en exploitant le comportement aux temps longs du spectre de rayons X présenté au chapitre 3 [2]. On observe tout d'abord qu'avec l'échelle logarithmique utilisée en ordonnées, les taux de transfert partiels comportent une partie linéaire :  $\lambda_J(E)$  est proportionnel à  $E^J$ . Ce résultat s'accorde parfaitement avec les lois de seuil s'appliquant pour les différentes ondes partielles [17]. En dessous de  $10^{-3}$  eV, le taux de transfert est dominé

par l'onde partielle  $J = 0$ , tandis qu'aux énergies thermiques ( $\sim 0.04$  eV), la contribution de l'onde  $J = 1$  devient prédominante.

$J$	1	2	3	4	5
Barrière centrifuge	0.09	0.91	3.57	9.48	19.39

TAB. 6.1 – *Barrières centrifuges en eV sur le canal d'entrée de la réaction  $(p\mu)_{1s} + O^{8+} \rightarrow p + (\mu O)^{7+}$  pour une valeur de  $J$  donnée.*

Dans le tableau (6.1), nous avons indiqué les hauteurs des barrières centrifuges correspondant à une valeur de  $J$  donnée. Ces données sont déduites du calcul des énergies adiabatiques  $\epsilon(R_1)$  provenant de la diagonalisation de l'Hamiltonien (I.78) présenté dans l'annexe I pour une valeur de  $R_1$  fixée. Les valeurs obtenues diffèrent de celles observées sur les niveaux hypersphériques  $\epsilon(\rho)$ . En effet, ces dernières résultent en partie de couplages non physiques provenant de la définition du système de coordonnées qui ne tend qu'asymptotiquement vers les coordonnées de Jacobi. Les flèches verticales de la figure (6.7) indiquent l'énergie correspondant à la hauteur de ces barrières. On observe qu'une fois sortie de la région du seuil, chaque onde partielle passe par un maximum pour une énergie très proche de l'énergie de la barrière centrifuge. Cela suggère que ces maxima correspondent à des résonances de formes produites par les barrières centrifuges.

En utilisant la formule (6.4), on trouve que le taux de transfert à l'énergie thermique vaut :

$$\lambda_{th} = \lambda(300K) = 7.77 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (6.15)$$

La valeur expérimentale mesurée est :

$$\lambda_{th}^{exp} = 8.5[5] \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (6.16)$$

L'erreur relative entre ces deux valeurs n'est donc que de 8.2%.

## 6.2.6 Discussion

A ce stade de notre étude, il est intéressant de confronter nos résultats avec les précédents calculs menés sur ce sujet. R. A. Sultanov et S. K. Adhikari ont les premiers obtenu une valeur théorique du taux de transfert thermique sur l'oxygène proche de la valeur expérimentale [64]. Leur méthode approchée utilise les équations intégral-différentielles Fadeev-Hahn à deux niveaux. Dans leur calcul, ils ne prennent pas en compte les contributions des ondes partielles  $J \neq 0$ . Or, nos résultats ont mis en évidence le rôle fondamental joué par l'onde  $J = 1$  aux énergies thermiques : l'accord de leur valeur avec l'expérience n'est donc qu'apparent, et provient d'un effet de compensation entre les différentes approximations faites.

V. I. Savichev et R. Blümel ont récemment utilisé un modèle semi-classique à deux niveaux pour calculer le taux de transfert à des énergies inférieures à 0.5 eV [65]. Dans ce modèle, ils tentent de prendre en compte l'effet d'écran provoqué par les électrons de coeur de l'oxygène. Leur calcul inclut également des ondes partielles  $J \neq 0$  jusqu'à  $J = 4$ . S'ils trouvent aussi un bon accord pour l'énergie thermique, leur taux présente une résonance au voisinage de 0.2 eV, associée à l'onde  $J = 2$ . Dans notre approche, nous avons négligé le rôle des électrons de la molécule d'oxygène pour décrire le potentiel d'interaction entre les trois particules. L'excellent accord que nous avons obtenu pour l'énergie thermique nous suggère cependant que ces effets sont faibles. De plus, si ces corrections d'écrantage avaient un effet significatif sur le taux de transfert, elles tendraient à diminuer l'interaction entre l'oxygène et l'hydrogène muonique, ce qui aurait pour conséquence d'augmenter les énergies des résonances de formes observées. Ainsi, avec un potentiel parfaitement exact, la résonance de l'onde  $J = 1$  se trouverait à une énergie supérieure à 0.04 eV et celle associée à l'onde  $J = 2$  à plus de 2 eV. Nous en concluons que si une certaine résonance doit apparaître au voisinage de 0.1–0.2 eV, celle-ci aurait un fort caractère  $J = 1$ , ce qui ne correspond pas aux résultats de V. I. Savichev et R. Blümel.

### 6.2.7 Faisabilité de l'expérience avec l'oxygène

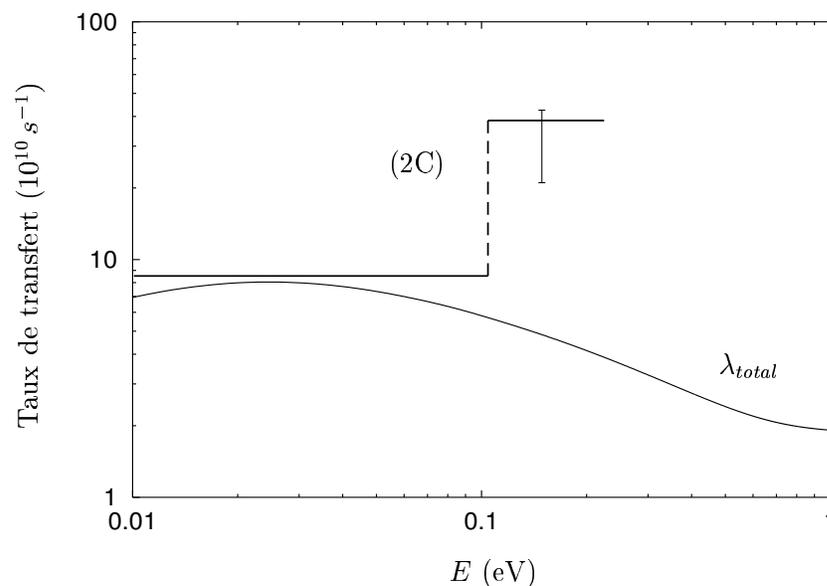


FIG. 6.8 – Comparaison entre le taux de transfert sur l'oxygène calculé et le modèle à deux composantes [2].

Nous sommes maintenant en mesure de confronter nos prévisions avec celles du

modèle à deux composantes proposées par A. Werthmüller *et al* pour expliquer le spectre de rayons X observé avec l'oxygène [2]. Cette comparaison est présentée sur la figure (6.8). Nous voyons clairement que nos calculs ne confirment pas l'augmentation du taux de transfert entre les énergies thermiques et épithermiques du modèle (2C). Il semble alors très probable que ce modèle soit trop simple pour rendre compte de l'effet observé sur le spectre X, en particulier à cause de l'incertitude concernant la distribution initiale des  $(p\mu)$  et son évolution temporelle ultérieure (voir chapitre 3).

D'après cette étude, la dépendance énergétique du taux de transfert n'est pas suffisamment importante pour envisager l'oxygène comme moyen de détection de la transition hyperfine de l'état fondamental de l'hydrogène muonique.

## 6.3 Cas du néon

### 6.3.1 Taux de transfert

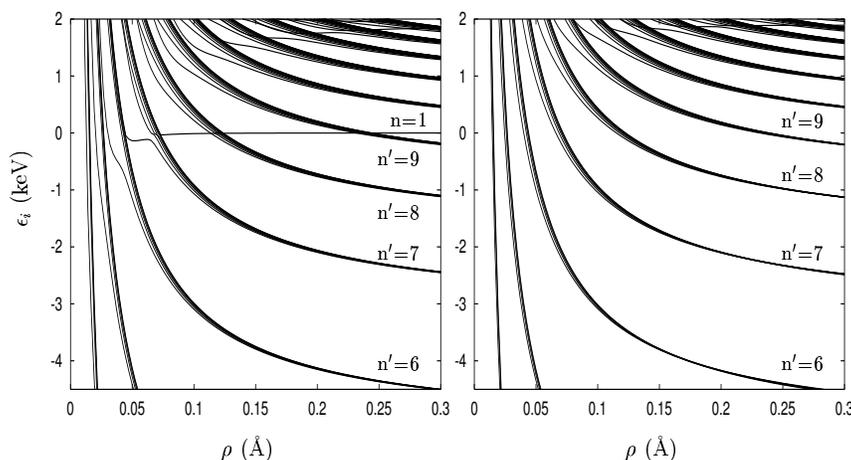
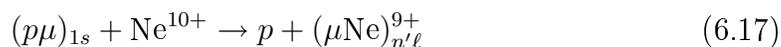


FIG. 6.9 – Energies adiabatiques  $\epsilon_i^{J\bar{\Omega}}$  en fonction du rayon hypersphérique pour  $J = 1$  (à gauche  $\bar{\Omega} = 0$ , à droite  $\bar{\Omega} = 1$ ). L'origine des énergies est choisie de façon à coïncider avec l'énergie asymptotique du canal d'entrée.  $n$  et  $n'$  sont les nombres quantiques principaux des états hydrogénoïdes de  $(p\mu)$  et  $(Ne\mu)^{9+}$ .

Afin de valider nos prévisions, nous nous intéressons à la réaction de transfert muonique sur le néon :



La possibilité de comparer nos résultats avec des données expérimentales disponibles [39, 66] fait de cet élément un candidat idéal pour notre test. La principale

différence entre le transfert de charge sur l'oxygène et sur le néon réside dans l'augmentation de la charge de l'élément  $X^{Z+}$  qui passe de 8 à 10. Sur la figure (6.9) on voit que les états asymptotiques  $(\text{Ne}\mu)^{9+} + p$  sont plus liés que ceux de  $(\text{O}\mu)^{7+} + p$  et c'est maintenant le canal  $(\text{Ne}\mu)_{n'=10}^{9+}$  qui se trouve presque dégénéré avec  $(p\mu)_{n=1}$ . Ces courbes ont été obtenues avec les mêmes paramètres de convergence que pour l'oxygène. Les couplages les plus importants sont observés entre l'état initial de la réaction (6.17) et les multiplicités  $n' = 6$  et  $n' = 7$  : on s'attend à ce que la dynamique de transfert soit gouvernée par ces états. A cause d'une interaction ion-dipôle plus importante, les barrières centrifuges sont plus petites qu'avec l'oxygène (le rapport est de l'ordre de  $(\frac{8}{10})^2$ ). Cependant, les cinq premières ondes partielles sont suffisantes pour converger les résultats aux énergies considérées (voir le tableau (6.2)). Le système d'équations couplées a été intégré jusqu'à  $\rho_{max} = 200 a_\mu$ , en incluant 133 canaux couplés  $[(p\mu)_{n=1-2} + \text{O}$  et  $p + (\mu\text{Ne})_{n'=4-16}]$  avec une taille des secteurs de  $\delta\rho = 0.5 a_\mu$ . La convergence obtenue est encore inférieure à 0.1 %.

$J$	1	2	3	4	5
Exacte	0.05	0.57	2.26	6.00	13.25
Approchée	0.05	0.47	1.86	5.18	11.65

TAB. 6.2 – Barrières centrifuges en eV sur le canal d'entrée de la réaction  $(p\mu)_{1s} + \text{Ne}^{10+} \rightarrow p + (\mu\text{Ne})^{9+}$  pour une valeur de  $J$  donnée. La première ligne correspond aux barrières sur les énergies  $\epsilon(R_1)$  calculées en coordonnées de Jacobi, la seconde donne les barrières calculées sur les niveaux asymptotiques  $\bar{\epsilon}(R_1)$ .

La figure (6.10) montre les taux de transfert partiels et total et les compare aux résultats expérimentaux. Les ondes partielles ont un comportement similaire à celui observé avec l'oxygène mais des différences se dessinent : la contribution de l'onde partielle  $J = 1$  est moins importante que pour l'oxygène, et c'est  $J = 2$  qui est la plus intense. Le taux de transfert est maintenant minimal aux énergies thermiques et présente un maximum très marqué au voisinage de 0.3 eV. En utilisant la formule (6.4), on trouve :

$$\lambda_{th} = \lambda(300K) = 10.2 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1} \quad (6.18)$$

Ce résultat est seulement 20 % plus élevé que la donnée expérimentale ( $8.49 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ ) [39].

### 6.3.2 Discussion

Récemment, S. V. Romanov [67] a calculé le taux de transfert muonique sur le néon. Le système est décrit à l'aide des coordonnées de Jacobi  $(R_1, r_1)$ , et seulement quatre canaux sont considérés. Afin d'étudier les effets d'écrantage électronique, il utilise trois potentiels différents : un potentiel purement Coulombien comme dans

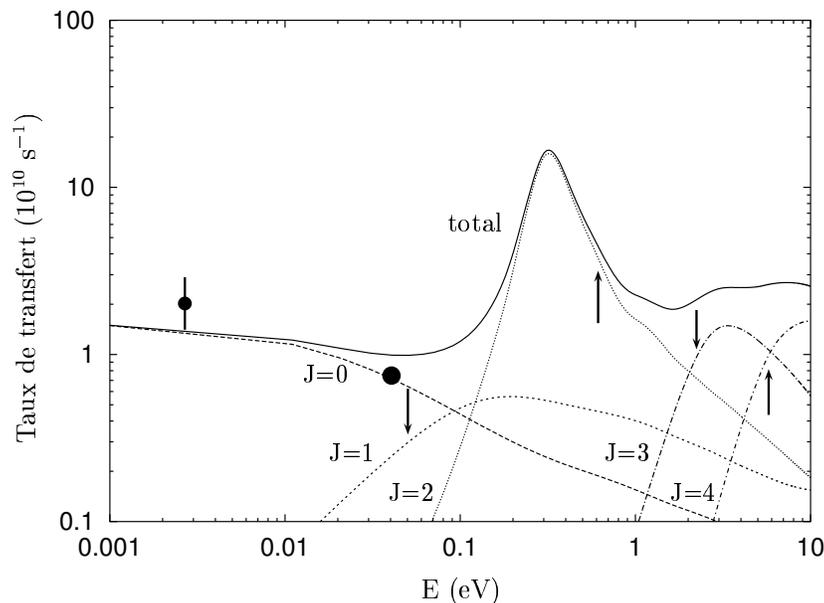


FIG. 6.10 – *Taux de transfert partiels et total sur le néon en fonction de l'énergie de collision. Les flèches verticales indiquent l'énergie de la barrière centrifuge. Les points correspondent aux résultats expérimentaux de [39, 66].*

notre calcul, et deux potentiels incluant des corrections liées aux électrons du néon. Avec le premier potentiel, son résultat pour l'énergie thermique est quatre fois plus élevé que l'expérience. En utilisant les potentiels corrigés, il obtient un taux de transfert encore deux fois supérieur au taux expérimental et retrouve une résonance de l'onde partielle  $J = 2$  vers 0.3 eV.

Romanov en conclut que l'effet des électrons est fondamental pour obtenir un taux de transfert réaliste. Pourtant, bien que nous n'ayons pas considéré cet effet dans notre calcul, notre résultat est en meilleur accord avec l'expérience que le sien. Nous pensons que la sensibilité de son calcul vis-à-vis du potentiel utilisé, vient du traitement approximatif du canal d'entrée mais non d'un effet physique important provoqué par les électrons du néon. En effet, au lieu de calculer de manière exacte l'énergie  $\epsilon(R_1)$  de ce canal, il utilise sa forme asymptotique (voir annexe H). Les barrières centrifuges qu'il obtient coïncident avec celles indiquées dans la deuxième ligne du tableau (6.2). Le taux de transfert qu'il obtient alors diffère considérablement de la donnée expérimentale. En ajoutant les corrections d'écrantage électronique, les niveaux adiabatiques qu'il calcule se rapprochent fortuitement de nos courbes obtenues avec un potentiel purement Coulombien. Cela explique pourquoi le taux de transfert qu'il obtient se rapproche de notre résultat et aussi de l'expérience : il s'agit là encore d'un effet de compensation des approximations utilisées.

Il est maintenant intéressant de calculer le taux de transfert pour les énergies épithermiques. On trouve :

$$\lambda_e = 4.7 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (6.19)$$

Le taux de transfert  $\lambda_e$  est cinq fois supérieur à sa valeur thermique  $\lambda_{th}$ . Cela montre donc qu'il dépend fortement de l'énergie cinétique de collision entre les énergies thermiques et épithermiques. Si l'on compare cette augmentation avec celle prévue pour l'oxygène par le modèle à deux composantes, on s'aperçoit qu'elle est d'une amplitude similaire. Bien qu'il nécessite confirmation par des simulations Monte Carlo, ce résultat plaide pour l'utilisation du néon à la place de l'oxygène dans l'expérience de mesure de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique.

### Remarque

Aux très basses énergies ( $T \sim 20\text{K}$ ), l'accord avec les données expérimentales [66] reste très satisfaisant. Cependant, il est délicat d'utiliser la formule (6.4) pour obtenir une valeur que l'on puisse comparer avec l'expérience. En effet, à ces températures, l'hydrogène à l'état liquide : la distribution Maxwellienne des ( $p\mu$ ) est alors très éloignée de la réalité.

## 6.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'essentiel des résultats obtenus concernant le transfert muonique sur deux éléments : l'oxygène et le néon. L'étude approfondie du transfert sur l'oxygène nous a permis de comprendre le mécanisme du processus. L'analyse de la distribution des états produits a mis en évidence une règle de sélection approchée : le transfert s'effectue majoritairement entre des canaux qui, du point de vue de l'arrangement spatial des trois particules, possède un fort caractère colinéaire. En ce qui concerne la dépendance du taux de transfert sur l'oxygène en fonction de l'énergie de collision, notre étude ne confirme pas les prévisions du modèle à deux composantes. Au lieu de la croissance attendue lorsqu'on passe des énergies thermiques aux épithermiques, nous trouvons une diminution d'un facteur deux. En revanche, les résultats obtenus avec le néon montrent une dépendance du taux de transfert qui semble suffisante pour utiliser cet élément dans l'expérience de mesure de la structure hyperfine de l'hydrogène muonique.



# Chapitre 7

## Effets isotopiques

Dans ce dernier chapitre, nous nous intéressons aux effets isotopiques dans le transfert de charge muonique. Les expériences ont en effet montré que sur un élément donné, le transfert dépend fortement de l'isotope de l'hydrogène muonique considéré, ( $p\mu$ ) ou ( $d\mu$ ). L'effet isotopique dépend aussi de l'élément sur lequel se transfère le muon. Nous présentons d'abord les résultats pour l'azote, le néon et l'oxygène. Nous verrons ensuite comment nos calculs permettent d'interpréter les phénomènes observés.

### 7.1 Cas de l'azote

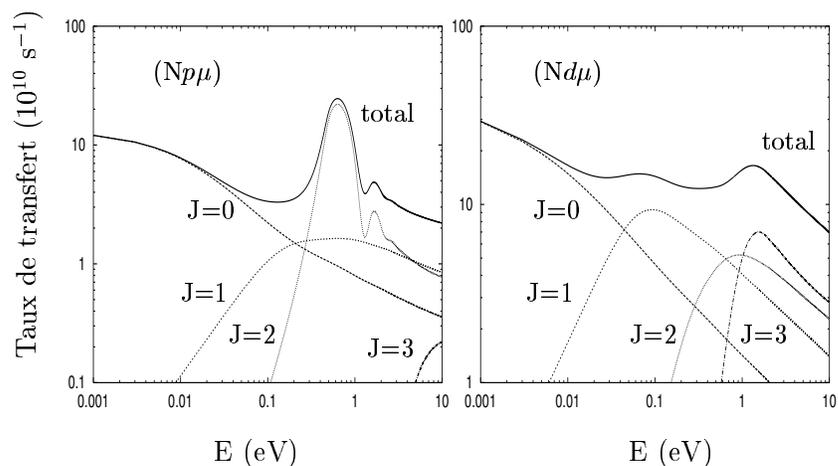


FIG. 7.1 – Taux de transfert partiels et total sur l'azote pour les deux isotopes de l'hydrogène muonique considérés, en fonction de l'énergie de collision. Le cas de l'hydrogène muonique est présenté à gauche, celui du deutérium muonique à droite.

Sur la figure (7.1) nous avons présenté les taux de transfert partiels et total sur l'azote pour les deux isotopes de l'hydrogène muonique ( $(p\mu)$  à gauche et  $(d\mu)$  à droite). Ces résultats ont été obtenus en incluant 88 canaux couplés [ $(p\mu)_{n=1-2} + N$  et  $p + (\mu N)_{n'=4-13}$ ]. Pour le domaine d'énergies considéré, les ondes partielles  $J = 0$  à 4, ont été nécessaires pour obtenir une convergence du taux de transfert total inférieure à 0.1 %.

On retrouve le comportement de seuil des ondes partielles en  $E^J$ . Afin de mettre en évidence l'effet isotopique, nous avons comparé directement les taux de transfert totaux ( $\lambda^p, \lambda^d$ ) (voir figure (7.2)). On s'aperçoit alors que pour des énergies inférieures à 0.1 eV,  $\lambda^d$  est systématiquement plus élevé que  $\lambda^p$ .

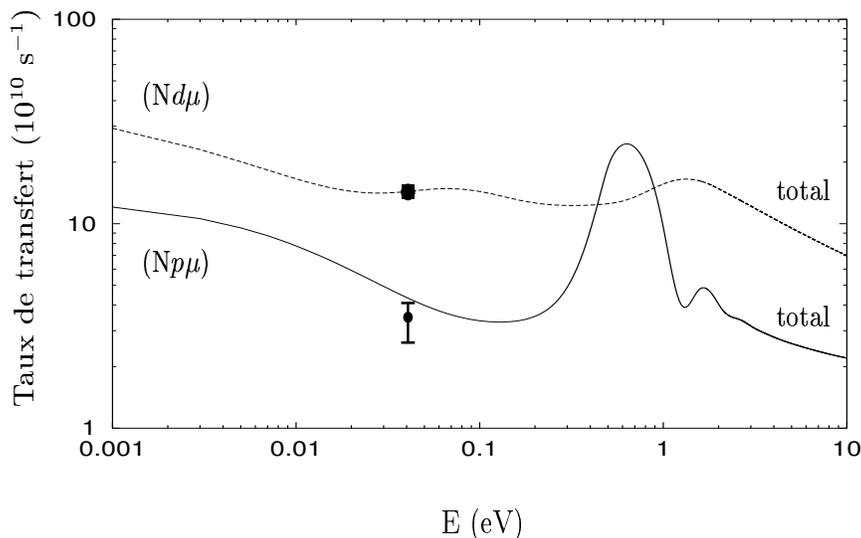


FIG. 7.2 – Comparaison entre les taux de transfert totaux sur l'azote depuis les deux isotopes de l'hydrogène muonique considérés. Le cercle indique le résultat expérimental obtenu avec  $(p\mu)$  [2], le carré celui obtenu avec  $(d\mu)$  [2].

Au voisinage de 0.3 eV, la résonance de l'onde partielle  $J = 2$  observée sur la figure (7.1), permet à  $\lambda^p$  de dépasser localement  $\lambda^d$ . Nous avons aussi reporté les résultats expérimentaux extraits de [2]. En utilisant la formule (6.4) présentée au chapitre précédent, on peut calculer des taux de transfert moyennés sur la distribution énergétique des isotopes muoniques. On trouve :

$$\lambda_{th}^p = \lambda(300K) = 5.2 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda_{th}^d = 14.8 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.1)$$

Ces résultats sont en parfait accord avec l'expérience ( $\lambda_{exp}^p = 3.4 \pm 0.7 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$  et  $\lambda_{exp}^d = 14.5 \pm 0.2 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$ ). L'effet isotopique est donc bien reproduit.

## 7.2 Cas du néon

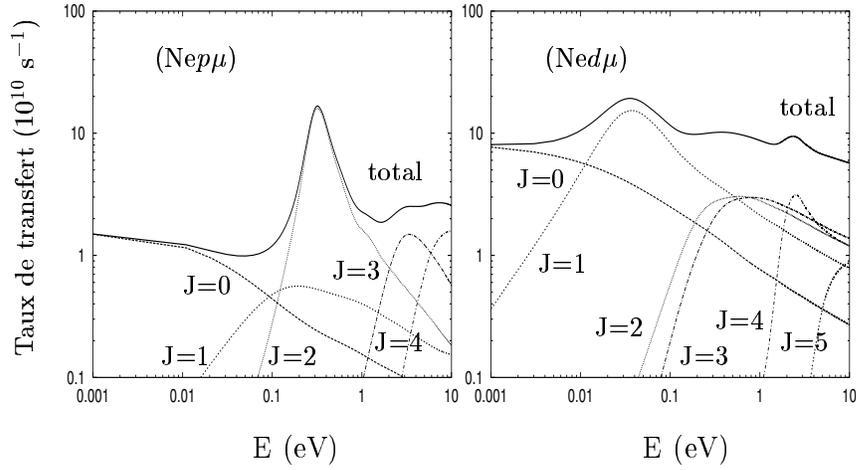


FIG. 7.3 – Taux de transfert partiels et total sur le néon pour les deux isotopes de l'hydrogène muonique considérés, en fonction de l'énergie de collision. Le cas de l'hydrogène muonique est présenté à gauche, celui du deutérium muonique à droite.

Avec le néon, l'effet isotopique est très similaire à celui observé avec l'azote. Sur la figure (7.4), on voit que pour des énergies inférieures à 0.1 eV,  $\lambda^d$  est toujours plus élevé que  $\lambda^p$ . Le passage de  $\lambda^p$  au-dessus de  $\lambda^d$  vers 0.6 eV, s'explique aussi par la résonance de l'onde  $J = 2$  montrée sur la figure (7.3). Aux énergies thermiques on trouve :

$$\lambda_{th}^p = \lambda(300K) = 1.02 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda_{th}^d = 15 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.2)$$

Les résultats expérimentaux donnent :

$$\lambda_{exp}^p = \lambda(300K) = 0.849 \pm 0.002 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda_{exp}^d = 10.1 \pm 0.3 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.3)$$

Même si l'accord expérience-théorie est un peu moins satisfaisant dans le cas du deutérium muonique, l'effet isotopique est reproduit. Des données expérimentales sont aussi disponibles à très basse température ( $T = 20K$ ) [66] :

$$\lambda_{exp}^p = \lambda(20K) = 3 \pm 1 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda_{exp}^d = 18 \pm 7 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.4)$$

En utilisant une distribution Maxwellienne pour calculer les taux moyennés, on obtient :

$$\lambda^p = \lambda(20K) = 1.2 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda^d = 10.5 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.5)$$

L'accord entre les valeurs mesurées et les résultats théoriques est moyen. Comme nous l'avons déjà remarqué au chapitre précédent, à cette température, l'hydrogène est à l'état liquide. L'incertitude sur la distribution énergétique des  $(p\mu)$  et  $(d\mu)$  ne nous permet pas de conclure sur la précision des calculs effectués. De plus, les barres d'erreurs expérimentales sont relativement importantes. Cependant, l'effet isotopique correspond bien à celui observé expérimentalement.

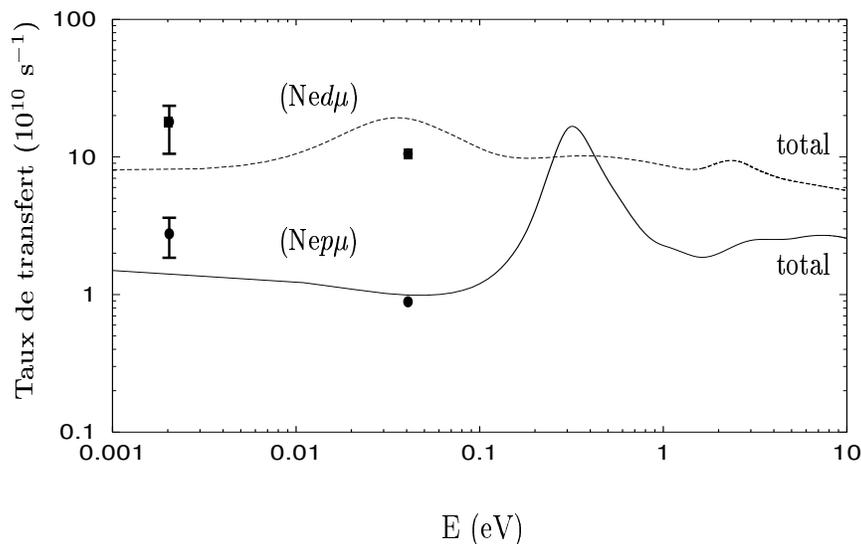


FIG. 7.4 – Comparaison entre les taux de transfert totaux sur le néon depuis les deux isotopes de l'hydrogène muonique considérés. Les cercles indiquent les résultats expérimentaux obtenus avec  $(p\mu)$  [66, 39], les carrés ceux obtenus avec  $(d\mu)$  [66, 39].

### 7.3 Cas de l'oxygène

L'oxygène est le dernier élément que nous présentons. Il est particulièrement intéressant, car expérimentalement, il est le seul pour lequel l'effet isotopique est inversé aux énergies thermiques. En effet, on observe [2] :

$$\lambda_{exp}^p = \lambda(300K) = 8.5 \pm 0.5 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda_{exp}^d = 5.5 \pm 0.5 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.6)$$

Le taux de transfert est donc plus important avec  $(p\mu)$  qu'avec  $(d\mu)$ . Ce résultat s'accord parfaitement avec nos prévisions qui sont présentées sur les figures (7.5) et (7.6). C'est maintenant la résonance observée pour l'onde partielle  $J = 1$  qui explique ce comportement. La théorie est en excellente adéquation avec l'expérience puisque nous trouvons :

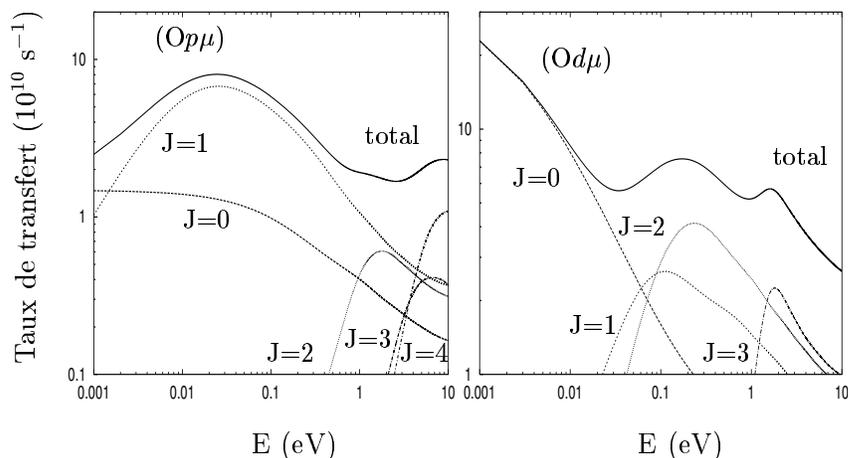


FIG. 7.5 – Taux de transfert partiels et total sur l'oxygène pour les deux isotopes de l'hydrogène muonique considérés, en fonction de l'énergie de collision. Le cas de l'hydrogène muonique est présenté à gauche, celui du deutérium muonique à droite.

$$\lambda^p = \lambda(300K) = 7.77 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad \text{et} \quad \lambda^d = 6.6 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (7.7)$$

## 7.4 Discussion

Elément	E (eV)	$\lambda^p$	Exp.	$\lambda^d$	Exp.
Azote	0.04	5.2	$3.4 \pm 0.7$	14.8	$14.5 \pm 0.2$
Oxygène	0.04	7.77	$8.5 \pm 0.5$	6.6	$5.5 \pm 0.5$
Néon	$2 \cdot 10^{-3}$	1.2	$3 \pm 1$	10.5	$18 \pm 7$
	0.04	1.02	$0.849 \pm 0.002$	15.0	$10.1 \pm 0.3$

TAB. 7.1 – Taux de transfert total moyen obtenus avec une distribution Maxwellienne aux énergies indiquées. Pour comparaison, les résultats expérimentaux extraits de [66, 39, 2] sont aussi présentés. L'unité utilisée est  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ .

Le tableau (7.1) regroupe l'ensemble des résultats que nous avons obtenus ainsi que les données expérimentales. Dans tous les cas, nos calculs reproduisent parfaitement l'effet isotopique observé.

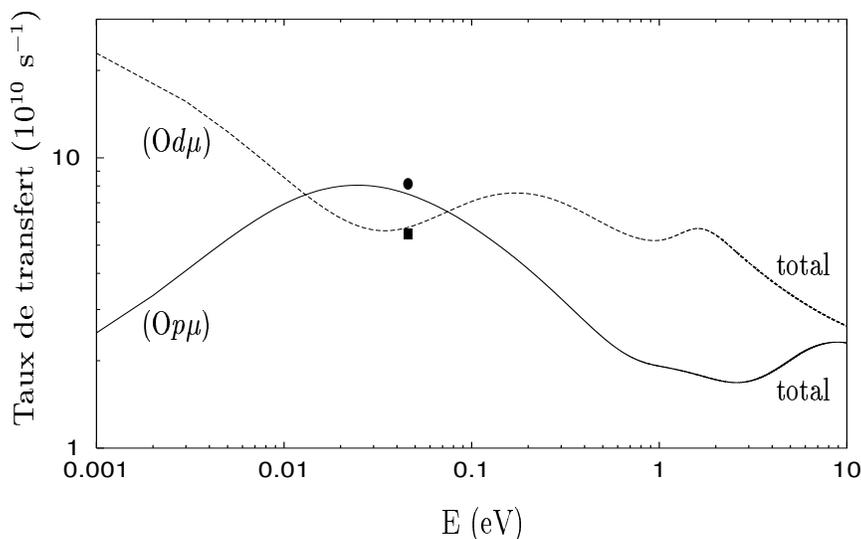


FIG. 7.6 – Comparaison entre les taux de transfert totaux sur l’oxygène depuis les deux isotopes de l’hydrogène muonique considérés. Le cercle indique le résultat expérimental obtenu avec  $(p\mu)$  [2], le carré celui obtenu avec  $(d\mu)$  [2].

En analysant les contributions des différentes ondes partielles, l’explication théorique de l’effet isotopique se dessine peu à peu. Pour les trois éléments étudiés, on remarque qu’à très basse énergie, lorsque l’onde partielle  $J = 0$  domine le processus, le taux de transfert avec  $(d\mu)$  est toujours supérieur à celui obtenu avec  $(p\mu)$ . L’inversion de comportement observée avec l’oxygène aux énergies thermiques s’explique simplement par une résonance importante de l’onde partielle  $J = 1$  qu’on ne retrouve pas avec les autres éléments. Pour ces derniers, un phénomène similaire non mesuré expérimentalement, apparaît à des énergies plus élevées ( $\sim 0.3 - 0.6$  eV). La contribution résonante est alors associée à l’onde partielle  $J = 2$ .

Il nous reste donc à comprendre le mécanisme responsable du comportement à très basse température. Pour cela, nous avons réalisé un calcul à deux niveaux. En effet, l’analyse des probabilités de transfert, nous a permis de constater qu’à très basse énergie, un seul canal de sortie se peuple de manière prédominante :  $p(d) + (N\mu)_{n=5}^{6+}$  pour l’azote,  $p(d) + (O\mu)_{n=5}^{7+}$  pour l’oxygène et  $p(d) + (Ne\mu)_{n=6}^{9+}$  pour le néon. Notre modèle est donc constitué du canal d’entrée de la réaction de transfert et du canal de sortie peuplé. Pour reproduire les niveaux hypersphériques correspondants, nous avons utilisé la forme asymptotique des canaux (voir annexe H) et des couplages Gaussiens. La comparaison entre le calcul complet et le modèle à deux niveaux est présentée pour l’azote sur la figure (7.7). Des résultats similaires ont été obtenus avec les deux autres éléments.

Le calcul simplifié reproduit bien les oscillations de la probabilité de transfert

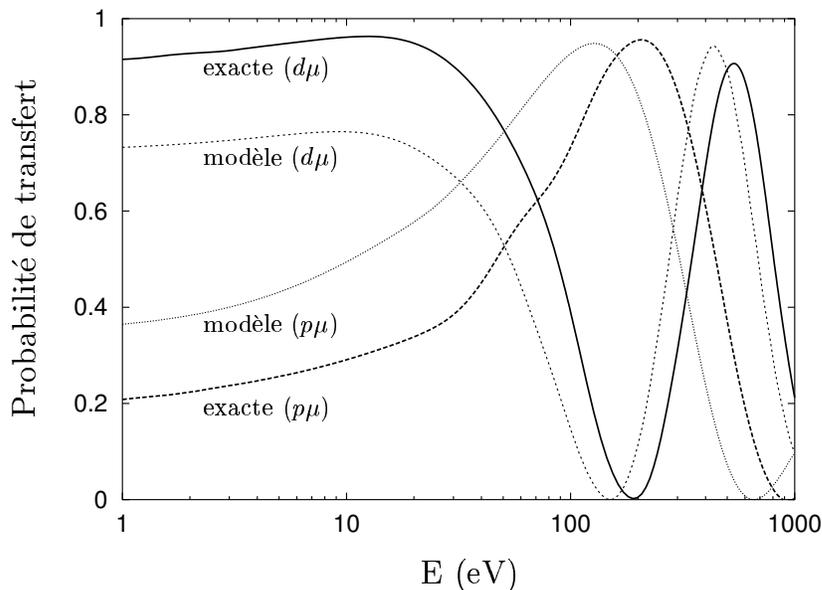


FIG. 7.7 – Comparaison entre les probabilités exactes de transfert sur l'azote depuis ( $p\mu$ ) et ( $d\mu$ ) (onde partielle  $J = 0$ ), et le modèle à deux niveaux.

observées. Ce comportement caractéristique correspond à des oscillations de Stueckelberg [68]. On observe donc les interférences entre les deux chemins dominants pour le transfert de muon : l'un correspond au transfert lorsque les particules se rapprochent, l'autre lorsqu'elles s'éloignent. Dans une vision semi-classique, la différence de phase entre ces deux chemins est donnée par la différence entre les intégrales d'action correspondantes : elle est donc proportionnelle à  $\sqrt{m}$ . A basse énergie, cette différence de phase produit des interférences constructives pour ( $d\mu$ ) alors qu'elles sont destructives avec ( $p\mu$ ). C'est pour cette raison que le taux de transfert  $\lambda^p$  est systématiquement inférieur à  $\lambda^d$  aux basses températures.

Ces résultats constituent la première analyse systématique des effets isotopiques dans le transfert muonique. Aux basses énergies, les premières prédictions réalisées par S. S. Gershtein [4] donnaient un taux de transfert avec ( $p\mu$ ), 1.4 fois plus élevé qu'avec ( $d\mu$ ). Son calcul, de type Landau-Zener, ne prenait pas en compte les effets d'interférences dont nous avons montré le rôle crucial. Plus récemment, R. A. Sultanov et S. K. Adhikari ont retrouvé les effets observés avec l'oxygène [6]. Comme nous l'avons déjà mentionné au chapitre précédent, leurs approximations ne sont pas justifiées et la concordance de leurs valeurs avec l'expérience n'est donc qu'apparente. En ce qui concerne le néon, l'effet isotopique à très basse énergie avait uniquement été interprété qualitativement par Yu. S. Sayasov, à l'aide d'un traitement semi-classique du processus [69].



# Conclusion

Cette thèse a été élaborée autour de l'idée originale d'A. Adamczak *et al.* d'utiliser la dépendance du taux de transfert du muon entre un hydrogène muonique et une molécule d'oxygène, pour mesurer la structure hyperfine de l'hydrogène muonique. Les résultats contradictoires entre les expériences et les études théoriques approchées qui avaient été menées sur ce sujet, nous ont amené à réaliser un calcul précis quantique sur ce processus de transfert, afin de statuer sur la validité du projet. Non seulement notre étude ne confirme pas le modèle à deux composantes élaboré à partir des données expérimentales sur l'oxygène, mais nous avons également montré qu'un autre élément pourrait remplacer avantageusement l'oxygène : le néon.

Pour parvenir à ces conclusions nous avons tout d'abord étudié le transfert muonique sur l'oxygène à l'aide d'un modèle colinéaire. Plus facile à mettre en œuvre que le calcul complet, cette approche nous a permis de bien comprendre la physique du processus. Confrontés à des problèmes de convergence numérique, nous nous sommes aperçus qu'aux voisinage des énergies thermiques, la réaction de transfert impliquant des atomes muoniques nécessitait le même traitement qu'une collision ultra froide. Nous avons donc été amené à développer une méthode particulièrement efficace pour calculer les états adiabatiques du système avec une grande précision. Nos résultats ont montré que la dynamique de transfert était gouvernée par un petit nombre de canaux couplés (le canal d'entrée  $(p\mu)_{n=1} + O^{8+}$ , et les canaux de sortie  $(O\mu)_{n'=5,6}^{7+} + p$  essentiellement). Ce modèle nous a enfin permis de nous familiariser avec les lois de seuil quantique qui apparaissent aux très basses températures. Bien évidemment, cette étude ne prenait pas en compte les effets rotationnels et la description des comportements asymptotiques était intrinsèquement non réaliste. Pour toutes ces raisons, le calcul tridimensionnel s'est avéré indispensable pour obtenir des résultats fiables.

Pour mettre en œuvre le calcul complet, nous avons utilisé les *coordonnées hypersphériques elliptiques* introduites par O. I. Tolstikhin *et al.* dès 1995. Ces coordonnées permettent de régulariser deux des trois singularités Coulombiennes qui apparaissent dans le potentiel d'interaction. La singularité restante correspond au rapprochement du proton et du noyau d'oxygène. Du fait de la répulsion Coulombienne entre ces deux particules chargées positivement, cette configuration n'est pas accessible aux énergies considérées, et ne pose donc pas de problème numérique. En tirant avantage de la quasi-séparabilité du potentiel, nous avons là encore pu mettre au point

une méthode de calcul des états adiabatiques très précise, basée sur l'utilisation des fonctions de Legendre associées. Contrairement au modèle à deux composantes qui prévoyait une augmentation d'un facteur 4 du taux de transfert sur l'oxygène avec l'énergie de collision entre 0.04 eV (énergie thermique) et environ 0.2 eV (énergie épithermique), nos résultats montrent une décroissance de moitié du taux dans cette gamme d'énergie : la dépendance énergétique n'est alors pas suffisante pour envisager d'utiliser l'oxygène dans l'expérience proposée.

Afin d'apprécier la capacité de notre méthode à calculer correctement le taux de transfert, nous l'avons testée sur un autre élément : le néon. Comme avec l'oxygène, les taux calculés aux énergies thermiques présentent un accord remarquable avec les données expérimentales connues. Ces résultats montrent par ailleurs qu'en raison d'une résonance associée à l'onde partielle  $J = 2$ , le taux de transfert sur le néon augmente environ d'un facteur 5 entre les énergies thermiques et épithermiques : il apparaît donc probable que le néon puisse remplacer favorablement l'oxygène. Pour conclure de manière définitive sur ce point, il reste cependant à simuler la technique proposée avec le néon.

Dans le dernier chapitre de cette thèse, nous avons étudié les effets isotopiques dans le transfert muonique, jusqu'alors inexplicés de manière théorique. Nos calculs ont montré que les variations du taux de transfert observées lorsque le deutérium muonique remplace l'hydrogène muonique, sont la conséquence d'un jeu subtil de contributions des différentes ondes partielles.

Si l'effet des électrons dans les atomes et molécules considérés ne semble pas jouer un rôle important dans le processus de transfert muonique, il reste intéressant d'essayer de les inclure dans des calculs ultérieurs afin de pouvoir étudier correctement des éléments plus lourds (l'argon par exemple). En effet, lorsque la charge du noyau augmente, les orbites électroniques se resserrent : les effets d'écrantage deviendront peut-être alors déterminants. Pour affiner la description des systèmes, les effets relativistes pourraient aussi être introduits. Notons enfin que les excellents résultats obtenus sur le transfert de muon sont autant d'incitations à explorer la possibilité d'utiliser la méthode développée, pour étudier d'autres réactions chimiques.

# Annexe A

## Fonction de Green

### A.1 Définition

La fonction de Green  $G_k$  de l'opérateur  $(\Delta + k^2)$  est telle que :

$$(\Delta + k^2)G_k(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{A.1})$$

### A.2 Expression

On a :

$$G_k(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \quad (\text{A.2})$$

En effet :

$$\begin{aligned} \Delta \left( \frac{e^{ikr}}{r} \right) &= e^{ikr} \Delta \left( \frac{1}{r} \right) + \frac{1}{r} \Delta (e^{ikr}) \\ &\quad + 2\nabla \left( \frac{1}{r} \right) \cdot \nabla (e^{ikr}) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

On calcule facilement :

$$\Delta (e^{ikr}) = -k^2 (e^{ikr}) + \frac{2ik}{r} (e^{ikr}) \quad (\text{A.4})$$

$$\nabla (e^{ikr}) = ik (e^{ikr}) \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (\text{A.5})$$

On a aussi [20] :

$$\Delta \left( \frac{1}{r} \right) = -4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (\text{A.6})$$

Il vient :

$$(\Delta + k^2) \left( -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right) = \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{A.7})$$

ce qui montre que la forme (A.2) vérifie bien l'équation (A.1).

### Remarque

On montre de même que :

$$(\Delta + k^2) \left( -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ikr}}{r} \right) = \delta(\mathbf{r}) \quad (\text{A.8})$$

## A.3 Expression intégrale de l'équation aux valeurs propres

Considérons l'équation aux valeurs propres suivante :

$$(\Delta + U(\mathbf{r})) \varphi(\mathbf{r}) = -k^2 \varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{A.9})$$

où  $U$  est un potentiel quelconque vérifiant les propriétés de régularités usuelles.

On peut alors montrer que si  $G_k$  est la fonction de Green de l'opérateur  $(\Delta + k^2)$  définie précédemment, la solution générale de l'équation (A.9) est de la forme [20] :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi_0(\mathbf{r}) + \int d^3r' G_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') \quad (\text{A.10})$$

où  $\varphi_0$  est la solution de l'équation libre :

$$(\Delta + k^2) \varphi_0(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{A.11})$$

# Annexe B

## Expression du rayon de Zemach en fonction des facteurs de forme

Dans cette annexe, nous exprimons le rayon de Zemach du proton  $R_p$  en fonction des facteurs de forme électrique et magnétique.

### B.1 Expression intégrale

#### B.1.1 Facteurs de forme

Les facteurs de forme électrique  $G_e$  et magnétique  $G_m$  sont respectivement la transformée de Fourier de la distribution électrique de charge du proton  $\rho_e$  et de sa distribution magnétique interne  $\rho_m$ . On a donc :

$$\rho_e(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} G_e(-\mathbf{p}^2) \quad (\text{B.1})$$

et

$$\rho_m(\mathbf{r}) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \frac{G_m(-\mathbf{p}^2)}{\mu_p} \quad (\text{B.2})$$

où  $\mu_p$  est le moment magnétique du proton et  $\mathbf{p}$  le vecteur impulsion. Ces définitions ont été choisies de sorte qu'en unités atomiques,  $G_e(\mathbf{0}) = 1$  et  $G_m(\mathbf{0}) = 1$ .

Pour des raisons de symétrie, l'argument des facteurs de formes est  $-\mathbf{p}^2$ . En effet,  $G_e$  et  $G_m$  apparaissent naturellement dans les expressions des éléments de matrice de l'opérateur de courant électromagnétique d'une particule chargée, avec comme argument le carré du 4-vecteur impulsion transférée  $\mathbf{P}$ . Dans les processus élastiques, il n'y a pas de transfert d'énergie et on a donc :  $\mathbf{P}^2 = -\mathbf{p}^2$ .

#### B.1.2 Rayon de Zemach

Le rayon de Zemach du proton est défini comme le premier moment de la distribution électromagnétique du proton. On a donc :

$$R_p = \int d^3r' r' \rho_{em}(\mathbf{r}') \quad (\text{B.3})$$

où :

$$\rho_{em}(\mathbf{r}) = \int d^3u \rho_e(\mathbf{r} - \mathbf{u}) \rho_m(\mathbf{u}) \quad (\text{B.4})$$

En utilisant les définitions (B.1) et (B.2) on peut mettre le rayon de Zemach du proton sous la forme :

$$R_p = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3p}{\mathbf{p}^4} \left( 1 - \frac{1}{\mu_p} G_E(-\mathbf{p}^2) G_M(-\mathbf{p}^2) \right) \quad (\text{B.5})$$

## B.2 Démonstration

L'intégrale (B.3) que nous cherchons à réexprimer, peut se mettre sous la forme :

$$R_p = \int d^3r r \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} F(\mathbf{p}^2) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (\text{B.6})$$

où on a posé  $F(\mathbf{p}^2) = G_e(-\mathbf{p}^2) G_m(-\mathbf{p}^2) / \mu_p$ . Il n'y a pas de problème de convergence pour l'intégrale sur  $\mathbf{p}$ . La convergence de l'intégrale sur  $\mathbf{r}$  reste à étudier. On peut écrire :

$$R_p = \lim_{a \rightarrow 0} \int d^3r r e^{-ar} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} F(\mathbf{p}^2) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (\text{B.7})$$

En utilisant la relation :

$$\frac{e^{-ar}}{r} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{k^2 + a^2} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{B.8})$$

on trouve :

$$r e^{-ar} = \frac{\partial^2}{\partial a^2} \frac{e^{-ar}}{r} = -8\pi \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2 - 3a^2}{(k^2 + a^2)^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (\text{B.9})$$

En substituant cette expression dans (B.7) on obtient :

$$R_p = -8\pi \lim_{a \rightarrow 0} \int d^3r \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2 - 3a^2}{(k^2 + a^2)^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} F(\mathbf{p}^2) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (\text{B.10})$$

Comme toutes les intégrales convergent, on peut changer leur ordre :

$$R_p = -8\pi \lim_{a \rightarrow 0} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} F(\mathbf{p}^2) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2 - 3a^2}{(k^2 + a^2)^3} \int d^3r e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k})\mathbf{r}} \quad (\text{B.11})$$

L'intégrale sur  $\mathbf{r}$  est connue :

$$\int d^3r e^{i(\mathbf{p}-\mathbf{k})\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}) \quad (\text{B.12})$$

Il vient :

$$R_p = -\frac{1}{\pi^2} \lim_{a \rightarrow 0} \int d^3p F(\mathbf{p}^2) \frac{p^2 - 3a^2}{(p^2 + a^2)^3} \quad (\text{B.13})$$

Divisons cette intégrale en deux parties :

$$R_p = -\frac{1}{\pi^2} \lim_{a \rightarrow 0} \int d^3p (F(\mathbf{p}^2) - 1) \frac{p^2 - 3a^2}{(p^2 + a^2)^3} + \Delta \quad (\text{B.14})$$

avec :

$$\Delta = -\frac{1}{\pi^2} \lim_{a \rightarrow 0} \int d^3p \frac{p^2 - 3a^2}{(p^2 + a^2)^3} \quad (\text{B.15})$$

L'intégrale  $\Delta$  se calcule facilement en coordonnées sphériques : on trouve que  $\Delta = 0$ , indépendamment de la valeur de  $a$ . En ce qui concerne la première intégrale, son intégrant peut s'écrire dans la limite  $\mathbf{p}^2 \rightarrow 0$  :

$$d^3p (F(\mathbf{p}^2) - 1) \frac{p^2 - 3a^2}{(p^2 + a^2)^3} \sim d\Omega dp F'(0) p^4 \frac{p^2 - 3a^2}{(p^2 + a^2)^3} \quad (\text{B.16})$$

où  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ . Cette expression ne possède pas de singularité en  $a = 0$  et on peut donc mettre directement  $a = 0$  dans (B.14) pour obtenir l'expression finale :

$$R_p = -\frac{1}{\pi^2} \int d^3p \frac{1}{p^4} (F(\mathbf{p}^2) - 1) \quad (\text{B.17})$$



# Annexe C

## Expression des opérateurs aux dérivées partielles

Dans cette annexe nous exprimons les opérateurs  $\frac{\partial^2}{\partial R_1^2}$  et  $\frac{\partial^2}{\partial r_1^2}$  en coordonnées hypersphériques.

### C.1 Coordonnées hypersphériques

Les coordonnées hypersphériques  $(\rho, \theta)$  se déduisent des coordonnées de Jacobi suivant la transformation :

$$R_1 = \rho \cos \theta \quad (\text{C.1})$$

$$r_1 = \rho \sin \theta \quad (\text{C.2})$$

soit :

$$\rho = \sqrt{R_1^2 + r_1^2} \quad (\text{C.3})$$

$$\tan \theta = \frac{r_1}{R_1} \quad (\text{C.4})$$

### C.2 Dérivée seconde par rapport à $R_1$

On a :

$$\frac{\partial}{\partial R_1} = \frac{\partial \rho}{\partial R_1} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial \theta}{\partial R_1} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\text{C.5})$$

d'après (C.3),

$$\frac{\partial \rho}{\partial R_1} = \frac{R_1}{\sqrt{R_1^2 + r_1^2}} = \frac{R_1}{\rho} = \cos \theta \quad (\text{C.6})$$

de même,

$$\frac{\partial \tan \theta}{\partial R_1} = (1 + \tan^2 \theta) \frac{\partial \theta}{\partial R_1} \quad (\text{C.7})$$

soit, d'après (C.4) :

$$\frac{\partial \theta}{\partial R_1} = \frac{1}{1 + \left(\frac{r_1}{R_1}\right)^2} \left(-\frac{r_1}{R_1^2}\right) = -\frac{r_1}{\rho^2} = -\frac{1}{\rho} \sin \theta \quad (\text{C.8})$$

il vient donc :

$$\frac{\partial}{\partial R_1} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta}$$

finalement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} &= \frac{\partial}{\partial R_1} \left( \frac{\partial}{\partial R_1} \right) \\ &= \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\rho} \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \rho} \\ &\quad - 2 \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \theta \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - 2 \frac{1}{\rho} \cos^2 \theta \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \theta} \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

### C.3 Dérivée seconde par rapport à $r_1$

En procédant de la même manière que précédemment on trouve :

$$\frac{\partial}{\partial r_1} = \sin \theta \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (\text{C.10})$$

soit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} &= \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\rho} \cos^2 \theta \frac{\partial}{\partial \rho} \\ &\quad - 2 \frac{1}{\rho^2} \cos^2 \theta \sin^2 \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + 2 \frac{1}{\rho} \cos^2 \theta \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \theta} \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

# Annexe D

## Fonctions de Legendre associées

### D.1 Définition

Les fonctions de Legendre associées, notées  $P_l^m$ , sont les solutions sur l'intervalle  $[-1, 1]$ , de l'équation différentielle :

$$\left( (1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right) P_l^m(x) = 0 \quad (\text{D.1})$$

Ces fonctions sont données par la relation :

$$P_l^m(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad (\text{D.2})$$

avec  $0 \leq m \leq l$ .

### D.2 Propriétés

#### D.2.1 Orthogonalité

Pour une valeur de  $m$  fixée, l'ensemble des  $P_l^m$  constitue un système orthogonal de fonctions. Elles satisfont la relation d'orthogonalité :

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_{l'}^m(x) dx = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \quad (\text{D.3})$$

#### D.2.2 Parité

On a :

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l-m} P_l^m(x) \quad (\text{D.4})$$

### D.2.3 Relations de récurrence

Il existe de nombreuses relations de récurrence [50] entre les fonctions de Legendre associées. En voici deux particulièrement importantes :

$$(2l + 1)xP_l^m(x) = (l + 1 - m)P_l^{m+1}(x) + (l + m)P_l^{m-1}(x) \quad (\text{D.5})$$

$$(1 - x^2)\frac{d}{dx}P_l^m(x) = (l + 1)xP_l^m - (l + 1 - m)P_{l+1}^m(x) \quad (\text{D.6})$$

#### Remarques

1. Au voisinage de  $x = \pm 1$ ,  $P_l^m(x) \simeq (1 \mp x)^{m/2}$ .
2. Pour  $m = 0$ ,  $P_l^m(x) = P_l^0(x)$  coïncide avec le polynôme de Legendre  $P_l(x)$ .
3. Les harmoniques sphériques  $Y_l^m$ , fonctions propres de l'opérateur carré du moment cinétique  $\mathbf{L}^2$  et de sa projection sur un axe de quantification  $L_z$ , peuvent être exprimées à l'aide des  $P_l^m$  selon la relation :

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l + 1)(l - m)!}{4\pi(l + m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (\text{D.7})$$

# Annexe E

## Utilisation mixte FBR-DVR

Cette annexe présente les concepts de base de l'utilisation mixte des représentations spectrale FBR et pseudo-spectrale DVR pour la recherche des états stationnaires d'un système. Pour la partie sur la base DVR, nous nous sommes largement inspirés de [70].

### E.1 FBR

Pour simplifier les notations, nous travaillons à une seule dimension. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit alors :

$$H\varphi(x) = E\varphi(x) \quad (\text{E.1})$$

où  $H$  est l'Hamiltonien du système considéré. En général,  $H$  se compose d'un terme cinétique  $T$  (opérateur non local) et d'un terme potentiel  $V$  (local) :

$$H = T + V \quad (\text{E.2})$$

Soit  $\{\phi_i(x)\}_{i=1,n}$  un ensemble fini de fonctions orthonormées de l'espace des états. Cet ensemble constitue une base *spectrale* de dimension  $n$ . La méthode FBR (Finite basis Representation) consiste à diagonaliser la matrice de la représentation de  $H$  dans une base spectrale.

Supposons que les  $\phi_i(x)$  correspondent aux états propres d'une partie  $H_0$  de l'hamiltonien telle que l'on puisse écrire :

$$H = H_0 + \Delta V \quad (\text{E.3})$$

où  $H_0 = T + V_0$  et  $\Delta V = V - V_0$  et :

$$H_0\phi_i(x) = \epsilon_i\phi_i(x) \quad (\text{E.4})$$

La représentation de  $H_0$  est alors diagonale et on peut écrire :

$$\langle \phi_i | H | \phi_j \rangle = H_{ij}^{FBR} = \epsilon_i \delta_{ij} + \langle \phi_i | \Delta | \phi_j \rangle \quad (\text{E.5})$$

Pour exprimer  $\Delta V$ , il faut calculer les intégrales du type :

$$\int \phi_i^*(x) \Delta V(x) \phi_j(x) dx \quad (\text{E.6})$$

Matriciellement l'expression (E.5) devient :

$$\mathbf{H}^{FBR} = \mathbf{H}_0^{FBR} + \Delta \mathbf{V}^{FBR} \quad (\text{E.7})$$

où  $\mathbf{H}_0^{FBR}$  est une matrice diagonale de dimension  $n \times n$  et  $\Delta \mathbf{V}^{FBR}$  une matrice pleine de même dimension.

## E.2 Méthode mixte FBR-DVR

D'après l'expression (E.7), il apparaît intéressant de trouver une nouvelle représentation de  $\Delta V$  afin de simplifier le traitement numérique de ce terme. C'est le rôle de la base DVR (Discrete Variable Representation).

### E.2.1 La base DVR

Considérons toujours le cas d'un problème unidimensionnel et indépendant du temps. La fonction d'onde  $\psi$  du système peut s'écrire sous la forme :

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i(x) \quad (\text{E.8})$$

où  $\{\phi_i\}_{i=1,2,\dots,n}$  est une base spectrale. Les coefficients  $a_i$  sont donnés par :

$$a_i = \int \phi_i^*(x) \psi(x) dx \quad (\text{E.9})$$

l'intégrale étant effectuée sur le domaine de définition de l'espace accessible au système. Afin de discrétiser cet espace, on utilise une quadrature de Gauss adaptée (voir annexe F). Avec  $n$  points de Gauss  $\{x_\alpha\}_{\alpha=1,2,\dots,n}$  de poids  $w_\alpha$  associés, si chaque  $\phi_i$  peut s'écrire comme une combinaison linéaire de polynômes de degré inférieur ou égal à  $n-1$ , on a

$$a_i = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \phi_i^*(x_\alpha) \psi(x_\alpha) \quad (\text{E.10})$$

En injectant (E.10) dans l'expression (E.8) de  $\psi$ , il vient :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \phi_i^*(x_\alpha) \psi(x_\alpha) \phi_i(x) \\ &= \sum_{\alpha=1}^n \psi_\alpha \delta_\alpha(x) \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

où on a défini les fonctions

$$\delta_\alpha(x) = \sqrt{w_\alpha} \sum_{i=1}^n \phi_i^*(x_\alpha) \phi_i(x) \quad (\text{E.12})$$

et les composantes de  $\psi$  par :

$$\psi_\alpha = \sqrt{w_\alpha} \psi(x_\alpha) \quad (\text{E.13})$$

Nous allons maintenant montrer que l'ensemble des fonctions  $\delta_\alpha(x)$  forme une base orthonormée de l'espace de Hilbert discrétisé. En outre, nous verrons que cette base que nous appellerons base DVR, diagonalise l'opérateur  $\hat{x}$ .

### E.2.2 Quelques propriétés

Considérons la matrice  $\mathcal{P}$  définie par :

$$\mathcal{P}_{ij} = \sqrt{w_i} \phi_j(x_i) \quad (\text{E.14})$$

Remarquons tout d'abord que le fait d'avoir choisi le même nombre de points de Gauss que celui de fonctions constituant la base spectrale, implique que  $\mathcal{P}$  est une matrice carrée d'ordre  $n$ . Il vient ensuite

$$\delta_\alpha(x) = \sum_{i=1}^n \phi_i(x) \mathcal{P}_{i\alpha}^\dagger \quad (\text{E.15})$$

Montrons que  $\mathcal{P}$  est unitaire. En effet :

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}^\dagger \mathcal{P})_{ij} &= \sum_{\alpha=1}^n \sqrt{w_\alpha} \phi_i^*(x_\alpha) \sqrt{w_\alpha} \phi_j(x_\alpha) \\ &= \int \phi_i^*(x) \phi_j(x) dx \\ &= \delta_{ij} \end{aligned} \quad (\text{E.16})$$

Cette dernière relation prouve l'unitarité de  $\mathcal{P}$ . En regardant l'équation (E.14), on peut déduire de l'unitarité de  $\mathcal{P}$  que l'ensemble des fonctions  $\delta_\alpha(x)$  forme une base orthonormée de  $\mathcal{H}$ , la base DVR.  $\mathcal{P}^\dagger$  est donc la matrice de passage de la base spectrale à la base DVR.

Considérons maintenant l'élément de matrice de l'opérateur  $\hat{x}$

$$\begin{aligned} \langle \delta_\alpha | \hat{x} | \delta_\beta \rangle &= \int \delta_\alpha^*(x) x \delta_\beta(x) dx \\ &= \sum_{\gamma=1}^n w_\gamma \delta_\alpha^*(x_\gamma) x_\gamma \delta_\beta(x_\gamma) \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

comme

$$\begin{aligned}
 \delta_\alpha^*(x_\beta) &= \sum_{i=1}^n \phi_i^*(x_\beta) \phi_i(x_\alpha) \sqrt{w_\alpha} \\
 &= \Delta_{\alpha\beta} / \sqrt{w_\beta} \\
 &= \delta_{\alpha\beta} / \sqrt{w_\beta}
 \end{aligned} \tag{E.18}$$

il vient

$$\langle \delta_\alpha | \hat{x} | \delta_\beta \rangle = x_\alpha \delta_{\alpha\beta} \tag{E.19}$$

la base DVR est donc formée de fonctions propres de l'opérateur  $\hat{x}$ . Les valeurs propres correspondantes sont les points de Gauss associés à la base spectrale.

### E.2.3 Expression mixte

Dans la base DVR on pourra écrire :

$$\langle \delta_\alpha | \Delta V | \delta_\beta \rangle = \int dx \delta_\alpha^*(x) \Delta V(x) \delta_\beta(x) \simeq \Delta V(x_\alpha) \delta_{\alpha\beta} \tag{E.20}$$

où l'erreur provient de la troncature de la base. Suivant cette approximation, la matrice de  $\Delta V$  est donc diagonale en représentation DVR et on a :

$$\mathbf{H}^{FBR} = \mathbf{H}_0^{FBR} + \mathcal{P} \Delta \mathbf{V}^{DVR} \mathcal{P}^{-1} \tag{E.21}$$

# Annexe F

## Quadratures Gaussiennes

Dans cette annexe, nous présentons les idées de base sur lesquelles repose la méthode d'approximation d'une intégrale par une quadrature de Gauss.

### F.1 Position du problème

Considérons l'intégrale définie de la forme :

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \tag{F.1}$$

Moyennant quelques restrictions sur les propriétés de la fonction  $w$ , appelée aussi *fonction de poids*, nous nous intéressons à l'existence d'un ensemble fini de points  $\{x_i\}_{i=1,n}$  de l'intervalle  $[a,b]$  et d'un ensemble de nombres réels associé  $\{w_i\}_{i=1,n}$  tels que :

$$\int_a^b w(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \tag{F.2}$$

les  $w_i$  sont les *poids* de la quadrature correspondante.

### F.2 Approche qualitative

L'idée première de cette méthode repose sur la détermination d'une fonction d'interpolation de  $f$  définie uniquement par la donnée d'un nombre fini de valeurs de  $f$  en certains points  $\{x_i\}_{i=1,n}$  de l'intervalle  $[a,b]$ . Dans les procédures usuelles d'interpolation, les  $x_i$  sont équidistants. Gauss propose en 1814, de tirer partie d'une distribution de points non équidistants permettant d'obtenir une meilleure interpolation avec le même nombre de points.

Considérons le cas où  $w(x) = 1$  pour tout  $x$  de l'intervalle  $[a,b]$ . Soit  $\{x_i\}_{i=1,n}$  un ensemble quelconque de points de  $[a,b]$ . Suivant la méthode d'interpolation de

Lagrange, à partir de l'ensemble des polynômes  $\{F_i\}_{i=1,n}$  définis par :

$$F_i(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{F.3})$$

on construit l'ensemble des polynômes  $\{Q_i\}_{i=1,n}$

$$Q_i(x) = \frac{1}{F'_n(x_i)} \frac{F_n(x)}{x - x_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{F.4})$$

de sorte que :

$$Q_i(x_k) = \delta_{ik} \quad (\text{F.5})$$

ainsi, le polynôme  $p_{n-1}$  défini par :

$$p_{n-1}(x) = f(x_1)Q_1(x) + f(x_2)Q_2(x) + \cdots + f(x_n)Q_n(x) \quad (\text{F.6})$$

possède la propriété de passer par  $f(x_i)$  en  $x = x_i$  pour  $i = 1, 2, \dots, n$ . Ce polynôme est en outre unique. En effet, si l'on suppose qu'il existe un autre polynôme  $\tilde{p}_{n-1}$  tel que  $\tilde{p}_{n-1}(x_i) = f(x_i)$  pour  $i = 1, 2, \dots, n$ , alors le polynôme  $p_{n-1} - \tilde{p}_{n-1}$  possède  $n$  zéros sur  $[a, b]$ . Comme ce polynôme est de degré  $n - 1$ , il est identiquement nul sur  $[a, b]$ .  $p_{n-1}$  est donc égal à  $\tilde{p}_{n-1}$ .

Si maintenant on considère que  $p_{n-1}$  est une approximation suffisamment précise de  $f$ , on peut évaluer l'intégrale sur  $[a, b]$  de  $f$  par :

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b p_{n-1}(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (\text{F.7})$$

avec :

$$w_k = \int_a^b Q_k(x)dx \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (\text{F.8})$$

L'idée ingénieuse de Gauss provient de la remarque suivante : si on ajoute un nouveau point  $x_{n+1}$  aux précédents, les définitions (F.3) et (F.4) montrent que  $Q_{n+1}$  est nécessairement proportionnel à  $F_n$ . Il vient donc d'après (F.8) :

$$w_{n+1} \propto \int_a^b F_n(x)dx \quad (\text{F.9})$$

De la même manière, si  $m$  nouveaux points sont introduits, les poids correspondants sont déterminés par une intégrale définie du type :

$$w_{n+i} = \int_a^b F_n(x)G_{m-1}^i(x)dx \quad (i = 1, 2, \dots, m) \quad (\text{F.10})$$

où les  $G_{m-1}^i$  sont des polynômes de degré  $m - 1$ . On remarque alors que si on impose les conditions intégrales suivantes :

$$\int_a^b F_n(x)x^i dx = 0 \quad (i = 0, 2, \dots, m - 1) \quad (\text{F.11})$$

les  $w_{n+i}$  deviennent automatiquement nuls pour  $i = 1, 2, \dots, m$ , car les polynômes  $G_{m-1}^i$  sont combinaisons linéaires des puissances successives de  $x$ .

Ainsi, considérant le problème à  $n$  points, la possibilité d'imposer la condition (F.11), dite *condition de d'orthogonalité* :

$$\int_a^b F_n(x)x^i dx = 0 \quad (i = 0, 2, \dots, n-1) \quad (\text{F.12})$$

permet alors d'écrire :

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) = \sum_{i=1}^m w_i f(x_i) \quad \forall m \geq n \quad (\text{F.13})$$

la précision de l'approximation est alors aussi bonne avec  $n$  points, qu'avec un nombre supérieur de points. En particulier, nous peut montrer que si  $f$  s'écrit comme une combinaison linéaire de polynômes de degrés inférieurs ou égaux à  $2n-1$ , il est possible de trouver un ensemble de polynômes orthogonaux permettant de déterminer l'ensemble des couples  $\{(x_i, w_i)\}_{i=1,n}$  tel que la relation (F.7) soit une égalité exacte.

### F.3 Exemples de quadratures Gaussiennes

Le tableau (F.1) énumère les polynômes orthogonaux associés à différentes fonctions de poids sur les intervalles adéquats. La figure (F.1) illustre la quadrature de *Gauss-Legendre* que nous utilisons dans la méthode DVR au chapitre 4.

$[a, b]$	$w(x)$	Polynômes orthogonaux
$[-1, 1]$	1	$P_n$ , polynômes de Legendre
$[-1, 1]$	$(1-x^2)^{-1/2}$	$T_n$ , polynômes de Chebyshev
$[0, +\infty[$	$e^{-x}$	$L_n$ , polynômes de Laguerre
$] -\infty, +\infty[$	$e^{-x^2}$	$H_n$ , polynômes d'Hermite

TAB. F.1 – Exemples de quadratures Gaussiennes

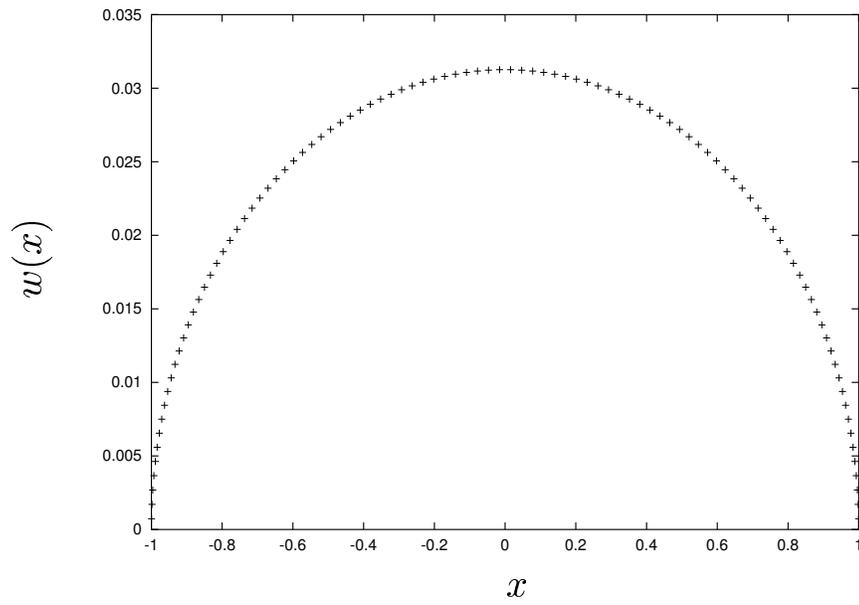


FIG. F.1 – *Quadratures de Gauss-Legendre.*

# Annexe G

## Méthode de de Vogelaere

La méthode de de Vogelaere [73] est assez ancienne (1955). C'est une méthode générale pour résoudre des équations du type :

$$\frac{d^2\psi}{dr^2}(r) = f(r) \quad (\text{G.1})$$

Dans le cas de l'équation de Schrödinger on aura :

$$f(r) = -W(r)\psi(r) \quad (\text{G.2})$$

avec :

$$W(r) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r)) \quad (\text{G.3})$$

Les équations itératives sont les suivantes :

$$\psi(r + \delta_r/2) = \psi(r) + \frac{\delta_r}{2} \psi'(r) + \frac{\delta_r^2}{24} W(r) \left[ 4f(r) - f(r - \delta_r/2) \right] + 0(\delta_r^4) \quad (\text{G.4})$$

où  $\psi'(r)$  est la dérivée première de  $\psi$  au point  $r$ ,

$$\psi(r + \delta_r) = \psi(r) + \delta_r \psi'(r) + \frac{\delta_r^2}{6} \left[ f(r) + 2f(r + \delta_r/2) \right] + 0(\delta_r^5) \quad (\text{G.5})$$

$$\psi'(r + \delta_r) = \psi'(r) + \frac{\delta_r}{6} \left[ f(r) + 4f(r + \delta_r/2) + f(r + \delta_r) \right] + 0(\delta_r^5) \quad (\text{G.6})$$

L'algorithme est initialisé en prenant :

$$\psi(r - \delta_r/2) = \psi(r) - \frac{\delta_r}{2} \psi'(r) + \frac{\delta_r^2}{8} f(r) \quad (\text{G.7})$$

Cette approximation linéaire est suffisante parce que, dans (G.4),  $\delta_r^2 f(r - \delta_r/2)$  doit être connu avec une erreur de  $0(\delta_r^4)$  seulement.

Si on change le pas de  $\delta_r$  à  $\tilde{\delta}_r$  alors :

$$\psi(r + \tilde{\delta}_r/2) = \psi(r) + \frac{\tilde{\delta}_r}{2} \psi'(r) + \frac{\tilde{\delta}_r^2}{24} \left[ \left( 3 + \frac{\tilde{\delta}_r}{\delta_r} \right) f(r) - \frac{\tilde{\delta}_r}{\delta_r} f(r - \delta_r/2) \right] \quad (\text{G.8})$$



# Annexe H

## Potentiel asymptotique

Dans cette annexe, nous calculons la forme asymptotique de l'énergie adiabatique du canal d'entrée de la réaction de transfert muonique. Nous traitons d'abord le cas colinéaire, puis nous montrons comment l'on obtient l'expression correspondant au cas tridimensionnel.

### H.1 Modèle colinéaire

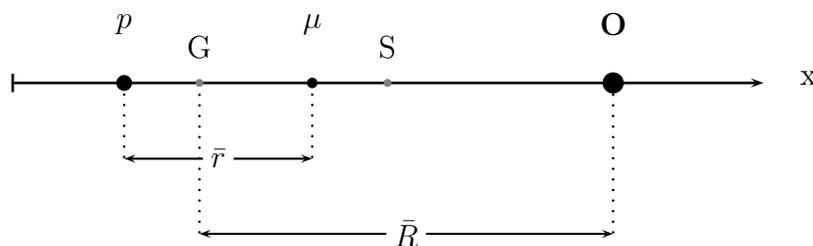


FIG. H.1 – *Coordonnées de Jacobi*

Dans le modèle colinéaire (voir figure (H.1)), le potentiel d'interaction entre les trois particules ( $p, \mu, O$ ) s'écrit<sup>1</sup> :

$$V = -\frac{e^2 Z}{|x_\mu - x_o|} + \frac{e^2 Z}{|x_p - x_o|} - \frac{e^2}{|x_p - x_\mu|} \quad (\text{H.1})$$

avec :

$$|x_\mu - x_o| = \bar{R} - (1 + \beta)\bar{r} \quad (\text{H.2})$$

<sup>1</sup>La notation  $\bar{R}$  et  $\bar{r}$  reprend celle du chapitre 4 et correspond à des distances physiques comptées positivement dans le sens des  $x$  croissants.

$$|x_p - x_o| = \bar{R} + \beta\bar{r} \quad (\text{H.3})$$

$$|x_p - x_\mu| = \bar{r} \quad (\text{H.4})$$

où on a posé  $\beta = m_\mu/(m_p + m_\mu)$  et  $Z$  est la charge du noyau d'oxygène. Lorsque  $\bar{R} \gg \bar{r}$  (H.1) devient :

$$V \simeq -\frac{e^2}{\bar{r}} + \Delta V \quad (\text{H.5})$$

avec

$$\Delta V = -\frac{e^2 Z \bar{r}}{\bar{R}^2} \quad (\text{H.6})$$

qui correspond à une interaction à longue distance entre le noyau d'oxygène  $O^{8+}$  et le dipôle ( $p\mu$ ). Ce terme peut être traité comme une perturbation vis à vis du potentiel d'interaction Coulombienne de l'hydrogène muonique. Les états liés du système ( $p\mu$ ) sont solution de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_{p,\mu}} \frac{d^2}{d\bar{r}^2} - \frac{e^2}{\bar{r}} \right) \varphi(\bar{r}) = E\varphi(\bar{r}) \quad (\text{H.7})$$

où  $m_{p,\mu} = (m_p m_\mu)/(m_p + m_\mu)$ . La normalisation de ces états s'écrit :

$$\int_0^{+\infty} |\varphi(\bar{r})|^2 d\bar{r} = 1 \quad (\text{H.8})$$

Pour l'état fondamental  $n = 1$ , on trouve [20] :

$$\varphi_{n=1}(\bar{r}) = \frac{4}{a_\mu^{3/2}} \bar{r} e^{-\bar{r}/a_\mu} \quad (\text{H.9})$$

où  $a_\mu$  est le rayon de Bohr muonique donné par :

$$a_\mu = \frac{\hbar^2}{m_{p,\mu} e^2} \quad (\text{H.10})$$

Au premier ordre de la théorie des perturbations stationnaires, la correction en énergie de cet état s'écrit :

$$\begin{aligned} \Delta E^{(1)} &= \langle \varphi_{n=1} | \Delta V | \varphi_{n=1} \rangle \\ &= -\frac{e^2 Z}{\bar{R}^2} \left( \frac{16}{a_\mu^3} \right) \int_0^{+\infty} \bar{r}^3 e^{-2\bar{r}/a_\mu} d\bar{r} \\ &= -\alpha \frac{Z}{\bar{R}^2} \end{aligned} \quad (\text{H.11})$$

avec :

$$\alpha = \frac{3\hbar^2}{2m_{p,\mu}} \quad (\text{H.12})$$

La forme asymptotique de l'énergie de cet état est donc :

$$\epsilon(\bar{R}) = \epsilon_1 - \alpha \frac{Z}{\bar{R}^2} \quad (\text{H.13})$$

où  $\epsilon_1$  est l'énergie de l'état lié non perturbé donnée par :

$$\epsilon_1 = -\frac{m_{p,\mu} e^4}{2\hbar^2} \quad (\text{H.14})$$

## H.2 Cas tridimensionnel

### H.2.1 Etats paraboliques

Les coordonnées paraboliques sont bien adaptées pour décrire le mouvement d'un système soumis à un champ Coulombien extérieur qui va privilégier une direction de l'espace (par exemple un champ électrique). Si  $(x, y, z)$  représente un ensemble de coordonnées Cartésiennes permettant de décrire le système, les coordonnées paraboliques  $(\xi, \eta, \varphi)$  sont définies par [17] :

$$\xi = r + z, \quad 0 \leq \xi < +\infty \quad (\text{H.15})$$

$$\eta = r - z, \quad 0 \leq \eta < +\infty \quad (\text{H.16})$$

$$\varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right), \quad 0 \leq \varphi < 2\pi \quad (\text{H.17})$$

où  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ . L'élément de volume correspondant est :

$$d\tau = \frac{1}{4}(\xi + \eta)d\xi d\eta d\varphi \quad (\text{H.18})$$

Pour un potentiel attractif :

$$V = -\frac{1}{r} = -\frac{2}{\xi + \eta} \quad (\text{H.19})$$

l'équation de Schrödinger revêt la forme :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{4}{\xi + \eta} \left( \frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi \eta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \left( E + \frac{2}{\xi + \eta} \right) \right) \psi(\xi, \eta, \varphi) = 0 \quad (\text{H.20})$$

Les solutions normalisées s'écrivent :

$$\psi_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) = \frac{\sqrt{2}}{n^2} f_{n_1, m} \left( \frac{\xi}{n} \right) f_{n_2, m} \left( \frac{\eta}{n} \right) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{H.21})$$

avec :

$$f_{p,m}(x) = \frac{1}{|m|!} \sqrt{\frac{(p+|m|)!}{p!}} F(-p, |m|+1, x) e^{-x/2} x^{|m|/2} \quad (\text{H.22})$$

où  $F$  est une fonction hypergéométrique dégénérée [50]. Chaque état du spectre discret est donc caractérisé par trois nombres entiers : les nombres quantiques *paraboliques*  $n_1$  et  $n_2$ , et le nombre quantique magnétique  $m$ . Si  $n$  est le nombre quantique principal des solutions exprimées en coordonnées sphériques, on a :

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1 \quad (\text{H.23})$$

## H.2.2 Potentiel asymptotique

A grande distance, les niveaux de l'hydrogène muonique sont perturbés par l'effet Stark provoqué par le champ électrique du noyau d'oxygène. Pour traiter ce problème en coordonnées paraboliques, on choisit l'axe  $z$  confondu avec la droite joignant  $O^{8+}$  et le centre de masse  $C$  de  $(p\mu)$ . Si l'on note  $\mathcal{E}$  la valeur du champ électrique créée par  $O^{8+}$  en  $C$ , l'hamiltonien Stark s'écrit :

$$W_S = \mathcal{E}z = \mathcal{E} \left( \frac{\xi - \eta}{2} \right) \quad (\text{H.24})$$

Pour simplifier les expressions, nous travaillons en unités muoniques (voir chapitre 1). Un calcul perturbatif jusqu'à l'ordre 2 permet d'obtenir l'expression de l'énergie d'un état parabolique perturbé  $(n_1, n_2, m)$  :

$$E_n = \epsilon_n + \frac{3}{2} \mathcal{E} n (n_1 - n_2) - \frac{\mathcal{E}^2}{16} n^4 (17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19) \quad (\text{H.25})$$

avec :

$$\epsilon_n = -\frac{m_{p,\mu}}{2n^2} \quad (\text{H.26})$$

Pour l'état fondamental  $(n = 1, n_1 = n_2 = 0, m = 0)$ , on obtient donc :

$$E_1 = \epsilon_1 - \frac{9}{4} \mathcal{E}^2 \quad (\text{H.27})$$

En repassant en unités absolues, la forme asymptotique de cette énergie devient :

$$\epsilon(\bar{R}) = \epsilon_1 - \beta \frac{Z^2}{\bar{R}^4} \quad (\text{H.28})$$

avec :

$$\beta = 9\hbar^4 / (4m_{p\mu}^2) \quad (\text{H.29})$$

# Annexe I

## Tenseur métrique

### I.1 Formule de Podolsky

#### I.1.1 Energie cinétique classique

Considérons un système de  $n$  particules. On note  $m_i$  la masse de la  $i^{\text{eme}}$  particule et  $m = \sum_{i=1}^n m_i$ , la masse totale du système. Soit  $\{\tilde{x}_i\}_{i=1,N}$  un ensemble de coordonnées Cartésiennes linéairement indépendantes permettant de décrire l'espace des états du système (en général  $N = 3n$ ). On définit des coordonnées pondérées par les masses  $\{x_i\}_{i=1,N}$  de la manière suivante :

$$x_i = \sqrt{\frac{m_i}{m}} \tilde{x}_i, \quad i = 1, N \quad (\text{I.1})$$

Soit  $\{q_i\}_{i=1,N}$  un ensemble équivalent de coordonnées curvilignes généralisées. L'énergie cinétique classique du système s'écrit :

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i \dot{x}_i^2 = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \dot{x}_i^2 \\ &= \frac{m}{2} \sum_{j,k=1}^N g_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k \end{aligned} \quad (\text{I.2})$$

où

$$g_{jk} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial x_i}{\partial q_j} \frac{\partial x_i}{\partial q_k} \quad (\text{I.3})$$

La matrice  $\mathbf{g}$  ainsi définie est appelée *tenseur métrique* associé aux coordonnées curvilignes  $q_i$ . Si l'on note  $\mathcal{J}$  la matrice Jacobienne associée au passage des coordonnées cartésiennes  $x_i$  aux coordonnées curvilignes  $q_i$ , on a :

$$\mathbf{g} = \mathcal{J} \mathcal{J}^t \quad (\text{I.4})$$

où  $\mathcal{J}^t$  représente la matrice transposée de  $\mathcal{J}$ . L'inverse du tenseur métrique est noté  $\mathbf{g}^{-1}$  et on a :

$$g_{jk}^{-1} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial q_j}{\partial x_i} \frac{\partial q_k}{\partial x_i} \quad (\text{I.5})$$

### I.1.2 Energie cinétique quantique

Soit  $|\psi\rangle$  et  $|\varphi\rangle$  deux vecteurs de l'espace des états du système. On a :

$$\langle \psi | T | \varphi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \int \psi^* \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \varphi dx_1 \cdots dx_N \quad (\text{I.6})$$

En intégrant par parties, il vient :

$$\langle \psi | T | \varphi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx_1 \cdots dx_N \quad (\text{I.7})$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x_i} \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \sqrt{g} dq_1 \cdots dq_N \quad (\text{I.8})$$

où  $g$  est le déterminant de  $\mathbf{g}$ . On utilise alors les règles de différentiation usuelles pour écrire :

$$\langle \psi | T | \varphi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j,k=1}^N \int \frac{\partial \psi^*}{\partial q_j} \frac{\partial \varphi}{\partial q_k} \frac{\partial q_j}{\partial x_i} \frac{\partial q_k}{\partial x_i} \sqrt{g} dq_1 \cdots dq_N \quad (\text{I.9})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j,k=1}^N \int \psi^* \left[ \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} \left( \sqrt{g} g_{jk}^{-1} \frac{\partial}{\partial q_k} \right) \right] \varphi dx_1 \cdots dx_N \quad (\text{I.10})$$

On en déduit la formule de Podolsky [55] :

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j,k=1}^N \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q_j} \left( \sqrt{g} g_{jk}^{-1} \frac{\partial}{\partial q_k} \right) \quad (\text{I.11})$$

#### Remarque

Le passage de l'expression classique de l'énergie cinétique (I.2) à l'expression quantique (I.11) ne s'effectue pas simplement par la transformation :

$$\dot{q}_i \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \quad (\text{I.12})$$

car cette correspondance entre une variable classique et l'opérateur quantique associé n'est applicable qu'avec des coordonnées Cartésiennes.

### I.1.3 Changement de coordonnées curvilignes

On souhaite maintenant utiliser de nouvelles coordonnées curvilignes  $\{\bar{q}_i\}_{i=1,N}$ . On note  $\bar{\mathcal{J}}$  la matrice Jacobienne associée au changement de variables  $\{q_i\} \rightarrow \{\bar{q}_i\}$  telle que :

$$\bar{\mathcal{J}}_{jl} = \frac{\partial \bar{q}_l}{\partial q_j} \quad (\text{I.13})$$

On part de la formule (I.9) :

$$\langle \psi | T | \varphi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j,k=1}^N \int \frac{\partial \psi^*}{\partial q_j} \frac{\partial \varphi}{\partial q_k} g_{jk}^{-1} \sqrt{g} dq_1 \cdots dq_N \quad (\text{I.14})$$

qui devient :

$$\langle \psi | T | \varphi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{j,k=1}^N \int \sum_{l,m=1}^N \frac{\partial \psi^*}{\partial \bar{q}_l} \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{q}_m} \frac{\partial \bar{q}_l}{\partial q_j} \frac{\partial \bar{q}_m}{\partial q_k} g_{jk}^{-1} \sqrt{g} \sqrt{\bar{g}} d\bar{q}_1 \cdots d\bar{q}_N \quad (\text{I.15})$$

où  $\sqrt{\bar{g}}$  est le déterminant de  $\bar{\mathcal{J}}^t$ . Soit  $\mathbf{M}$  la matrice définie par :

$$\mathbf{M} = \bar{\mathcal{J}}^t \mathbf{g}^{-1} \bar{\mathcal{J}} \quad (\text{I.16})$$

il vient :

$$\langle \psi | T | \varphi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l,m=1}^N \int \psi^* \left[ \frac{\partial}{\partial \bar{q}_l} \left( \sqrt{g} \sqrt{\bar{g}} M_{lm} \frac{\partial}{\partial \bar{q}_m} \right) \right] \varphi d\bar{q}_1 \cdots d\bar{q}_N \quad (\text{I.17})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l,m=1}^N \int \psi^* \left[ \frac{1}{\sqrt{\bar{g}}} \frac{\partial}{\partial \bar{q}_l} \left( \sqrt{g} \sqrt{\bar{g}} M_{lm} \frac{\partial}{\partial \bar{q}_m} \right) \right] \varphi dq_1 \cdots dq_N \quad (\text{I.18})$$

On en déduit donc la nouvelle formule de Podolsky exprimée en fonction des coordonnées  $\bar{q}_i$  :

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l,m=1}^N \frac{1}{\sqrt{\bar{g}}} \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial \bar{q}_l} \left( \sqrt{g} \sqrt{\bar{g}} M_{lm} \frac{\partial}{\partial \bar{q}_m} \right) \quad (\text{I.19})$$

## I.2 Tenseur métrique des coordonnées hypersphériques elliptiques

Nous considérons maintenant le système à trois corps décrit au chapitre 5. Comme coordonnées Cartésiennes de départ, nous choisissons les composantes des vecteurs de Jacobi  $(R_{1x}, R_{1y}, R_{1z}, r_{1x}, r_{1y}, r_{1z})$  dans le repère associé au référentiel

(BF). Les coordonnées curvilignes généralisées que nous souhaitons utiliser sont  $(\rho, \xi, \eta, \omega_x, \omega_y, \omega_z)$  où :

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{pmatrix}_{(BF)} = \begin{pmatrix} \dot{\Omega}_x \\ \dot{\Omega}_y \\ \dot{\Omega}_z \end{pmatrix} \quad (\text{I.20})$$

est le vecteur instantané de rotation du référentiel (BF) par rapport au référentiel (SF). Si  $\mathbf{M}$  est un vecteur quelconque de  $\mathbb{R}^3$ , la relation de changement de référentiel s'écrit :

$$\left( \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right)_{(SF)} = \left( \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right)_{(BF)} + \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{M} \quad (\text{I.21})$$

Les angles de rotation instantanée  $\Omega_x, \Omega_y$  et  $\Omega_z$ , respectivement autour des axes  $(Gx), (Gy)$  et  $(Gz)$ , permettent d'exprimer le moment cinétique total du système  $\mathbf{J}$  sous la forme :

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix}_{(BF)} = -i\hbar \begin{pmatrix} \partial/\partial\Omega_x \\ \partial/\partial\Omega_y \\ \partial/\partial\Omega_z \end{pmatrix} \quad (\text{I.22})$$

On a :

$$\mathbf{R}_1 = \begin{pmatrix} R_{1x} \\ R_{1y} \\ R_{1z} \end{pmatrix}_{(BF)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho \cos\left(\frac{\xi+\eta}{4}\right) \end{pmatrix} \quad (\text{I.23})$$

et

$$\mathbf{r}_1 = \begin{pmatrix} r_{1x} \\ r_{1y} \\ r_{1z} \end{pmatrix}_{(BF)} = \begin{pmatrix} \rho \sin\left(\frac{\xi+\eta}{4}\right) \sin\gamma_1 \\ 0 \\ \rho \sin\left(\frac{\xi+\eta}{4}\right) \cos\gamma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.24})$$

avec :

$$\sin\gamma_1 = \frac{\alpha\beta}{\sin 2\theta_\mu \sin\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right)} \quad (\text{I.25})$$

où

$$\alpha = \cos 2\theta_\mu - \cos \xi \quad (\text{I.26})$$

$$\beta = \cos \eta - \cos 2\theta_\mu \quad (\text{I.27})$$

En appliquant la relation (I.21) à  $\mathbf{R}_1$  et  $\mathbf{r}_1$ , on obtient la matrice Jacobienne :

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathcal{J}_{13} & \mathcal{J}_{14} & 0 & \mathcal{J}_{16} \\ 0 & 0 & \mathcal{J}_{23} & \mathcal{J}_{24} & 0 & \mathcal{J}_{26} \\ 0 & 0 & \mathcal{J}_{33} & \mathcal{J}_{34} & 0 & \mathcal{J}_{36} \\ 0 & \mathcal{J}_{42} & 0 & 0 & \mathcal{J}_{45} & 0 \\ \mathcal{J}_{51} & 0 & 0 & \mathcal{J}_{54} & 0 & \mathcal{J}_{56} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathcal{J}_{65} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.28})$$

avec :

$$\mathcal{J}_{13} = \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \quad (\text{I.29})$$

$$\mathcal{J}_{14} = \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin \gamma_1 \quad (\text{I.30})$$

$$\mathcal{J}_{16} = \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos \gamma_1 \quad (\text{I.31})$$

$$\mathcal{J}_{23} = \mathcal{J}_{33} = -\frac{\rho}{4} \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \quad (\text{I.32})$$

$$\mathcal{J}_{24} = \frac{\rho}{4} \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin \gamma_1 + \rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos \gamma_1 \frac{\partial \gamma_1}{\partial \xi} \quad (\text{I.33})$$

$$\mathcal{J}_{26} = \frac{\rho}{4} \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos \gamma_1 + \rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin \gamma_1 \frac{\partial \gamma_1}{\partial \xi} \quad (\text{I.34})$$

$$\mathcal{J}_{34} = \frac{\rho}{4} \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin \gamma_1 + \rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos \gamma_1 \frac{\partial \gamma_1}{\partial \eta} \quad (\text{I.35})$$

$$\mathcal{J}_{36} = \frac{\rho}{4} \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos \gamma_1 + \rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin \gamma_1 \frac{\partial \gamma_1}{\partial \eta} \quad (\text{I.36})$$

$$\mathcal{J}_{42} = -\mathcal{J}_{51} = -\rho \cos\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \quad (\text{I.37})$$

$$\mathcal{J}_{45} = -\mathcal{J}_{54} = -\rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos \gamma_1 \quad (\text{I.38})$$

$$\mathcal{J}_{56} = -\mathcal{J}_{65} = -\rho \sin\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin \gamma_1 \quad (\text{I.39})$$

où :

$$\frac{\partial \gamma_1}{\partial \xi} = \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right)} \quad (\text{I.40})$$

$$\frac{\partial \gamma_1}{\partial \eta} = -\frac{\alpha}{2\sqrt{\alpha\beta} \sin\left(\frac{\xi+\eta}{2}\right)} \quad (\text{I.41})$$

On calcule alors le tenseur métrique  $\mathbf{g} = \mathcal{J}\mathcal{J}^t$  :

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22} & g_{23} & 0 & g_{25} & 0 \\ 0 & g_{32} & g_{33} & 0 & g_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{44} & 0 & g_{46} \\ 0 & g_{52} & g_{53} & 0 & g_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{64} & 0 & g_{66} \end{pmatrix} \quad (\text{I.42})$$

avec :

$$g_{22} = \frac{\rho^2}{16} + \rho^2 \sin^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \left(\frac{\partial \gamma_1}{\partial \xi}\right)^2 \quad (\text{I.43})$$

$$g_{33} = \frac{\rho^2}{16} + \rho^2 \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \left( \frac{\partial \gamma_1}{\partial \eta} \right)^2 \quad (\text{I.44})$$

$$g_{44} = \rho^2 \left( 1 - \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \sin^2 \gamma_1 \right) \quad (\text{I.45})$$

$$g_{55} = \rho^2 \quad (\text{I.46})$$

$$g_{66} = \rho^2 \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \sin^2 \gamma_1 \quad (\text{I.47})$$

$$g_{23} = g_{32} = \frac{\rho^2}{16} + \rho^2 \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \frac{\partial \gamma_1}{\partial \xi} \frac{\partial \gamma_1}{\partial \eta} \quad (\text{I.48})$$

$$g_{25} = g_{52} = \rho^2 \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \frac{\partial \gamma_1}{\partial \xi} \quad (\text{I.49})$$

$$g_{35} = g_{53} = \rho^2 \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \frac{\partial \gamma_1}{\partial \eta} \quad (\text{I.50})$$

$$g_{64} = g_{46} = -\rho^2 \sin^2 \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \sin \gamma_1 \cos \gamma_1 \quad (\text{I.51})$$

Pour trouver l'inverse de cette matrice, on écrit  $\mathbf{g}$  sous la forme :

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} \mathbf{G} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^T & \mathbf{K} \end{pmatrix} \quad (\text{I.52})$$

avec :

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22} & g_{23} \\ 0 & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{I.53})$$

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} g_{44} & 0 & g_{46} \\ 0 & g_{55} & 0 \\ g_{64} & 0 & g_{66} \end{pmatrix} \quad (\text{I.54})$$

et

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{25} & 0 \\ 0 & g_{35} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.55})$$

On peut montrer que l'inverse de  $\mathbf{g}$  est alors donnée par [57] :

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{G}^{-1} + \mathbf{G}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{U} \mathbf{C}^t \mathbf{G}^{-1} & -\mathbf{G}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{U} \\ -\mathbf{U} \mathbf{C}^t \mathbf{G}^{-1} & \mathbf{U} \end{pmatrix} \quad (\text{I.56})$$

avec :

$$\mathbf{U} = (\mathbf{K} - \mathbf{C}^t \mathbf{G}^{-1} \mathbf{C})^{-1} \quad (\text{I.57})$$

On trouve :

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & g_{22}^{-1} & 0 & 0 & g_{25}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & g_{33}^{-1} & 0 & g_{35}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{44}^{-1} & 0 & g_{46}^{-1} \\ 0 & g_{52}^{-1} & g_{53}^{-1} & 0 & g_{55}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & g_{64}^{-1} & 0 & g_{66}^{-1} \end{pmatrix} \quad (\text{I.58})$$

avec :

$$g_{22}^{-1} = \frac{16}{\rho^2} \frac{\alpha}{\alpha + \beta} \quad (\text{I.59})$$

$$g_{25}^{-1} = g_{52}^{-1} = -\frac{4}{\rho^2} \tan\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha + \beta} \quad (\text{I.60})$$

$$g_{33}^{-1} = \frac{16}{\rho^2} \frac{\beta}{\alpha + \beta} \quad (\text{I.61})$$

$$g_{35}^{-1} = g_{53}^{-1} = \frac{4}{\rho^2} \tan\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\alpha + \beta} \quad (\text{I.62})$$

$$g_{44}^{-1} = g_{55}^{-1} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right)} \quad (\text{I.63})$$

$$g_{46}^{-1} = g_{64}^{-1} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right)} \cot \gamma_1 \quad (\text{I.64})$$

$$g_{66}^{-1} = \frac{1}{\rho^2} \frac{1 - \sin^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin^2 \gamma_1}{\sin^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \cos^2\left(\frac{\xi + \eta}{4}\right) \sin^2 \gamma_1} \quad (\text{I.65})$$

### I.3 Passage par les coordonnées de Jacobi

Dans ce paragraphe, nous montrons comment obtenir l'expression de l'énergie cinétique en coordonnées hypersphériques elliptiques en utilisant des coordonnées curvilignes intermédiaires définies à partir des vecteurs de Jacobi.

Les coordonnées curvilignes intermédiaires sont  $(R_1, r_1, \gamma_1, \omega_x, \omega_y, \omega_z)$ .  $R_1$  et  $r_1$  sont les normes des vecteurs de Jacobi  $\mathbf{R}_1$  et  $\mathbf{r}_1$ . Dans le repère  $(G, x, y, z)$  associé au référentiel (BF), on écrira donc :

$$\mathbf{R}_1 = \begin{pmatrix} R_{1x} \\ R_{1y} \\ R_{1z} \end{pmatrix}_{(BF)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ R_1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.66})$$

et

$$\mathbf{r}_1 = \begin{pmatrix} r_{1x} \\ r_{1y} \\ r_{1z} \end{pmatrix}_{(BF)} = \begin{pmatrix} r_1 \sin \gamma_1 \\ 0 \\ r_1 \cos \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.67})$$

En appliquant la relation (I.21) à  $\mathbf{R}_1$  et  $\mathbf{r}_1$ , on trouve l'expression de la matrice Jacobienne :

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sin \gamma_1 & 0 & \cos \gamma_1 \\ 0 & 0 & 0 & r_1 \cos \gamma_1 & 0 & -r_1 \sin \gamma_1 \\ 0 & -R_1 & 0 & 0 & -r_1 \cos \gamma_1 & 0 \\ R_1 & 0 & r_1 \cos \gamma_1 & 0 & -r_1 \sin \gamma_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & r_1 \sin \gamma_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.68})$$

il vient :

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_1^2 & 0 & r_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & R_1^2 + r_1^2 \cos^2 \gamma_1 & 0 & -r_1^2 \sin \gamma_1 \cos \gamma_1 \\ 0 & 0 & r_1^2 & 0 & R_1^2 + r_1^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -r_1^2 \sin \gamma_1 \cos \gamma_1 & 0 & r_1^2 \sin^2 \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.69})$$

Pour trouver l'inverse de cette matrice, on procède comme précédemment en écrivant  $\mathbf{g}$  sous la forme :

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} \mathbf{G} & \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^T & \mathbf{K} \end{pmatrix} \quad (\text{I.70})$$

avec :

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & r_1^2 \end{pmatrix} \quad (\text{I.71})$$

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} R_1^2 + r_1^2 \cos^2 \gamma_1 & 0 & -r_1^2 \sin \gamma_1 \cos \gamma_1 \\ 0 & R_1^2 + r_1^2 & 0 \\ -r_1^2 \sin \gamma_1 \cos \gamma_1 & 0 & r_1^2 \sin^2 \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.72})$$

et

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sin \gamma_1 & 0 & \cos \gamma_1 \\ r_1 \cos \gamma_1 & 0 & -r_1 \sin \gamma_1 \end{pmatrix} \quad (\text{I.73})$$

On trouve alors :

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{R_1^2} & 0 & \frac{1}{R_1^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{R_1^2} & 0 & \frac{\cot \gamma_1}{R_1^2} \\ 0 & 0 & -\frac{1}{R_1^2} & 0 & \frac{1}{R_1^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\cot \gamma_1}{R_1^2} & 0 & \frac{1}{r_1^2 \sin^2 \gamma_1} + \frac{\cot^2 \gamma_1}{R_1^2} \end{pmatrix} \quad (\text{I.74})$$

On a aussi facilement :

$$g = \det(\mathbf{g}) = R_1^4 r_1^4 \sin^2 \gamma_1 \quad (\text{I.75})$$

La formule (I.11) devient :

$$\begin{aligned} T = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial R_1} R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1 \frac{\partial}{\partial R_1} + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial r_1} R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1 \frac{\partial}{\partial r_1} \right. \\ & + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \gamma_1} R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1 \left( \frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{R_1^2} \right) \frac{\partial}{\partial \gamma_1} + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \Omega_x} r_1^2 \sin \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \Omega_x} \\ & + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \Omega_y} r_1^2 \sin \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \Omega_y} + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \Omega_z} \left( \frac{R_1^2}{\sin \gamma_1} + \frac{r_1^2 \cos^2 \gamma_1}{\sin \gamma_1} \right) \frac{\partial}{\partial \Omega_z} \\ & + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \Omega_y} \frac{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1}{-R_1^2} \frac{\partial}{\partial \gamma_1} + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \frac{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1}{-R_1^2} \frac{\partial}{\partial \Omega_y} \\ & \left. + \frac{1}{R_1^2 r_1^2 \sin \gamma_1} r_1^2 \cos \gamma_1 \left( \frac{\partial}{\partial \Omega_x} \frac{\partial}{\partial \Omega_z} + \frac{\partial}{\partial \Omega_z} \frac{\partial}{\partial \Omega_x} \right) \right] \quad (\text{I.76}) \end{aligned}$$

En utilisant la définition (I.22) et la relation de commutation *anomale* des moments cinétiques dans le référentiel (BF) :

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = -i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \quad (\text{I.77})$$

où  $\epsilon_{ijk}$  est le tenseur antisymétrique standard, on peut mettre l'Hamiltonien du système sous la forme :

$$H = T + V(R_1, r_1, \gamma_1) \quad (\text{I.78})$$

avec :

$$\begin{aligned} T = & -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2}{\partial R_1^2} R_1 + \frac{1}{r_1} \frac{\partial^2}{\partial r_1^2} r_1 \right) \\ & + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{R_1^2} + \frac{1}{r_1^2} \right) \left( -\frac{1}{\sin \gamma_1} \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \sin \gamma_1 \frac{\partial}{\partial \gamma_1} + \frac{1}{\sin^2 \gamma_1} \left( \frac{\hat{J}_z}{\hbar} \right)^2 \right) \\ & + \frac{\hat{J}^2 - 2\hat{J}_z^2}{2mR_1^2} + \frac{1}{mR_1^2} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial \gamma_1} \hat{J}_y + \cot \gamma_1 \hat{J}_x \hat{J}_z \right) \quad (\text{I.79}) \end{aligned}$$

Pour trouver l'expression (5.38) du chapitre 5, on effectue le changement de variables internes  $(R_1, r_1, \gamma_1) \rightarrow (\rho, \xi, \eta)$ . On utilise la formule (I.19) relative au changement de coordonnées curvilignes. La matrice  $\mathcal{J}$  est calculée à l'aide des relations suivantes :

$$R_1 = \rho \cos \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \quad (\text{I.80})$$

$$r_1 = \rho \sin \left( \frac{\xi + \eta}{4} \right) \quad (\text{I.81})$$

et toujours :

$$\sin \gamma_1 = \frac{\alpha\beta}{\sin 2\theta_\mu \sin \left(\frac{\xi+\eta}{2}\right)} \quad (\text{I.82})$$

# Annexe J

## Base des fonctions de Legendre

Dans cette annexe, nous montrons comment l'équation aux valeurs propres (5.61) du chapitre 5 peut être résolue efficacement en utilisant une base de fonctions de Legendre.

### J.1 Opérateur $\hat{D}_{\bar{\Omega}}(u)$

Nous recherchons les états propres de l'opérateur :

$$\hat{D}_{\bar{\Omega}}(u) + W_{J\bar{\Omega}}^u(u; \rho, \epsilon) \quad (\text{J.1})$$

où  $W_{J\bar{\Omega}}^u$  est la partie séparable du potentiel renormalisé en  $u = \xi$  ou  $\eta$ , et :

$$\hat{D}_{\bar{\Omega}}(u) = -\epsilon \frac{\partial}{\partial u} (\cos u - \cos(2\theta_\mu)) \frac{\partial}{\partial u} + \epsilon \frac{\bar{\Omega}^2 \sin^2(\theta_\mu) \cos^2(\theta_\mu)}{\cos u - \cos(2\theta_\mu)} \quad (\text{J.2})$$

avec  $\epsilon = 1$  si  $u = \eta$ , et  $\epsilon = -1$  pour  $u = \xi$ .

### J.2 Similitude avec les fonctions de Legendre

Considérons le cas  $u = \eta$ . En définissant la nouvelle variable  $\bar{\eta}$  telle que :

$$\bar{\eta} = \eta/(2\theta_\mu), \quad -1 \leq \bar{\eta} \leq 1 \quad (\text{J.3})$$

l'opérateur  $\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\eta)$  s'écrit sous la forme :

$$\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\eta) = \frac{\sin^2(\theta_\mu)}{2\theta_\mu^2} \left( -\frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} \left( 1 - \frac{\sin^2(\theta_\mu \bar{\eta})}{\sin^2 \theta_\mu} \right) \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} + \frac{\bar{\Omega}^2 \cot^2(\theta_\mu) \theta_\mu^2}{1 - \frac{\sin^2(\theta_\mu \bar{\eta})}{\sin^2 \theta_\mu}} \right) \quad (\text{J.4})$$

Cette expression présente une grande similitude avec l'opérateur  $\hat{L}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta})$  dont les fonctions propres correspondent aux fonctions de Legendre associées (voir annexe D) :

$$\hat{L}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta}) = -\frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} (1 - \bar{\eta}^2) \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} + \frac{\bar{\Omega}^2}{1 - \bar{\eta}^2} \quad (\text{J.5})$$

Plus précisément, définissons les fonctions  $f(\bar{\eta})$  et  $g(\bar{\eta})$  telles que :

$$\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\eta) - \frac{\sin(\theta_\mu \bar{\eta}) \cos(\theta_\mu \bar{\eta})}{2\theta_\mu} \hat{L}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta}) = \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} f(\bar{\eta}) \frac{\partial}{\partial \bar{\eta}} + \bar{\Omega}^2 g(\bar{\eta}) \quad (\text{J.6})$$

On a :

$$g(\bar{\eta}) = \frac{\sin^2(\theta_\mu)}{2\theta_\mu^2} \frac{G(\bar{\eta})}{\left(1 - \frac{\sin^2(\theta_\mu \bar{\eta})}{\sin^2 \theta_\mu}\right) (1 - \bar{\eta}^2)} \quad (\text{J.7})$$

avec :

$$G(\bar{\eta}) = \theta_\mu \cot \theta_\mu (1 - \bar{\eta}^2) - \left(1 - \frac{\sin^2(\theta_\mu \bar{\eta})}{\sin^2 \theta_\mu}\right) \quad (\text{J.8})$$

Au voisinage de  $\bar{\eta} = -1$ , un développement de Taylor permet d'écrire :

$$G(\bar{\eta}) = \frac{(\bar{\eta} + 1)^2}{2} G''(-1) + O((1 + \bar{\eta})^3) \quad (\text{J.9})$$

On a aussi :

$$1 - \frac{\sin^2(\theta_\mu \bar{\eta})}{\sin^2 \theta_\mu} = (1 + \bar{\eta}) \frac{\theta \sin 2\theta}{\sin^2 \theta_\mu} + O((1 + \bar{\eta})^2) \quad (\text{J.10})$$

soit :

$$\lim_{\bar{\eta} \rightarrow -1} g(\bar{\eta}) = \frac{\sin^2(\theta_\mu)}{2\theta_\mu^2} \frac{G''(-1) \sin^2(\theta_\mu)}{4\theta_\mu \sin 2\theta_\mu} \quad (\text{J.11})$$

On en déduit que  $g(\bar{\eta}) = O(1)$  au voisinage de  $-1$ . Un calcul similaire montre que  $g(\bar{\eta})$  a le même comportement au voisinage de  $\bar{\eta} = 1$ . Considérons maintenant le terme différentiel que l'on peut mettre sous la forme :

$$f(\bar{\eta}) = -\frac{\sin^2(\theta_\mu \bar{\eta})}{\sin^2 \theta_\mu} G(\bar{\eta}) \quad (\text{J.12})$$

En utilisant le développement (J.9), on voit que  $f(\bar{\eta}) = O((1 + s\bar{\eta})^2)$  au voisinage de  $\bar{\eta} = -1$ . On montre de même que  $f(\bar{\eta}) = O((1 - \bar{\eta})^2)$  pour  $\bar{\eta} \approx 1$ . Ces résultats montrent donc qu'au voisinage de  $\bar{\eta} = \pm 1$ , les opérateurs  $\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta})$  et  $\hat{L}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta})$  ne diffèrent que par un facteur multiplicatif et une constante additive.

Développons maintenant les fonctions propres de l'opérateur  $\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta})$  en puissances de  $(1 + s\bar{\eta})$ , où  $s = 1$  pour  $\bar{\eta} \approx -1$  et  $s = -1$  pour  $\bar{\eta} \approx 1$ . Notons  $(1 + s\bar{\eta})^\alpha$  le terme dominant de ce développement. En utilisant l'équation (J.6) on trouve  $\alpha = \bar{\Omega}/2$  : les fonctions propres de  $\hat{D}_{\bar{\Omega}}(\bar{\eta})$  ont donc le même comportement de les fonctions de Legendre associées au voisinage des singularités  $\bar{\eta} = \pm 1$  (voir annexe D).

Une étude similaire pour  $u = \xi$  apporte les mêmes conclusions qui nous incite à utiliser une base de fonctions de Legendre associées pour calculer les états produit du problème séparable.



# Liste des publications

– **Chapitre 2 :**

A. Dupays, A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, and D. Bakalov : *Proton Zemach radius from measurements of the hyperfine splitting of hydrogen*, Phys. Rev. A **68**, 052503 (2003).

– **Chapitre 4 :**

A. Dupays, A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, and D. Bakalov : *Calculation of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen*, Phys. Rev. A **67**, 062505 (2003).

– **Chapitres 5 et 6 :**

A. Dupays, A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, and D. Bakalov : *Hyperspherical elliptic coordinate treatment of muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen*, Phys. Rev. A **68**, 062506 (2003).

A. Dupays, A. Beswick, B. Lepetit, C. Rizzo, and D. Bakalov : *Non-zero total angular momentum three-body dynamics using hyperspherical elliptic coordinates. Application to muon transfer from muonic hydrogen to atomic oxygen and neon*, Phys. Rev. A **69**, 062501 (2004).

– **Chapitre 7 :**

A. Dupays : *Isotopic effects in the muon transfer from  $p\mu$  and  $d\mu$  to heavier atoms*, Phys. Rev. Lett. (sous presse).



# Bibliographie

- [1] L. I. Ponomarev, *Hyperfine Interact.* **138**, 15-23 (2001).
- [2] A. Werthmüller, A. Adamczak, R. Jacot-Guillarmod, L. S. F. Mulhauser, L. Schellenger, H. Schneuwly, Y. Thalmann and S. Tresch, *Hyperfine Interact.* **116**, 1 (1998).
- [3] A. Adamczak, D. Bakalov, K. Bakalova, E. Polacco and C. Rizzo, *Hyperfine Interact.* **136**, 1 (2001).
- [4] S. S. Gershtein, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **43**, 706 (1962), *sov. Phys. JETP* **16**, 501 (1963).
- [5] P. K. Haff, E. Rodrigo, and T. A. Tombrello, *Ann. Physics* **104**, 363 (1977).
- [6] R. A. Sultanov and S. K. Adhikari, *Phys. Rev. A* **62**, 22509 (2000).
- [7] F. Mulhauser and H. Schneuwly, *J. Phys. B* **26**, 4307 (1993).
- [8] K. Kirch, D. Abbott, B. Bach, P. Hauser, P. Indelicato, F. Kottmann, J. Missimer, P. Patte, R. T. Siegel, L. M. Simons and D. Viel, *Phys. Rev. A* **59**, 3375 (1998).
- [9] K. Hagiwara *et al.*, *Phys. Rev. D* **66**, 01001 (2002).
- [10] B. Rossi, David. B. Hall, *Phys. Rev.* **59**, 223 (1941).
- [11] P. A. M. Dirac, *Roy. Soc. Proc.* **117**, 610 (1928).
- [12] P. Kusch, H. M. Foley, *Phys. Rev.* **74**, 250 (1948).
- [13] G. Charpak *et al.*, *Nuovo Cimento* **37**, 1241 (1965).
- [14] H. N. Brown *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2227 (2001).
- [15] A. Czarnecki and W. J. Marciano, *Phys. Rev. D* **64**, 013014 (2001).
- [16] S. Weinberg *The Quantum Theory of Fields* (Cambridge University Press, 1999).
- [17] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics* (Pergamon, Oxford, 1977).
- [18] H. Hellwig, R. F. C. Vessot, M. V. Levine *et al.*, *IEEE Trans. Instrum. Meas.* **IM-19**, 200 (1970).
- [19] L. Essen, M. J. Donaldson, M. J. Bangham, and E. G. Hope, *Nature (London)* **229**, 110 (1971).

- [20] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloe, *Mécanique quantique* (Hermann 1973).
- [21] E. Fermi, *Z. Phys.* **60**, 320 (1930).
- [22] A. C. Zemach, *Phys. Rev.* **104**, 1771 (1956).
- [23] G. T. Bodwin, and D. R. Yennie, *Phys. Rev. D* **37**, 498 (1988).
- [24] M. I. Eides, H. Grotch, and V. A. Shelyuto, *Phys. Rep.* **342**, 63 (2001).
- [25] J. R. Sapirstein, and D. R. Yennie, *Quantum Electrodynamics* (World Scientific 1991).
- [26] S. G. Karshenboim, *Phys. Lett. A* **225**, 97 (1997).
- [27] R. N. Faustov, A. P. Martynenko and V. A. Saleev, *Phys. At. Nucl.* **62**, 2099 (1999).
- [28] R. N. Faustov, A. Karimkhodzhaev and A. P. Martynenko, *Phys. At. Nucl.* **62**, 2103 (1999).
- [29] W. Liu, M. G. Boshier and S. Dhawan, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 711 (1999).
- [30] G. G. Simon, C. Schmitt, F. Borkowski and V. H. Walther, *Nucl. Phys. A* **333**, 381 (1980).
- [31] R. Rosenfelder, *Phys. Lett. B* **479**, 381 (2000).
- [32] O. Gayou, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 092301 (2002).
- [33] I. T. Todorov, *Phys. Rev. D* **3**, 2351 (1971).
- [34] V. V. Dvoeglazov, R. N. Faustov and Yu. N. Tukhtyaev, *Part. Nuclei* **25**, 58 (1994).
- [35] E. V. Cherednikova, R. N. Faustov and A. P. Martynenko, *Nucl. Phys. A* **703**, 365 (2002).
- [36] R. N. Faustov and A. P. Martynenko, Samara State University, Russia, Report No. SSU-HEP-97/03, 1997 (unpublished).
- [37] D. Bakalov *et al.*, *Phys. Lett. A* **172**, 277 (1992).
- [38] D. Bakalov *et al.*, In : *Proceedings of the III International Symposium WEIN-92, Dubna*, (World Scientific 1992).
- [39] R. Jacot-Guillarmod, *Phys. Rev A* **51**, 2179 (1995b).
- [40] R. Jacot-Guillarmod *et al.*, *Phys. Rev A* **55**, 3447 (1997).
- [41] A. Werthmüller *et al.*, *Baltzer Journals* (1995).
- [42] A. Badertscher *et al.*, *Europhys. Lett.* **54**, 313 (2001).
- [43] J. F. Crawford *et al.*, *Phys. Rev. D* **43**, 46 (1991).
- [44] B. Lepetit, J. M. Launay, and M. L. Dourneuf, *Chem. Phys.* **106**, 103 (1986).
- [45] C. Schwartz *J. Math. Phys.* **26**, 411 (1985).
- [46] K. M. Dunseath, J. M. Launay, M. Terao-Dunseath and L. Mouret, *J. Phys. B* **35**, 3539 (2002).

- [47] D. Baye and M. Vincke, Phys. Rev E **59**, 7195 (1999).
- [48] E. Fattal, R. Baer and R. Kosloff, Phys. Rev E **53**, 1217 (1996).
- [49] D. Lemoine, Chem. Phys. Lett. **320**, 492 (2000).
- [50] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (Dover Publications, INC., New York 1970).
- [51] F. T. Smith, J. Chem. Phys. **31**, 1352 (1959).
- [52] A. Kuppermann, J. Phys. Chem. **100**, 2621-2636 (1996).
- [53] L. M. Delves, Nucl. Phys. **9**, 391 (1958).
- [54] O. I. Tolstikhin, S. Watanabe, and M. Matsuzawa, Phys. Rev. Lett. **74**, 3573 (1995).
- [55] B. Podolsky, Phys. Rev. **32**, 812 (1928).
- [56] J. H. Van Vleck, Rev. Mod. Phys. **23**, 213 (1951).
- [57] B. R. Johnson, J. Chem. Phys. **79**, 1916-1925 (1983).
- [58] J. M. Launay, J. Phys. B : Atom. Molec. Phys. **9**, No. 10 (1976).
- [59] J. Z. H. Zhang *Theory and Application of Quantum Molecular Dynamics* (World Scientific, 1999).
- [60] O. I. Tolstikhin, and M. Matsuzawa, Phys. Rev. A. **63**, 62705 (2001).
- [61] O. I. Tolstikhin, S. Watanabe, and M. Matsuzawa, Phys. Rev. A. **54**, R3705-R3709 (1996).
- [62] D. Park, Z. Phys. **159** (1960).
- [63] G. Holzwarth, H. J. Pfeiffer, Z. Phys. A **272** 311-313(1975).
- [64] R. A. Sultanov and S. K. Adhikari, J. Phys. B **35**, 935 (2002).
- [65] V. I. Savichev and R. Blümel, Eur. Phys. J. D **21**, 3-12 (2002).
- [66] L. Schellenberg Muon Cat. Fusion **5/6**, 73 (1990/91).
- [67] S. V. Romanov Eur. Phys. J. D **28**, 11-38 (2004).
- [68] E. C. G. Stueckelberg Helv. Phys. Acta **5**, 369 (1932).
- [69] Yu. S. Sayasov Helv. Phys. Acta **63**, 547 (1990).
- [70] G. C. Corey, J. W. Tromp and D. Lemoine, In : *Numerical grid Methods and their Application to Schrödinger's equation* (NATO ASI Series, C. Cerjan, Kluwer 1993).
- [71] C. Lanczos, *Applied analysis* (Prentice Hall 1956).
- [72] J. Stoer and R. Bulirsch, *Introduction to numerical analysis* (Springer-Verlag New York Inc 1980).
- [73] R. de Vogelaere, J. Res. Nalt. Bur. Std. **54**, 119 (1955).