

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION	5
CHAPITRE I : Description des états doublement excités des systèmes atomiques à deux électrons	6
I.1. Hamiltonien d'un système atomique à deux électrons	7
I.2. Fonctions d'onde du couplage spin-orbite (LS)	9
I.3. Autoionisation de l'atome d'hélium	11
I.4. Méthode de diagonalisation	13
I.5. Autres méthodes de calculs	17
I.6. Fonctions d'onde des états autoionisants $^1P^0$ et $^3P^0$ de l'hélium et des ions héliumoides	18
CHAPITRE II : Paramètres de résonances sous les seuils d'excitation N=2, 3	24
II.1. Effet de la répulsion coulombienne entre les deux électrons des systèmes héliumoides : intégrale d'échange	25
II.2. Calcul des intégrales radiales R^k de Slater	33
II.3. Largeurs partielles et largeurs totales	37
II.4. Calcul de la section efficace	41
II.5. Calcul des probabilités d'autoionisation et rapports de branchement	44
CONCLUSION	48
BIBLIOGRAPHIE	49

INTRODUCTION

Dans les systèmes héliumoïdes, les états d'autoionisation ou encore états de résonance atomique, sont des états de double excitation électronique situés au-dessus du premier potentiel d'ionisation. Ce sont des états quasi-stationnaires dont la durée de vie est comprise entre 10^{-15} et 10^{-6} seconde et qui se manifestent sous forme de résonances dans les sections efficaces de photoabsorption ou de diffusion des particules chargées par des atomes et des ions. Il existe des situations pour lesquelles ces configurations de double excitation électronique ont une plus grande probabilité de se dissocier en un ion et un électron (autoionisation) et d'autres pour lesquelles elles peuvent se désexciter par émission de photons (désexcitation radiative) [1].

Dans ce présent travail on se propose d'évaluer des durées de vie, des sections efficaces, des probabilités d'autoionisation et des rapports de branchement de l'hélium et des ions héliumoïdes multichargés Li^+ , Be^{2+} , B^{3+} , C^{4+} , N^{5+} , O^{6+} , F^{7+} et Ne^{8+} sous le seuil d'excitation $N = 2, 3$ de l'ion hydrogénoïde résiduel sur la base de la méthode de diagonalisation.

La méthode de diagonalisation est l'une des méthodes phares de notre laboratoire et y a été introduite par Wagué vers les années 80 [2]. A l'heure actuelle, nous disposons d'une base importante de résultats quantitatifs et qualitatifs sur les énergies d'excitation, les largeurs totales et partielles des résonances autoionisantes sous divers seuils d'excitation et pour divers ions héliumoïdes [1].

Dans le cadre de ce travail, nous passons en revue au premier chapitre, la description des états doublement excités dans les systèmes héliumoïdes, dans le cadre de la méthode de diagonalisation. Dans le deuxième chapitre, en plus des résultats déjà obtenus, dans des travaux antérieurs [1-6], sur les énergies d'excitation et les largeurs des résonances autoionisantes, nous présentons des résultats sur les probabilités d'autoionisation, les rapports de branchements et les sections efficaces. Ces sections efficaces ainsi que les probabilités d'autoionisation et rapports de branchement ont été évaluées pour l'hélium et pour les ions héliumoïdes multichargés ($Z \leq 10$) sous le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

En conclusion, nous tirons les principaux enseignements issus de l'étude de ces différents paramètres et dégageons quelques perspectives.

CHAPITRE I
DESCRIPTION DES ÉTATS DOUBLEMENT
EXCITÉS DES SYSTÈMES ATOMIQUES À
DEUX ÉLECTRONS

Introduction

Les premières observations des états doublement excités sont dues à Madden et Codling [7-8]. En dirigeant un rayonnement synchrotron sur l'état fondamental $1S^e$ de l'atome d'hélium, ils ont observé dans le spectre d'absorption trois séries d'états $1P^0$, d'intensités différentes, convergeant vers le seuil d'ionisation $N = 2$. Or, le modèle des particules indépendantes prédisait trois séries d'égales intensités : $2snp$, $2pns$ et $2pnd$. La différence dans les intensités des séries du spectre enregistré était donc la signature des corrélations électroniques négligées dans le modèle des particules indépendantes. Par conséquent, les prédictions théoriques sur les positions des résonances des trois séries dominantes observées étaient totalement erronées.

Cooper et al [9] proposèrent une explication basée sur le fait que les états $(2lnl')$ $1P^0$, qui sont dégénérés dans le modèle à particules indépendantes sont fortement couplés par l'interaction électron-électron $1/r_{12}$.

D'autres chercheurs tels que Herrick et al [10-13] pour décrire les états doublement excités, ont utilisé les propriétés du groupe de symétrie $SO(4)$ tout en introduisant de nouveaux nombres quantiques T et K . La classification d'Herrick ne fournit aucune information sur les corrélations radiales des électrons. Elle a donc été complétée plus tard par Lin [14-15], qui a introduit un nouveau nombre quantique A appelé nombre quantique de corrélation radiale.

I.1./- Hamiltonien d'un système atomique à deux électrons

L'Hamiltonien d'un système atomique à deux électrons, dans le cas où les effets relativistes et la masse du noyau ne seraient pas pris en compte, se met sous la forme suivante :

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (I.1)$$

L'Hamiltonien peut aussi s'écrire :

$$H = H_0 + H_1 \quad (I.2)$$

avec :

$$H_0 = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right] \quad (I.3)$$

Dans cette dernière expression, le terme H_0 contient l'énergie cinétique et potentielle de chaque électron dans le champ du noyau :

$$H_1 = \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{I.4})$$

H_1 représente la répulsion coulombienne entre la pair d'électron. Pour déterminer l'énergie, on procèdera à la diagonalisation l'opérateur H_1 dans l'état des électrons issu de H_0 . Dans l'approximation $H = H_0 + H_1$, la composition des moments se fait suivant le couplage LS car les bases obtenues sont plus adaptées aux symétries du terme de corrélation électronique $1/r_{12}$.

Définissons les opérateurs moment cinétique orbital total et moment cinétique de spin total :

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i \quad (\text{I.5})$$

$$\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i \quad (\text{I.6})$$

Comme H_0 n'agit que sur r , il commute évidemment avec \vec{L}_i et \vec{S}_i quelque soit i , et donc avec \vec{L} et \vec{S} . En ce qui concerne H_1 , on montre que bien qu'il ne commute pas avec les moments cinétiques orbitaux individuels des électrons, il commute par contre avec \vec{L} , et bien entendu avec \vec{S} puisqu'il agit sur les variables spatiales. On a la relation de commutation suivante :

$$[H, \vec{S}] = [H, \vec{L}] = 0 \quad (\text{I.7})$$

Or les opérateurs L^2, L_z, S^2, S_z génèrent l'espace des fonctions d'onde de H et grâce aux relations de commutation établie ci-dessus, on voit que les opérateurs $H, H_1, L^2, L_z, S^2, S_z$ forment un ECOC et donc que les valeurs propres de H vont être caractérisées par les valeurs propres des opérateurs L^2 et S^2 uniquement, car comme d'après les relations de commutations, H_1 commute également avec L_{\pm} et S_{\pm} , l'énergie d'écart avec le niveau non couplé ne dépend ni de M_L , ni de M_S [16].

Chaque niveau d'énergie va donc donner naissance à des niveaux repérés par les valeurs de L et S , nommés termes, et qui sont notés ^{2S+1}L , où L est la lettre correspondant à la valeur de L . La dégénérescence de ces niveaux est toujours bien entendu donnée par l'ensemble des valeurs que peuvent prendre M_L et M_S , soit $(2L+1)(2S+1)$.

Afin de déterminer les diverses valeurs de L et S données par un état, on doit utiliser les règles d'addition des moments cinétiques. Par exemple, si $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ (respectivement $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$), alors les valeurs propres L (resp. S) de l'opérateur L^2 (resp. S^2) seront données par :

$$(I.8.a) \quad L = l_1 + l_2, \quad l_1 + l_2 - 1, \quad \dots \quad |l_1 - l_2|$$

$$(I.8.b) \quad S = s_1 + s_2, \quad s_1 + s_2 - 1, \quad \dots \quad |s_1 - s_2| = 1, \quad 0$$

$$M_L = m_{l_1} + m_{l_2} = L, L-1 \dots -L \quad (I.8.c)$$

$$M_S = m_{s_1} + m_{s_2} = \begin{cases} 1, 0, -1 \text{ quand } S = 1 \\ 0 \text{ quand } S = 0 \end{cases} \quad (I.8.d)$$

I.2./- Fonctions d'onde du couplage spin - orbite (LS)

Nous donnons ici les fonctions d'ondes de spin d'un système héliumoïde et leur symétrie.

Notation	Fonctions	2S+1	Symétrie
$ 1, 1\rangle \equiv {}^3\varepsilon_1$	$\alpha(1)\alpha(2)$	3	symétrique
$ 1, 0\rangle \equiv {}^3\varepsilon_0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$	3	symétrique
$ 1, -1\rangle \equiv {}^3\varepsilon_{-1}$	$\beta(1)\beta(2)$	3	symétrique
$ 0, 0\rangle \equiv {}^3\varepsilon_0$	$\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$	1	antisymétrique

Les fonctions propres de L^2 et L_Z sont données par les expressions :

$$\begin{aligned} |L, M_L\rangle &\equiv |l_1, l_2; L, M_L\rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} |l_1, l_2; m_1, m_2\rangle \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l_1, l_2; L, M_L \rangle \end{aligned} \quad (I.9)$$

et

$$\begin{aligned}
& |l_1, l_2; L, M_L\rangle \\
&= (-1)^{l_1+l_2-M_L} \sum_{m_1, m_2} \sqrt{2L+1} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & -M_L \end{pmatrix} |l_1, l_2; m_1, m_2\rangle \quad (\text{I.10})
\end{aligned}$$

Pour rendre symétrique (S) ou antisymétrique (A) ces fonctions propres, on leur applique les opérateurs suivants :

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + P_{21}) \quad (\text{I.11})$$

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - P_{21}) \quad (\text{I.12})$$

Où P_{21} est l'opérateur de permutation entre les deux électrons avec :

$$P_{21} = P_{21}^{(0)} \otimes P_{21}^{(s)} \quad (\text{I.13})$$

et

$$P_{21}^{(s)} |S, M_S\rangle = (-1)^{S+1} |S, M_S\rangle \quad (\text{I.14})$$

En utilisant l'une des propriétés de symétrie des coefficients de Clebsch- Gordan :

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j_1, j_2; J, M\rangle = (-1)^{j_1+j_2-J} \langle j_2, j_1; m_1, m_2 | j_2, j_1; J, M\rangle \quad (\text{I.15})$$

Nous avons :

$$|{}^1L, M_L, M_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|l_1(1), l_2(2); L, M_L\rangle + (-1)^{l_1+l_2-L} |l_2(1), l_1(2); L, M_L\rangle \right] \varepsilon \quad (\text{I.16})$$

$$|{}^3L, M_L, M_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|l_1(1), l_2(2); L, M_L\rangle - (-1)^{l_1+l_2-L} |l_2(1), l_1(2); L, M_L\rangle \right] \varepsilon \quad (\text{I.17})$$

De façon plus générale :

$$\begin{aligned}
& |l_1, l_2; L, M_L; S, M_S\rangle \\
&= c \left\{ \left[1 - (-1)^{S+1} P_{21}^{(0)} |l_1(1), l_2(2); L, M_L\rangle \right] \otimes |S, M_S\rangle \right\} \quad (\text{I.18})
\end{aligned}$$

où c est une constante.

La fonction d'onde antisymétrique et normalisée est donnée par l'expression :

$$|L, S; M_L, M_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{mm'\mu\mu'} [1 - P_{21}^{(0)} \otimes P_{21}^{(S)}] |l, l'; L, M_L\rangle \otimes |s, s'; S, M_S\rangle \quad (\text{I.19})$$

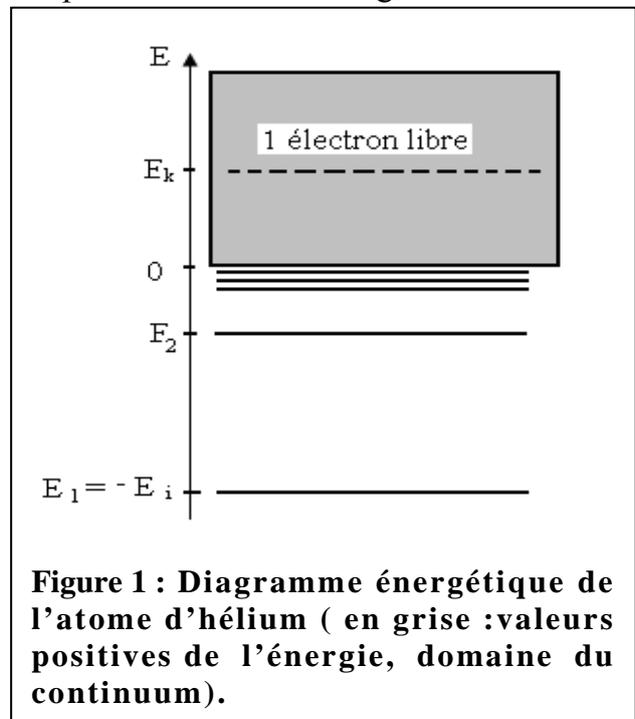
Dans cette formule, l, l', s, s' sont les moments cinétiques orbitaux et de spins individuels des électrons et m, m', μ, μ' respectivement leur projection suivant l'axe Oz. L et S désignent dans l'ordre le moment cinétique orbital et le moment cinétique de spin total.

I.3./-Autoionisation de l'atome d'hélium

L'hélium possède deux électrons, plongés dans le potentiel coulombien du noyau doublement chargé He^{2+} . On peut donner un modèle grossier de ce système en ignorant l'interaction entre ces électrons et que ces états propres sont analogues à ceux de l'atome d'hydrogène à un facteur près correspondant à la charge double du noyau. L'énergie des états $|n\rangle$ s'écrit :

$$E_n = -\frac{E_i}{n^2} \quad (\text{I.20})$$

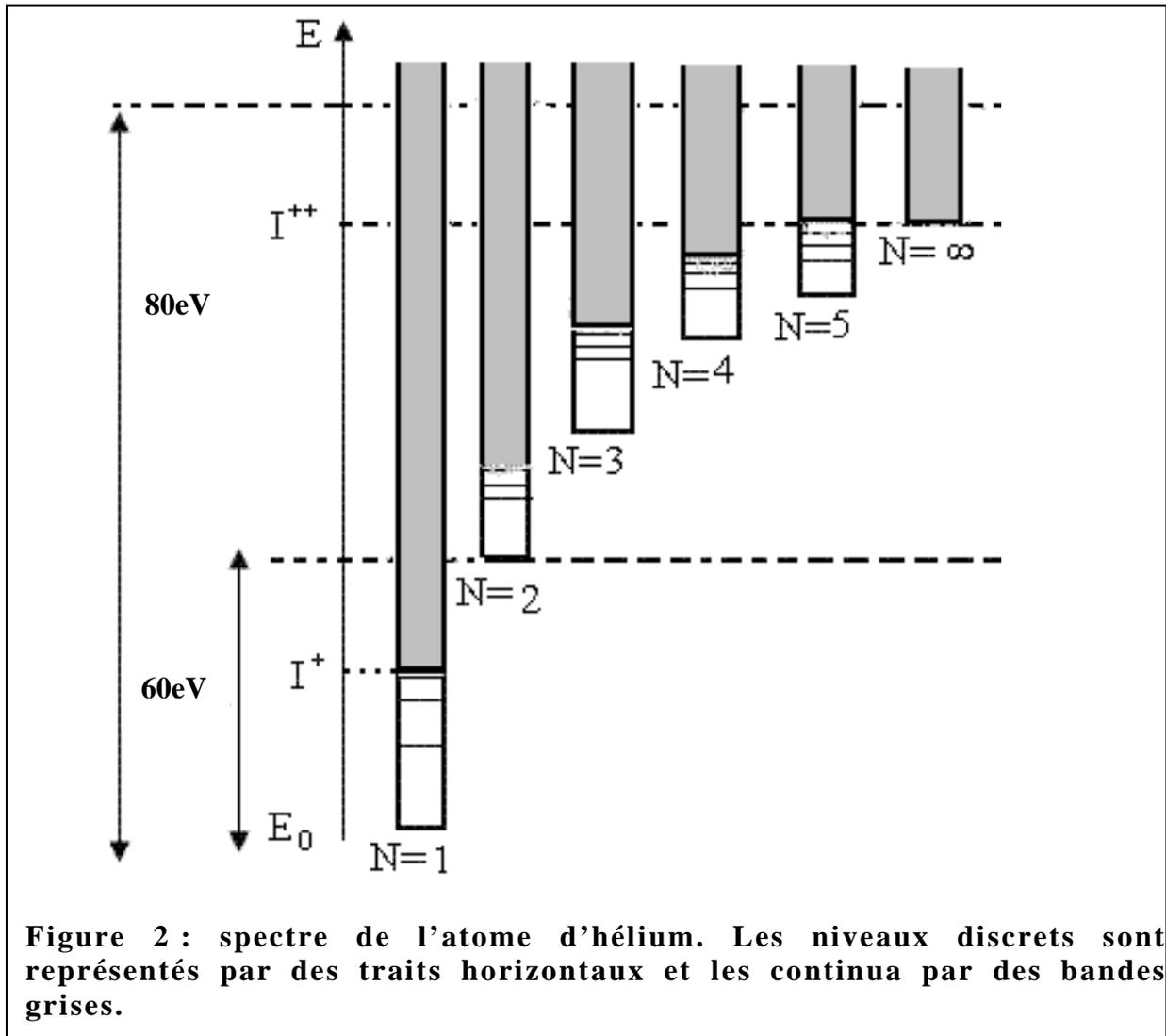
où n est un entier non nul et E_i l'énergie d'ionisation qui vaut quatre fois celle de l'atome d'hydrogène ($E_i = 54,4 \text{ eV}$). Il y'a de plus les états ionisés d'énergies positives, où l'électron peut s'éloigner à l'infini. Les énergies E_k de ces états $|k\rangle$ ne sont pas quantifiées : elles forment un continuum comme l'indique la figure 1 ci-contre [18].



Lorsque l'atome d'hélium est excité par absorption d'un photon d'une énergie donnée ; deux processus différents peuvent se produire. Le premier, observable sous le seuil de deuxième ionisation I^{++} , est la formation d'états doublement excités autoionisants. Le second, qui apparaît au-dessus du seuil I^{++} , est précisément l'ionisation double (voir figure.2).

Chacun de ces processus est, par ailleurs, couplé aux processus concurrent d'ionisation simple avec excitation de l'ion résiduel.

Comme les processus collisionnels ou radiatifs les plus intenses conservent le spin, les états singulets ($S = 0$) et triplet ($S = 1$) apparaissent comme ceux de deux types d'atome d'hélium : le parahélium ($S = 0$) et l'orthohélium ($S = 1$), en notation spectroscopique $2^{S+1}L^\pi$ [19].



Pour $N = 1$, nous avons l'état fondamental E_0 et l'ensemble des états monoexcités c'est-à-dire :

- ✓ les états liés $1sn'l'$ ($n' > 1$) qui forment une série de Rydberg convergeant vers le premier seuil d'ionisation simple I^+ ;
- ✓ le simple continuum $1s\epsilon l$ formé de l'ion résiduel dans son état fondamental et d'un électron libre.

Les bandes suivantes correspondent à des états doublement excités. Les états discrets comportent ainsi toutes les séries de Rydberg de type $Nlnl'$ ($n \geq N$) qui convergent vers le seuil d'ionisation I_N^+ (où I_N^+ représente le premier seuil d'ionisation simple I^+ correspondant aux différentes valeurs de N indiqué sur la figure 2) ainsi que les continua $Nl\varepsilon'l'$ formés de l'ion résiduel dans le niveau Nl et d'un électron libre d'énergie ε' et de moment angulaire l' .

I.4./- Méthode de diagonalisation

Une description efficace des processus d'études des niveaux d'énergies des systèmes héliumoïdes nécessite l'utilisation de méthodes théoriques, tenant compte le plus que possible des phénomènes de corrélation électroniques. Dans ce travail, comme méthode théorique de base, nous avons considéré la méthode de diagonalisation [1-6].

Cette méthode a été appliquée de façon plus générale à l'étude de la photo ionisation résonante multicanale des systèmes atomiques à deux électrons sous le seuil $N = 3$, par Sénashenko et Wagué [5] pour la description de la résonance $(3s3p)^1p^0$ de l'hélium ; par Wagué [6] dans l'étude des systèmes héliumoïdes multichargés sous les seuils $N = 2$ et $N = 3$ de l'ion résiduel [4-5] ; par N.A.B.Faye et Wagué [18] dans l'étude des résonances auto ionisantes des ions héliumoïdes multichargés : C^{4+} , N^{5+} et O^{6+} ; et plus récemment par A.S. Ndao [1] dans l'étude des systèmes héliumoïdes multichargés sous les seuils d'excitation $N = 4$ et $N = 5$ de l'ion résiduel.

Dans son utilisation pratique, la méthode de diagonalisation consiste à résoudre des systèmes d'équations algébriques en vue d'obtenir les fonctions d'onde ainsi que les énergies des états autoionisants pour pouvoir déterminer ensuite les largeurs partielles et totales des états doublement excités des systèmes héliumoïdes [28]. La fonction d'onde $\Psi_{Ei}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ représentant la solution de l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi_{Ei}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi_{Ei}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (I.21)$$

$$\text{Avec} \quad H = H_0 + V \quad (I.22)$$

Dans cette relation, H_0 représente l'Hamiltonien d'ordre zéro et V l'opérateur d'interaction coulombienne entre les deux électrons, décomposé en deux parties : une première qui contient le sous espace des canaux ouverts (états discrets) et une deuxième comprenant le sous espace des canaux fermés (états des continua). la fonction d'onde $\Psi_{Ei}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est donc exprimée de la façon suivante :

$$\Psi_{Ei}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_k A[\Psi_k(\vec{r}_1)U_k(E, \vec{r}_2)] + \sum_\mu \Lambda_\mu \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{I.23})$$

Dans cette expression k désigne l'ensemble des nombres quantiques caractérisant le système ion + électrons dans l'espace des canaux ouverts, et la sommation sur μ est limitée aux états de double excitation électronique ; A représente l'opérateur d'antisymétrisation, $U_k(E, \vec{r}_2)$ est une fonction inconnue à déterminer ; $\Psi_k(\vec{r}_1)$ est la fonction d'onde décrivant l'état de l'ion résiduel et Λ_μ sont des coefficients. La fonction $\Psi_k(\vec{r})$ satisfait aux relations suivantes :

$$\langle \Psi_k(\vec{r}) | \Psi_{k'}(\vec{r}) \rangle = \delta_{kk'} \quad (\text{I.24})$$

$$\langle \Psi_k(\vec{r}) | H | \Psi_{k'}(\vec{r}) \rangle = \varepsilon_{kk'} \delta_{kk'} + V_{kk'} \quad (\text{I.25})$$

où $V_{kk'}$ est l'élément matriciel de l'opérateur d'interaction coulombienne électron-électron.

Les fonctions d'onde $\Phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ représentent les états d'autoionisation et sont obtenues par une transformation unitaire de l'Hamiltonien H dans le sous espace des canaux fermés :

$$\phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{j,l} \alpha_\mu(j,l) \chi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{I.26})$$

avec

$$\chi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A[\Psi_j(\vec{r}_1)\Psi_l(\vec{r}_2)] \quad (\text{I.27})$$

Ces fonctions d'onde satisfont à la condition de diagonalisation suivante :

$$\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | H | \phi_{\mu'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \varepsilon_{\mu\mu'} \delta_{\mu\mu'} \quad (\text{I.28})$$

Les coefficients $\alpha_\mu(j, l)$ définis dans les fonctions d'onde $\Phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, s'obtiennent en résolvant le système d'équations algébriques :

$$\sum_\nu \left\{ (E - E_0) \delta_{\mu\nu} + \langle \chi_\mu | V | \chi_\nu \rangle \right\} \alpha_\nu = 0 \quad (\text{I.29})$$

Où E_0 représente la valeur propre de l'Hamiltonien H_0 correspondant aux fonctions propres χ_μ . L'introduction de la fonction d'onde totale dans l'équation de Schrödinger, et quelques opérations intermédiaires conduisent au système d'équations déterminant les coefficients A_μ et les fonctions $U_k(E, \vec{r}_2)$:

$$\Lambda_\mu(E) = \frac{\sum_{j=0}^N \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | A [U_j(E, \vec{r}_2) \Psi_j(\vec{r}_1)] \rangle}{E - \varepsilon_\mu} \quad (\text{I.30})$$

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{z}{r_2} + \langle \Psi_j(\vec{r}_1) | V | \Psi_j(\vec{r}_1) \rangle + E_j - E \right] U_j(E, \vec{r}_2) \\ & \pm \langle \Psi_j(\vec{r}_1) | V | U_j(E, \vec{r}_1) \rangle \Psi_j(\vec{r}_2) \bullet \sum_{k \neq j} \langle \Psi_j(\vec{r}_1) | V | A [U_j(E, \vec{r}_2) \Psi_k(\vec{r}_j)] \rangle \\ & = -\sqrt{2} \sum_{\mu} \Lambda_\mu(E) \langle \Psi_j(\vec{r}_1) | V | \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \end{aligned} \quad (\text{I.31})$$

La résolution de ce système d'équations a été traitée en détail dans les travaux de Wagué [2-20] et elle conduit à l'expression de la fonction d'onde de l'état final du système :

$$\begin{aligned} \Psi_F(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \varphi_j(E) \\ &+ \frac{\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \varphi_j(E) \rangle}{E - \varepsilon_\mu - \Delta_\mu - \frac{i}{2} \Gamma_\mu^{\text{tot}}} \left[\phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + i\pi \sum_l \varphi_l(E) \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \varphi_l(E) \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{I.32})$$

Dans l'expression de cette fonction d'onde, $\varphi_j(E)$ représente la fonction d'onde du spectre continu avec le couplage électrostatique d'ordre un dans le canal ouvert ; elle est définie par :

$$\varphi_j(E) = A \left[\delta_{kj} \Psi_j(E, \vec{r}_2) \Psi_k(\vec{r}_1) \right] \quad (\text{I.33})$$

Γ_μ^{tot} désigne la largeur totale de l'état autoionisant μ :

$$\Gamma_\mu^{\text{tot}} = 2\pi \sum_j \left| \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \varphi_j(E) \rangle \right|^2 \quad (\text{I.34})$$

et Δ_μ le déplacement du niveau résonnant tel que :

$$\Delta_{\mu} = \sum_j P \int \frac{\left| \langle \phi_{\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \phi_j(E) \rangle \right|^2}{E - E'} dE' + \Delta_{\mu} \quad (I.35)$$

où P désigne la partie principale de l'intégrale et Δ_{μ} définit le déplacement de la résonance dû aux états liés de l'Hamiltonien H .

La méthode de diagonalisation en tant que méthode utilisée dans ce travail consiste à négliger le couplage indirect des canaux fermés à travers les canaux ouverts [1].

I.5./- Autres méthodes de calculs

Un très grand nombre de méthodes d'investigation des états doublement excités a permis d'améliorer notre compréhension des corrélations électroniques dans les systèmes à deux électrons.

Parmi ces méthodes, on peut citer :

- la méthode variationnelle de Hylleraas utilisée initialement par Hylleraas [21] pour la détermination de l'énergie totale de l'état fondamental des systèmes héliumoides. Les fonctions d'onde de type Hylleraas sont très employées ;
- La méthode des coordonnées hypersphériques introduite par Macek [22,23] et employées dans le calcul des énergies des états excités ($Nlnl'$) des systèmes atomiques à deux électrons.
- La méthode de la théorie variationnelle des perturbations dépendantes du temps utilisées par D. Ray et P.K. Mukherji [24] pour le calcul des énergies des états doublement excités $(nl)^2$ de l'hélium et des ions héliumoides Li^+ , Be^{2+} et B^{3+} ;
- Le formalisme de la méthode de la rotation complexe et ses applications dans les processus de collisions atomiques a été développé par Ho [25].

I.6./- Fonctions d'onde des états autoionisants $^1P^0$ et $^3P^0$ de l'hélium et des ions héliumoides

Les fonctions d'onde des états d'autoionisation sont données par les vecteurs propres obtenus après diagonalisation d'une matrice (10×10) des éléments matriciels de l'interaction coulombienne du système héliumoides considéré, dans une base où les fonctions propres de l'Hamiltonien sont sous la forme de produits antisymétriques de fonctions coulombiennes dans le champ de charge Z .

Les calculs ont été effectués dans une base contenant les configurations $2lnl'$ avec $l \leq 1$; $l' \leq 2$; $2 \leq n \leq 5$ ce qui correspond à une matrice (10×10). Nous présentons ici, dans le tableau 1 ci-après, les

résultats des calculs concernant les fonctions d'onde des dix premières résonances des états singulets de l'hélium.

Il faut noter que les états $Nlnl'$ de la colonne de gauche ne sont pas des états purs à cause du mixage des configurations mais plutôt une combinaison linéaire des états de base $|n_1l_1n_2l_2\rangle$ de la première ligne. Si nous notons l'état doublement excité $\Psi_{nln'l'}$, nous avons :

$$\Psi_{nln'l'} = \sum_i c_i |n_1l_1n_2l_2\rangle_i$$

Les c_i sont les valeurs propres correspondant à la fonction propre $|n_1l_1n_2l_2\rangle_i$. Par exemple:

$$\Psi_{2s2p} = +0,8756|2s2p\rangle - 0,1828|2s3p\rangle - 0,0148|2s5p\rangle - 0,0578|4s2p\rangle - 0,0721|2p4d\rangle - 0,0344|5s2p\rangle - 0,0456|2p5d\rangle - 0,3040|3s2p\rangle - 0,0280|2s4p\rangle - 0,3076|2p3d\rangle.$$

Tableau 1 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^1P^0$ de l'atome d'hélium convergeant vers le seuil d'excitation $N = 2$ de l'ion résiduel. Matrice (10 x10).

	2s2p	2s3p	2s5p	4s2p	2p4d	5s2p	2p5d	3s2p	2s4p	2p3d
2s2p	+0.875 6	-0.182 8	-0.014 8	-0.057 8	-0.072 1	-0.034 4	-0.045 6	-0.304 0	-0.028 0	-0.307 6
2s3p	-0.006 2	+0.647 7	-0.048 1	+0.240 2	-0.130 0	+0.041 6	-0.026 2	-0.618 7	-0.264 6	+0.219 9
2s5p	+0.410 9	+0.173 7	+0.055 0	+0.245 5	+0.454 5	+0.183 3	+0.347 5	+0.316 4	+0.090 5	+0.518 2
4s2p	+0.079 8	+0.420 3	+0.336 8	+0.322 2	-0.280 6	+0.265 5	-0.184 3	+0.307 5	+0.422 8	-0.378 4
2p4d	-0.043 1	+0.273 8	+0.039 7	-0.228 8	+0.713 2	+0.154 5	-0.316 6	+0.043 6	-0.272 9	-0.400 2
5s2p	+0.183 5	+0.328 0	+0.031 4	-0.595 3	-0.397 4	+0.057 8	+0.029 0	+0.412 1	-0.386 8	+0.147 9
2p5d	-0.066 8	+0.228 7	-0.451 5	+0.029 2	+0.005 6	-0.095 4	+0.702 9	+0.074 6	+0.009 6	-0.479 3
3s2p	+0.020 1	-0.212 8	-0.496 7	+0.410 3	-0.155 1	+0.496 6	-0.233 6	+0.215 2	-0.408 6	-0.029 3
2s4p	-0.006 3	-0.099 3	+0.486 9	+0.416 7	-0.024 1	-0.400 9	+0.152 2	+0.182 6	-0.579 6	-0.160 2
2p3d	-0.132 7	-0.224 2	+0.436 8	-0.159 1	-0.037 6	+0.670 3	+0.411 9	-0.270 6	-0.123 6	-0.084 1

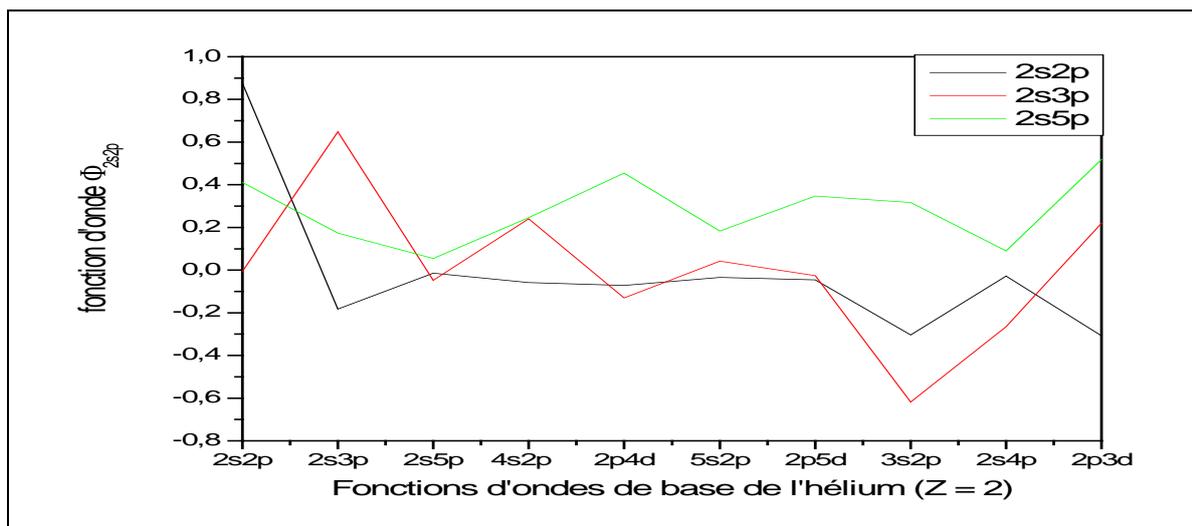


Figure 3 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^1P^0$ du système hélium He ($Z = 2$) convergeant vers le seuil d'excitation $N = 2$ de l'ion résiduel.

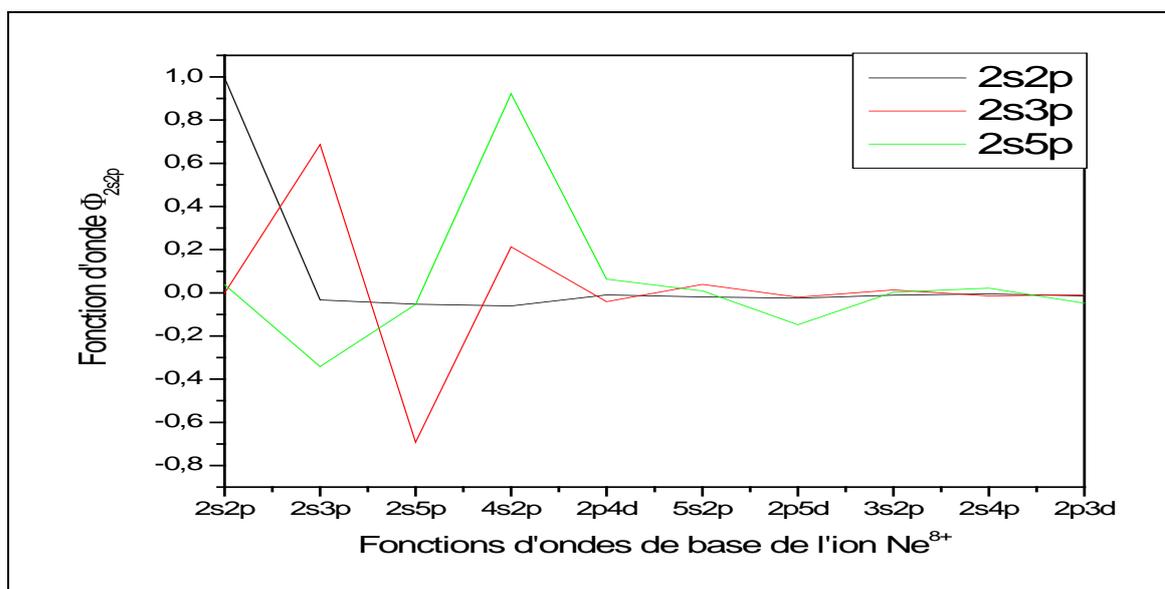


Figure 4 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^1P^0$ du système hélium Ne $^{8+}$ ($Z = 10$) convergeant vers le seuil d'excitation $N = 2$ de l'ion résiduel

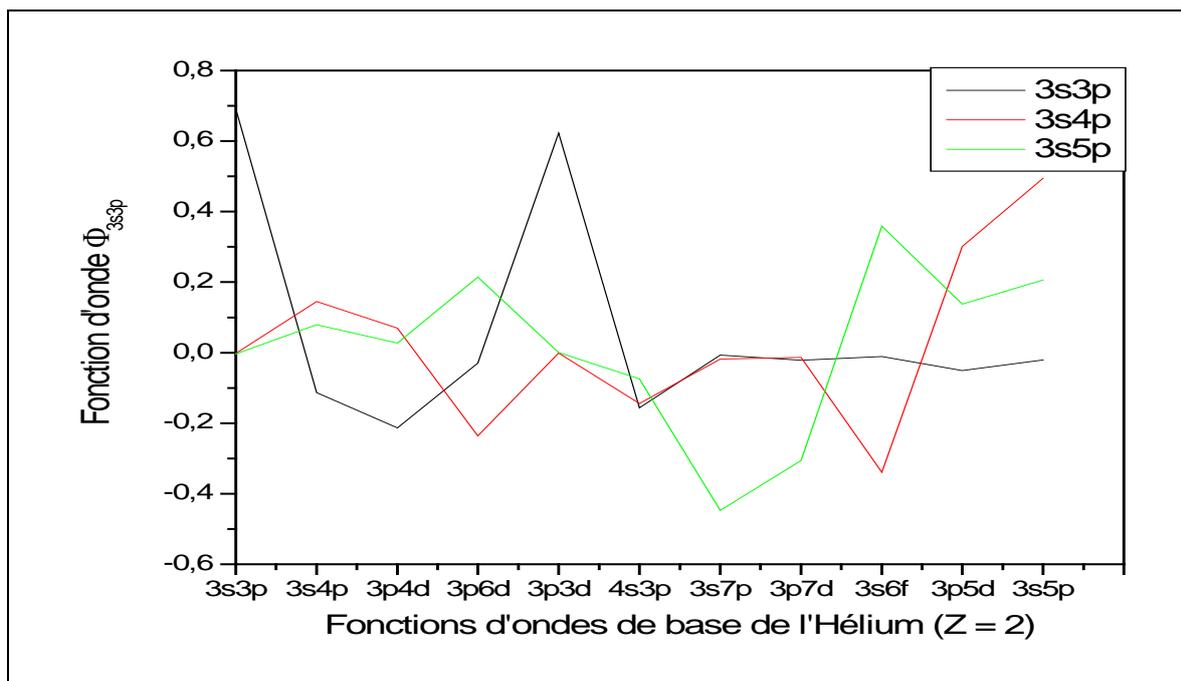


Figure 5 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^1P^0$ du système héliumöide He ($Z = 2$) convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

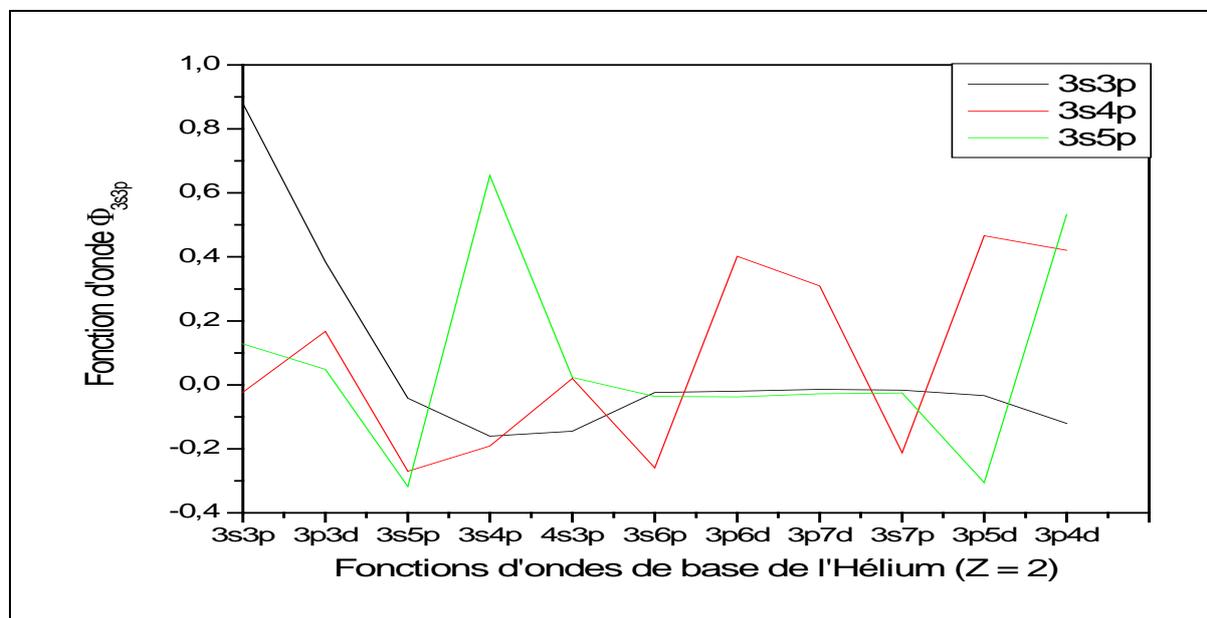


Figure 6 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^3P^0$ du système héliumöide He ($Z = 2$) convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

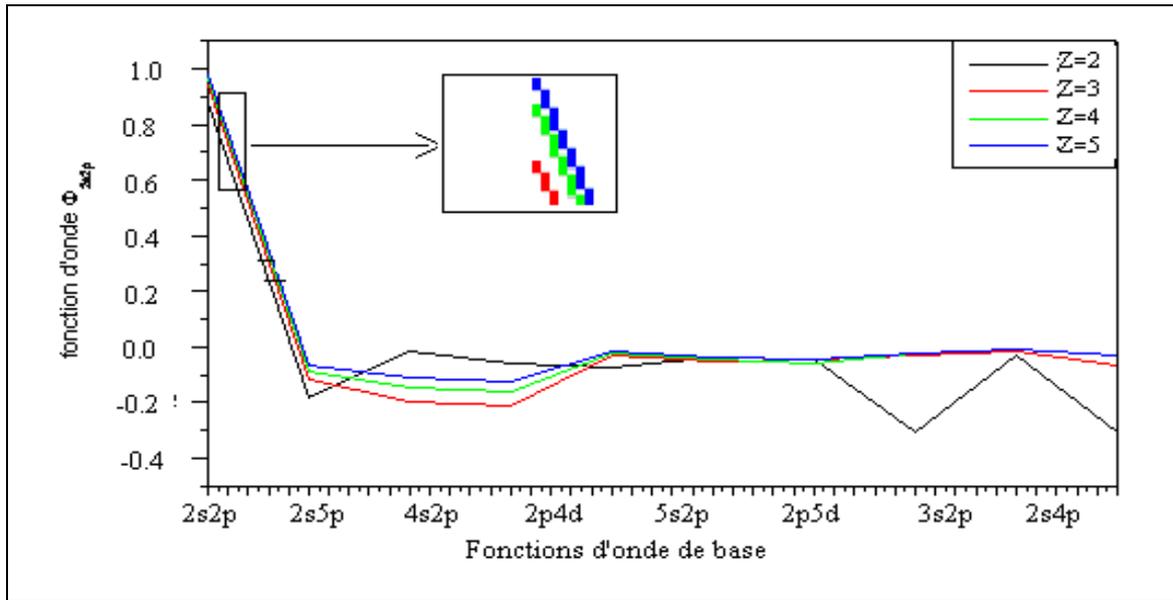


Figure 7 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^1P^0$ des systèmes héliumoides $Z = 2-5$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 2$ de l'ion résiduel.

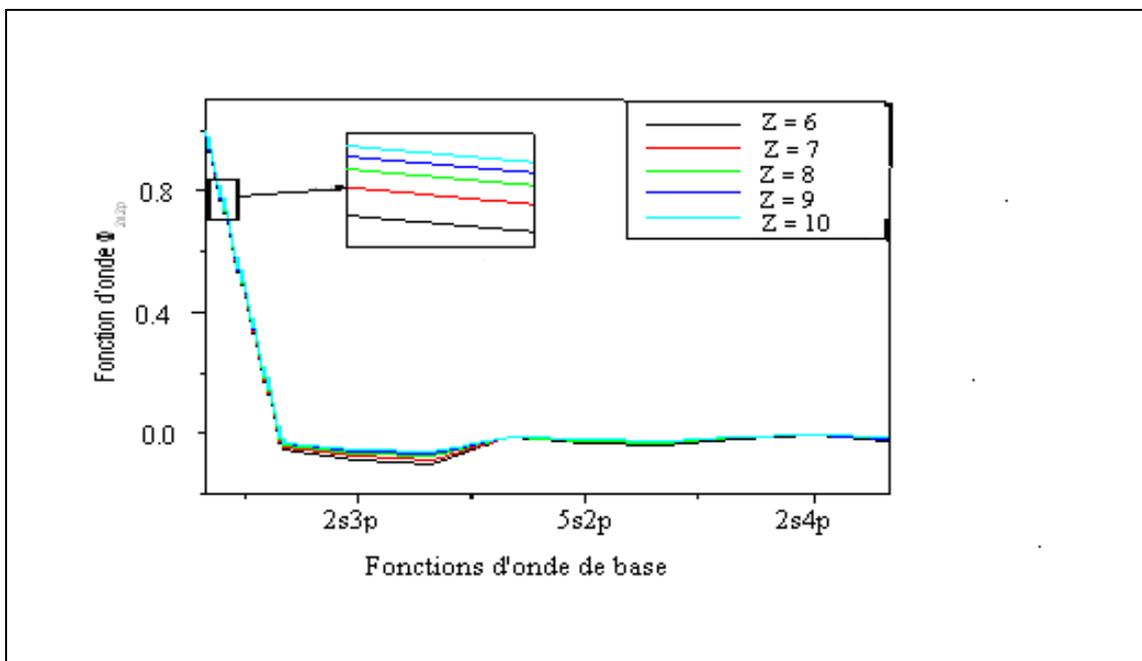


Figure 8 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $^1P^0$ des systèmes héliumoides $Z = 6-10$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 2$ de l'ion résiduel.

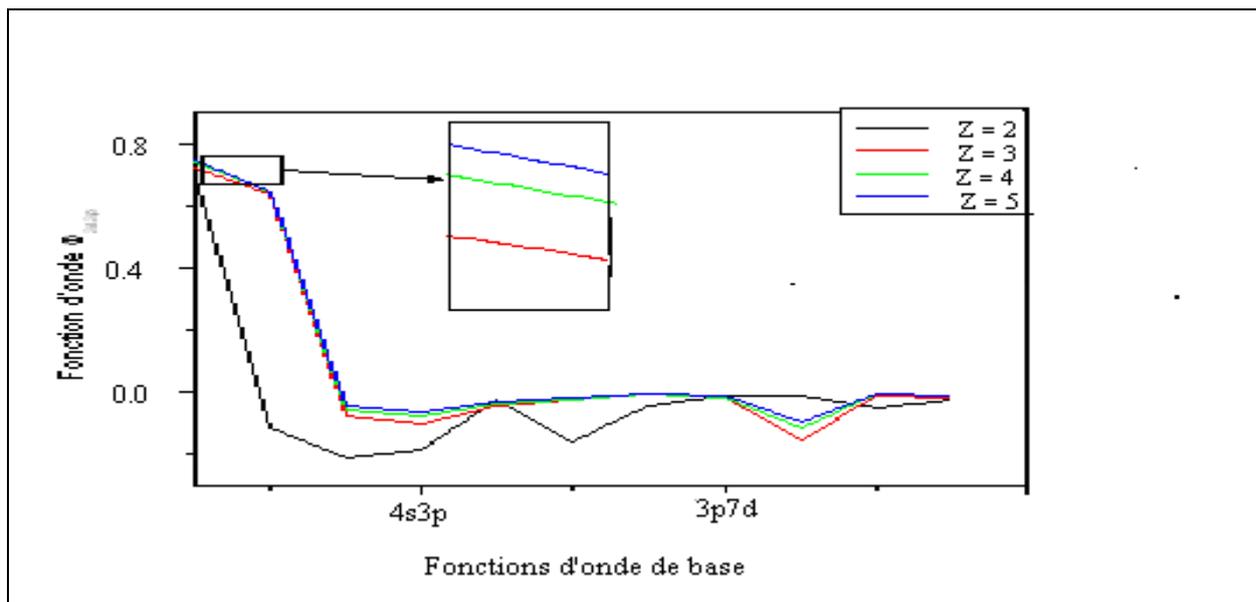


Figure 9 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $1P^0$ des systèmes héliumoides $Z = 2-5$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

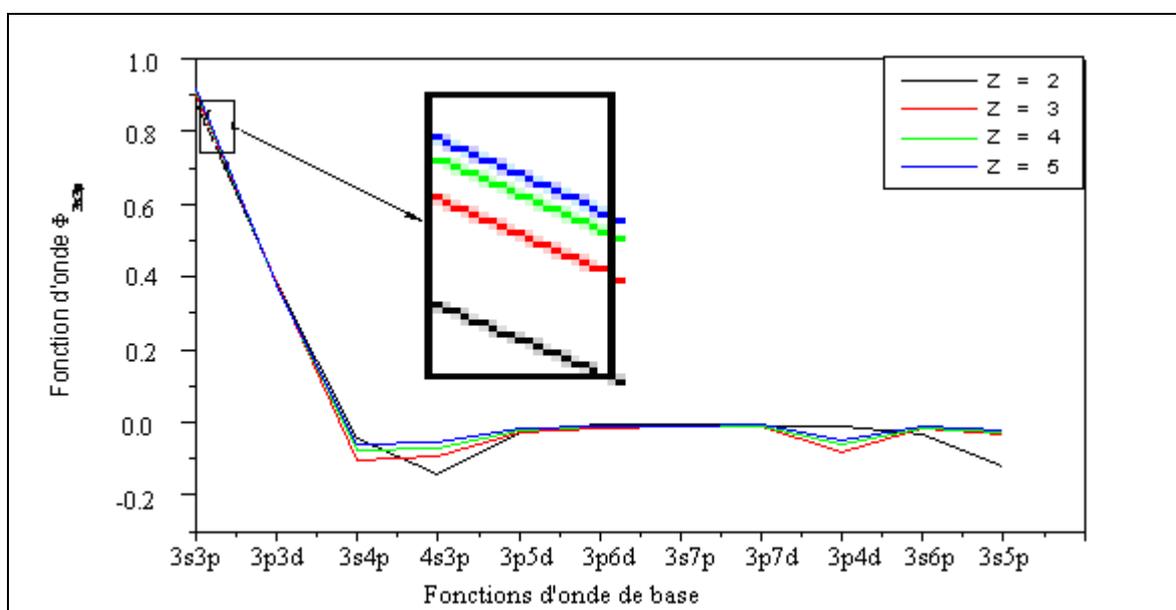


Figure 10 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $3P^0$ des systèmes héliumoides $Z = 2-5$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

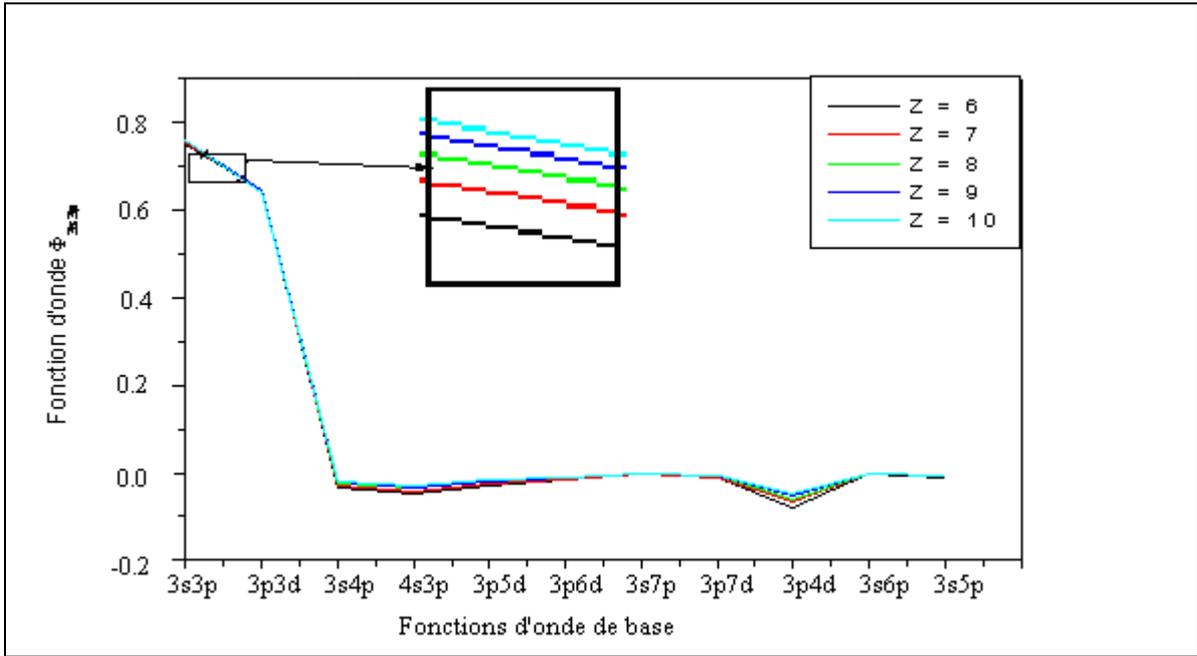


Figure 11 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $1P^0$ des systèmes héliumoides $Z = 6-10$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

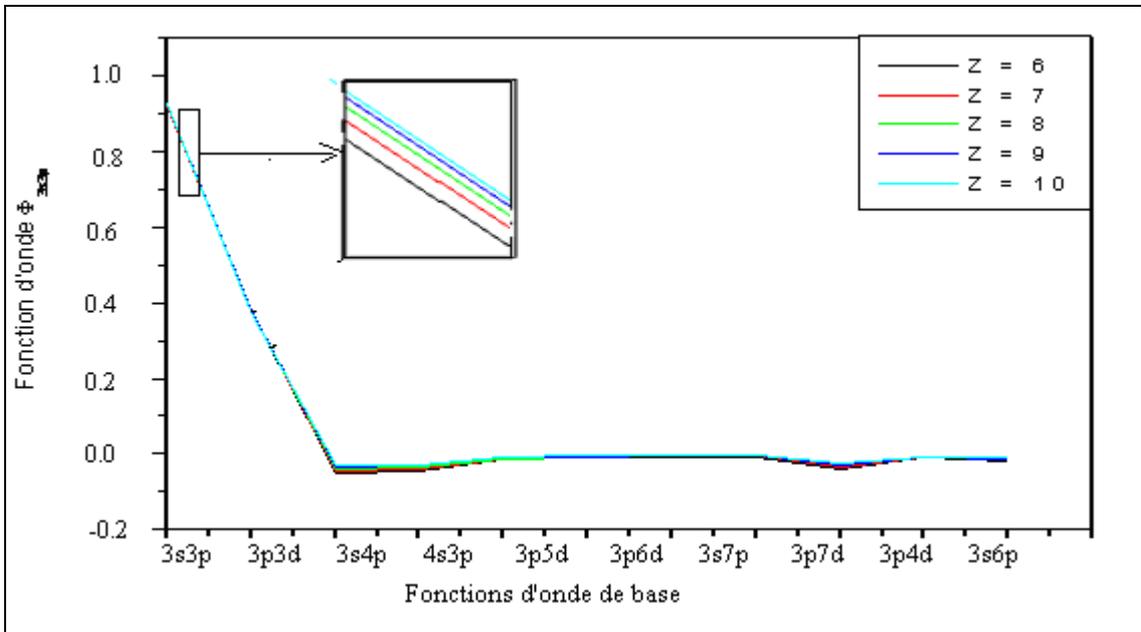


Figure 12 : Fonctions d'onde des états d'autoionisation $3P^0$ des systèmes héliumoides $Z = 6-10$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel

Nous présentons également, sur les figures 3-6 les courbes des fonctions d'onde des trois premières résonances, des états $^1P^0$, de l'hélium He et de l'ion héliumoïde Ne^{8+} convergeant vers les seuils d'excitations $N = 2$ et $N = 3$ de l'ion résiduel

Dans ces figures on note une très grande corrélation pour $2s2p$ et pour $3s3p$ ($N = n'$) car ces deux électrons sont sur la même couche (mais ne sont pas sur la même sous couche) ce qui réduit leur distance et augmente le rapport $1/r_{12}$. Les états $2s3p$, $2s5p$, $3s4p$, $3s5p$, semblent osciller autour d'une valeur de faible corrélation. Nous constatons également au niveau de ces figures que les états $2s2p$ et $3s3p$ sont fortement couplés par interaction électron-électron $1/r_{12}$. Ces états présentent un très grand effet de corrélation presque égale à 1. Au-delà de $2p4d$ on ne ressent presque plus ces effets, c'est dire que lorsque les électrons sont proches du noyau, ils présentent une importante corrélation et un faible écrantage. Lorsque les électrons sont assez éloignés du noyau leurs effets de corrélation sont inexistantes, et ont un très grand écrantage.

Nous avons observé sur les figures de 7 à 12 que la stabilité des fonctions d'onde dépend du choix de la base et de la charge nucléaire Z du système héliumoïde considéré. Au fur et à mesure que la charge nucléaire Z du système héliumoïde augmente, la stabilité des fonctions d'onde est obtenue pour des bases de plus en plus petites.

Pour une base donnée, les fonctions d'onde des états $^3P^0$ sont beaucoup plus stables que celles des états $^1P^0$. Ceci pourrait s'expliquer pour les états $^3P^0$ par le principe d'exclusion de Pauli qui n'admet pas le recouvrement des orbitales des deux électrons lorsqu'ils ont le même spin. Dans ce cas il y a moins de mixage des configurations du fait de la faiblesse relative de l'interaction électron-électron.

CHAPITRE II
PARAMÈTRES DE RÉSONANCE SOUS LES
SEUILS D'EXCITATION $N=2, 3$

II.1. /- Effet de la répulsion coulombienne entre les deux électrons des systèmes héliumoides : intégrale d'échange

Soit H l'Hamiltonien d'un système héliumoides :

$$H = H_0 + W \quad (\text{II.1.a})$$

avec

$$H_0 = \frac{P_1^2}{2m_e} + \frac{P_2^2}{2m_e} + V_c(r_1) + V_c(r_2) \quad (\text{II.1.b})$$

$$W = -\frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} - V_c(r_1) - V_c(r_2) \quad (\text{II.1.c})$$

En écrivant la fonction d'onde de la façon suivante :

$$\begin{aligned} & \left| n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S \right\rangle \\ & = c \left\{ \left[1 - (-1)^{S+1} P_{21}^{(0)} \right] \left| 1: n, l; 2: n', l'; L, M_L \right\rangle \right\} \otimes \left| S, M_S \right\rangle \quad (\text{II.2}) \end{aligned}$$

On note d'abord que W commute avec les quatre observables L^2 , L_z , S^2 , S_z qui forment un ECOC à l'intérieur de $\xi(n, l; n', l')$; où $\xi(n, l; n', l')$ est le sous espace associé à la configuration $nl, n'l'$ obtenu après antisymétrisation des kets du sous espace $\xi_{n1}(1) \otimes \xi_{n'1'}(2)$ de ξ . Il s'ensuit que la restriction de W à l'intérieur de $\xi(n, l; n', l')$ est d'emblée diagonale dans la base $\{|n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S\rangle\}$ et a pour valeurs propres : $\delta(L, S)$ d'où :

$$\delta(L, S) = \left\langle n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S \left| W \right| n, l; n', l'; L, M_L; S, M_S \right\rangle \quad (\text{II.3})$$

Puisque $\delta(L, S)$ ne dépend ni de M_L ni de M_S alors W peut commuter non seulement avec L_z et S_z mais également avec L_{\pm} et S_{\pm} : W est donc un opérateur scalaire à la fois dans l'espace des états orbitaux et dans celui de spin. Dans la configuration $1s2s$ de l'atome d'hélium : $N=1, n'=2, l=l'=L=l+l'=0$ obtient : $|1:1,0;2:2,0;L=0,M_L=0\rangle = |1:1,0,0;2:2,0,0\rangle = |1:1s;2:2s\rangle$ si nous désignons par $|^3S, M_S\rangle$ et $|^1S, 0\rangle$ les états correspondants aux deux termes spectraux 3S et 1S issus de la configuration $1s2s$, on obtient :

$$\left| ^3S, M_S \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(1 - P_{21}^{(0)}) |1:1s;2:2s\rangle \right] \otimes \left| S=1, M_S = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{Bmatrix} \right\rangle \quad (\text{II.4.a})$$

$$\left| ^1S, M_S = 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(1 + P_{21}^{(0)}) |1:1s;2:2s\rangle \right] \otimes \left| S=0, M_S = 0 \right\rangle \quad (\text{II.4.b})$$

Soient $\delta(^3S)$ et $\delta(^1S)$ les valeurs propres respective des états triplets et singulets obtenues en utilisant les relations (II.4.a) et (II.4.b) avec :

$$\delta(^3S) = \frac{1}{2} \langle 1:1s; 2:2s | (1 - P_{21}^{(0)}) W (1 - P_{21}^{(0)}) | 1:1s; 2:2s \rangle \quad (\text{II.4})$$

$$\delta(^1S) = \frac{1}{2} \langle 1:1s; 2:2s | (1 + P_{21}^{(0)}) W (1 + P_{21}^{(0)}) | 1:1s; 2:2s \rangle \quad (\text{II.5})$$

Posons maintenant :

$$\delta(^3S) = K - J \quad (\text{II.6.a})$$

et

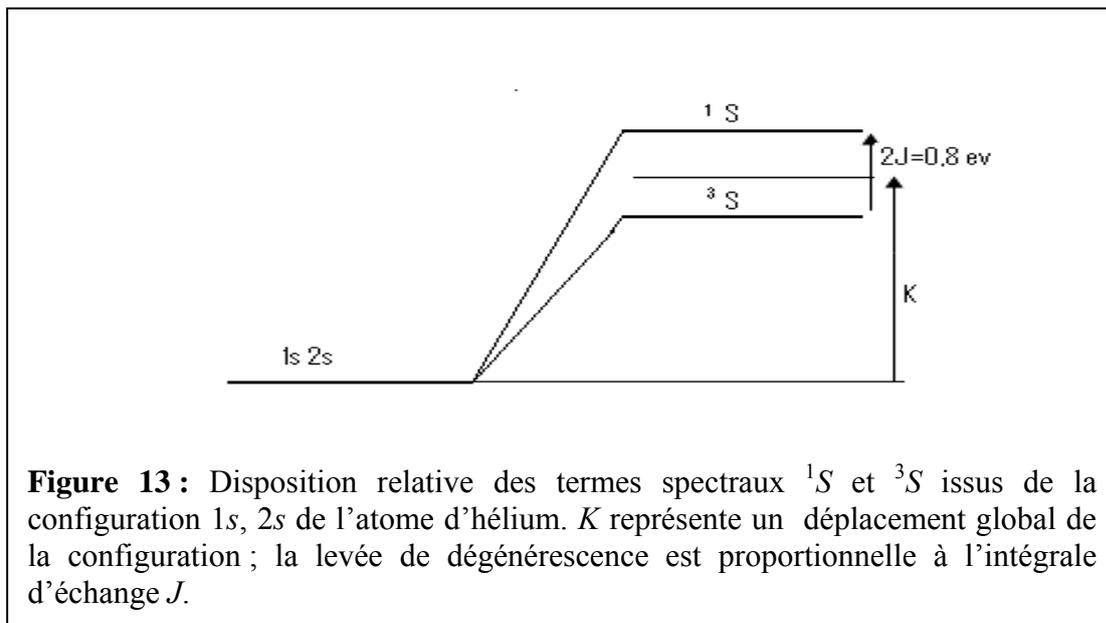
$$\delta(^1S) = K + J \quad (\text{II.6.b})$$

où K et J sont donnés par :

$$K = \langle 1:1s; 2:2s | W | 1:1s; 2:2s \rangle \quad (\text{II.6.c})$$

$$J = \langle 1:1s; 2:2s | P_{21}^{(0)} W | 1:1s; 2:2s \rangle = \langle 1:2s; 2:1s | W | 1:1s; 2:2s \rangle \quad (\text{II.6.d})$$

Le terme K représente donc un déplacement global de l'énergie des deux termes et ne contribue pas à leur séparation. Par contre, J est plus intéressant car il introduit une différence d'énergie entre les termes 3S et 1S (fig.13) [17].



Reportons l'expression de W en (II.1.c) dans celle de J , il apparaît des termes de la forme :

$$\langle 1:2s;2:1s|V_c(r_1)|1:1s;2:2s\rangle = \langle 1:2s|V_c(r_1)|1:1s\rangle\langle 2:1s|2:2s\rangle \quad (\text{II.7})$$

Or le produit scalaire des deux états orthogonaux $\langle 2:1s|2:2s\rangle$ est nul, de sorte que l'expression ci-dessus est égale zéro. Le même type de raisonnement montre que les termes qui proviennent des opérateurs $V_c(r_2)$, $-2e^2/r_1$, $-2e^2/r_2$, sont également nuls ; en effet, chacun de ces opérateurs n'agit que dans l'espace des états d'un seul électron alors que l'état des deux électrons est différent dans l'expression de J ; d'où J peut s'écrire de la façon suivante :

$$J = \langle 1:2s;2:1s|\frac{e^2}{|r_1-r_2|}|1:1s;2:2s\rangle \quad (\text{II.8})$$

J ne fait donc intervenir que la répulsion électrostatique entre les électrons. Soient $\varphi_{n,l,m}(r)$ les fonctions d'ondes associées aux états $|n,l,m\rangle$ (états stationnaires d'un électron dans le potentiel central V_c) :

$$\varphi_{nlm}(r) = \langle r|n,l,m\rangle$$

en représentation $\{|r\rangle\}$, le calcul de J donne :

$$J = \int d^3r_1 \int d^3r_2 \varphi_{2,0,0}^*(r_1) \varphi_{1,0,0}^*(r_2) \frac{e^2}{|r_1-r_2|} \varphi_{1,0,0}(r_1) \varphi_{2,0,0}(r_2) \quad (\text{II.9})$$

Cette intégrale est appelée « intégrale d'échange » et est positive. On montre que l'énergie associée à la fonction d'onde d'espace antisymétrique est inférieure à celle de la fonction d'onde symétrique. Ainsi, un état triplet est d'énergie inférieure à celle de l'état singulet de même configuration. Considérons les deux fonctions d'onde $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$.

$$|\Psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|l'_1(1), l'_2(2); L', M_L'\rangle - \varepsilon (-1)^{l'_1+l'_2-L'} |l'_2(1), l'_1(2); L', M_L'\rangle \right] \otimes |S', M_S'\rangle \quad (\text{II.10.a})$$

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|l_1(1), l_2(2); L, M_L\rangle - \varepsilon (-1)^{l_1+l_2-L} |l_2(1), l_1(2); L, M_L\rangle \right] \otimes |S, M_S\rangle \quad (\text{II.10.b})$$

avec

$$\varepsilon = \frac{1}{2} (1 + 4(S_1 \cdot S_2)) \quad (\text{II.10.c})$$

Posons également :

$$V = \frac{e^2}{r_{12}} \quad (\text{II.12})$$

La matrice de V n'a que des éléments diagonaux autrement dit les éléments de matrice ne sont différents de zéro que pour $L = L'$; $M_L = M_L'$; $S = S'$; $M_S = M_S'$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | V | \Psi' \rangle &= \langle S, M_S | \otimes \langle l_1, l_2; L, M_L | V | l'_1, l'_2; L, M_L \rangle \otimes | S, M_S \rangle \\ &= \langle l_1, l_2; L, M_L | V | l'_1, l'_2; L, M_L \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

En utilisant les expressions explicites de $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$, on obtient :

$$\langle \Psi | V | \Psi' \rangle = \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\langle l_1(1), l_2(2); L, M_L | V | l'_1(1), l'_2(2); L, M_L \rangle \\ &+ \varepsilon^2 (-1)^{l_1+l_2+l'_1+l'_2-2L} \langle l_2(1), l_1(2); L, M_L | V | l'_2(1), l'_1(2); L, M_L \rangle \\ &- \varepsilon (-1)^{l'_1+l'_2-L} \langle l_1(1), l_2(2); L, M_L | V | l'_2(1), l'_1(2); L, M_L \rangle \\ &- \varepsilon (-1)^{l_1+l_2-L} \langle l_2(1), l_1(2); L, M_L | V | l'_1(1), l'_2(2); L, M_L \rangle \end{aligned} \right] \quad (\text{II.14})$$

En tenant compte du fait que les fonctions d'onde $|l_1(1), l_2(2); L, M_L\rangle$ contiennent une partie radiale de la forme :

$$\left(\frac{1}{r_1 r_2} \right) P_{n_1 l_1}(r_1) P_{n_2 l_2}(r_2) \quad (\text{II.15})$$

La fonction potentielle V peut être développée sous forme d'un polynôme de Legendre, et on obtient :

$$V = \frac{e^2}{r_{12}} = 4\pi e^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{2k+1} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} Y_1^{(k)} Y_2^{(k)} \quad (\text{II.16})$$

Où $r_{<}$ et $r_{>}$ représente la plus petite et la plus grande valeur entre les normes des vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 ; $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$.

Par ailleurs :

$$\begin{aligned}
& \langle l_1(1), l_2(2); L, M_L | Y_1^{(k)} Y_2^{(k)} | l'_1(1), l'_2(2); L, M_L \rangle \\
& = (-1)^{l'_1+l_2+L} \langle l_1(1) | Y_1^{(k)} | l'_1(1) \rangle \langle l_2(2) | Y_2^{(k)} | l'_2(2) \rangle \begin{pmatrix} l'_1 & l'_2 & L \\ l_2 & l_1 & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.17.a})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle l_2(1), l_1(2); L, M_L | Y_1^{(k)} Y_2^{(k)} | l'_1(1), l'_2(2); L, M_L \rangle \\
& = (-1)^{l'_2+l_1+L} \langle l_2(1) | Y_1^{(k)} | l'_2(1) \rangle \langle l_1(2) | Y_2^{(k)} | l'_1(2) \rangle \begin{pmatrix} l'_2 & l'_1 & L \\ l_1 & l_2 & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.17.b})
\end{aligned}$$

Or :

$$\langle l_1(1) | Y_1^{(k)} | l'_1(1) \rangle = \langle l_2(1) | Y_1^{(k)} | l'_2(1) \rangle = \langle l_2 | Y^k | l'_2 \rangle \quad (\text{II.18})$$

Il découle aussi des propriétés de symétrie des 6j-symboles que :

$$\begin{pmatrix} l'_1 & l'_2 & L \\ l_2 & l_1 & K \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l'_2 & l'_1 & L \\ l_1 & l_2 & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.19})$$

Nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
& \langle l_1(1), l_2(2); L, M_L | Y_1^{(k)} Y_2^{(k)} | l'_1(1), l'_2(2); L, M_L \rangle \\
& = (-1)^{l'_1+l_2+L} \langle l_1 | Y_1^k | l'_1 \rangle \langle l_2 | Y_2^k | l'_2 \rangle \begin{pmatrix} l'_1 & l'_2 & L \\ l_2 & l_1 & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.20})
\end{aligned}$$

Comme $\varepsilon^2 = 1$, il s'en suit pour les deux derniers éléments de matrice que :

$$\begin{aligned}
& -\varepsilon (-1)^{l'_1+l'_2-L} \langle l_1(1), l_2(2); L, M_L | Y_1^{(k)} Y_2^{(k)} | l'_2(1), l'_1(2); L, M_L \rangle \\
& = -\varepsilon (-1)^{l'_1-l'_2-L} (-1)^{l'_2+l_2-L} \langle l_1(1) | Y_1^{(k)} | l'_2(1) \rangle \langle l_2(2) | Y_2^{(k)} | l'_1(2) \rangle \begin{pmatrix} l'_2 & l'_1 & L \\ l_2 & l_1 & K \end{pmatrix} \\
& = -\varepsilon (-1)^{l'_1+l_2} \langle l_1 | Y^K | l'_2 \rangle \langle l_2 | Y^K | l'_1 \rangle \begin{pmatrix} l'_2 & l'_1 & L \\ l_1 & l_2 & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.21})
\end{aligned}$$

Ce qui permet d'écrire :

$$E_c = \langle l_1, l_2; L, M_L | V | l'_1, l'_2; L, M_L \rangle \quad (\text{II.22.a})$$

Avec E_c représentant une grandeur énergétique qui se met sous la forme :

$$E_c = \langle \Psi | V | \Psi' \rangle \quad (\text{II.22.a.b})$$

Aussi E_c est donné par :

$$E_c = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2k+1} \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} R^k(n_1 l_1, n_2 l_2; n'_1 l'_1, n'_2 l'_2) \cdot 2(-1)^{l'_1+l_2+L} \langle l_1 | Y^k | l'_1 \rangle \langle l_2 | Y^k | l'_2 \rangle \begin{pmatrix} l'_1 & l'_2 & L \\ l_2 & l_1 & K \end{pmatrix} \\ -\varepsilon R^k(n_2 l_2, n_1 l_1; n'_1 l'_1, n'_2 l'_2) \cdot 2(-1)^{l'_1+l_2} \langle l_1 | Y^k | l'_2 \rangle \langle l_2 | Y^k | l'_1 \rangle \begin{pmatrix} l'_1 & l'_2 & L \\ l_1 & l_2 & K \end{pmatrix} \end{array} \right] \quad (\text{II.22.b})$$

Nous utiliserons les fonctions R^K définies comme suit :

$$\begin{aligned} R^K(n_1 l_1, n_2 l_2; n'_2 l'_2, n'_1 l'_1) \\ = e^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P_{n_1 l_1}(r_1) P_{n'_2 l'_2}(r_1) P_{n_2 l_2}(r_2) P_{n'_1 l'_1}(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \end{aligned} \quad (\text{II.23.a})$$

$$\begin{aligned} R^K(n_1 l_1, n_2 l_2; n'_1 l'_1, n'_2 l'_2) \\ = e^2 \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_<^k}{r_>^{k+1}} P_{n_1 l_1}(r_1) P_{n'_1 l'_1}(r_1) P_{n_2 l_2}(r_2) P_{n'_2 l'_2}(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \end{aligned} \quad (\text{II.23.b})$$

$$R^K(n_1 l_1, n_2 l_2; n'_1 l'_1, n'_2 l'_2) = R^K(n_2 l_2, n_1 l_1; n'_2 l'_2, n'_1 l'_1) = F^K \quad (\text{II.24.a})$$

$$R^K(n_1 l_1, n_2 l_2; n'_2 l'_2, n'_1 l'_1) = R^K(n_2 l_2, n_1 l_1; n'_1 l'_1, n'_2 l'_2) = G^K \quad (\text{II.24.b})$$

D'où on obtient :

$$E_c = \sum_{k=0}^{\infty} \left[\begin{array}{c} (-1)^{l_1+l_1'+L} [l_1, l_2; l_1', l_2'] \begin{pmatrix} l_1 & K & l_1' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & K & l_2' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1' & l_2' & L \\ l_2 & l_1 & K \end{pmatrix} F^k \\ -\varepsilon (-1)^{l_1+l_1'} [l_1, l_2; l_1', l_2'] \begin{pmatrix} l_1 & K & l_2' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & K & l_1' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1' & l_2' & L \\ l_1 & l_2 & K \end{pmatrix} G^k \end{array} \right] \quad (\text{II.25})$$

soit :

$$\langle n_1 l_1, n_2 l_2; SLM_S M_L | V | n_1' l_1', n_2' l_2'; SLM_S M_L \rangle = \sum_k a^k F^k \pm b^k G^k \quad (\text{II.26})$$

Nous pouvons réécrire E_c de la manière la plus simple Soit :

$$E_c = \sum_{k=0}^{\infty} (a^k F^k \pm b^k G^k) = \begin{cases} \sum_{k=0}^{\infty} (a^k F^k + b^k G^k) & \text{état singulet} \\ \sum_{k=0}^{\infty} (a^k F^k - b^k G^k) & \text{état triplet} \end{cases} \quad (\text{II.27})$$

Les coefficients a^k et b^k ne dépendent que des variables angulaires individuelles des deux électrons et peuvent être déterminés par l'application du théorème de Wigner-Eckart. Les coefficients a^k et b^k ont pour expression :

$$a^k = (-1)^{l_2+l_1'+L} \langle l_1 || C^k || l_1' \rangle \langle l_2 || C^k || l_2' \rangle \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ & & \\ l_2' & l_1' & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.28})$$

Les valeurs de K correspondants à a^k sont telles que :

$$\max \left(\begin{array}{c} |l_1 - l_1'| \\ |l_2 - l_2'| \end{array} \right) \leq K \leq \min \left(\begin{array}{c} (l_1 + l_1') \\ (l_2 + l_2') \end{array} \right) \quad (\text{II.29.a})$$

$$\left. \begin{array}{c} l_1 + l_2 + K \\ l_2 + l_2' + K \end{array} \right\} \text{entiers pairs} \quad (\text{II.29.b})$$

$$b^k = (-1)^{l_1+l_2'} \langle l_1 || C^k || l_2' \rangle \langle l_2 || C^k || l_1' \rangle \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ & & \\ l_1' & l_2' & K \end{pmatrix} \quad (\text{II.30})$$

Les paramètres de K pour b^k ayant pour valeurs :

$$\max \begin{pmatrix} |l_1 - l_2| \\ |l_1' - l_2| \end{pmatrix} \leq K \leq \min \begin{pmatrix} (l_1 + l_2) \\ (l_1' + l_2) \end{pmatrix} \quad (\text{II.31.a})$$

$$\left. \begin{matrix} l_1 + l_2 + K \\ l_2 + l_1' + K \end{matrix} \right\} \text{entiers pairs} \quad (\text{II.31.b})$$

Avec L prenant les valeurs suivantes :

$$\max \begin{pmatrix} |l_1 - l_2| \\ |l_1' - l_2| \end{pmatrix} \leq L \leq \min \begin{pmatrix} (l_1 + l_2) \\ (l_1' + l_2) \end{pmatrix} \quad (\text{II.32})$$

où les $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_2' & l_1' & K \end{pmatrix}$ sont les 6j-symboles de Wigner associés aux calculs

des coefficients. Quant aux éléments de matrices réduits $\langle l_1 || C^k || l_1' \rangle$, ils sont définis comme suit :

$$\langle l_1 || C^k || l_1' \rangle = (-1)^{l_1} \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)(2K + 1)(2l_1' + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & K & l_1' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.33})$$

avec $\begin{pmatrix} l_1 & K & l_1' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ les 3j-symboles de Wigner qui ne sont différents de

zéro que pour les valeurs de K telles que $|l_1 + l_1'| \leq K \leq |l_1 - l_1'|$ et $(K + l_1 + l_1') = 2i$; avec i entier. Ces conditions restreignent considérablement les valeurs de k pour lesquelles a^k et b^k seront différents de zéro [16].

Nous donnons ci-dessous quelques éléments matriciels de l'opérateur électrostatique V liant les termes de certaines configurations à deux électrons [1]:

$$\langle sp|V|pd \rangle = F^0 + \frac{1}{3}G^1$$

$$\langle sp|V|df \rangle = \frac{\sqrt{2}}{3}F^1 + \frac{\sqrt{2}}{5}G^2$$

$$\langle sp|V|fg \rangle = -\frac{2}{7}F^3 - \frac{2}{9}G^4$$

(II.34)

II.2./- Calcul des intégrales radiales R^K de Slater

Les éléments de matrices de la répulsion coulombienne $V_{ij} = \sum_{i < j} e^2 / r_{ij}$ peuvent être réduits en produit d'élément de matrice angulaire et d'élément de matrice radiale. L'élément de matrice radiale est normalement désigné par R^K définie en (II.23.a) et nommé : intégrale radiale de Slater et peut être écrite comme suit :

$$R^K(n_1 l_1, n_2 l_2; n_1' l_1', n_2' l_2')$$

$$= \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{n_1 l_1}(r_1) P_{n_2 l_2}(r_1) P_{n_2' l_2'}(r_2) P_{n_1' l_1'}(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \quad (\text{II.35.a})$$

Soit $a = n_1 l_1$; $b = n_2 l_2$; $c = n_2' l_2'$ et $d = n_1' l_1'$ alors de manière plus générale R^K peut s'écrire sous la forme suivante :

$$R^K(ab, cd) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} R_a(r_1) R_b(r_2) R_c(r_1) R_d(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \quad (\text{II.35})$$

où $r_{>}$ et $r_{<}$ représente la plus petite et la plus grande valeur entre les normes des vecteurs \vec{r}_1 et \vec{r}_2 ; $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$. L'intégrale peut se décomposer en une combinaison linéaire :

$$\int_0^\infty \int_0^\infty f(r_1) g(r_2) dr_1 dr_2$$

$$= \int_0^\infty f(r_1) dr_1 \int_0^{r_1} g(r_2) dr_2 + \int_0^\infty g(r_2) dr_2 \int_0^{r_2} f(r_1) dr_1 \quad (\text{II.36})$$

Coulson et Sharma ont effectué les calculs pour $f(r_1) = r_1^m e^{-\alpha r_1}$, $g(r_2) = r_2^n e^{-\beta r_2}$ et pour $k \leq \min(n-1; m-1)$:

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^m e^{-\alpha r_1} r_2^n e^{-\beta r_2} dr_1 dr_2 = \sum_{i=0}^{m-k-k} \frac{(m-k-1)!}{(m-k-1-i)!} \frac{(m+n-1-i)!}{\alpha^{i+1} (\alpha + \beta)^{m+n-i}}$$

$$+ \sum_{i=0}^{n-k-1} \frac{(n-k-1)!}{(n-k-1-i)!} \frac{(m+n-1-i)!}{\beta^{i+1} (\alpha + \beta)^{m+n-i}} \quad (\text{II.37})$$

Les fonctions d'onde radiales manipulées dans les intégrales de Slater se présentent comme une combinaison linéaire des fonctions $f(r_1) = r_1^m e^{-\alpha r_1}$ et $g(r_2) = r_2^n e^{-\beta r_2}$. Notons aussi la relation suivante :

$$\int_0^{\infty} r_1^m e^{-\alpha r_1} \int_0^r r_2^n e^{-\beta r_2} dr_2 dr_1 = \frac{m!n!}{\alpha^{m+1} \beta^{n+1}} - \sum_{s=0}^n \frac{1}{\beta^{s+1}} \frac{(m+n-s)!}{(\alpha+\beta)^{m+n+1-s}} \quad (\text{II.38})$$

Butler et al [30] ont appliqué ces calculs entre deux configurations (ab) et (cd) et ont obtenu les résultats suivants :

$$R^k(ab, cd) = H(ab, cd) \sum_{s=0}^{n_a-l_a-1} \sum_{s_1=0}^{n_b-l_b-1} \sum_{s_2=0}^{n_c-l_c-1} \sum_{s_3=0}^{n_d-l_d-1} A(s)B(s_1)C(s_2)D(s_3)I(s, s_1, s_2, s_3) \quad (\text{II.39})$$

Dans l'expression (II.39) a , b , c et d représentent les états électroniques des électrons :

$$H(ab, cd) = \frac{2^4 Z^9}{(n_a n_b n_c n_d)^2} \left[(n_a - l_a - 1)! (n_b - l_b - 1)! (n_c - l_c - 1)! (n_d - l_d - 1)! \right]^{1/2} \otimes \left[(n_a + l_a)! (n_b + l_b)! (n_c + l_c)! (n_d + l_d)! \right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{n_a} \right)^{l_a} \left(\frac{2Z}{n_b} \right)^{l_b} \left(\frac{2Z}{n_c} \right)^{l_c} \left(\frac{2Z}{n_d} \right)^{l_d} \quad (\text{II.40})$$

$$A(s) = \frac{(-1)^s \left(\frac{2Z}{n_a} \right)^s}{(n_a - l_a - 1 - s)! (2l_a + 1 + s)! s!} \quad (\text{II.41})$$

$B(s_1)$, $C(s_2)$ et $D(s_3)$ sont définis par des expressions similaires à celle de $A(s)$.

$$I(s, s_1, s_2, s_3) = \frac{q!}{\alpha^{q+1} \beta^{p+1}} \left(\frac{\beta}{\alpha + \beta} \right)^{p+1} \sum_{r=0}^q \frac{(p+r)!}{r!} \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right)^r + \frac{y!}{\alpha^{x+1} \beta^{y+1}} \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta} \right)^{x+1} \sum_{r=0}^y \frac{(x+r)!}{r!} \left(\frac{\beta}{\alpha + \beta} \right)^r \quad (\text{II.42})$$

avec:

$$p = l_b + l_d + 2 + k + s_1 + s_3 \quad (\text{II.43.a})$$

$$q = l_a + l_c + 1 - k + s + s_2 \quad (\text{II.43.b})$$

$$x = l_a + l_c + 2 + k + s + s_2 \quad (\text{II.43.c})$$

$$y = l_b + l_d + 1 - k + s_1 + s_3 \quad (\text{II.43.d})$$

$$\alpha = (n_a + n_c) / n_a n_c \quad (\text{II.43.e})$$

$$\beta = (n_b + n_d)/n_b n_d. \quad (\text{II.43.f})$$

Les énergies d'excitation sont aussi obtenues par la diagonalisation de la matrice de l'interaction coulombienne du système à deux électrons considéré, dans une base où les fonctions propres de l'Hamiltonien sont sous la forme de produits antisymétriques de fonctions coulombiennes dans le champ de charge Z . Les principaux résultats des calculs concernant les énergies d'excitation, sont regroupées dans les tableaux 2 à 5 ci-après.

Tableau 2: Energies d'excitations en électronvolts (eV) des états d'autoionisation $^1P^0$ des systèmes héliumoïdes de charge $Z \leq 6$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

Z	3s3p $^1P^0$				3s4p $^1P^0$		3p3d $^1P^0$	
	^a W.A	^b Ho	^c Sakho et al	^d Biaye et al	^a W.A	^c Sakho et al	^a W.A	^b Ho
2	69.900	69.87	69.91	70.01	71.22	71.35	72.00	-
3	175.56	175.49	175.63	175.35	179.40	179.68	178.38	178.10
4	329.62	329.50	330.54		337.28	337.69	333.77	333.35
5	532.10	531.92	532.15		544.89	545.39	537.59	537.92
6	783.03	782.73			802.28		789.88	789.15

^a,Wagué A, Z. Phys. Atoms, Molecules and Clusters 6, 337 (1987)

^b,Ho, J. Phys. B **12**, 387-399 (1979)

^c,Sakho et al, Eur.Phys.J.D. **47**, 37- 44 (2008)

^dBiaye et al, Phys.Scr.**74**, 180 (2005).

Tableau 3: Energie d'excitations en unité atomique (ua) des états d'autoionisation $^1P^0$ du système héliumoïde $Z = 8$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel. Matrice (17 x17).

Etats	^a Ndao A. S.	^b Bachau et al	^c Chetoui et al	^d Bachau
3s 3p	6.624	6.628	6.623	6.624
3p 3d	6.273	6.286	6.286	6.276
3s 4p	5.297	5.020	5.020	
4s 3p	5.198	5.297	5.296	5.296
4p 3d	5.192	5.204	5.201	
3p 4d	5.004	5.199	5.198	
3d 4f	4.979	4.986	4.995	
3s 5p	4.640			
5p 3d	4.586	4.596		
5s 3p	4.578	4.641		
3p 5d	4.484	4.583		

^a,A. S Ndao, Non publié.

^bBachau et al, At. Data Nucl. Data Tables 48 168-213 (1991)

^cChetoui et al, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23 3659-75 (1990)

^dBachau, Thesis Bordeaux (1983).

Tableau 4 : Energies d'excitations en électronvolts (eV) des états d'autoionisation $^3P^0$ des systèmes héliumoïdes de charge $Z \leq 6$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

états	$3s3p \ ^3P^0$			$3s5p \ ^3P^0$			$3p3d \ ^3P^0$	
	^a W. A	^b Ho	^c Oberoi	^a W. A	^c Oberoi	^d Callaway	^a W. A	^b Ho
Z								
2	69.45	-	69.44	71.42	71.39	71.39	7.63	7.58
3	174.80	174.78	175.63	184.56			176.76	176.65
4	328.54	328.46	330.54	341.53			331.28	331.11
5	532.70	532.56	532.15	551.76			534.22	533.98
6	781.30	781.04		812.36			785.60	785.23

^a,Wagué A, Z. Phys. Atoms, Molecules and Clusters 6, 337 (1987)

^b,Ho, J. Phys. B **12**, 387-399 (1979)

^cOberoi, J. Phys. B **5**, 1120-1125 (1972)

^d,Callaway, J. Phys. Lett. 66 A, 201-203 (1978)

Tableau 5 : Energie d'excitations en unité atomique (ua) des états d'autoionisation $^3P^0$ du système héliumoïde $Z = 8$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel. Matrice (17 x17).

	^a A. S. Ndao	^b Bachau et al	^c Bachau
Etats			
3s 3p	6.712	6.714	6.712
3p 3d	6.496	6.502	6.498
4s 3p	5.261	5.262	5.261
3s 4p	5.255	5.135	
3p 4d	5.136	5.139	
4p 3d	5.126	5.261	
3d 4f	5.026	5.031	
3s 5p	4.623		
5s 3p	4.617	4.628	
5p 3d	4.551	4.618	
3p 5d	4.545	4.561	

^a,A. S Ndao, Non publié

^bBachau et al, At. Data Nucl. Data Tables 48 168-213 (1991)

^cBachau, Thesis Bordeaux (1983)

^dFaye N A B and Wagué A 1994 Z. Phys.

Les énergies d'excitation calculées pour les systèmes héliumoïdes de charge nucléaire $5 \leq Z \leq 10$ sont très stables par rapport aux méthodes utilisées; cette stabilité devenant plus visible avec l'augmentation de Z .

II.3./- Largeurs partielles et largeurs totales

La largeur d'un niveau d'autoionisation est un paramètre très important pour la description des processus dynamiques de la désexcitation des résonances, car elle est directement liée à la durée de vie de l'état autoionisant. Les largeurs partielles et totales sont définies par les expressions suivantes :

$$\Gamma_j^\mu = 2\pi \left| \left\langle \Phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Phi_j(E) \right\rangle \right|^2 \quad (\text{II.44})$$

$$\Gamma^{tot} = \sum_j \Gamma_j^\mu \quad (\text{II.45})$$

D'après ces formules, le calcul des largeurs des résonances autoionisantes nécessite donc la connaissance des fonctions d'onde des états autoionisants Φ_μ et des différents canaux du continuum Φ_j . Dans le calcul pratique des éléments matriciels relatifs aux largeurs des états autoionisants, nous avons utilisé pour les fonctions d'onde des niveaux d'autoionisation les mêmes fonctions obtenues pour la détermination des énergies d'excitation des résonances. Pour ce qui concerne la fonction d'onde de l'état final (ion + électron) de l'ion héliumoïde, nous avons considéré l'électron libre avec un moment angulaire l dans le canal j , nous avons utilisée à la forme suivante :

$$R_{kl}(r) = \sqrt{\frac{2k}{\pi}} \frac{(2)^l (k)^l l!}{(2l+1)!} r^l e^{ikr} {}_1F_1(l+1, 2l+2; 2ikr) \quad (\text{II.46})$$

où ${}_1F_1(l+1, 2l+2; 2ikr)$ est une fonction hypergéométrique confluyente.

Le calcul des éléments matriciels relatifs aux largeurs des niveaux autoionisants, nécessite la connaissance des fonctions d'onde des états de résonance et celles des différents canaux ouverts du continuum [1].

Les calculs ont été effectués entre les configurations $2lnl'$ pour les états autoionisants et la configuration $1skp$ pour l'ion résiduel avec $l \leq 1$; $l' \leq 2$; $2 \leq n \leq 5$. En ce qui concerne les fonctions d'onde des états autoionisants, elles sont les mêmes que celles que nous avons obtenues lors de la détermination des énergies d'excitations.

Dans les tableaux 6 et 8 figurent les largeurs totales obtenues par la méthode de diagonalisation pour les dix sept premières résonances $^1P^0$

et $^3P^0$ de l'hélium sous le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion hydrogénoïde résiduel He^+ .

Cette concordance entre les valeurs obtenues est meilleure pour les états triplets que pour les états singulets. Ceci est sans doute lié à la stabilité des fonctions d'onde pour les états $^3P^0$.

Tableau 6 : Largeur totale en eV des états d'autoionisation $^1P^0$ du système héliumoïde $Z = 2$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel. Matrice (17 x17).

Etats	^a Ndao A. S.	^b Herrick and Sinanoglu]	Woodruff and Samson
3s3p	0.15012	0.1510	0.1780±0,012
3s4p	0.0006		
3p4d	0.0674	0.0680	≈ 0.0700
4s3p	0.0472		
4p3d	0.0009		
3p3d	0.0003		
5p3d	0.0243		
5s3p	0.0222		
3p6d	0.0007		
3d6f	0.0001		
6p3d	0.0492		
6s3p	0.0036		
3d5f	0.0075		
3s6p	0.0156		
3p5d	0.4043		
3s5p	0.1076		
3d4f	0.0707		

^a,Ndao A. S. non publié

^b,Woodruff, and Samson., Phys. Rev. Lett. **25**, 848-856 (1992)

^c,Herrick and Sinanoglu., Phys. Rev. A **11**, 97-110 (1975)

Tableau 7 : Largeur totale en eV des états d'autoionisation $^3P^0$ du système héliumöide $Z = 2$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel. Matrice (17 x17).

Etats	^a Ndao A. S	^b Herrick and Sinanoglu
3s3p	0.0983	0.0980
3p3d	0.0490	0.0490
3s5p	0.0131	0.0230
3s4p	0.0382	
4s3p	0.0131	
3p6d	0.0001	
3s6p	0.0249	
3d6f	0.0004	
4p3d	0.0001	
6p3d	0.0131	
5p3d	0.0007	
5s3p	≈ 0.0001	
6s3p	0.0001	
3d5f	0.2108	
3p5d	0.0171	
3p4d	0.0994	
3d4f	0.0313	

^a, Ndao A. S. non publié

^b, Herrick and Sinanoglu, Phys. Rev. **A 11** 97-110 (1975)

Tableau 8 : Durée de vie et Largeur totale des états d'autoionisation $^1P^0$ du système héliumoïde $Z = 2$ convergeant vers le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel. Matrice (17 x17).

^a Wagué. A		
Etats	Largeur totale en eV	Durée de vie en (s) $\times 10^{-15}$
3s3p	0.150 192 8	4.386 029
3s4p	0.000 569 3	1176.339 300
3p4d	0.067 401 8	9.773 477
4s3p	0.047 180 2	13.962 424
4p3d	0.000 900 6	731.456 810
3p3d	0.000 343 3	1918.875 600
5p3d	0.024 343 2	27.060 945
5s3p	0.022 177 4	29.703 662
3p6d	0.000 723 1	911.008 150
3d6f	0.000 048 1	13684.046 000
6p3d	0.049 159 9	13.400 149
6s3p	0.003 643 6	180.796 470
3d5f	0.007 458 6	88.320 864
3s6p	0.015 646 1	42.103 143
3p5d	0.404 332 3	1.629 229
3s5p	0.107 581 3	6.123 276
3d4f	0.070 667 1	9.321 876

^a,Wagué A, Z. Phys. Atoms, Molecules and Clusters 6, 337 (1987)

La largeur de la résonance, Γ est liée à sa durée de vie, τ par la relation : $\Gamma\tau = \hbar$. En fait les résonances sont des états de particules qui se désintègrent par voie forte, alors que les particules au sens courant sont soit stables, soit instables, mais par désintégration électromagnétique ou faible. Le type d'interaction par lequel s'effectue la désintégration donne directement la probabilité de celle-ci, donc sa durée de vie. Elle est plus probable si c'est par interaction forte (de l'ordre de $10^{-23} - 10^{-20}$) encore moins probable par interaction faible ($10^{-16} - 10^{-13}$).

II.4./- Calcul de la section efficace

Une section efficace est une grandeur physique correspondant à la probabilité d'interaction d'une particule pour une réaction donnée de la physique nucléaire ou de la physique atomique. L'unité de la section efficace est une unité spécifiée : le barn (b), avec : $1\text{b} = 10^{-24}\text{ cm}^2$.

Dans ce travail nous étudions la section efficace d'absorption, qui est une mesure de la probabilité d'un processus d'absorption. En d'autre terme la section efficace d'absorption est la capacité d'un atome ou d'une molécule d'absorber un photon d'une longueur d'onde donnée. Comme unité nous utilisons le cm^2 .

Nous effectuerons le calcul la section efficace dans les systèmes héliumoïdes par utilisation de la relation de Yu. K Zemtsov [32] sous le seuil d'excitation $N=3$ de l'ion résiduel.

La section efficace est donnée par l'expression suivante :

$$\sigma_0(n_3 \rightarrow n_1) = \frac{8 \pi a_0^2}{3 Z^4} \frac{n_1^7 n_3^5}{(n_1^2 - n_3^2)^5} \quad (\text{II.47})$$

Avec $\pi a_0^2 = 8,8.10^{-17}\text{ cm}^2$

Ci-après, nous dressons le tableau 9 des valeurs de la section efficace calculée pour les états d'autoionisation des systèmes héliumoïdes sous le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel.

Tableau 9 : Sections efficaces en cm^2 des états d'autoionisation des systèmes héliumoides de $Z \leq 10$ sous le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel (multiplié par 10^{-17}).

Z Etats	3s3p	4s3p	5p3d	6p3d	
2	0.09786037	0.031635279	0.014386059	0.007814956	1skp
	32.8364928	3.089382716	0.897535345	0.391441498	2skp
3	0.01933044	0.006248944	0.002841691	0.001543695	1skp
	6.4862208	0.610248438	0.177290932	0.077321777	2skp
4	0.00611627	0.001977205	0.000899129	0.000488435	1skp
	2.0522808	0.19308642	0.056095959	0.024465094	2skp
5	0.00250523	0.000809863	0.000368283	0.000200063	1skp
	0.84061422	0.079088198	0.022976905	0.010020902	2skp
6	0.00120815	0.000390559	0.000177606	9.64809E-05	1skp
	0.4053888	0.038140527	0.011080683	0.004832611	2skp
7	0.00065213	0.000210814	9.58671E-05	5.2078E-05	1skp
	0.21881878	0.020587307	0.005981077	0.002608523	2skp
8	0.00038227	0.000123575	5.61955E-05	3.05272E-05	1skp
	0.12826755	0.012067901	0.003505997	0.001529068	2skp
9	0.00023865	7.71475E-05	3.50826E-05	1.9058E-05	1skp
	0.0800768	0.007533931	0.002188777	0.00095459	2skp
10	0.00015658	5.06164E-05	2.30177E-05	1.25039E-05	1skp
	0.05253839	0.004943012	0.001436057	0.000626306	2skp

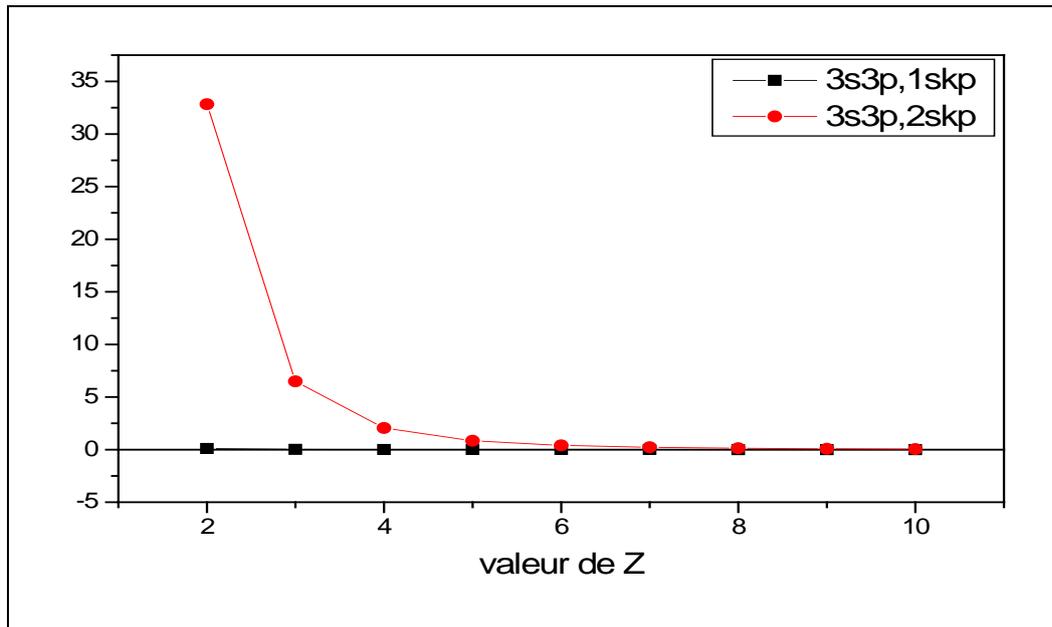


Figure 13 : Section efficace pour les états $3s3p,1skp$ et $3s3p,2skp$ en fonction de la charge nucléaire Z .

Nous constatons sur la figure 13 une diminution de la section efficace lorsque Z augmente et que les valeurs de la section efficace sont très grandes pour $3s3p, 2skp$.

II.5./- Calcul des probabilités d'autoionisation et rapports de branchement

Les probabilités d'autoionisation pour les systèmes atomiques à deux électrons sont calculées avec les valeurs du nombre quantique principal n (avec $n \leq 10$) et de la charge nucléaire Z ($Z \leq 10$). Ces calculs se font par l'intermédiaire de deux méthodes :

- en extrapolant la section efficace excitation du seuil ;
- en calculant directement les éléments de matrices.

Pour les grandes valeurs de n , les deux méthodes donnent des résultats similaires.

Pour le calcul des probabilités d'autoionisation, nous nous servons de la formule de Yu. K Zemtsov [32] sous le seuil d'excitation $N=3$ de l'ion résiduel.

Soit $\omega(n_1, n_2 \rightarrow n_3)$ la probabilité d'autoionisation qui s'exprime en seconde-1 ; la formule générale de $\omega(n_1, n_2 \rightarrow n_3)$ après calcul fait est :

$$\omega(n_1, n_2 \rightarrow n_3) = \frac{16}{Z^4} \frac{2R_y}{3\pi\hbar} \frac{n_1^3 n_3^5}{n_2^5 (n_1^2 - n_2^2)^4} \left[1 - \frac{n_1^2 n_3^2}{4n_2^2 (n_1^2 - n_3^2)} \right] \quad (\text{II.48})$$

Dans cette formule, R_y désigne le rydberg, $1R_y = 13,605698 \text{ eV}$ et Z est le numéro atomique du système héliumoïde considéré.

Le rapport de branchement est défini comme étant le rapport entre deux valeurs des largeurs $\Gamma(2s)$ et $\Gamma(2p)$ pris pour un même état.

Les résultats obtenus sont consignés dans les tableaux 10-12 ci-après.

Tableau 10 : Probabilité d'autoionisation en s^{-1} pour des systèmes héliumoïdes de $Z = 2-10$ sous le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel (multiplier par 10^{16}).

	Z=	2	3	4	5	6	7	8	9	10
3s3p	1skp	1.14522E-05	2.26217E-06	7.15765E-07	2.93177E-07	1.41386E-07	7.63164E-08	4.47353E-08	2.7928E-08	1.83236E-08
	2skp	0.001983346	0.000391772	0.000123959	5.07737E-05	2.44858E-05	1.32168E-05	7.74744E-06	4.83669E-06	3.17335E-06
3s4p	1skp	2.75602E-06	5.444E-07	1.72251E-07	7.05542E-08	3.4025E-08	1.83658E-08	1.07657E-08	6.72098E-09	4.40964E-09
	2skp	0.000522135	0.000103138	3.26335E-05	1.33667E-05	6.44612E-06	3.47945E-06	2.03959E-06	1.27331E-06	8.35417E-07
4s3p	1skp	2.20002E-06	4.34572E-07	1.37501E-07	5.63206E-08	2.71608E-08	1.46607E-08	8.59384E-09	5.36509E-09	3.52004E-09
	2skp	0.000150884	2.98043E-05	9.43026E-06	3.86264E-06	1.86277E-06	1.00548E-06	5.89391E-07	3.67954E-07	2.41415E-07
5p3d	1skp	6.56127E-07	1.29605E-07	4.10079E-08	1.67969E-08	8.10033E-09	4.37236E-09	2.563E-09	1.60007E-09	1.0498E-09
	2skp	3.20066E-05	6.32229E-06	2.00041E-06	8.19369E-07	3.95143E-07	2.13288E-07	1.25026E-07	7.8053E-08	5.12106E-08
3p6d	1skp	3.66541E-07	7.24031E-08	2.29088E-08	9.38344E-09	4.52519E-09	2.44259E-09	1.4318E-09	8.93866E-10	5.86465E-10
	2skp	7.36007E-05	1.45384E-05	4.60005E-06	1.88418E-06	9.08651E-07	4.90467E-07	2.87503E-07	1.79487E-07	1.17761E-07
6p3d	1skp	2.50765E-07	4.95339E-08	1.56728E-08	6.41959E-09	3.09587E-09	1.67107E-09	9.79551E-10	6.11529E-10	4.01224E-10
	2skp	1.0344E-05	2.04325E-06	6.46497E-07	2.64805E-07	1.27703E-07	6.8931E-08	4.04061E-08	2.52253E-08	1.0344E-05
3d5f	1skp	9.08911E-07	1.79538E-07	5.68069E-08	2.32681E-08	1.12211E-08	6.05688E-09	3.55043E-09	2.21652E-09	1.45426E-09
	2skp	0.000178901	3.53385E-05	1.11813E-05	4.57986E-06	2.20865E-06	1.19218E-06	6.98832E-07	4.36277E-07	2.86242E-07

Tableau 11 : Rapport de branchement des états d'autoionisation pour les systèmes héliumoides de $Z = 2-10$ des états $^1p^0$ 3s3p et 3p3d sous le seuil d'excitation $N = 3$ de l'ion résiduel

Z	2	3	4	5	6	7	8
$\Gamma_{2s}(3s3p)$	0.00041815	0.00229606	0.00678325	0.0077786	0.00830855	0.00860692	0.00527085
$\Gamma_{2p}(3s3p)$	0.0033452	0.00480947	0.01037927	0.01858222	0.02520977	0.03037014	0.01230209
Γ_{2s}/Γ_{2p}	0.125	0.47740396	0.65353829	0.41860436	0.32957663	0.28340076	0.42845175
$\Gamma_{2s}(3p3d)$	0.00000125	0.00028593	0.00025262	0.00022614	0.00020707	0.0019261	0.00227863
$\Gamma_{2p}(3p3d)$	1.0538E-06	0.38240133	0.1562278	0.27224808	0.38594611	0.4959965	0.00646705
Γ_{2s}/Γ_{2p}	0.843	0.00074772	0.001617	0.00083064	0.00053653	0.00388329	0.03525451

Tableau 12 : Rapports de branchement des états $^1p^0$ pour l'ion héliumoides O^{6+} (en u.a)

	Γ_{2s}	Γ_{2p}	Γ_{2s}/Γ_{2p}	Γ_{2s}/Γ_{2p} (Chetioui et al)
3s3p	0.005270852	0.01230209	0.42845186	0.49
3p3d	0.000227863	0.00646705	0.03523451	0.032
3s4p	2.57924E-05	0.01026707	0.00251215	
4s3p	4.96613E-05	0.01218184	0.00407667	
4p3d	4.37132E-05	0.01143711	0.00382205	
3p4d	4.26995E-05	0.011306	0.00377672	
3d4f	4.9581E-05	0.01178585	0.00420683	

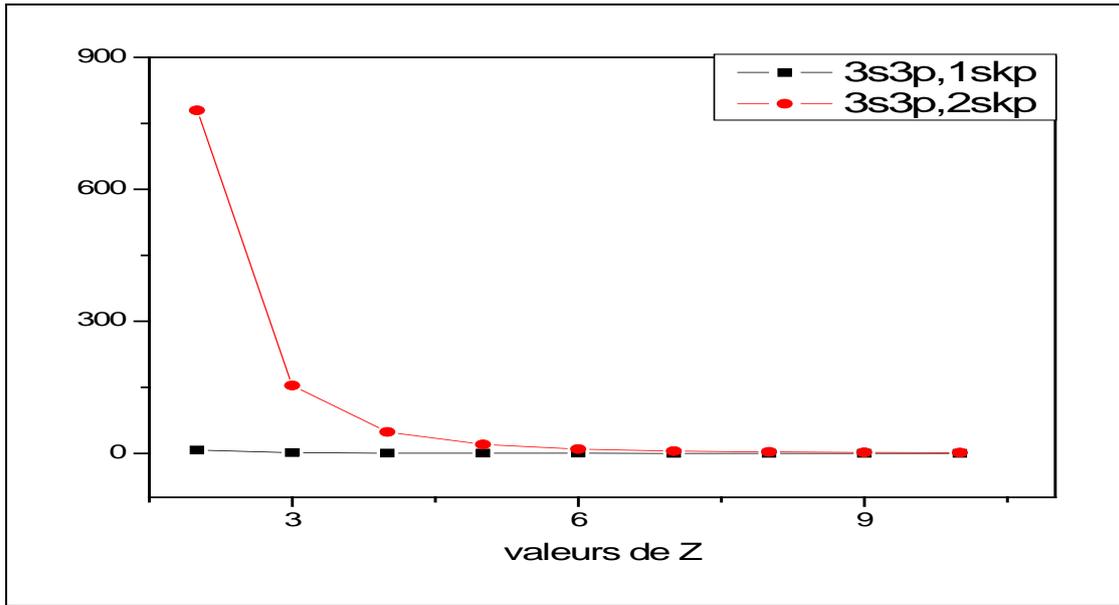


Figure 15 : Probabilité d'autoionisation pour les états $3s3p,1skp$ et $3s3p,2skp$ en fonction de la charge nucléaire Z

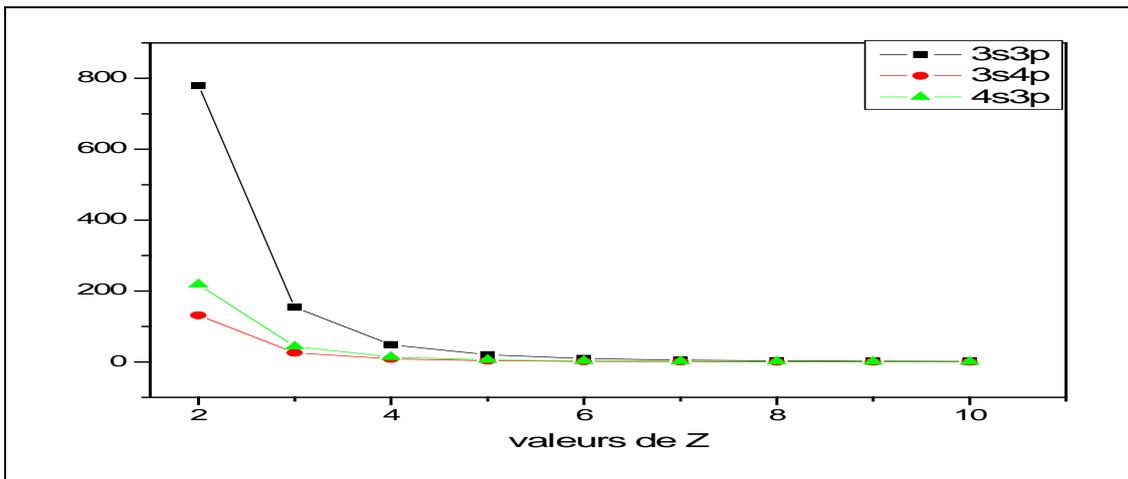


Figure 16 : Probabilité d'autoionisation pour les états $3s3p,2skp$; $3s4p,2skp$; et $4s3p,2skp$ en fonction de la charge nucléaire Z .

Sur la figure 15 nous constatons au niveau de l'état $3s3p$, que la probabilité d'autoionisation tout en laissant l'ion résiduel dans l'état $2skp$ est plus grande que celle pour l'état $1skp$ et que la probabilité d'autoionisation décroît en fonction de Z . Sur la figure 16 puisque $2skp$ est l'état le plus probable, nous notons que l'état où les électrons sont sur la même couche, du fait de l'augmentation des effets de corrélation ($3s3p$) est supérieur à celui pour lequel les électrons ne sont pas sur la même couche ($3s4p$, $4s3p$).

CONCLUSION

Dans ce présent travail nous avons étudié les fonctions d'onde obtenues sur la base de la méthode de diagonalisation de l'hélium et des ions héliumoïdes Li^+ , Be^{2+} , B^{3+} , C^{4+} , N^{5+} , O^{6+} , F^{7+} et Ne^{8+} sous le seuil d'excitation $N = 2$ et $N = 3$ de l'ion résiduel.

A partir des énergies et des largeurs, nous avons procédé aux calculs des sections efficaces, des probabilités d'autoionisation et des rapports de branchements. Par ailleurs, l'effet du mixage des configurations dans l'étude de l'état fondamental des atomes est faible d'une manière générale. Pour ce qui concerne les états excités des atomes ces effets deviennent significatifs. Les résultats quantitatifs sur les sections efficaces, les probabilités d'autoionisation et les rapports de branchements montrent qu'il existe une forte interaction électron-électron qui se traduit par un important mixage des configurations appartenant à la fois au spectre discret et au continuum.

Ce travail vient confirmer à nouveau que la méthode de diagonalisation est une approche théorique capable, à l'instar d'autres méthodes théoriques plus complexes du point de vue mathématique, d'interpréter les phénomènes liés aux processus des paramètres de résonances dans les systèmes héliumoïdes.

Dans des travaux futurs, il serait intéressant d'évaluer et de regarder le comportement de la section efficace, de la probabilité d'autoionisation et du rapport de branchement vers des seuils d'excitations supérieurs, $N = 4, 5, 6$.

BIBLIOGRAPHIE

1. Ndao A. S. 1997 *Thèse de Doctorat 3^{ème} cycle*, U.C.A.D. Dakar ;
2. Wagué A., 1984 *Thèse de Doctorat d'Etat*, N° 1125, Université Paul Sabatier Toulouse ;
3. Balashov V. V; Grishanova S. I; Kruglova. I. M and Sénashenko. V. S; 1970 *Opt. Spektrosk.* **28**, 859;
4. Sénashenko V. S; Wagué A; 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys*, **L12** 269;
5. Wagué A.; Safronova U. I.; Sénashenko V. S. ; 1981 *Opt. Spektrosk* **51**, 95;
6. Wagué A. 1987 *Z Phys. D : Atoms, Molecules and Clusters* **6**, 337;
7. Madden R. P. and Codling K., 1963 *Phys. Rev. Lett.* **1**. 516;
8. Madden R. P. and Codling K., 1965 *Astrophys. J.* **141**, 364;
9. Cooper et al 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81**, 241 ;
10. Herrick D R 1980 *Phys. Rev. A* **22**, 1346;
11. Herrick D R and Kellman M E 1980 *Phys. Rev. A* **21**, 418-25;
12. Herrick D R, Kellman M E and Poliak R D 1980 *Phys. Rev. A* **22** 1517-35
13. Herrick D R and Sinanoglu O 1975 *Phys. Rev. A* **11**, 97-110;
14. Lin C D 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1348-51;
15. Lin C D and Watanabe S 1987 *Phys. Rev. A* **35**, 4499;
16. Omar Tidiane Ba 2006 *Mémoire de D.E.A*, U.C.A.D. Dakar ;
17. Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloé F., 1973 *Mécanique Quantique, Vol II*, Hermann, Paris ;
18. Faye N A B and Wagué A 1994 *Z. Phys. D. Atoms, Molecules and Clusters* **31**, 37;
19. Konté A 1999. *Thèse de Doctorat 3^{ème} cycle*, U.C.A.D. Dakar ;
20. Wagué, A.: XIII ICPEAC 1993 *Abstracts of contributed papers*. Eichler, J., Fritsch, W., Hertel, I.V., Stoltenfoht, N., Wille, U. (eds.), p25.

International Conference on the physics of electronic and atomic Collisions e.V. Berlin;

- 21.** Hylleraas E. A. 1928 Z. Phys. **48**, 469 ;
- 22.** Macek J.H and Burke P.G., 1967 Prog. Phys. Soc London **92**,351;
- 23.** Macek 1968, J.H J.Phys.B: **2**, 3287;
- 24.** Ray, D. and Mukherjee, K.P., 1991 J. Phys. B **24** 1241;
- 25.** Ho Y.K 1983, *The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes*, Physics Reports (Review Section of Physics Letters) **99**, N^o.1 1-68. North-Holland Publishing Company;
- 26.** Ho, Y.K. 1979, J. Phys. B **12**, 387-399;
- 27.** Ho, Y.K. 1979 J. Phys. B **12**, L 543-L 546;
- 28.** Hylleraas E. A. 1928 Z. Phys. **48**, 469 ;
- 29.** Hylleraas E. A. and Undheim B., 1930 Z. Phys. **65**, 759;
- 30.** Butler P. H., Minchin P. E. H., and Wybourne B. G. 1971 *Atomic Data* **3**, 153;
- 31.** Woodruff, P.G., Samson, J.A.R. 1992: Phys. Rev. Lett. **25**, 848-856 ;
- 32.** Yu. K. Zemtsov (October . 1972) Opt. Spektrosk. **37**, 626-632;
- 33.** Sakho, I., Ndao, A S., Biaye, M and Wague, A, 2008 Eur.Phys.J.D. **47**, 37- 44;
- 34.** Biaye, M., Konte, A., Faye, NAB., and Wague A, 2005 Phys.Scr.**74**, 180.
- 35.** Bachau, H: 1983 Thesis Bordeaux, 1984 J. Phys. B: At. Mol. Phys. **17** 1771-84; 1988 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **21**, 3547-58;
- 36.** Chetioui A, Martin F, Politis M F, Rozet J P, Touati A, Blumenfeld L, Vernhet D, Wohrer K, Stephan C, Barat M, Gaboriaud M N, Laurent H and Rocin P 1990 J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **23**, 3659-75;
- 37.** Bachau H et al 1991 At. Data Nucl. Data Tables **48** 168-213;
- 38.** Oberoi, R.S. 1972 J. Phys. B **5**, 1120-1125;
- 39.** Callaway, 1978 J. Phys. Lett. **A66**, 201-203;

