ANNALES DE L'I. H. P., SECTION A

C. JOACHAIN

Traitement variationnel de collisions atomiques

Annales de l'I. H. P., section A, tome 1, nº 1 (1964), p. 55-77
<http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1964__1_1_55_0>

Ann. Inst. Henri-Poincaré,
Vol. I, n° 1, 1964, p. 55-77.

Section A :
Physique théorique.

Traitement variationnel de collisions atomiques

par

C. JOACHAIN (*)
Université Libre de Bruxelles.

RÉSUMÉ. — Le principe variationnel de Schwinger pour l'amplitude de diffusion est appliqué à l'étude de collisions atomiques directes. Des calculs détaillés sont effectués pour la diffusion élastique d'électrons et de positons par des atomes d'hydrogène et d'hélium à l'approximation statique. Nos résultats indiquent que l'expression stationnaire de Schwinger est fort précise dans une gamme très étendue d'énergies. La comparaison avec la première et la deuxième approximation de Born est également faite.

SUMMARY. — The Schwinger variational principle for the scattering amplitude is applied to the study of atomic direct collisions. Detailed calculations are carried out for electron and positron elastic scattering by hydrogen and helium atoms in the static approximation. It is found that Schwinger's stationary expression gives accurate results in a very large energy region. Comparison with first and second Born approximations is also made.

1. **Introduction.** — Parmi les nombreuses méthodes variationnelles proposées dans l'étude des collisions quantiques directes, élastiques et inélastiques, l'une des plus intéressantes est celle de Schwinger ([*1*] [*2*]) relative au calcul de l'amplitude de diffusion. Cette méthode, qui est basée directement sur les équations intégrales de la diffusion, jouit en effet d'une série de propriétés remarquables [*3*] qui la rendent particulièrement bien adaptée aux applications.

(*) Chargé de recherches du Fonds National de la Recherche Scientifique.

Cependant, en dépit de ces avantages et de résultats préliminaires encourageants, le calcul de l'amplitude de diffusion par la méthode de Schwinger n'a été mené à bien que dans un petit nombre de cas ([*4*]-[*10*]). La raison de ce fait provient de ce que la méthode de Schwinger introduit des éléments de matrice du second ordre en les potentiels d'interaction — analogues à ceux de la deuxième approximation de Born — qui sont généralement malaisés à évaluer.

Cela étant, il nous a semblé intéressant d'entreprendre une étude systématique de la méthode variationnelle de Schwinger. Le présent travail est consacré à l'application de cette méthode au traitement de diverses collisions atomiques élastiques constituant des critères significatifs de validité de celle-ci. Le paragraphe *2* résume la méthode de Schwinger dont nous exposons deux formulations directement adaptées aux applications. Le paragraphe *3* est consacré à l'étude des collisions élastiques d'électrons et de positons avec des atomes d'hydrogène et d'hélium. Pour chaque cas, des calculs numériques détaillés sont effectués dans le contexte de l'approximation statique. Nous comparons ainsi les méthodes suivantes : première approximation de Born, deuxième approximation de Born, méthode variationnelle de Schwinger et méthode des ondes partielles. Nos résultats numériques figurent au paragraphe *4* sous forme de tableaux.

2. **La méthode variationnelle de Schwinger pour les collisions directes.** — *2*.1. FORMULES GÉNÉRALES. — Considérons une collision directe, élastique ou inélastique. L'hamiltonien total du système s'écrit

$$H = H_0 + V, \tag{2.1}$$

où l'hamiltonien H_0 décrit les deux systèmes indépendants qui effectuent la collision et V est le potentiel d'interaction. La section efficace différentielle d'une telle collision est donnée par

$$\frac{d\sigma_{if}}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar v_i} | T_{if} |^2 \rho_f, \tag{2.2}$$

où v_i est la vitesse relative initiale et ρ_f la densité des états finaux [*11*]. La quantité T_{if} est l'élément de matrice de transition, tel que

$$T_{if} = \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle, \tag{2.3}$$

où Φ_i et Φ_f sont les ondes libres initiale et finale tandis que $\Psi_i^{(+)}$ et $\Psi_f^{(-)}$ désignent les solutions des équations de Lippmann-Schwinger

$$\Psi_i^{(+)} = \Phi_i + G_0^{(+)} V \Psi_i^{(+)} \tag{2.4}$$

et

$$\Psi_f^{(-)} = \Phi_f + G_0^{(-)} V \Psi_f^{(-)}, \tag{2.5}$$

où

$$G_0^{(\pm)} = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \tag{2.6}$$

sont les deux opérateurs de Green associés à l'hamiltonien H_0. Lippmann et Schwinger [2] ont proposé pour la quantité T_{if} l'expression stationnaire

$$[T_{if}] = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle - \langle \Psi_f^{(-)} | V - VG_0^{(+)}V | \Psi_i^{(+)} \rangle \tag{2.7}$$

connue sous le nom de forme bilinéaire (1) du principe variationnel de Schwinger. Il est facile de vérifier que ce principe variationnel se présente sous la forme intégrale des principes variationnels, les équations d'Euler-Lagrange correspondantes étant les équations intégrales (2.4) et (2.5) de Lippmann-Schwinger.

De la forme bilinéaire (2.7), on déduit aisément la forme fractionnaire du principe variationnel de Schwinger ([12] [13])

$$[T_{if}] = \frac{\langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle}{\langle \Psi_f^{(-)} | V - VG_0^{(+)}V | \Psi_i^{(+)} \rangle} \tag{2.8}$$

qui présente l'avantage d'être indépendante de l'amplitude des fonctions d'essai qu'on substitue aux solutions exactes $\Psi_i^{(+)}$ et $\Psi_f^{(-)}$.

Tenant compte de la relation qui lie l'élément de matrice de transition T_{if} à l'amplitude de diffusion f, à savoir

$$T_{if} = -\frac{2\pi\hbar^2}{\mu} f, \tag{2.9}$$

où μ est la masse réduite des deux particules effectuant la collision directe, et introduisant les opérateurs réduits

$$U = \frac{2\mu}{\hbar^2} V \tag{2.10}$$

et

$$G_0'^{(+)} = \frac{\hbar^2}{2\mu} G_0^{(+)}, \tag{2.11}$$

---

(1) Ce nom provient du fait que les fonctions $\Psi_i^{(+)}$ et $\Psi_f^{(-)}$ entrent chacune pour leur part de façon linéaire dans l'expression (2.7).

nous pouvons obtenir pour l'amplitude de diffusion le principe variationnel

$$(2.12)\qquad [f] = -\frac{1}{4\pi}\frac{\langle \Psi_f^{t(-)} | U | \Phi_i \rangle \langle \Phi_f | U | \Psi_i^{t(+)} \rangle}{\langle \Psi_f^{t(-)} | U - U G_0^{\prime(+)} U | \Psi_i^{t(+)} \rangle}.$$

Jusqu'à présent, les principes variationnels que nous venons d'examiner sont « exacts » en ce sens qu'ils font usage des solutions $\Psi_i^{(+)}$ et $\Psi_f^{(-)}$ des équations de Lippmann-Schwinger. On obtient des formules approchées en remplaçant dans les expressions stationnaires de T_{if} ou de f les fonctions d'onde inconnues $\Psi_i^{(+)}$ et $\Psi_f^{(-)}$ par des fonctions d'essai connues. Nous examinons ci-dessous deux choix très simples et particulièrement utiles dans les applications.

2.2. FORMULATION VARIATIONNELLE I. — Nous désignerons sous le nom de formulation variationnelle I le choix

$$(2.13)\qquad \Psi_i^{t(+)} = \Phi_i \qquad \text{et} \qquad \Psi_f^{t(-)} = \Phi_f,$$

où Φ_i et Φ_f sont les ondes libres de Born. Avec ce choix, l'expression stationnaire (*2.*12) de l'amplitude de diffusion que nous noterons $[f]_B$ devient

$$(2.14)\qquad [f]_B = f_B^{(1)}\left[\frac{1}{1-\dfrac{f_B^{\prime(2)}}{f_B^{(1)}}}\right],$$

où

$$(2.15)\qquad f_B^{(1)} = -\frac{1}{4\pi}\langle \Phi_f | U | \Phi_i \rangle$$

est l'amplitude de diffusion à la première approximation de Born et où

$$(2.16)\qquad f_B^{\prime(2)} = -\frac{1}{4\pi}\langle \Phi_f | U G_0^{\prime(+)} U | \Phi_i \rangle,$$

$$(2.17)\qquad = f_B^{(2)} - f_B^{(1)},$$

$f_B^{(2)}$ étant l'amplitude de diffusion à la seconde approximation de Born. Nous voyons que si

$$(2.18)\qquad \left|\frac{f_B^{\prime(2)}}{f_B^{(1)}}\right| < 1,$$

nous pouvons écrire

$$(2.19)\qquad [f]_B = f_B^{(1)}\left[1 + \frac{f_B^{\prime(2)}}{f_B^{(1)}} + \dots\right] = f_B^{(2)} + \dots$$

de sorte que lorsque la condition (2.18) est remplie, la deuxième approximation de Born apparaît comme le premier terme d'une série qui converge vers l'expression stationnaire approchée $[f]_{B}$.

A titre d'exemple, explicitons les formules de $f_{B}^{(1)}$ et $f_{B}^{\prime(2)}$ pour un type particulier de collisions directes, à savoir la diffusion d'une particule de masse μ par un potentiel statique $V(\bar{r})$. Dans ce cas, nous avons

$$(2.20) \qquad \Phi_i = e^{i\bar{k}_i\cdot\bar{r}} \qquad \text{et} \qquad \Phi_f = e^{i\bar{k}_f\cdot\bar{r}}.$$

Utilisant le potentiel réduit $U(\bar{r})$, nous avons, en vertu de (2.15)

$$(2.21) \qquad f_{B}^{(1)} = -\frac{1}{4\pi}\int e^{i\bar{K}\cdot\bar{r}}U(\bar{r})d\bar{r},$$

où

$$(2.22) \qquad \bar{K} = \bar{k}_i - \bar{k}_f$$

représente le vecteur d'onde transféré et où les vecteurs $\bar{k}_i$ et $\bar{k}_f$ sont respectivement les vecteurs d'onde incident et diffusé, de longueur k. D'autre part, comme l'hamiltonien non perturbé est donné par

$$(2.23) \qquad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\bar{r}},$$

la fonction de Green réduite $\mathcal{G}_0^{\prime(+)}(\bar{r}, \bar{r}')$ correspondant à l'opérateur $G_0^{\prime(+)}$ dans la représentation de position vaut

$$(2.24) \qquad \mathcal{G}_0^{\prime(+)}(\bar{r}, \bar{r}') = -\frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi|\bar{r}-\bar{r}'|}.$$

Dès lors, l'expression du second ordre $f_{B}^{\prime(2)}$ fournie par la formule (2.16) s'écrit explicitement

$$(2.25) \qquad f_{B}^{\prime(2)} = \frac{1}{(4\pi)^2}\int d\bar{r}\int d\bar{r}'\, e^{-i\bar{k}_f\cdot\bar{r}}U(\bar{r})\frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{|\bar{r}-\bar{r}'|}U(\bar{r}')\, e^{i\bar{k}_i\cdot\bar{r}'}.$$

Il est souvent intéressant d'évaluer l'expression (2.25) en passant à l'espace des vecteurs d'onde. Définissant de façon générale dans la représentation $\{\bar{K}\}$

$$(2.26) \qquad \langle\bar{K}|V|\bar{K}'\rangle = (2\pi)^{-3}\int d\bar{r}\, e^{i(\bar{K}'-\bar{K})\cdot\bar{r}}V(\bar{r})$$

et faisant usage de la relation

$$(2.27) \qquad \frac{e^{ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{4\pi|\bar{r}-\bar{r}'|} = \lim_{\varepsilon\to 0^+} (2\pi)^{-3} \int \frac{e^{i\bar{K}'.(\bar{r}-\bar{r}')}}{K'^2 - k^2 - i\varepsilon} d\bar{K}',$$

on obtient

$$(2.28) \quad f_B'^{(2)} = 2\pi^2 \lim_{\varepsilon\to 0^+} \int d\bar{K}' \frac{1}{K'^2 - k^2 - i\varepsilon} \langle \bar{k}_f | U | \bar{K}' \rangle \langle \bar{K}' | U | \bar{k}_i \rangle.$$

2.3. Formulation variationnelle II. — Un autre choix de fonctions d'essai, que nous appellerons formulation variationnelle II a été proposé par Mower [*8*] dans le cas de la diffusion d'une particule de masse μ par un potentiel statique central $V(r)$. Il consiste à prendre

$$(2.29) \quad \Psi_i'^{(+)} = \alpha e^{i\bar{k}_i.\bar{r}} + \beta e^{-i\bar{k}_i.\bar{r}} \qquad \text{et} \qquad \Psi_f'^{(-)} = \alpha e^{i\bar{k}_f.\bar{r}} + \beta e^{-i\bar{k}_f.\bar{r}},$$

où α et β sont des paramètres variationnels déterminés en substituant les fonctions d'essai (*2*.29) dans la forme bilinéaire (*2*.7) du principe de Schwinger. A l'aide de ce choix, et en désignant par θ l'angle de diffusion compris entre les vecteurs $\bar{k}_i$ et $\bar{k}_f$, on obtient pour l'amplitude de diffusion l'expression

$$(2.30) \quad [f]_M = f_B^{(1)}(\theta) \frac{[P^2(\theta)+1][1-S(\theta)] - 2P^2(\theta)[1-S(\pi-\theta)]}{[1-S(\theta)]^2 - P^2(\theta)[1-S(\pi-\theta)]^2},$$

où

$$(2.31) \qquad P(\theta) = \frac{f_B^{(1)}(\pi-\theta)}{f_B^{(1)}(\theta)}$$

et

$$(2.32) \qquad S(\theta) = \frac{f_B'^{(2)}(\theta)}{f_B^{(1)}(\theta)}$$

et où l'indice M rappelle le choix (*2*.29) de Mower qui caractérise la formulation variationnelle II. On montre facilement [*8*] que la formule (*2*.30) qui est indéterminée pour $\theta = \frac{\pi}{2}$, se réduit pour cette valeur de l'angle à la formule (*2*.14) de sorte que les formulations variationnelles I et II coïncident pour $\theta = \frac{\pi}{2}$. La formulation II comparée à la formulation I présente l'avantage de ne pas nécessiter de nouvelles intégrations (2) tout en améliorant

(2) En effet, la formulation II ne fait usage comme la formulation I que des expressions $f_B^{(1)}$ et $f_B'^{(2)}$.

généralement les résultats de façon significative. L'extension de cette formulation aux collisions directes générales considérées au paragraphe *2.*1 s'effectue sans difficultés.

Il existe évidemment d'autres choix de fonctions d'essai ayant pour but de fournir des résultats meilleurs que ceux de la formulation I. Un examen détaillé de plusieurs choix possibles a été effectué par Gerjuoy et Saxon [*7*] et par Mower [*8*]. Dans ce travail, nous n'utiliserons pour le traitement des applications du paragraphe *3* que les formulations variationnelles I et II.

3. **Application à la diffusion d'électrons et de positons par des atomes d'hydrogène et d'hélium.** — *3.*1. DIFFUSION ÉLASTIQUE D'ÉLECTRONS PAR DES ATOMES D'HYDROGÈNE. — Considérons la diffusion élastique d'un électron de charge $(-e)$ incident sur un atome d'hydrogène dans l'état fondamental. Nous repérons l'électron incident par le vecteur $\bar{r}$ et l'électron lié par le vecteur $\bar{s}$ relativement au proton supposé infiniment lourd. Le potentiel d'interaction s'écrit

$$V(\bar{r}, \bar{s}) = \frac{e^2}{|\bar{r} - \bar{s}|} - \frac{e^2}{r}. \tag{3.1}$$

L'approximation statique consiste à admettre que l'électron incident est soumis au potentiel moyen ou potentiel statique

$$\overline{V}(\bar{r}) = \langle \psi_{1s}(s) \,|\, V \,|\, \psi_{1s}(s) \rangle \tag{3.2}$$

obtenu en prenant la moyenne du potentiel d'interaction (*3.*1) à l'aide de la fonction d'onde hydrogénoïde $\psi_{1s}(s)$ de l'électron lié. Ce potentiel statique se calcule sans peine. Passant au potentiel réduit et adoptant les unités atomiques de Hartree, on obtient

$$U(r) = -2\left(1 + \frac{1}{r}\right)e^{-2r}. \tag{3.3}$$

L'approximation statique se présente donc comme une approximation qui ne tient pas compte des détails internes de la cible. En particulier, les effets d'échange [*14*], de corrélation [*14*] et de polarisation [*8*] sont négligés. Les résultats que nous obtiendrons dans la suite ne pourront donc être comparés aux résultats expérimentaux que dans le domaine de validité de l'approximation statique, c'est-à-dire pour des énergies de l'électron incident supérieures à 50 eV (correspondant à des vecteurs d'onde de longueur $k > 2$ en unités atomiques). Toutefois, adoptant un point de vue différent, nous pouvons considérer le problème statique comme un problème mathématique déterminé pour lequel nous comparons diverses méthodes approchées de résolution, en prenant comme référence une méthode de résolution particulièrement précise (par exemple, la méthode des ondes partielles dans laquelle tous les déphasages significatifs sont déterminés par intégration numérique de l'équation de Schrödinger). Dans cette façon de penser, le problème statique nous servira de critère pour juger la valeur des différentes méthodes de résolution.

Cela étant, procédons au calcul des diverses quantités qui nous intéressent, à savoir l'amplitude de diffusion $f(\theta)$ ainsi que les sections efficaces différentielles $\sigma(\theta)$ et totale σ_{tot}. A la première approximation de Born, nous avons, en vertu des relations (*2*.21) et (*2*.22),

$$f_{\text{B}}^{(1)} = 2\frac{8 + \text{K}^2}{(4 + \text{K}^2)^2}, \tag{3.4}$$

où

$$\text{K} = 2k \sin\frac{\theta}{2} \tag{3.5}$$

est la longueur du vecteur d'onde $\overline{\text{K}}$ exprimée en unités atomiques. On en déduit la section efficace différentielle

$$\sigma_{\text{B}}^{(1)}(\theta) = 4\frac{(8 + \text{K}^2)^2}{(4 + \text{K}^2)^4} \tag{3.6}$$

et la section efficace totale

$$\sigma_{\text{tot}}^{(\text{B1})} = 2\pi\int_0^\pi \sigma_{\text{B}}^{(1)}(\theta) \sin\theta \, d\theta = \frac{7k^4 + 18k^2 + 12}{2(1 + k^2)^3}. \tag{3.7}$$

La deuxième approximation de Born met en jeu l'expression du second ordre $f_{\text{B}}^{\prime(2)}$ qui est donnée dans l'espace des moments par la formule (*2*.28). En ce qui concerne le potentiel statique (*3*.3), la quantité qui figure au membre de droite de (*2*.28) généralise certaines intégrales considérées par Dalitz [*15*] et par Morse et Feshbach [*16*]. Altshuler [*6*] a évalué cette intégrale pour $\theta = 0$ et Mower [*5*] pour tous les angles dans le cas d'un potentiel statique légèrement plus général que (*3*.3), à savoir

$$\text{U}(r) = -2\text{U}_0\left(\frac{1}{r} + \frac{\lambda}{2}\right)e^{-\lambda r}. \tag{3.8}$$

La méthode de résolution s'appuie sur le fait que le potentiel statique (*3*.3) se décompose en un potentiel exponentiel et un potentiel de Mott-Yukawa pour lesquels on applique une technique de calcul due à Feynman [*17*].

L'expression — complexe — de $f_B'^{(2)}$ étant ainsi connue, on en tire aisément la valeur de l'amplitude de diffusion $f_B^{(2)}$ à la deuxième approximation de Born, ainsi que celle de la section efficace différentielle $\sigma_B^{(2)}$. Pour obtenir la section efficace totale, nous pouvons faire usage du théorème optique

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \mathfrak{Im} f(0) \tag{3.9}$$

puisque la partie imaginaire de $f_B^{(2)}$ n'est pas nulle. Toutefois, dans ce cas, on sait que la précision obtenue est diminuée d'un ordre de calcul des perturbations, de sorte qu'on retrouve simplement de cette manière la section efficace totale de la première approximation de Born. Par contre, nous pouvons obtenir une véritable expression du second ordre pour la section efficace totale par intégration de la section efficace différentielle $\sigma_B^{(2)}$. La fonction $\sigma_B^{(2)}(\theta)$ étant très compliquée, cette intégration a été effectuée numériquement.

Passons à présent à l'examen du principe variationnel de Schwinger dans les formulations I et II. Les formules (*2*.14) et (*2*.30) permettent, à partir des expressions $f_B^{(1)}$ et $f_B'^{(2)}$ d'obtenir les amplitudes de diffusion $[f]_B$ et $[f]_M$. Nous en déduisons respectivement les sections efficaces différentielles $\sigma_{var\,I}(\theta)$ et $\sigma_{var\,II}(\theta)$. Quant aux sections efficaces totales, elles peuvent à nouveau s'obtenir, soit à l'aide du théorème optique (*3*.9), soit par intégration numérique de la section efficace différentielle correspondante.

Les tableaux I et II, figurant à la fin de ce travail rassemblent les résultats que nous avons obtenus. Ils concernent respectivement la section efficace différentielle et la section efficace totale. Nous avons choisi une série de valeurs de k (en unités atomiques) correspondant à une gamme de valeurs de l'énergie E des électrons incidents s'étendant de 1,22 à 1,360 eV [3]. Nous comparons entre elles les diverses méthodes dont il a été question ci-dessus, à savoir les première et deuxième approximations de Born, ainsi que la méthode variationnelle de Schwinger dans les formulations I et II. Nous adoptons comme référence des calculs très précis effectués à basse énergie par la méthode des ondes partielles et qui consistent à déterminer les déphasages significatifs, soit par intégration numérique de l'équation radiale de Schrödinger, soit par une méthode variationnelle de détermination des déphasages.

---

[3] Rappelons qu'en unités atomiques l'énergie, exprimée en rydbergs, est donnée par E (Ryd) $= k^2$.

Ainsi, dans le tableau I, les diverses sections efficaces différentielles sont données pour $\theta = 0$, 60, 120 et 180° et comparées :

a. aux résultats extraits des tables de Chandrasekhar et Breen [*18*] (notés C. B.), qui ont calculé les deux premiers déphasages η_0 et η_1 par intégration numérique de l'équation radiale ;

b. aux résultats de Massey et Moiseiwitsch [*19*] (notés M. M.) qui ont obtenu le premier déphasage η_0 par les méthodes variationnelles de Hulthén [*20*] et de Kohn [*21*] (⁴).

L'examen du tableau I révèle que la méthode variationnelle de Schwinger donne de meilleurs résultats que les deux premières approximations de Born et reste satisfaisante jusqu'aux énergies les plus basses considérées. La formulation II, qui est la plus élaborée, doit être préférée à la formulation I dans la région des basses énergies. Pour les énergies plus élevées, les deux formulations deviennent pratiquement équivalentes (⁵), et donnent des sections efficaces différentielles qui tendent vers celles des deux premières approximations de Born lorsque l'énergie augmente. Ainsi, nous voyons que les principes variationnels de Schwinger, même dans la formulation la plus simple I, constituent une méthode d'approximation précise dans une gamme très étendue d'énergies.

Cette conclusion est confirmée par l'examen du tableau II qui concerne les sections efficaces totales. Celles-ci sont obtenues de la manière indiquée au cours de ce paragraphe et sont comparées à celles des auteurs cités plus haut (C. B. et M. M.), ainsi qu'aux résultats de Smith, Miller et Mumford [*22*] (notés S. M. M.). Ces derniers auteurs ont résolu numériquement l'équation radiale de Schrödinger pour des énergies plus élevées que celles considérées par Chandrasekhar et Breen. Les chiffres entre parenthèses indiquent le nombre d'ondes partielles qui contribuent de façon significative à la section efficace totale. On voit que pour $k = 1{,}5$ ce nombre atteint 5, ce qui met en lumière l'intérêt d'utiliser la méthode variationnelle de Schwinger dans la région des énergies intermédiaires. En effet, pour de telles valeurs de l'énergie, le nombre de déphasages à calculer par la méthode des ondes partielles devient important tandis que, d'autre part, les deux premières approximations de Born (qui sont des approximations de hautes énergies) ne sont pas justifiées.

Enfin, on notera l'excellent accord existant entre les sections efficaces

---

(⁴) Les deux méthodes donnent essentiellement des résultats identiques pour le déphasage η_0.

(⁵) Les différences apparaissant aux grands angles dans les sections efficaces différentielles n'affectent quasiment pas l'allure des courbes.

variationnelles totales calculées à l'aide du théorème optique et celles obtenues par intégration numérique de la section efficace différentielle correspondante. Cet accord peut être considéré comme une preuve significative de la cohérence interne de la méthode variationnelle de Schwinger.

3.2. DIFFUSION ÉLASTIQUE DE POSITONS PAR DE L'HYDROGÈNE ATOMIQUE. — Ainsi que l'ont noté Massey et Moussa [*23*], la diffusion élastique de positons diffère de celle des électrons par deux aspects. D'abord le potentiel moyen correspondant à (*3.*2) est répulsif et non attractif. Ensuite, il n'y a pas d'effets d'échange. Cette dernière différence a d'importantes conséquences, car elle simplifie considérablement le traitement théorique du problème. En particulier, nous pouvons penser que dans le cas de la diffusion de positons, l'approximation statique — qui se définit comme au paragraphe *3.*1 — donnera de meilleurs résultats que pour les électrons.

Cela étant, nous avons étudié à l'approximation statique la diffusion élastique de positons par des atomes d'hydrogène de façon absolument parallèle à celle exposée au paragraphe *3.*1 pour les électrons. Les formules établies dans ce dernier cas ne subissent qu'une modification, à savoir le fait d'y inverser le signe du potentiel statique.

Les tableaux III et IV rassemblent les résultats que nous avons obtenus. Ces résultats sont comparés à ceux obtenus par Massey et Moussa [*23*] (notés M. M.) qui ont calculé le premier déphasage η_0 par les méthodes de Hulthén et de Kohn (6). Afin de faciliter cette comparaison nous avons adopté la valeur supplémentaire $k = 0{,}2$ qui est l'une des trois valeurs de k choisies par Massey et Moussa (les deux autres étant $k = 0{,}5$ et $k = 1{,}0$). En ce qui concerne les sections efficaces totales, nous comparons de plus nos résultats à ceux obtenus par Smith, Miller et Mumford [*22*] (notés S. M. M.) qui ont résolu numériquement l'équation radiale de Schrödinger pour toutes les ondes partielles significatives. Notons que les deux derniers résultats de ces auteurs (S. M. M.) se rapportent à une approximation légèrement différente de l'approximation statique, dans laquelle on a tenu compte du couplage $1s$-$3s$ [*22*]. C'est pourquoi nous les affectons de l'indice (*).

L'examen des tableaux III et IV confirme les conclusions dégagées à propos des tableaux I et II concernant les électrons. Notons que cette fois les formulations I et II sont pratiquement équivalentes dans tout le domaine d'énergies considéré. Si nous comparons ces résultats à ceux des électrons, nous voyons que la première approximation de Born n'établit aucune diffé-

(6) A nouveau ces deux méthodes donnent des résultats pratiquement identiques pour le déphasage η_0.

rence entre électrons et positons, tandis que la méthode variationnelle de Schwinger tient compte de cette différence de façon entièrement correcte. Quant à la seconde approximation de Born, elle donne généralement des résultats quelque peu meilleurs que ceux de la première approximation de Born, bien que son comportement aux basses énergies soit inexact. Pour terminer, remarquons que les sections efficaces variationnelles (formulations I et II) et « exactes » (M. M. et S. M. M.) sont nettement plus petites aux basses énergies que celles correspondant aux électrons. Cette propriété résulte du caractère répulsif du potentiel moyen subi par les positons. A mesure que l'énergie augmente, la différence entre les électrons et les positons diminue. Cette différence devient négligeable aux hautes énergies conformément aux prévisions de l'approximation de Born.

3.3. Diffusion élastique d'électrons par des atomes d'hélium. — Considérons la diffusion élastique d'un électron de charge $(-e)$ par un atome d'hélium dans l'état fondamental. Nous repérons l'électron incident et les deux électrons liés respectivement par les vecteurs $\bar{r}$, $\bar{s}_1$ et $\bar{s}_2$ relativement au noyau d'hélium (supposé infiniment lourd). Le potentiel d'interaction s'écrit

$$(3.10) \qquad V(\bar{r}, \bar{s}_1, \bar{s}_2) = \frac{e^2}{|\bar{r}-\bar{s}_1|} + \frac{e^2}{|\bar{r}-\bar{s}_2|} - \frac{2e^2}{r}.$$

Nous définissons l'approximation statique de la même façon que pour l'atome d'hydrogène, c'est-à-dire en admettant que l'électron incident est soumis au potentiel moyen (ou potentiel statique)

$$(3.11) \qquad \bar{V}(\bar{r}) = \langle \Psi_0(\bar{s}_1, \bar{s}_2) \,|\, V(\bar{r}, \bar{s}_1, \bar{s}_2) \,|\, \Psi_0(\bar{s}_1, \bar{s}_2) \rangle$$

obtenu en prenant la moyenne du potentiel d'interaction (*3*.10) à l'aide de la fonction d'onde $\Psi_0(\bar{s}_1, \bar{s}_2)$ décrivant l'état fondamental de l'atome d'hélium. Nous choisissons comme fonction Ψ_0 celle obtenue par Hylleraas [*24*]

$$(3.12) \qquad \Psi_0(s_1 s_2) = \frac{Z'^3}{\pi} e^{-Z'(s_1+s_2)}, \qquad \text{où} \qquad Z' = \frac{27}{16}.$$

Ce choix est identique à celui de Moiseiwitsch [*25*] qui a calculé le premier déphasage η_0 à l'aide de la méthode variationnelle de Hulthén. Effectuant au moyen de la fonction d'onde (*3*.12) le calcul explicite de l'expression (*3*.11) on obtient aisément pour le potentiel réduit (en unités atomiques)

$$(3.13) \qquad U(r) = -4\left(Z' + \frac{1}{r}\right) e^{-2Z'r}.$$

De même que pour l'atome d'hydrogène, l'approximation statique ne tient pas compte des détails de la cible et néglige donc les effets d'échange [*25*], de corrélation et de polarisation. Comparant le potentiel statique (*3*.13) avec la classe de potentiel (*3*.8) considérée par Mower [*5*] nous voyons que nous pouvons obtenir les intégrales du second ordre qui nous intéressent à partir des formules de Mower. Nous en déduisons ensuite les diverses amplitudes de diffusion et sections efficaces correspondant aux différentes méthodes d'approximation que nous étudions.

Nos résultats sont rassemblés dans les tableaux V et VI. Nous les avons comparés au travail déjà cité de Moiseiwitsch [*25*] (noté M.) ainsi qu'à celui de Macdougall [*26*] (noté Mc. D.), qui a obtenu les deux premiers déphasages η_0 et η_1 par résolution numérique de l'équation de Schrödinger radiale du problème. Notons que ce dernier travail concerne un potentiel statique légèrement différent de (*3*.13). Macdougall a en effet utilisé comme potentiel statique un champ self-consistant de Hartree.

Nous voyons en examinant les tableaux V et VI que la méthode variationnelle de Schwinger, spécialement dans la formulation II, fournit d'excellents résultats à toutes les énergies considérées. En particulier, il est significatif de souligner (comme pour l'atome d'hydrogène) l'intérêt que présente cette méthode dans la région des énergies intermédiaires où la détermination d'un seul déphasage n'est plus suffisante.

3.4. Diffusion élastique de positons par des atomes d'hélium. — Utilisant toujours l'approximation statique, nous pouvons étudier la diffusion élastique de positons par des atomes d'hélium de façon parallèle à celle exposée au paragraphe *3*.3 pour les électrons. Il suffit à nouveau comme pour l'atome d'hydrogène, d'inverser le signe du potentiel statique donné par (*3*.13).

Nous avons rassemblé nos résultats dans les tableaux VII et VIII et nous les avons comparés à ceux de Massey et Moussa [*23*] (notés M. M.) qui ont calculé numériquement les déphasages significatifs aux basses énergies. Le signe (*) indique que les résultats de Massey et Moussa (que nous avons extrapolés aux valeurs de k qui nous intéressent) concernent un potentiel statique self-consistant qui diffère légèrement de celui que nous avons considéré.

L'examen des tableaux VII et VIII confirme les conclusions déjà dégagées pour le problème correspondant relatif à l'atome d'hydrogène. L'approximation de Born ne fait aucune différence entre les électrons et les positons; la seconde approximation de Born fournit des résultats quelque peu meilleurs. Quant à la méthode variationnelle de Schwinger, elle tient compte de façon correcte de la différence électrons-positons et s'avère très précise dans tout le domaine d'énergies considéré.

Terminons par une remarque valable pour toutes les applications traitées dans ce travail et relative à la phase de l'amplitude de diffusion. Cette phase est mal rendue aux basses énergies par les deux premières approximations de Born. Par contre, un examen détaillé des diagrammes d'Argand montre que, même pour les énergies les plus basses considérées, la phase obtenue à l'aide des formulations variationnelles I et II est très satisfaisante. Ainsi, les principes variationnels que nous avons utilisés fournissent à la fois une estimation précise du module et de la phase de l'amplitude de diffusion dans une gamme très étendue d'énergies. Ce fait suggère d'appliquer ces principes variationnels à l'étude d'autres collisions atomiques.

4. **Tableaux numériques.** — Les tableaux I à VIII présentent des extraits (7) de nos résultats numériques obtenus à l'aide de l'ordinateur I. B. M. *1620* de l'Université Libre de Bruxelles. Ils concernent respectivement les sections efficaces différentielles et totales pour les quatre types de collisions considérées au paragraphe *3*.

(7) Les résultats numériques complets peuvent être obtenus à l'adresse suivante : Service de Physique Théorique et Mathématique (Prof. M. Demeur), Faculté des Sciences, Université Libre de Bruxelles, 50, avenue F.-D. Roosevelt, Bruxelles.

TABLEAU I

Diffusion d'électrons par le potentiel statique de l'atome d'hydrogène.

Section efficace différentielle (en unité a_0^2/srad).

k (a_0^{-1})	θ (°)	$\sigma_B^{(1)}$	$\sigma_B^{(2)}$	σ_{var} Form. I	σ_{var} Form. II	$\sigma_{O.P.}$ C. B.	$\sigma_{O.P.}$ M.M.
0,3	0	1,00	2,90	5,86	5,86	8,52	8,31
	60	0,935	2,78	5,75	5,74	8,42	
	120	0,822	2,57	5,48	5,52	8,22	
	180	0,773	2,48	5,33	5,42	8,13	
0,5	0	1,00	2,55	3,04	2,72	3,30	2,99
	60	0,834	2,26	2,64	2,46	3,14	
	120	0,601	1,84	1,94	2,15	2,86	
	180	0,518	1,68	1,64	2,06	2,73	
0,835	0	1,00	2,00	1,75	1,48	1,41	
	60	0,621	1,42	1,10	0,951	1,16	
	120	0,296	0,862	0,454	0,596	0,790	
	180	0,219	0,711	0,298	0,568	0,670	
1,0	0	1,00	1,80	1,52	1,32	1,10	0,617
	60	0,518	1,10	0,780	0,674	0,831	
	120	0,201	0,573	0,245	0,340	0,463	
	180	0,141	0,452	0,146	0,330	0,362	
1,5	0	1,00	1,44	1,23	1,15	-	0,221
	60	0,275	0,503	0,310	0,286		
	120	0,0652	0,172	0,0518	0,0758		
	180	0,0404	0,122	0,0268	0,0813		
2,0	0	1,00	1,26	1,12	1,09	-	0,102
	60	0,141	0,235	0,141	0,133		
	120	0,0244	0,0597	0,0162	0,0222		
	180	0,0144	0,0398	0,00811	0,0267		
4,0	0	1,00	1,07	1,03	1,03		
	60	0,0144	0,0208	0,0120	0,0118		
	120	0,00171	0,00319	0,00107	0,00117		
	180	$9{,}70 . 10^{-4}$	0,00193	$5{,}60 . 10^{-4}$	0,00149		
6,0	0	1,00	1,03	1,01	1,01		
	60	0,00303	0,00401	0,00250	0,00249		
	120	$3{,}42 . 10^{-4}$	$5{,}34 . 10^{-4}$	$2{,}36 . 10^{-4}$	$2{,}46 . 10^{-4}$		
	180	$1{,}93 . 10^{-4}$	$3{,}15 . 10^{-4}$	$1{,}27 . 10^{-4}$	$2{,}64 . 10^{-4}$		
8,0	0	1,00	1,03	1,01	1,01		
	60	$9{,}70 . 10^{-4}$	0,0121	$8{,}20 . 10^{-4}$	$8{,}18 . 10^{-4}$		
	120	$1{,}08 . 10^{-4}$	$1{,}51 . 10^{-4}$	$8{,}11 . 10^{-5}$	$8{,}33 . 10^{-5}$		
	180	$6{,}10 . 10^{-5}$	$8{,}42 . 10^{-5}$	$4{,}42 . 10^{-5}$	$7{,}77 . 10^{-5}$		
10,0	0	1,00	1,01	1,00	1,00		
	60	$3{,}99 . 10^{-4}$	$4{,}77 . 10^{-4}$	$3{,}46 . 10^{-4}$	$3{,}45 . 10^{-4}$		
	120	$4{,}44 . 10^{-5}$	$5{,}78 . 10^{-5}$	$3{,}52 . 10^{-5}$	$3{,}59 . 10^{-5}$		
	180	$2{,}50 . 10^{-5}$	$3{,}33 . 10^{-5}$	$1{,}93 . 10^{-5}$	$3{,}03 . 10^{-5}$		

TABLEAU II

Diffusion d'électrons par le potentiel statique de l'atome d'hydrogène.

Section efficace totale (en unités πa_0^2).

k (a_0^{-1})	$\sigma_{tot}^{(B)}$	$\sigma_{tot}^{(B2)}$	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ C. B.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ S.M.M.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ M. M.
0,3 .	3,52	10,71	20,65	22,46	22,44	22,52	33,29		33,25
0,5 .	2,89	8,23	8,78	9,18	9,21	9,26	12,00		11,96
0,835.	1,91	4,67	3,34	3,22	3,26	3,21	3,93		—
1,0 .	1,54	3,50	2,34	2,20	2,26	2,18	2,63	2,60 (5)	2,46
1,5 .	0,854	1,57	1,05	0,954	1,01	0,940		1,09 (5)	0,885
2,0 .	0,523	0,822	0,587	0,538	0,576	0,532		0,60 (7)	0,410
4,0 .	0,142	0,169	0,146	0,139	0,146	0,139			
6,0 .	0,0640	0,0699	0,0649	0,0631	0,0649	0,0631			
8,0 .	0,0362	0,0381	0,0365	0,0358	0,0365	0,0358			
10,0 .	0,0232	0,0234	0,0233	0,0231	0,0233	0,0231			

TABLEAU III

Diffusion de positons par le potentiel statique de l'atome d'hydrogène.

Section efficace différentielle (en unités a_0^2/srad).

k (a_0^{-1})	θ (°)	$\sigma_B^{(1)}$	$\sigma_B^{(2)}$	σ_{var} Form. I	σ_{var} Form. II	$\overline{\sigma_{O.P.}}$ M.M.
0,2	0	1,00	0,106	0,329	0,333	0,325
	60	0,970	0,0991	0,315	0,318	
	120	0,915	0,0865	0,291	0,288	
	180	0,889	0,0810	0,279	0,275	
0,3	0	1,00	0,170	0,345	0,353	
	60	0,935	0,152	0,315	0,318	
	120	0,822	0,123	0,263	0,260	
	180	0,773	0,113	0,242	0,235	
0,5	0	1,00	0,329	0,393	0,404	0,272
	60	0,834	0,264	0,308	0,313	
	120	0,601	0,186	0,197	0,192	
	180	0,518	0,164	0,160	0,152	
0,835	0	1,00	0,571	0,500	0,503	
	60	0,621	0,352	0,272	0,273	
	120	0,296	0,193	0,102	0,101	
	180	0,219	0,161	0,0676	0,0676	
1,0	0	1,00	0,658	0,554	0,551	0,167
	60	0,518	0,345	0,243	0,243	
	120	0,201	0,166	0,0708	0,0718	
	180	0,141	0,135	0,0437	0,0480	
1,5	0	1,00	0,816	0,696	0,684	
	60	0,275	0,240	0,151	0,148	
	120	0,0652	0,0819	0,0247	0,0270	
	180	0,0404	0,0611	0,0134	0,0217	
2,0	0	1,00	0,890	0,791	0,782	
	60	0,141	0,140	0,0838	0,0821	
	120	0,0244	0,0368	0,00998	0,0114	
	180	0,0144	0,0256	0,00520	0,0112	
4,0	0	1,00	0,971	0,934	0,933	
	60	0,0144	0,0173	0,00996	0,00986	
	120	0,00171	0,00274	$9{,}22.10^{-4}$	$9{,}97.10^{-4}$	
	180	$9{,}70.10^{-4}$	0,00168	$4{,}86.10^{-4}$	0,00117	
6,0	0	1,00	0,986	0,969	0,969	
	60	0,00303	0,00366	0,00228	0,00227	
	120	$3{,}42.10^{-4}$	$4{,}95.10^{-4}$	$2{,}19.10^{-4}$	$2{,}28.10^{-4}$	
	180	$1{,}93.10^{-4}$	$2{,}93.10^{-4}$	$1{,}18.10^{-4}$	$2{,}37.10^{-4}$	
8,0	0	1,00	0,993	0,982	0,982	
	60	$9{,}70.10^{-4}$	0,00115	$7{,}77.10^{-4}$	$7{,}75.10^{-4}$	
	120	$1{,}08.10^{-4}$	$1{,}45.10^{-4}$	$7{,}74.10^{-5}$	$7{,}94.10^{-5}$	
	180	$6{,}10.10^{-5}$	$8{,}41.10^{-5}$	$4{,}22.10^{-5}$	$7{,}31.10^{-5}$	
10,0	0	1,00	0,995	0,989	0,989	
	60	$3{,}99.10^{-4}$	$4{,}60.10^{-4}$	$3{,}34.10^{-4}$	$3{,}33.10^{-4}$	
	120	$4{,}44.10^{-5}$	$5{,}60.10^{-5}$	$3{,}41.10^{-5}$	$3{,}47.10^{-5}$	
	180	$2{,}50.10^{-5}$	$3{,}23.10^{-5}$	$1{,}87.10^{-5}$	$2{,}91.10^{-5}$	

TABLEAU IV

Diffusion de positons par le potentiel statique de l'atome d'hydrogène.

Section efficace totale (en unités πa_0^2).

k (a_0^{-1})	$\sigma_{tot}^{(B)}$	$\sigma_{tot}^{(B2)}$	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Th.opt.	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ S.M.M.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ MM.
0,2 .	3,77	0,372	1,24	1,21	1,21	1,21	—	1,30
0,3 .	3,52	0,553	1,21	1,16	1,16	1,16	—	—
0,5 .	2,89	0,910	1,14	1,02	1,04	1,02	—	1,09
0,835.	1,91	1,14	0,952	0,792	0,842	0,795	—	—
1,0 .	1,54	1,09	0,855	0,698	0,761	0,699	0,759 (4)	0,67
1,5 .	0,854	0,781	0,594	0,483	0,556	0,481	0,513* (5)	
2,0 .	0,523	0,520	0,413	0,345	0,400	0,343	0,366* (7)	
4,0 .	0,142	0,146	0,133	0,121	0,132	0,121		
6,0 .	0,0640	0,0653	0,0621	0,0591	0,0621	0,0591		
8,0 .	0,0362	0,0367	0,0356	0,0345	0,0356	0,0345		
10,0 .	0,0232	0,0228	0,0230	0,0219	0,0230	0,0219		

Tableau V

Diffusion d'électrons par le potentiel statique de l'atome d'hélium.

Section efficace différentielle (en unités a_0^2/srad).

k (a_0^{-1})	θ (°)	$\sigma_B^{(1)}$	$\sigma_B^{(2)}$	σ_{var} Form. I	σ_{var} Form. II	$\sigma_{O.P.}$ Mc.D.	$\sigma_{O.P.}$ M.
0,272	0	0,493	1,78	10,70	10,78	9,98	11,57
	60	0,484	1,76	10,73	10,76		
	120	0,465	1,72	10,72	10,71		
	180	0,457	1,70	10,67	10,69		
0,608	0	0,493	1,60	2,71	2,38	2,67	2,70
	60	0,448	1,51	2,49	2,31		
	120	0,374	1,36	2,02	2,22		
	180	0,343	1,30	1,79	2,21		
0,859	0	0,493	1,44	1,60	1,27	1,34	1,33
	60	0,409	1,28	1,32	1,14		
	120	0,292	1,04	0,853	1,03		
	180	0,250	0,956	0,673	1,03		
1,053	0	0,493	1,31	1,22	0,933	1,00	0,855
	60	0,374	1,10	0,908	0,758	0,924	
	120	0,232	0,821	0,482	0,629	0,821	
	180	0,189	0,727	0,347	0,632	0,800	
1,359	0	0,493	1,13	0,921	0,706	0,490	0,478
	60	0,316	0,841	0,566	0,458		
	120	0,156	0,539	0,217	0,313		
	180	0,117	0,454	0,137	0,323		
1,992	0	0,493	0,907	0,700	0,591	0,461	0,208
	60	0,216	0,497	0,282	0,234	0,316	
	120	0,0719	0,238	0,0628	0,101	0,152	
	180	0,0481	0,185	0,0339	0,114	0,132	
4,0	0	0,493	0,612	0,538	0,529		
	60	0,0428	0,0769	0,0371	0,0356		
	120	0 00644	0,0178	0,00336	0,00447		
	180	0,00373	0,0117	0,00164	0,00746		
6,0	0	0,493	0,548	0,513	0,511		
	60	0 0110	0,0180	0,00851	0,00840		
	120	0,00135	0,00311	$7{,}02 \cdot 10^{-4}$	$7{,}93 \cdot 10^{-4}$		
	180	$7{,}63 \cdot 10^{-4}$	0,00194	$3{,}56 \cdot 10^{-4}$	0,00136		
8,0	0	0,493	0,524	0,504	0,504		
	60	0,00373	0,00573	0,00282	0,00280		
	120	$4{,}31 \cdot 10^{-4}$	$8{,}63 \cdot 10^{-4}$	$2{,}42 \cdot 10^{-4}$	$2{,}58 \cdot 10^{-4}$		
	180	$2{,}43 \cdot 10^{-4}$	$5{,}52 \cdot 10^{-4}$	$1{,}21 \cdot 10^{-4}$	$3{,}96 \cdot 10^{-4}$		
10,0	0	0,493	0,513	0,500	0,500		
	60	0,00157	0,00227	0,00119	0,00119		
	120	$1{,}77 \cdot 10^{-4}$	$3{,}17 \cdot 10^{-4}$	$1{,}07 \cdot 10^{-4}$	$1{,}12 \cdot 10^{-4}$		
	180	$9{,}98 \cdot 10^{-5}$	$1{,}89 \cdot 10^{-4}$	$5{,}69 \cdot 10^{-5}$	$1{,}51 \cdot 10^{-4}$		

TABLEAU VI

Diffusion d'électrons par le potentiel statique de l'atome d'hélium.

Section efficace totale (en unités πa_0^2).

k (a_0^{-1})	$\sigma_{tot}^{(B)}$	$\sigma_{tot}^{(B2)}$	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ Mc. D.	$\sigma_{tot}^{O.\ P.}$ M.
0,272 . .	1,90	6,95	41,20	42,88	42,92	43,01	39,91	46,28
0,608 . .	1,65	5,75	9,04	9,01	9,08	9,25	10,75	10,82
0,859 . .	1,41	4,66	4,57	4,36	4,42	4,61	5,38	5,31
1,053 . .	1,23	3,86	3,04	2,82	2,87	3,07	3,50	3,42
1,359 . .	0,977	2,80	1,82	1,63	1,67	1,88	1,96	1,91
1,922 . .	0,639	1,55	0,907		0,830		0,965	0,833
4,000 . .	0,189	0,299	0,207		0,203			
6,000 . .	0,0880	0,115	0,0914		0,0911			
8,000 . .	0,0502	0,0594	0,0513		0,0513			
10,000 . .	0,0324	0,0363	0,0328		0,0328			

TABLEAU VII

Diffusion de positons par le potentiel statique de l'atome d'hélium.

Section efficace différentielle (en unités a_0^2/srad).

k (a_0^{-1})	θ (°)	$\sigma_B^{(1)}$	$\sigma_B^{(2)}$	σ_{var} Form. I	σ_{var} Form. II	$\sigma_{O.P.}$ M.M.
0,272	0	0,493	0,0277	0,137	0,139	0,17*
	60	0,484	0,0218	0,133	0,134	
	120	0,465	0,0202	0,126	0,125	
	180	0,457	0,0196	0,123	0,121	
0,608	0	0,493	0,0899	0,152	0,157	0,16*
	60	0,448	0,0808	0,133	0,136	
	120	0,374	0,0692	0,103	0,100	
	180	0,343	0,0658	0,0910	0,0865	
0,859	0	0,493	0,152	0,170	0,176	
	60	0,409	0,127	0,131	0,134	
	120	0,292	0,0998	0,0815	0,0789	
	180	0,250	0,0932	0,0656	0,0609	
1,053	0	0,493	0,199	0,186	0,192	
	60	0,374	0,154	0,127	0,130	
	120	0,232	0,122	0,0658	0,0637	
	180	0,189	0,103	0,0491	0.0455	
1,359	0	0,493	0,264	0,214	0,218	
	60	0,316	0,177	0,119	0,120	
	120	0,156	0,112	0,0452	0,0443	
	180	0,117	0,0999	0,0302	0,0295	
1,992	0	0,493	0,348	0,268	0,265	
	60	0,216	0,166	0,0943	0,0938	
	120	0,0719	0,0824	0,0217	0,0225	
	180	0,0481	0,0684	0,0125	0,0159	
4,0	0	0,493	0,453	0,393	0,394	
	60	0,0428	0,0492	0,0238	0,0233	
	120	0,00644	0,0124	0,00233	0,00270	
	180	0,00373	0,00846	0,00119	0,00356	
6,0	0	0,493	0,475	0,444	0,443	
	60	0,0110	0,0141	0,00667	0,00659	
	120	0,00135	0,00258	$5{,}82 . 10^{-4}$	$6{,}44 . 10^{-4}$	
	180	$7{,}63 . 10^{-4}$	0,00163	$3{,}01 . 10^{-4}$	$9{,}64 . 10^{-4}$	
8,0	0	0,493	0,483	0,464	0,464	
	60	0,00373	0,00493	0,00243	0,00241	
	120	$4{,}31 . 10^{-4}$	$7{,}67 . 10^{-4}$	$2{,}16 . 10^{-4}$	$2{,}30 . 10^{-4}$	
	180	$2{,}43 . 10^{-4}$	$4{,}68 . 10^{-4}$	$1{,}13 . 10^{-4}$	$3{,}25 . 10^{-4}$	
10,0	0	0,493	0,486	0,474	0,474	
	60	0,00157	0,00205	0,00108	0,00107	
	120	$1{,}77 . 10^{-4}$	$2{,}92 . 10^{-4}$	$9{,}92 . 10^{-5}$	$1{,}04 . 10^{-4}$	
	180	$9{,}98 . 10^{-5}$	$1{,}75 . 10^{-4}$	$5{,}28 . 10^{-5}$	$1{,}33 . 10^{-4}$	

TABLEAU VIII

Diffusion de positons par le potentiel statique de l'atome d'hélium.

Section efficace totale (en unités πa_0^2).

k (a_0^{-1})	$\sigma_{tot}^{(B)}$	$\sigma_{tot}^{(B2)}$	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ I}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Th. opt.	$\sigma_{tot}^{var\ II}$ Intég.	$\sigma_{tot}^{O.P.}$ M.M.
0,272. . .	1,90	0,0841	0,527	0,519	0,518	0,519	0,70*
0,608. . .	1,65	0,301	0,508	0,473	0,476	0,479	0,63*
0,859. . .	1,41	0,458	0,485	0,430	0,438	0,447	0,56*
1,053. . .	1,23	0,540	0,464	0,396	0,410	0,427	0,53*
1,359. . .	0,977	0,596	0,425	0,347	0,370	0,401	0,44*
1,992. . .	0,639	0,539	0,348		0,309		
4,0 . . .	0,189	0,203	0,153		0,149		
6,0 . . .	0,0880	0,0938	0,0792		0,0788		
8,0 . . .	0,0502	0,0527	0,0472		0,0472		
10,0 . . .	0,0324	0,0335	0,0311		0,0311		

Ce travail constitue une partie d'un Mémoire couronné du Prix Louis Empain 1963, groupe Sciences physiques.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à M. le Professeur M. Demeur pour les conseils qu'il m'a donnés au cours de nombreuses discussions.

BIBLIOGRAPHIE

[*1*] J. Schwinger, *Phys. Rev.*, t. 72, 1947, p. 742.
[*2*] B. A. Lippmann et J. Schwinger, *Phys. Rev.*, t. 79, 1950, p. 469.
[*3*] M. Moe et D. S. Saxon, *Phys. Rev.*, t. 111, 1958, p. 950.
[*4*] E. Gerjuoy et D. S. Saxon, *Phys. Rev.*, t. 85, 1952, p. 704 et 939.
[*5*] L. Mower, *Phys. Rev.*, t. 89, 1953, p. 947.
[*6*] S. Altshuler, *Phys. Rev.*, t. 89, 1953, p. 1278.
[*7*] E. Gerjuoy et D. S. Saxon, *Phys. Rev.*, t. 94, 1954, p. 484.
[*8*] L. Mower, *Phys. Rev.*, t. 99, 1955, p. 1065.
[*9*] M. C. Newstein, Technical Report n° *4*, Project DIC *6915*, Massachusetts Institute of Technology, 1955.
[*10*] C. Joachain, *Bull. Cl. Sciences Acad. Roy. Belg.*, t. 48, 1962, p. 302.
[*11*] A. Messiah, *Mécanique quantique*, t. II, Dunod, Paris, 1960, p. 718.
[*12*] M. Lax, *Phys. Rev.*, t. 78, 1950, p. 306.
[*13*] P. M. Morse et H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, p. 1131.

[*14*] B. L. MOISEIWITSCH, *Elastic Scattering of Electrons* (Atomic and Molecular Processes, édité par D. R. Bates, Academic Press, New York, London, 1962), p. 280.
[*15*] R. H. DALITZ, *Proc. Roy. Soc. A*, t. 206, 1951, p. 509.
[*16*] *Voir* [*13*], p. 1706.
[*17*] R. P. FEYNMAN, *Phys. Rev.*, t. 76, 1949, p. 769 (Appendice).
[*18*] S. CHANDRASEKHAR et F. H. BREEN, *Astr. J.*, t. 103, 1946, p. 41.
[*19*] H. S. W. MASSEY et B. L. MOISEIWITSCH, *Proc. Roy. Soc. A*, t. 205, 1951, p. 483.
[*20*] L. HULTHÉN, *Kgl. Fysiogr. Sällsk. Lund Förh.*, t. 14, 1944, p. 1; *Dixième Congrès des Mathématiciens Scandinaves*, Copenhagen, 1946, p. 201; *Ark. Math. Ast. Phys.*, t. 35 A, 1948, p. 1.
[*21*] W. KOHN, *Phys. Rev.*, t. 74, 1948, p. 1763; *Phys. Rev.*, t. 84, 1951, p. 495.
[*22*] K. SMITH, W. F. MILLER et A. J. P. MUMFORD, *Proc. Phys. Soc.*, t. 76, 1960, p. 559.
[*23*] H. S. W. MASSEY et A. H. A. MOUSSA, *Proc. Phys. Soc.*, t. 71, 1958, p. 38.
[*24*] E. A. HYLLERAAS, *Z. Phys.*, t. 54, 1929, p. 347.
[*25*] B. L. MOISEIWITSCH, *Proc. Roy. Soc. A*, t. 219, 1953, p. 102.
[*26*] J. MACDOUGALL, *Proc. Roy. Soc. A*, t. 136, 1932, p. 549.

(Manuscrit reçu le 7 janvier 1964).