

# UNIVERSITE CHEIKH ANTA DIOP DE DAKAR



ECOLE DOCTORALE, PHYSIQUE, CHIMIE, SCIENCES DE LA TERRE,  
DE L'UNIVERS ET DE L'INGENIEUR  
(PCSTUI)

FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES

ANNEE: 2017-2018

THESE DE DOCTORAT UNIQUE

SPECIALITE: PHYSIQUE ATOMIQUE ET NUCLEAIRE

PRESENTEE PAR: M. ABDOU DIOUF

**Utilisation de la Méthode Variationnelle et de la Méthode de Rotation Complexe pour le Calcul des Paramètres des Résonances des Etats Singulets et Triplets Doublement Excités  $(n1)^2$ ,  $n1n'1$  et  $n1n'1'$  (avec  $1 \neq 1'$  ou  $1 = 1'$ ) des Systèmes Hélioïdes avec de Nouvelles Fonctions d'Onde de Type Hylleraas**

Soutenue le samedi 16 Mars 2019

Devant la commission d'examen formée par :

<b>Président :</b>	Cheikh	SENE	Professeur titulaire	FST / UCAD
<b>Rapporteurs :</b>	Babacar	MBOW	Professeur titulaire	FST / UCAD
	Mamadou	BARRY	Professeur titulaire	FST / UCAD
<b>Examineurs :</b>	Bassirou	BA	Professeur titulaire	FST / UCAD
	Mamadi	BIAYE	Professeur titulaire	FASTEF / UCAD
<b>Directeur de thèse :</b>	Ahmadou	WAGUE	Professeur titulaire	FST / UCAD

# Dédicaces

*«Gloire et Louange à ALLAH»*

Je dédie ce travail au

**Prophète Mouhammad**

**(Paix et Bénédiction d'Allah sur lui)**

**A ma mère,**

**A mon père**

**A mes femmes et à mes enfants**

**A tous ceux (ou toutes celles) qui, de près ou de loin, m'ont  
soutenu depuis mes débuts jusqu'à nos jours.**

# REMERCIEMENTS

**A mon Directeur de thèse**, Professeur **Ahmadou WAGUE**, Professeur titulaire à la Faculté des Sciences et Technique de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar

Vous avez encadré et dirigé ce travail avec beaucoup de rigueur et d'attention malgré vos multiples occupations. Vous nous avez accordé un privilège particulier et exceptionnel en nous offrant les conditions les plus optimales pour la réalisation de ce travail. Votre simplicité, votre humilité sans façon, vos conseils d'homme avisé, vos hautes qualités humaines et intellectuelles nous ont très profondément marqués et font de vous notre modèle. Votre habileté à extraire les idées physiques de problèmes extrêmement compliqués m'a impressionné et a été pour moi une motivation supplémentaire. C'est ici l'occasion pour nous, de vous exprimer nos sincères remerciements pour votre soutien, votre ouverture, votre disponibilité et toute l'assistance que vous m'avez apporté tout au long de ce travail.

**Au Président de jury**, Professeur **Cheikh SENE**, Professeur titulaire de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar et Directeur de l'Ecole Doctorale Physique Chimie Sciences de la Terre de l'Univers et de l'Ingénieur.

Vous avez accepté avec beaucoup de satisfaction et de spontanéité de présider ce jury de thèse malgré votre calendrier très chargé. Vos hautes qualités scientifiques et votre approche facile justifient le choix pour la présidence de ce jury de thèse. Nous vous prions de trouver ici l'expression de notre sincère gratitude et profond respect.

**Au Rapporteur de thèse**, Professeur **Babacar MBOW**, Professeur titulaire à la Faculté des Sciences et Technique de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar.

Vous nous faites un très grand honneur en acceptant spontanément d'être rapporteur de cette thèse qui est le fruit de beaucoup de sacrifices. Vos immenses qualités scientifiques et intellectuelles, votre rigueur et votre application dans le travail sont pour nous un motif d'admiration et un but à atteindre. Veuillez trouver ici notre profonde et respectueuse gratitude. Votre courtoisie nous a marquée durant tout le temps que nous vous avons côtoyé.

**Au Rapporteur de thèse**, Professeur **Mamadou BARRY**, Professeur titulaire et Chef de Département de Mathématique et Informatique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar

Vous avez accepté d'être rapporteur de cette thèse malgré vos multiples occupations. Veuillez recevoir cher professeur le témoignage de toute notre admiration pour vos qualités humaines ainsi que notre plus grande sympathie à votre égard. C'est ici l'occasion pour nous, de vous exprimer ma profonde reconnaissance et nos sincères remerciements.

**A l'Examineur,** Professeur **Bassirou BA**, Professeur titulaire à la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar. Vous avez accepté de juger ce travail malgré vos multiples occupations. Votre simplicité, votre humilité sans façon, vos conseils d'homme avisé, vos hautes qualités humaines et intellectuelles nous ont très profondément marqués. C'est ici l'occasion pour nous, de vous exprimer nos sincères remerciements et profonde reconnaissance. Que vous trouvez ici ma profonde gratitude pour le temps précieux que vous m'avez accordé en acceptant de juger ce travail.

**A l'Examineur,** Professeur **Mamadi BIAYE**, Professeur titulaire et Doyen de la Faculté des Sciences et Technologies de l'Education et de la Formation (FASTEF) de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar. Nous sommes très sensibles à l'honneur que vous nous faites en acceptant de juger ce travail. Vos immenses qualités pédagogiques, humaines et intellectuelles nous ont toujours beaucoup marqués. Je voudrais témoigner mes sincères remerciements et ma profonde gratitude pour avoir accepté de participer à ce jury comme examinateur. Veuillez croire à notre très haute et profonde considération.

Je suis très reconnaissant à l'endroit du Dr. **Boubacar Sow** pour son soutien, sa disponibilité, son ouverture et toute l'aide qu'il n'a cessé de m'apporter pour bien mener à terme ce travail. Je voudrais ici lui témoigner mes sincères remerciements

J'adresse mes remerciements aux Dr. **Malick Sow**, Enseignant au Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, Dr. **Babou Diop** et Dr. **Youssou GNING** pour leurs conseils, soutiens et encouragements tout au long de ce travail. Je leur suis reconnaissant pour leur lecture attentive et leurs commentaires constructifs de ce manuscrit

Je suis très reconnaissant à l'endroit de Monsieur **Ibrahima SAKHO**, Maître de Conférences à l'UFR (Unité de Formation et de Recherches) du Département de Physique de l'Université Assane Seck de Ziguinchor, pour son soutien, sa disponibilité, son ouverture et toute l'aide qu'il n'a cessé de m'apporter pour bien mener à terme ce travail.

J'adresse mes remerciements aux Professeurs de Itna et du Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, pour les enseignements qu'ils nous ont dispensés.

J'adresse mes remerciements à tous les vacataires et doctorants du Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar pour leurs encouragements et camaraderies.

Tous mes collègues du Lycée **SEYDINA LIMAMOULAYE** surtout la **CELLULE DE PC**.

Enfin, merci à tous ceux qui de près ou de loin, ont contribué à notre formation morale, scolaire, universitaire et d'enseignant



UNIVERSITÉ CHEIKH ANTA DIOP DE DAKAR  
 ECOLE DOCTORALE PHYSIQUE CHIMIE SCIENCES DE LA  
 TERRE DE L'UNIVERS ET DE L'INGENIEUR  
 DEPARTEMENT DE PHYSIQUE  
 FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES  
 THESE DE DOCTORAT  
 Spécialité: Physique Atomique

**Résumé**

**Prénoms et Nom du Candidat:** ABDYOU DIOUF

**Titre :** Utilisation de la Méthode Variationnelle et la Méthode de Rotation Complexe pour le Calcul des Paramètres des Résonances des Etats Singulets et Triplets Doublement Excités  $(nl)^2$ ,  $nl n'l$  et  $nl n'l'$  (avec  $l = l'$  ou  $l \neq l'$ ) des Systèmes Héliumoïdes avec de Nouvelles Fonctions d'onde de Type Hylleraas

**Date et lieu de soutenance:** 16 Mars 2019 à 10H à la FST

Devant la commission d'examen formée par :

Président :	Cheikh	SENE	Professeur titulaire	FST / UCAD
Rapporteurs :	Babacar	MBOW	Professeur titulaire	FST / UCAD
	Mamadou	BARRY	Professeur titulaire	FST / UCAD
Examineurs :	Bassirou	BA	Professeur titulaire	FST / UCAD
	Mamadi	BIAYE	Professeur titulaire	FASTEF / UCAD
Directeur de thèse :	Ahmadou	WAGUE	Professeur titulaire	FST / UCAD

**Résumé :** Ce présent travail est consacré aux calculs des énergies des états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1I^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  et aux calculs des énergies et des largeurs des paramètres de résonances des états singulets et triplets doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$ . Dans ces calculs sont utilisées de nouvelles fonctions d'onde corrélées à deux termes de type Hylleraas pour la description des corrélations électroniques dans les ions Héliumoïdes multichargés ( $Z \leq 10$  et  $n \leq 10$ ) par la méthode variationnelle et la méthode de rotation complexe.

La première partie du travail comporte une revue de quelques méthodes expérimentales et théoriques dans les calculs des paramètres des résonances des états doublement excités dans les systèmes Héliumoïdes multichargés. Ces méthodes expérimentales portent sur les méthodes d'ionisation et d'excitations par impacts photonique, électronique, ionique ainsi que sur la méthode de spectroscopie ionique en faisceaux colinéaires. Les méthodes théoriques concernent la méthode de diagonalisation, la constante d'écran par unité de charge nucléaire, la théorie des orbitales atomiques de Slater, des coordonnées hyper-sphériques et la méthode variationnelle d'Hylleraas.

Dans la deuxième partie se trouve la description de la théorie de la méthode variationnelle avec les résultats des calculs des énergies des états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1I^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  ( $Z \leq 10$  et  $n \leq 10$ ). Ces résultats sont obtenus dans le cadre de la méthode variationnelle avec des nouvelles fonctions d'onde corrélées à deux termes de type Hylleraas.

La troisième partie de ce travail concerne dans un premier temps le formalisme général de la méthode de rotation complexe et les résultats des calculs sur les largeurs et par les énergies des résonances des états singulets et triplets doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$ . Ces résultats ont été obtenus par l'élaboration et l'utilisation de nouvelles fonctions d'onde corrélées de type Hylleraas. Les résultats numériques ont été obtenus à l'aide d'un programme informatique écrit en Maxima.

Les résultats obtenus par l'utilisation des deux méthodes (variationnelle et rotation complexe) sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles et ont fait l'objet de deux publications dans des revues internationales « International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics » et « International Journal of Physics ».

**Mots clés :** résonances, énergies, largeurs, nouvelles fonctions d'onde corrélées, ions multichargés, systèmes Héliumoïdes, états singulets, états triplets.

# LISTE DES TABLEAUX

<b>Tableau 1</b>	: Contribution des autres électrons à la constante d'écran.....	18
<b>Tableau 2</b>	: Energies (eV) des états doublement excités ( $ns^2$ ) $^1S^e$ ( $n \leq 10$ ) des ions Hélioïdes de charge nucléaire $Z= 2- 10$ .....	37
<b>Tableau 3</b>	: Energies (eV) des états doublement excités ( $np^2$ ) $^1D^e$ ( $n \leq 10$ ) des ions Hélioïdes de charge nucléaire $Z= 2- 10$ .....	39
<b>Tableau 4</b>	: Energies (eV) des états doublement excités ( $nd^2$ ) $^1G^e$ ( $n \leq 10$ ) des ions Hélioïdes de charge nucléaire $Z= 2- 10$ ,.....	41
<b>Tableau 5</b>	: Energies (eV) des états doublement excités ( $nf^2$ ) $^1I^e$ , ( $n \leq 10$ ) des ions Hélioïdes de charge nucléaire $Z= 2- 10$ ,.....	43
<b>Tableau 6</b>	: Energies (eV) des états doublement excités ( $ng^2$ ) $^1K^e$ , ( $nh^2$ ) $^1M^e$ ( $n \leq 10$ ) des ions Hélioïdes de charge nucléaire $Z= 2- 10$ ,.....	45
<b>Tableau 7</b>	: Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $ns^2$ ) $^1S^e$ $2 \leq n \leq 10$ de l'Hélium et des ions Hélioïdes de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.....	49
<b>Tableau 8</b>	: Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $np^2$ ) $^1D^e$ $2 \leq n \leq 10$ de l'Hélium et des ions Hélioïdes de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.....	51
<b>Tableau 9</b>	: Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $nd^2$ ) $^1G^e$ $2 \leq n \leq 10$ de l'Hélium et des ions Hélioïdes de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.....	53
<b>Tableau 10</b>	: Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $nf^2$ ) $^1I^e$ $2 \leq n \leq 10$ de l'Hélium et des ions Hélioïdes de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.....	55
<b>Tableau 11</b>	: Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $ng^2$ ) $^1K^e$ et ( $nh^2$ ) $^1M^e$ $2 \leq n \leq 10$ de l'Hélium et des ions Hélioïdes de charge nucléaire ( $Z=2- 10$ ) avec d'autres résultats théoriques.....	56
<b>Tableau 12</b>	: Paramètres de résonances des états doublement excités $2sns^{+1,3}S^e$ ( $Z=2-10$ ).....	78

<b>Tableau 13</b>	: Paramètres de résonances des états doublement excités $2snp \ ^{+1,3}P^0$ ( $Z=2-10$ ).....	79
<b>Tableau 14</b>	: Paramètres de résonances des états doublement excités $2pnp \ ^{+1,3}D^e$ ( $Z=2-10$ ).....	80
<b>Tableau 15</b>	: Paramètres de résonances des états doublement excités $3d4d \ ^{+1,3}G^e$ ( $Z=2-10$ ).....	81
<b>Tableau 16</b>	: Comparaison des énergies des états $2sns \ ^{1,3}S^e$ .....	84
<b>Tableau 17</b>	: Comparaison des énergies des états $2snp \ ^{1,3}P^0$ .....	85
<b>Tableau 18</b>	: Comparaison des énergies des états $2pnp \ ^{1,3}D^e$ .....	86
<b>Tableau 19</b>	: Comparaison des énergies des états $3d4d \ ^{1,3}G^e$ .....	87
<b>Tableau 20</b>	: Comparaison des résonances des états $2s2p \ ^{1,3}P^0$ .....	88

# LISTE DES FIGURES

<b>Figure 1</b>	: Angle $\theta_{12}$ intervenant dans la partie angulaire de fonction d'onde d'Hylleraas.....	22
<b>Figure 2</b>	: Courbes de variation de l'énergie totale $E$ d'un système atomique à deux électrons en fonction du paramètre variationnel $\alpha$ et de la dimension $D$ de l'espace des états en vertu du théorème de Hylleraas et Undheim.....	22
<b>Figure 3</b>	: Comparaison de $\alpha$ en fonction de $Z$ pour les états $ns^2$ (2s et 3s) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes .....	57
<b>Figure 4</b>	: Comparaison de $\alpha$ en fonction de $Z$ pour les états $np^2$ (2p et 3p) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes .....	57
<b>Figure 5</b>	: Comparaison de $\alpha$ en fonction de $Z$ pour les états $nf^2$ (4f et 5f) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes .....	58
<b>Figure 6</b>	: Comparaison de $\alpha$ en fonction de $Z$ pour les états $nd^2$ des (3d et 4d) fonctions d'ondes de 2 et 4 termes .....	58
<b>Figure 7</b>	: Comparaison de $\alpha$ en fonction de $Z$ pour les états $ns^2$ les états (4s et 5s) fonctions d'ondes de 2 et 4 termes .....	58
<b>Figure 8</b>	: Comparaison de $\alpha$ en fonction de $Z$ pour $np^2$ (4p et 5p) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes .....	58

# TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION</b> .....	1
<b>CHAPITRE I : Quelques méthodes expérimentales et théoriques appliquées à l'étude de la photo-ionisation résonante des systèmes atomiques à deux électrons.</b> .....	4
<b>I-1- Les méthodes expérimentales</b> .....	5
I-1-1- Excitation par impact photonique .....	5
I-1-2- Excitation par impact électronique .....	6
I-1-3- Excitation par impact ionique .....	7
I-1-4- La spectroscopie ionique en faisceau colinéaire.....	8
<b>I-2- Méthodes théoriques</b> .....	9
I-2-1- Méthode de diagonalisation .....	9
I-2-2- Méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire .....	12
I-2-3- Méthode des orbitales atomiques de Slater .....	16
I-2-4- Méthode des coordonnées hypersphériques .....	19
I-2-5- Méthode de Hylleraas .....	21
<b>CHAPITRE II : Applications de la méthode variationnelle à l'étude des états singulets doublement excités <math>ns^2\ ^1S^e</math>, <math>np^2\ ^1D^e</math>, <math>nd^2\ ^1D^e</math>, <math>nf^2\ ^1F^e</math>, <math>ng^2\ ^1K^e</math> et <math>nh^2\ ^1M^e</math> (<math>Z=2-10</math>)</b> .....	26
<b>II-1- Etude de la théorie de la méthode variationnelle</b> .....	27
II-1-1- Procédure variationnelle.....	28
II-1-2- Construction de la fonction d'onde.....	29
II-1-3- Transformation de l'hamiltonien.....	31
<b>II-2- Calcul d'énergie des états singulets doublement excités <math>(nl)^2</math></b> .....	32
<b>II-3- Résultats et Discussions</b> .....	36

<b>CHAPITRE III : Application de la méthode de rotation complexe aux calculs des énergies de quelques états singulets et triplets doublement excités et des largeurs d'états doublement excités <math>2sns^{+1,3}S^e</math>, <math>2snp^{+1,3}P^0</math>, <math>2pnp^{+1,3}D^e</math>, <math>3d4d^{+1,3}G^e</math> des systèmes atomiques à deux électrons.....</b>	<b>60</b>
<b>III-1- La méthode de rotation complexe.....</b>	<b>61</b>
III-1-1- Formalisme de la méthode de rotation complexe et formes des fonctions d'ondes.....	61
III-1-2- Expressions des fonctions d'onde des états $nln'l'$ .....	64
III-1-3- Expressions littérales des éléments matriciels et de l'énergie totale des états $nln'l'$ .....	71
<b>III-2- Calcul des paramètres de résonance de quelques états singulets et triplets doublement excités <math>2sns^{+1,3}S^e</math>, <math>2snp^{+1,3}P^0</math>, <math>2pnp^{+1,3}D^e</math>, <math>3d4d^{+1,3}G^e</math> des systèmes atomiques à deux électrons par la méthode de rotation complexe .....</b>	<b>76</b>
III-2-1- Procédure de calcul .....	76
III-2-2- Résultats et Discussions .....	76
<b>CONCLUSION ET PERSPECTIVES .....</b>	<b>90</b>
<b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....</b>	<b>92</b>
<b>ANNEXES.....</b>	<b>99</b>

## INTRODUCTION GENERALE

Au cours des trois dernières décennies, des études expérimentales et théoriques intenses sur les propriétés des systèmes à deux électrons ont été d'un grand intérêt pour les physiciens. Ces études ont porté sur la compréhension des effets de corrélation électron-électron de l'état fondamental ainsi que dans les états doublement excités de la série iso-électronique de l'hélium. Pour les états doublement excités, la corrélation entre les deux électrons est similaire à la vibration ou à la rotation d'une molécule triatomique linéaire flexible. Des états doublement excités de systèmes à deux électrons ont suscité un intérêt considérable à la fois du point de vue de l'expérience et aussi du point de vue théorique depuis les premières séries d'expériences de photo-absorption effectuées sur l'atome d'He par Madden et Codling [1–2]. En outre, la plupart des méthodes théoriques [3–8] appliquées aux ions héliumoïdes nécessitent de grands calculs. Du côté expérimental, les transitions entre les états doublement excités ont été observées dans l'atome de Lithium [6,7]. Sur la base des observations expérimentales, des études théoriques approfondies de la série iso-électronique à l'hélium ont suscité l'élaboration de nouvelles méthodes théoriques. Parmi les méthodes théoriques qui sont appliquées à l'étude des ions héliumoïdes, nous pouvons citer la méthode de diagonalisation [11–16], la méthode variationnelle [17–21, 22,23], la méthode de la Constante d'Ecran par Unité de Charge Nucléaire (CEUCN/SCUNC) [24–25, 26-30], la méthode de la Théorie Modifiée des Orbitales Atomiques (TMOA) [31–34], la méthode de rotation complexe [41], la méthode des opérateurs de projection de Fechbach avec ses variantes telles que la méthode de diagonalisation tronquée (TDM) et la méthode de stabilisation, la méthode de Hartree-Fock et le champ auto-cohérent. Par l'étude des propriétés des systèmes à deux électrons, il est nécessaire de procéder à des modèles de calculs appropriés. A cet effet, nous avons présenté de nouvelles fonctions d'onde de deux termes en utilisant la méthode variationnelle et la méthode de rotation complexe. Ces méthodes permettent d'obtenir des valeurs des énergies des états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1I^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$ ,  $nh^2\ ^1M^e$  et des paramètres de résonances, à savoir l'énergie et la largeur de résonance, des états singulets et triplets doublement excités de type  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$ .

La plupart de ces méthodes utilisent des développements mathématiques complexes et/ou des programmes informatiques fastidieux pour obtenir des valeurs des paramètres de résonance.

La méthode de la rotation complexe est très utilisée en physique atomique pour la détermination des paramètres des résonances auto-ionisantes des systèmes atomiques à deux électrons [22, 35, 36, 37]. Pour décrire les systèmes atomiques à deux électrons doublement excités comme l'hélium et les ions héliumoïdes de nouvelles fonctions d'onde de formes spéciales de type Hylleraas ont été obtenues. Ces fonctions d'onde de formes spéciales avec l'utilisation de la méthode variationnelle ont permis de décrire de manière satisfaisante quelques états singulets de même valence puis des électrons de valences différentes de l'hélium et des ions héliumoïdes [17–21]. Egalement, sur la base les fonctions d'onde spéciales de type Hylleraas, la méthode de rotation complexe a été utilisé pour calculer les énergies des états singulets et triplets doublement excités ( $nl n'l'$ ) de l'hélium et des ions héliumoïdes [38].

Les études expérimentales et théoriques des états d'auto-ionisation ont permis d'obtenir beaucoup de données spectroscopiques sur les sections efficaces de photo-ionisation, les énergies d'excitation et les largeurs totales et partielles pour divers atomes et ions .Jusqu'ici une grande place a été accordée aux systèmes atomiques à deux électrons [39,40]. L'étude de ces systèmes constitue une étape importante dans l'investigation des propriétés des atomes plus complexes et dans la recherche d'une meilleure compréhension des processus de corrélation électronique au niveau atomique [25,18].

S'inscrivant dans cette thématique, le présent travail traite des «Utilisation de la Méthode Variationnelle et la Méthode de Rotation Complexe pour le Calcul des Paramètres de Résonance des Etats Singulets et Triplets Doublement Excités  $(nl)^2$ ,  $nl n'l$  et  $nl n'l'$  (avec  $l = l'$  ou  $l \neq l'$ ) des Systèmes Héliumoïdes avec de Nouvelles Fonctions d'Onde de forme spéciale que nous définissons plus loin.»

Ce travail comporte une introduction, trois chapitres, une conclusion et des perspectives:

Le premier chapitre est consacré à une revue de quelques méthodes expérimentales et théoriques décrivant les systèmes atomiques à plusieurs électrons pour l'obtention des paramètres des états doublement excités des ions multichargés Héliumoïdes. Les méthodes expérimentales décrites portent sur l'excitation par impact photonique, l'excitation par impact électronique, l'excitation par impact ionique ainsi que la description de la spectroscopie ionique en faisceau colinéaire. Les méthodes théoriques concernent la méthode de diagonalisation, la méthode de constante d'écran par unité de charge nucléaire (ces deux méthodes ont été développées dans le laboratoire Atome Laser de Dakar dirigé par le

Professeur Ahmadou WAGUE), la théorie des orbitales atomiques de Slater, les coordonnées hyper-sphériques et la méthode variationnelle d'Hylleraas.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté la théorie de la méthode variationnelle et les résultats des calculs sur les énergies des états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1I^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  dans des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z \leq 10$  avec ( $n \leq 10$ ). Ces résultats ont été obtenus par la méthode variationnelle en utilisant de nouvelles fonctions d'onde corrélées de forme spéciale de type Hylleraas.

En fin le troisième chapitre porte sur une description de la méthode de rotation complexe ainsi que sur les calculs par cette méthode des paramètres des résonances des états singulets et triplets doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$  des systèmes atomiques à deux électrons. Dans cette partie, également, nous avons utilisé des nouvelles fonctions d'onde corrélées à deux termes.

Nous terminons par une conclusion où nous tirons les principaux enseignements de ce travail ainsi que les perspectives. Cette conclusion est suivie d'une bibliographie et les annexes portant les détails de certains calculs ainsi que les programmes informatiques qui les accompagnent de même que les publications issues de ce travail.

## CHAPITRE I :

Quelques méthodes expérimentales et théoriques  
appliquées à l'étude de la photo-ionisation  
résonante des systèmes atomiques à deux électrons.

## **I-1- Les méthodes expérimentales**

Actuellement en physique atomique, les mesures expérimentales appliquées à la mesure des énergies de l'état fondamental des systèmes atomiques concernent principalement la mesure des potentiels d'ionisation. Quant aux états doublement excités, les études expérimentales très diversifiées sur les résonances atomiques se sont considérablement développées grâce à l'utilisation des sources de rayonnement synchrotron et des lasers dans les processus de photoabsorption et de photoionisation des atomes et des ions. Parmi ces travaux on peut distinguer les techniques avancées de spectroscopie des photoélectrons, les expériences de mesure de fluorescence consécutive à la désexcitation des résonances ainsi que les nouvelles méthodes de spectroscopie électronique dans les collisions entre ions multichargés et divers projectiles (électrons, protons, ions, atomes et molécules).

Parmi ces diverses techniques d'investigation des états d'autoionisation des systèmes atomiques et ioniques, nous aborderons ici, quelques aspects concernant les investigations par impact photonique (sources synchrotron et lasers), par impact électronique, par impact ionique, par spectroscopie ionique à faisceau colinéaire et par montage de rayonnement synchrotron.

### **I-1-1- Excitation par impact photonique**

Les premières expériences de Madden et Codling [1-2] à l'aide d'une source de rayonnement synchrotron ont concerné la photoabsorption de l'hélium dans le domaine spectral correspondant à l'ultra violet lointain (165-200 Å). Ces expériences ont permis d'observer les résonances correspondant à l'excitation des états autoionisants convergeant vers les seuils  $n=2$ ,  $n=3$  et  $n=4$  de l'ion  $\text{He}^+$ . L'énergie d'excitation, la largeur et l'indice de profil de la résonance  $(2s2p)^1P$  ont été déterminés.

Par la suite, en utilisant une source de rayonnement synchrotron [42] par des mesures de la section efficace de photoabsorption avec un pouvoir de résolution énergétique plus élevé que dans les expériences de Madden et Codling [1-2] ont permis de déterminer les principaux paramètres décrivant le profil d'absorption de la résonance  $(3s3p)^1P$  de l'hélium. Récemment Kossmann et al. [43] ont fait une nouvelle détermination des paramètres de Fano pour la résonance  $(3s3p)^1P$  de l'hélium.

Les expériences par impact de photons sont également orientées vers d'autres types d'analyse: il s'agit en l'occurrence des mesures de fluorescence comme celles effectuées par Samson et Woodruff [44] lors de la photoexcitation des résonances convergeant vers les seuils

$n=3, 4, 5$  de l'ion  $\text{He}^+$ . Dans leurs travaux, Samson et Woodruff [44] ont enregistré la raie de fluorescence à  $304 \text{ \AA}$  émise lors de la désintégration des niveaux excités  $n=2$  de l'ion  $\text{He}^+$  et ont déterminé les sections efficaces partielles de photoionisation. Ces expériences constituent une étude complémentaire aux expériences de photoabsorption.

La spectroscopie des photoélectrons constitue un autre type d'analyse dans les expériences de photoionisation par rayonnement synchrotron. Dans ce cadre Wuilleurnier et al. [45] ont étudié les processus photoniques dans l'hélium et d'autres atomes. Lindle et al. [46] se sont intéressés au processus de photoionisation de l'hélium au dessus du seuil d'excitation  $n=2$  d' $\text{He}^+$  par impact de photons incidents ayant les énergies comprises entre  $67,5 \text{ eV}$  et  $90 \text{ eV}$ . Dans leur expérience, Lindle et al. [46] ont détecté les photoélectrons à  $0^\circ$  et à  $54,7^\circ$  par rapport au vecteur de polarisation du faisceau de photons.

Une autre technique ayant permis le développement des études expérimentales sur les états d'autoionisation, concerne l'utilisation des lasers dans les mesures spectroscopiques. En utilisant le rayonnement laser pour la préparation des ions cibles et comme source excitatrice, Carroll et Kenedy [47] ont étudié la photoexcitation des ions Lithium  $\text{Li}^+$  sous le seuil d'excitation  $n=2$  de l'ion résiduel. Dans ces expériences, l'analyse des données sur la section efficace de photoabsorption a permis de déterminer l'énergie d'excitation et le profil de la résonance  $(2s2p) \text{ }^1\text{P}$ .

Actuellement des progrès importants ont été réalisés par Letokhov et Faisal [48-49] qui utilise des lasers dans l'étude des processus d'ionisation multiphotonique des systèmes atomiques et dans les processus d'ionisation sélective des atomes.

### **I-1-2- Excitation par impact électronique**

Dans le mode par impact électronique, un électron du faisceau incident percute le système atomique qui est ainsi porté à un état excité. Il s'ensuit alors un processus de désexcitation des états d'autoionisation. Ainsi pour le cas particulier de l'atome d'Hélium, nous utilisons ce schéma formel comme référence :

Excitation :

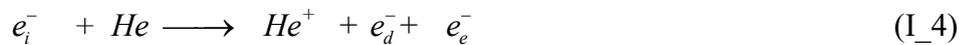


Désexcitation :



Dans les équations (I\_2) et (I\_3), ( $e_i^-$ ), ( $e_d^-$ ) et ( $e_e^-$ ) désignent respectivement les électrons incidents, diffusé et éjecté.

Pour les configurations de double excitation du type  $Nl, nl'$  ( $N, n > 1$ ), l'énergie est supérieure à l'énergie de première ionisation (l'énergie de la configuration  $1s, nl'$ , lorsque  $n \rightarrow \infty$ ) de sorte que la plupart des états doublement excités sont instables : ils tendent alors à se dissocier rapidement en un ion et un électron [50], d'où on les appelle des états autoionisants. Ainsi, bien qu'il existe des états doublement excités qui ne sont pas autoionisants, et par conséquent se dés excitent par émission de photon [50], lors du processus d'excitation par impact électronique, l'ionisation directe de l'Hélium peut se produire comme suit:



Dans la pratique, l'étude des états autoionisants formés par impact électronique consiste à déterminer les caractéristiques des électrons éjectés et diffusés ainsi que celles de l'ion résiduel s'intéressant à l'étude de la distribution spectrale de l'électron éjecté, Silverman et Lassetre [51] observèrent les deux premières résonances de la série  $^1P$  de l'hélium convergeant vers le seuil d'excitation  $n = 2$  de l'ion  $He^+$ .

En outre mesurant le courant résiduel d'ions hélions  $He^{2+}$  dans la collision ( $e^- + He^+$ ), Daly et Powell [52] ont pu mettre en évidence les trois résonances  $^1S$ ,  $^1P$  et  $^1D$  attribués aux états doublement excités de l'atome d'Hélium sous le seuil d'excitation  $n = 3$ .

### I-1-3- Excitation par impact ionique

Depuis les premières expériences par impact ionique sur l'hélium effectuées par Rudd [53] les investigations portant sur les collisions ions-atomes ont connu un essor important. L'intérêt porté sur les collisions entre un faisceau d'ions et des cibles atomiques s'explique par le fait que le spectre d'émission de l'électron éjecté lors de la collision présente diverses caractéristiques qui peuvent être associées à des mécanismes particuliers d'ionisation. C'est ainsi que Oza et al [54] en analysant le processus de transfert de charge électronique lors de la collision entre l'ion  $N^{7-}$  et diverses cibles ( $He$ ,  $H_2$ ,  $Ar$ ), ont pu déterminer les énergies d'excitation des états autoionisants  $3nl'$  de l'ion  $N^{5+}$ . La formation d'états autoionisants par la capture de deux électrons par un ion multichargé dans la collision est venue élargir le champ d'investigations dans les expériences par impact ionique et elle a permis de mener des mesures quantitatives et qualitatives sur plusieurs ions multichargés des systèmes Heliumoïdes

[55-56]. Un autre procédé d'analyse spectroscopique dans les expériences par impact ionique se fait à partir du spectre des photons émis après désexcitation radiative des états d'autoionisation. Ainsi Bruch et al [57], en étudiant la collision entre l'ion  $C^{4+}$  (5MeV) avec l'hélium ont pu détecter les états doublement excités de l'ion Héliumoïde  $C^{4+}$  convergeant vers le seuil d'excitation  $n=3$ . La technique dite du "beam foil" constitue aussi un autre type d'investigations expérimentales des résonances par impact ionique [58-59]. La technique du "beam foil" est une méthode expérimentale qui permet non seulement d'étudier les transitions non radiatives des états autoionisants mais aussi les transitions optiques qui ont lieu lorsque le processus d'émission photonique l'emporte sur celui de l'émission électronique. Deux méthodes d'analyse sont ainsi devenues possibles avec la technique du "beam foil": la spectroscopie du photon ou celle de l'électron. Le mode d'excitation par impact ionique a apporté une contribution essentielle dans la compréhension de la dynamique collisionnelle et post-collisionnelle des ions multichargés avec des atomes.

Nous concluons cet exposé sur les méthodes expérimentales utilisées dans l'étude de la dynamique des résonances autoionisantes, en notant l'importance des progrès techniques accomplis depuis les expériences de Madden et Codling [1-2]. Nous assistons de plus en plus à une nette amélioration de la résolution expérimentale et à la naissance de nouvelles techniques expérimentales qui favorisent en conséquence une stimulation croissante des recherches théoriques.

#### **I-1-4- La spectroscopie ionique en faisceau colinéaire**

Grâce à l'avènement des sources d'ions ECR (Electron Cyclotron Résonance ion source), un essor considérable a été connu par la production d'ions multichargés permettant de réaliser des expériences de collision lentes ions-ions et ions-atomes. Ces expériences ont révélé la possibilité d'obtenir des états autoionisants par des processus de double capture électronique (Bordenave-Montesquieu et al, [60]).

Dans les expériences de Spectroscopie ionique en faisceaux colinéaires, un faisceau d'ions est mélangé à un faisceau de rayonnement synchrotron monochromatique. En mesurant le nombre d'ions ayant gagné une ou plusieurs charges dans l'interaction en fonction de l'énergie des photons [39], on arrive à déterminer en valeur absolue, les sections efficaces de photoionisation simple et multiple.

En 1991, l'équipe de recherche du Dr J.-. M. Bizau [45] a démontré la faisabilité d'étudier la photoionisation d'espèce ionique par spectrométrie électronique [45]. Ce montage

de faisceaux colinéaires, installé sur l'anneau de stockage Super-ACO d'Orsay à Paris et couplant une source d'ions avec un faisceau de rayonnement synchrotron issu d'un onduleur permettait une analyse en énergie et en angle des électrons émis lors du processus de photoionisation à l'aide d'un spectromètre de type miroir cylindrique. Cette technique très performante, donne accès à de nombreux paramètres des processus de photoionisation et permet d'identifier les sous-couches participant aux processus de photoionisation et de désexcitation non radiative des lacunes produites.

## **I-2- Méthodes théoriques**

L'investigation de la dynamique des résonances autoionisantes dans les systèmes à deux électrons est d'une grande importance dans le développement et l'élaboration de nouvelles méthodes d'approximations théoriques permettant une description détaillée des processus d'excitation et de désexcitation radiatives et non radiatives des états d'autoionisation.

Les progrès théoriques réalisés dans la description des processus d'autoionisation et l'interprétation des spectres des états doublement excités des systèmes Héliumoides, ont mis en évidence la nécessité de mettre au point des méthodes très bien élaborées qui prennent en compte le rôle fondamental joué par la corrélation électronique dans la description des systèmes à plusieurs électrons [40 ,62,63,64,65 ,66 ,67].

Nous allons à présent aborder les principes de quelques unes des principales méthodes théoriques permettant une telle description des résonances autoionisantes dans des systèmes atomiques à deux électrons. Les méthodes que nous allons décrire ici sont:

La méthode de diagonalisation, la méthode des coordonnées hypersphériques, la méthode de rotation complexe, la théorie des orbitales atomiques de Slater, l'approximation "close-coupling", la théorie R-matrice et la méthode variationnelle ainsi que d'autres méthodes théoriques.

### **I-2-1- Méthode de diagonalisation**

La méthode de diagonalisation utilisée dans le calcul de l'énergie totale, des largeurs totales et partielles et de la section efficace de photoabsorption de l'atome d'Hélium. Cette méthode à été utilisée initialement par Balashov et al [68] dans l'étude de la photoionisation résonante monocanal (interaction d'une ou de plusieurs résonances avec un seul continuum) de l'Hélium et des ions Héliumoides sous le seuil d'excitation  $n = 2$  de l'ion résiduel. Senashenko et Wagué [69] ont par la suite généralisé la méthode à l'étude de la

photoionisation résonante multicanal (interaction d'une ou de plusieurs résonances avec plusieurs continua) pour la description de la résonance  $(3s3p)^1P^o$  de l'hélium et dans l'étude des systèmes Hélioïdes multichargés sous les seuils d'excitation  $n = 2$  et  $n = 3$  de l'ion résiduel par Wagué [9,10,11,12].

Faye et al [13,14] puis Ndao et al [15,16] ont utilisé la méthode de diagonalisation pour l'obtention de résultats complets et appréciables sur le calcul des énergies et largeurs des états autoionisants des ions Hélioïdes multichargés  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$  et  $O^{6+}$  sous le seuil d'excitation  $n = 3$  de l'ion résiduel [13,14] ainsi que des ions Hélioïdes de charge nucléaire  $Z \leq 10$  sous le seuil d'excitation  $n = 4$  de l'ion résiduel [15,16].

La résolution du problème de l'excitation par des photons et de la désexcitation des résonances autoionisantes exigent les étapes suivantes [10]:

- 1) La fonction d'onde de l'état initial du système atomique considéré doit être connue.
- 2) Les fonctions d'onde, les énergies d'excitation, les largeurs partielles et totales des états d'autoionisation doivent être déterminées.
- 3) Les fonctions d'onde du spectre continu doivent être calculées avec et sans l'effet des interférences avec les résonances Selon la méthode de diagonalisation [68], dans le sous espace des états discrets (canaux fermés) et dans celui des états du continuum (canaux ouverts), dans un système à deux électrons, la fonction d'onde  $\psi_{Ei}$  de l'état final ion + électron s'écrit sous la forme:

$$\psi_{Ei}(r_1, r_2) = \hat{A} \sum_k [\psi_k(r_1) U_{ki}(E, r_2)] \sum_{\mu} \Gamma_{\mu}(E) \phi_{\mu}(r_1, r_2) \quad (I_6)$$

Dans cette formule,  $\hat{A}$  représente l'opérateur d'antisymétrisation,  $k$  représente l'ensemble des nombres quantiques qui caractérisent le système ion+ photoélectron dans le sous espace des canaux ouverts,  $U_{ki}(E, r_2)$  sont les fonctions inconnues à déterminer décrivant le mouvement du photoélectron,  $\psi_k(r_1)$  sont les fonctions propres définissant les états de l'ion résiduel telles que:

$$\langle \psi_k | \psi_{k'} \rangle = \delta_{kk'} \quad (I_7)$$

$$\langle \psi_k | \hat{H} | \psi_{k'} \rangle = \varepsilon_k \delta_{kk'} + V_{kk'} \quad (I_8)$$

Les fonctions  $\phi_\mu(r_1, r_2)$  sont obtenues par une transformation unitaire qui diagonalise l'hamiltonien total  $\hat{H}$  dans le sous espace des canaux fermés:

$$\phi_\mu(r_1, r_2) = \hat{A} \sum_{lm} \alpha_\mu [\psi_l(r_1) \psi_m(r_2)] \quad (\text{I}_9)$$

Elles satisfont à la condition de diagonalisation:

$$\langle \phi_\mu | \hat{H} | \phi_\nu \rangle = E_\mu \delta_{\mu\nu} \quad (\text{I}_{10})$$

Dans la transformation unitaire (I\_9), les coefficients  $\alpha_\mu$  définissant les fonctions  $\phi_\mu(r_1, r_2)$  sont déterminées par la résolution du système d'équations linéaires algébriques:

$$\sum_\nu \left\{ (E_\mu - E_0) \delta_{\mu\nu} - \langle \chi_\mu | \hat{V} | \chi_\nu \rangle \alpha_\nu \right\} = 0 \quad (\text{I}_{11})$$

Où  $E_0$  représente la valeur propre de l'Hamiltonien à l'ordre zéro  $\hat{H}_0$  correspondant aux fonctions propres  $\chi_\mu$  définie par:

$$\chi_\mu = \hat{A} [\psi_l(r_1) \psi_m(r_2)] \quad (\text{I}_{12})$$

La détermination de la fonction d'onde de l'état final ion + photoélectron  $\psi_{Ei}(r_1, r_2)$  se ramène aux calculs des coefficients  $\Gamma_\mu(E)$  et des fonctions  $U_{ki}(E, r_2)$ .

Dans le problème de la photoionisation multicanale, le détail des calculs sur ces coefficients a été abordé dans les travaux de Wagué [9].

D'après ces calculs, l'amplitude totale de la photoabsorption  $T_j(E)$  au voisinage d'une résonance isolée prend la forme:

$$T_j = \langle \phi_j(E) | \hat{D} | \psi_0 \rangle + \frac{q+i}{\varepsilon-i} \langle \phi_\mu | \hat{V} | \phi_j(E) \rangle \frac{\sum_k \langle \phi_\mu | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \langle \phi_k(E) | \hat{D} | \psi_0 \rangle}{\sum_k \left| \langle \phi_\mu | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \right|^2} \quad (\text{I}_{13})$$

Où  $\varepsilon$ , l'écart relatif par rapport à la résonance, est donné par l'expression suivante:

$$\varepsilon = (E - E_\mu) / (1/2) \Lambda_\mu^{\text{tot}} \quad (\text{I}_{14})$$

Dans (I\_13),  $\hat{D}$  est l'opérateur du moment électrique dipolaire,  $\psi_0$  est la fonction d'onde  $\varphi_j(E)$  de l'état initial et  $\varphi_j(E)$  la fonction d'onde du spectre continu dans le canal  $j$ ;  $E_\mu$  est l'énergie de l'état autoionisant  $\mu$ ;  $q$  est l'indexe de profil de la résonance.

La sommation au dénominateur de l'expression (I\_13) détermine la largeur totale  $\Lambda_\mu^{\text{tot}}$  de l'état autoionisant  $\mu$ .

$$\Lambda_\mu^{\text{tot}} = 2\pi \sum_k \left| \left\langle \phi_k \left| \hat{V} \right| \varphi_j(E) \right\rangle \right|^2 \quad (\text{I}_15)$$

Un autre paramètre caractérisant la photoionisation résonante est la section efficace de photoabsorption au voisinage d'une résonance isolée. A l'approximation de diagonalisation ce paramètre est défini par la formule de Fano [70]:

$$\sigma = \sum_j |T_j|^2 = \sigma_b + \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1} \quad (\text{I}_16)$$

Dans cette formule  $\sigma_a$  représente la partie de la section efficace incluant l'effet de l'interférence de la résonance avec le spectre continu,  $\sigma_b$  la partie ne contenant pas cet effet.

D'après les travaux de Balashov et al. [68], la méthode de diagonalisation en tant que simplification notable de la méthode de Feshbach [71] ou de Fano [61], consiste à négliger le couplage indirect des canaux fermés à travers les canaux ouverts [68].

### I-2-2- Méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire

A l'approximation d'ordre 1, la théorie des perturbations fournit pour l'énergie de l'état fondamental des systèmes atomiques à deux électrons le résultat suivant:

$$E(1s^2; ^1S) = E_1^{(1)} + E_1^{(2)} + \varepsilon_1 Z^2 E_H \quad (\text{I}_17.a)$$

Dans cette relation, le paramètre  $\varepsilon_1 = \frac{5}{4Z}$  désigne le coefficient de perturbation tenant compte des effets de corrélation électron-électron à l'approximation d'ordre 1 et

$$E_1^{(1)} = E_1^{(2)} = \frac{Z^2 \alpha^2 m_0 c^2}{2} = -Z^2 E_H, \quad (\text{I}_17.b)$$

$E_H$  est l'énergie de l'état fondamentale de l'atome d'hydrogène (H).

A un ordre d'approximation q, l'équation (I\_17.a) se généralise comme suit :

$$E(1s^2; {}^1S) = E_1^{(1)} + E_1^{(2)} + \left( \sum_{p=1}^q \varepsilon_p \right) Z^2 E_H \quad (\text{I}_{18.a})$$

C'est-à-dire :

$$E(1s^2; {}^1S) = -Z^2 E_H - Z^2 \left[ 1 - \left( \sum_{p=1}^q \varepsilon_p \right) \right] E_H \quad (\text{I}_{18.b})$$

Introduisons la charge effective notée  $Z^*$  et définie par

$$Z^{*2} = Z^2 \left( 1 - \sum_{p=1}^q \varepsilon_p(Z) \right) \quad (\text{I}_{19})$$

Par la suite posons : 
$$\left[ 1 - \beta(1S_0; Z) \right]^2 = \left[ 1 - \left( \sum_{p=1}^q \varepsilon_p \right) \right] \quad (\text{I}_{20})$$

L'équation (I\_19) s'écrit alors:

$$E(1s^2; {}^1S) = -Z^2 Ryd - Z^2 \left[ 1 - \beta(1S_0; Z) \right]^2 Ryd \quad (\text{I}_{21})$$

Dans cette équation, le second terme du membre de droite correspond à l'énergie de première ionisation. Ce qui permet de généraliser (I\_21) aux cas des états doublement excités de type  $(Nl, n'l')^{2S+1}L^\pi$  avec  $n = N, N+1, N+2, \dots$ :

$$E(Nnl'; {}^{2S+1}L^\pi) = -Z^2 \left( -\frac{1}{N^2} + \frac{1}{n^2} \left[ 1 - \beta(Nnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z) \right]^2 \right) Ryd \quad (\text{I}_{22})$$

Dans cette équation, N et n désignent respectivement les nombres quantiques principaux de l'électron interne et de l'électron externe de l'hélium et des ions héliumoïdes.

Quand au paramètre  $\beta$ , il correspond au coefficient d'écran par unité de charge nucléaire. Ce paramètre est défini par la relation :

$$\beta(Nnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z) = \sum_{k=1}^q f_k \left( \frac{1}{Z} \right)^k \quad (\text{I}_{23})$$

où  $f_k = f_k(Nnl'; {}^{2S+1}L^\pi)$  sont des paramètres à déterminer.

Dans la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire, le paramètre  $\beta(Nnl^i; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$  peut être déterminé en adoptant soit une procédure variationnelle soit une procédure semi-empirique.

-**La procédure variationnelle** emprunte les procédés de calcul des méthodes ab initio existantes. Comme la méthode des perturbations, la méthode variationnelle est une des techniques de calcul permettant de fournir des solutions approximatives à la résolution de l'équation de Schrödinger appliquée aux systèmes atomiques à deux électrons. Cette méthode est basée sur le principe variationnel.

Si  $E_0$  est la plus petite des valeurs propres de l'Hamiltonien  $\hat{H}$ , la valeur moyenne  $\langle \hat{H} \rangle$  dans un état quelconque  $|\psi\rangle$  de l'espace des états des systèmes atomiques est telle

$$\text{que : } \langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (\text{I}_{24})$$

L'égalité de l'expression (I\_23) se produit lorsque  $|\psi\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}$  avec la valeur propre  $E_0$ .

Dans le cadre de la procédure variationnelle de la méthode de la constante d'écran par unité de charge nucléaire, le ket approché  $|\psi\rangle$  correspondant aux fonctions d'onde d'essais de type  $\psi(r_1, r_2, \alpha)$ , où  $\alpha = f(\beta)$  est le paramètre variationnel. On détermine le paramètre  $\beta$  en minimisant la valeur moyenne  $\langle \hat{H} \rangle$  de l'énergie totale du système atomique ; soit :

$$\left. \frac{d \langle \hat{H} \rangle}{d \alpha} \right|_{\alpha = \alpha_0} = 0 \quad (\text{I}_{25})$$

La connaissance de  $\alpha_0 = f(\beta_0)$  permet alors de déterminer  $\beta = \beta_0$  puis d'exprimer l'énergie totale des systèmes héliumoides dans l'état considéré

- **Dans le cadre de la procédure semi-empirique**, la constante d'écran par unité de charge nucléaire  $\beta(Nnl^i; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$  est exprimée en fonction de paramètres empiriques (I\_25)

$$\beta(Nnl^i; {}^{2S+1}L^\pi; Z) = \sum_{k=1}^q f_k(Nnl^i; {}^{2S+1}L^\pi) \left(\frac{1}{Z}\right)^k \quad (\text{I}_{26})$$

Dans cette expression, les  $f_k(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi)$  sont des paramètres empiriques caractéristiques des effets de corrélation électronique à déterminer à partir des données expérimentales sur l'énergie des systèmes héliumoides ; l'ordre q détermine le degré de précision des calculs. La valeur q=0 est exclue car  $\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$  est une fonction de Z. En développant l'expression (I\_26) on obtient:

$$\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z) = f_1\left(\frac{1}{Z}\right)^1 + f_2\left(\frac{1}{Z}\right)^2 + f_3\left(\frac{1}{Z}\right)^3 + \dots + f_q\left(\frac{1}{Z}\right)^q \quad (I_27)$$

Cette expression montre que la constante  $\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$  est une équation linéaire en  $\frac{1}{Z}$  à q inconnues. La détermination de cette constante pour un état quantique donné, est analogue à celle des fonctions d'onde corrélées. Rappelons l'expression générale (I\_34) sur laquelle est basé le principe de détermination des paramètres  $f_k(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi)$ :

$$E(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi) = \left\{ -\frac{Z^2}{N^2} - \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 - \beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z) \right]^2 \right\} Ryd \quad (I_28)$$

Pour déterminer une expression correcte de  $\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$ , on fixe l'ordre q à une valeur déterminée. Ce qui donne d'après (I\_27) :

$$\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z) = f_1\left(\frac{1}{Z}\right)^1 + f_2\left(\frac{1}{Z}\right)^2 + f_3\left(\frac{1}{Z}\right)^3 \quad (I_29)$$

En portant cette expression de  $\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$  dans l'expression ci-dessus de l'énergie, on obtient :

$$E(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi) = \left\{ -\frac{Z^2}{N^2} - \frac{Z^2}{n^2} \left[ 1 - \frac{f_1}{Z} - \frac{f_2}{Z^2} - \frac{f_3}{Z^3} \right]^2 \right\} Ryd \quad (I_30)$$

Cette formule conduit alors à un système d'équations à trois inconnues. Pour résoudre ce système, la procédure semi-empirique fait recours aux valeurs expérimentales disponibles de l'énergie  $E(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi)$  pour trois valeurs de numéro atomique Z. L'expression ainsi établie est considérée comme acceptable, si elle reproduit avec une très bonne précision les valeurs expérimentales de l'énergie  $E(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi)$  disponibles pour  $Z > 3$  (ou, si elle donne

des résultats en bon accord avec les valeurs théoriques fournies par diverses autres méthodes de calcul si les valeurs expérimentales font défaut).

Dans la pratique, la variation du paramètre  $q$  est limitée par le nombre de résultats expérimentaux disponibles permettant le calcul des paramètres empiriques  $f_k(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi)$ .

Cependant, dans la méthode du coefficient d'écran par unité de charge nucléaire, la constante  $\beta(Nlnl'; {}^{2S+1}L^\pi; Z)$  est généralement déterminée pour  $q \leq 2$ . Cette méthode a permis de calculer les énergies de l'état fondamental et des états symétriques doublement excités ( $np^2$ )  ${}^1P^0$   $n \leq 5$  de l'atome d'hélium et les ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z \leq 12$  sans avoir recours à un programme de calcul informatique. Elle a permis également de calculer des énergies totales, des énergies d'interactions coulombienne électron-électron et des énergies d'excitation dans les états de double excitation ( $ns^2$ )  ${}^1S^e$ , ( $ns^2$ )  ${}^1D^e$ , ( $Nsnp$ )  ${}^1P^0$  de l'hélium et des ions Héliumoïdes [24].

### I-2-3- Méthode des orbitales atomiques de Slater

En 1930, J.C. Slater [72] propose une méthode de calcul approché de l'énergie et du rayon atomique d'un atome à plusieurs électrons basée sur la détermination de la charge nucléaire effective :

$$Z^* = Z - \sum_j \sigma_{ij} = Z - \sigma_i \quad (I_{31})$$

Où

$\sigma_{ij}$  : coefficient d'écran de l'électron  $j$  sur l'électron  $i$  ;

$\sigma_i$  : coefficient d'écran relatif à l'électron  $i$  et égal d'après (I\_31) à la somme des coefficients  $\sigma_{ij}$  dus à tous les électrons de l'atome considéré autres que l'électron  $i$ .

La théorie des orbitales atomiques de Slater utilise des fonctions d'onde spéciales de type hydrogénoïdes dans lesquelles la charge nucléaire  $Z$  est remplacée par la charge nucléaire effective  $Z^*$  définie par (I\_31) et sont de la forme :

$$\Psi_{nlm} = N_n \left( \frac{r}{a_0} \right)^{n^*-1} \exp \left( -\zeta \frac{r}{a_0} \right) Y_{lm}(\Theta, \varphi), \quad (I_{32})$$

Où  $N_n = (2\zeta)^{n+1/2} [(2n)!]^{-1/2}$  est la constante de normalisation ;

$\zeta = \frac{Z - \sigma_i}{n^*}$  est l'exponentielle orbitale ;

$n^*$  est le nombre quantique effectif lié au nombre quantique principal  $n$  suivant une règle empirique établie par Slater [72] et exposée plus bas.

Les fonctions d'ondes (I\_32) de Slater sont solutions de l'équation de Schrödinger pour l'atome hydrogénoïde d'hamiltonien (abstraction faite du spin) :

$$\hat{H} = -\frac{\eta^2}{2m}\Delta + \hat{V}(r) \quad (\text{I}_33)$$

Dans l'expression (I) l'opérateur énergie potentielle  $\hat{V}(r)$  est de la forme :

$$\hat{V}(r) = -e^2 \frac{(Z - \sigma_i)}{r} + \frac{\eta^2}{2m} \frac{n^*(n^* - 1)}{r^2} \quad (\text{I}_34)$$

Cette formule permet alors de préciser le sens physique du coefficient d'écran  $\sigma_i$  qui traduit l'effet exercé par les électrons autres que l'électron  $i$  sur la charge nucléaire  $Z$ . En résolvant l'équation de Schrödinger pour l'atome hydrogénoïde à potentiel (I\_33), on obtient les valeurs propres suivantes

$$E = -\frac{me^4}{2\eta^2} \frac{(Z - \sigma_i)^2}{(n^*)^2} \quad (\text{I}_35)$$

En unité atomique (au), l'expression (I\_35) devient:

$$E = -\frac{(Z - \sigma_i)^2}{(n^*)^2} \quad (\text{I}_36)$$

avec  $1\text{au} = 2\text{Ryd}$  (Rydberg) ;  $1\text{Ryd} = 13,605698 \text{ eV}$ .

L'expression (I\_36) coïncide avec celle d'un atome Hydrogénoïde de charge nucléaire effective  $(Z - \sigma_i)$  et de nombre quantique principal effectif  $n^*$ . En outre, cette expression montre que du point de vue électrostatique, l'électron  $i$  n'est pas attiré par  $Z$  protons du noyau mais plutôt par  $(Z - \sigma_i)$  protons, les électrons de sa propre couche et ceux des couches inférieures faisant écran électrostatique.

Les paramètres empiriques  $\sigma_i$  et  $n^*$  ont été approximés par Slater pour tous les éléments de la classification périodique de telle sorte que ces valeurs soient en bon accord avec les

données expérimentales obtenues par spectroscopies aux rayons X. L'évaluation des constantes  $\sigma_i$  et  $n^*$  se fait selon les règles suivantes de Slater :

La valeur de  $n^*$  est liée au nombre quantique principal  $n$  de la façon suivante :

$$\begin{array}{cccccc}
 n \dots\dots\dots & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\
 n^* \dots\dots\dots & 1 & 2 & 3 & 3,7 & 4 & 4,2
 \end{array}
 \tag{I_37a}$$

Les constantes d'écran  $\sigma_i$  sont déterminées en répartissant les orbitales atomiques (OA) en groupes : (1s) (2s2p) (3s3p) (3d) (4s4p) (4d) (4f) (5s5p) et ainsi de suite. Dans cette répartition, toutes les orbitales d'un même groupe ont la même fonction radiale. Pour une orbitale donnée, la valeur de  $\sigma_i$  est égale à la somme des contributions des électrons isolés.

Ces contributions sont résumées dans le tableau suivant :

**Tableau 1 :** Contribution des autres électrons à la constante d'écran

Origine de l'électron considéré	Contribution des autres électrons à la constante d'écran						Couches $>n$
	Couches $<n-1$	Couche $=n-1$	Couche $n$				
			1s	s, p	D	F	
1s	-	-	0,30				0
s ou p	1,00	0,85		0,35	0	0	0
D	1,00	1,00		1,00	0,35	0	0
F	1,00	1,00		1,00	1,00	0,35	0

L'ensemble des contributions (I\_36) à (I\_37) peut être résumées comme suit [73]:

$$(1s) = 0,30 (1s - 1)$$

$$(2p) = (2s) = 0,85 (1s) + 0,35 (2s + 2p - 1) ;$$

$$(3p) = (3s) = 1,00 (1s) + 0,85 (2s + 2p) + 0,35 (3s + 3p - 1) ;$$

$$(4p) = (4s) = 1,00 (1s + 2s + 2p) + 0,85 (3s + 3p + 3d) + 0,35 (4s + 4p - 1) ;$$

$$(3d) = 1,00 (1s + 2s + 2p + 3s + 3p) + 0,85 (2s + 2p) + 0,35 (3d - 1) ; \tag{I_37b}$$

Pour le calcul des constantes d'écran pour une configuration donnée, il faut remplacer 1s, 2s, 2p, 3d, etc... dans les seconds membres des relations ci-dessus par le nombre d'électrons occupant l'orbital correspondant. Par exemple dans le cas particulier de l'état fondamental,  $\sigma = 0,30(2 - 1) = 0,30$ . Bien que la théorie des orbitales atomiques de Slater est une méthode analytique approchée, elle permet de mettre en évidence les énergies

d'ionisations successives des atomes, la classification énergétique des différentes orbitales atomiques (la configuration électronique la plus stable correspond à l'énergie la plus basse) et aussi permet de justifier la règle de Klechkowsky avec le respect de l'ordre de remplissage des configurations électroniques 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d... [25]

#### I-2-4- Méthode des coordonnées hypersphériques

La méthode des coordonnées hypersphériques introduite par Macek [74] est une technique de calcul qui permet de rendre compte des effets de corrélations électroniques liés aux mouvements radial et angulaire des deux électrons dans les états de double excitation électronique. Pour la description de ces effets de corrélation, la fonction d'onde totale des états autoionisants est construite en utilisant des coordonnées collectives pour la paire d'électrons. Ces coordonnées appelées coordonnées hypersphériques sont définies par:

- ✓  $r_1$  et  $r_2$  sont les coordonnées des électrons,
- ✓ le rayon hypersphérique ou hyper rayon  $R = (r_1^2 + r_2^2)^{1/2}$  qui mesure "la taille" de l'état des électrons,
- ✓ Et l'angle hypersphérique ou hyperangle  $\alpha = \arctg(r_1 / r_2)$  qui décrit la corrélation entre les deux électrons.

La fonction d'onde totale des états de double excitation électronique dans les systèmes à deux électrons peut s'écrire sous la forme:

$$\psi^{KLM}(R, \alpha, r_1, r_2) = \sum_{\mu, l_1, l_2} (R^{5/2} \sin \alpha \cos \alpha)^{-1} F_{\mu}^{KL}(R) \phi_{\mu}^{LM}(R, \alpha, r_1, r_2) \quad (I_{-38})$$

Dans  $F_{\mu}^{KL}$ , K est un ensemble de nombres quantiques incluant énergie et L représente le moment angulaire total.

Les fonctions  $\phi_{\mu}^{LM}(R, \alpha, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  satisfont à l'équation différentielle suivante:

$$\left[ -\frac{d^2}{d\alpha^2} + \frac{l_1^2}{\cos^2 \alpha} + \frac{l_2^2}{\sin^2 \alpha} - RC(\alpha, \theta_{12}) \right] \phi_{\mu}^{LM} = -U_{\mu}(R) \phi_{\mu}^{LM} \quad (I_{39})$$

Dans l'équation (I\_39)  $U_{\mu}(R)$  est une valeur propre qui dépend paramétriquement de  $R$ ,  $l_i$  est le moment angulaire de l'électron  $i$ , et  $C(\alpha, \theta_{12})$  est un terme proportionnel à la somme des potentiels nucléaire et électrostatique:

$$C(\alpha, \theta_{12}) = \frac{2Z}{\cos \alpha} + \frac{2Z}{\sin \alpha} + 2(1 - \sin(2\alpha) \cos \theta_{12}) \quad (I_{40})$$

Avec  $\theta_{12} = \cos^{-1}(\frac{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2}{r_1 r_2})$

Les fonctions radiales  $F_{\mu}^{KL}$  satisfont à des équations différentielles couplées que l'on obtient en substituant l'expression (I\_38) dans l'équation de Schrödinger et en utilisant l'équation (I\_39).

Ces équations sont les suivantes:

$$\left[ \frac{d}{dR^2} + \frac{U_{\mu}(R)^{1/4}}{R^2} + \left( \phi_{\mu}^{LM} \frac{\partial^2 \phi_{\mu}^{LM}}{\partial R^2} \right) + 2E \right] \times F_{\mu}^{KL}(R) + \sum_{\mu \neq \mu'} \left[ \left( \phi_{\mu}^{LM} \frac{\partial^2 \phi_{\mu'}^{LM}}{\partial R^2} \right) + 2 \left( \phi_{\mu'}^{LM} \frac{\partial^2 \phi_{\mu}^{LM}}{\partial R^2} \right) - \frac{\partial}{\partial R} \right] F_{\mu'}^{KL}(R) = 0 \quad (I_{41})$$

Dans la méthode des coordonnées hypersphériques Macek [74] a introduit l'approximation dite adiabatique. Dans cette approximation appelée encore approximation quasi séparable, les termes du second membre de l'équation (I\_41) sont négligés.

La fonction d'onde (I\_38) dans ce cas est réduite à :

$$\psi_{\mu}^{KLM} = \left( R^{5/2} \sin \alpha \cos \alpha \right)^{-1} F_{\mu}^{KL}(R) \phi_{\mu}^{LM}(R, \alpha, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (I_{42})$$

L'approximation adiabatique a rendu possible un grand nombre d'études théoriques qui ont élucidé la dynamique des processus mettant en cause les systèmes héliumoïdes. Son application dans la méthode des coordonnées hypersphériques a donné des résultats satisfaisants pour la détermination des énergies des états doublement excités et des prédictions exactes sur la description de la dynamique des systèmes à deux électrons.

Une application importante de cette approximation est la classification des états doublement excités dans les systèmes à deux électrons formulée par le groupe de Fano [75], et par Lin [65]. Les fonctions d'onde quasi-séparables donnent en général une excellente représentation des fonctions d'onde dans les systèmes à deux électrons aux petites distances près du noyau.

Mais aux grandes distances radiales elles donnent une représentation proche de l'approximation de la particule indépendante.

### I-2-5- Méthode de Hylleraas

En 1928, Hylleraas [77] a proposé une méthode très précise pour le calcul des énergies de l'état fondamental de l'hélium et de sa série iso-électronique. Cette méthode utilise des fonctions d'onde de base de l'état fondamental construite par Hylleraas [77] et qui sont de la

$$\text{forme : } \Phi_{jkm}(\rho_1, \rho_2) = (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\rho_1 - \rho_2|^m \exp(-\lambda_0(r_1 + r_2)) \quad (\text{I}_43)$$

Dans cette expression, les grandeurs  $j$ ,  $k$ ,  $m$  et  $\lambda_0$  sont des paramètres introduits par Hylleraas tels que ( $j, k, m \geq 0$ ) et  $j + k + m \leq 3$  et  $\lambda_0 > 0$ . Du point de vue physique:

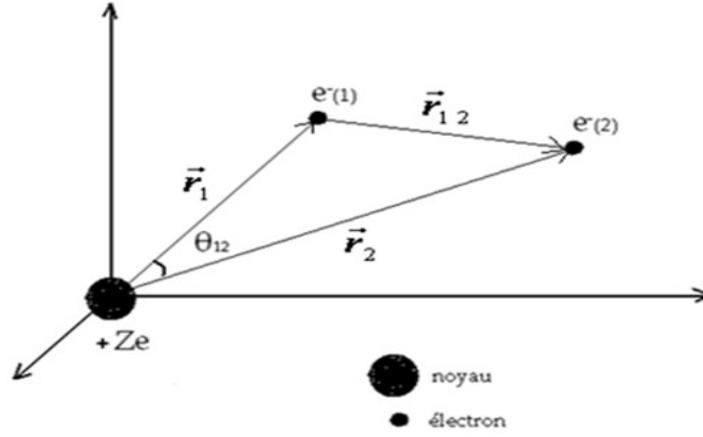
- $j$  tient compte de l'éloignement des deux électrons du noyau;
- $k$  tient compte du rapprochement des deux électrons du noyau;
- $m$  tient compte de la distance entre les deux électrons;
- $\lambda$  tient compte du paramètre variationnel et est défini par la relation:

$$\lambda_0 = \frac{Z}{\alpha r_0} \quad (\text{I}_44)$$

où  $Z$  désigne la charge nucléaire ;  $\alpha$  le paramètre variationnel et  $r_0$  le rayon atomique de Bohr.

Dans les fonctions d'onde de Hylleraas (I\_44), la partie angulaire représentant les harmoniques sphériques  $Y(\theta, \varphi)$  est déterminée par le cosinus de l'angle  $\theta_{12}$  que font entre elles les directions des rayons vecteurs  $\rho_1$  et  $\rho_2$  repérant respectivement les positions des deux électrons notés (1) et (2) dans l'espace (fig. 1). Cette partie angulaire est contenue dans le terme de corrélation comme le montre l'expression suivante:

$$|\rho_1 - \rho_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos\theta_{12}} \quad (\text{I}_45)$$



**Figure 1 :** Angle  $\theta_{12}$  intervenant dans la partie angulaire de fonction d'onde d'Hylleraas

Du point de vue pratique, la méthode de Hylleraas est basée sur le théorème de Hylleraas et Undheim [77] selon lequel une bonne approximation de l'énergie  $E$  d'un état donné est obtenue lorsque le minima de la fonction  $E = f(\alpha)$  converge rapidement en augmentant la dimension  $D$  de l'espace des états jusqu'à ce qu'elle exhibe un plateau.

En outre, dans la méthode de Hylleraas, l'hamiltonien  $\hat{H}$  du système héliumoïde est décomposé en une somme de trois termes comme suit :  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{C} + \hat{W}$  (I\_46)

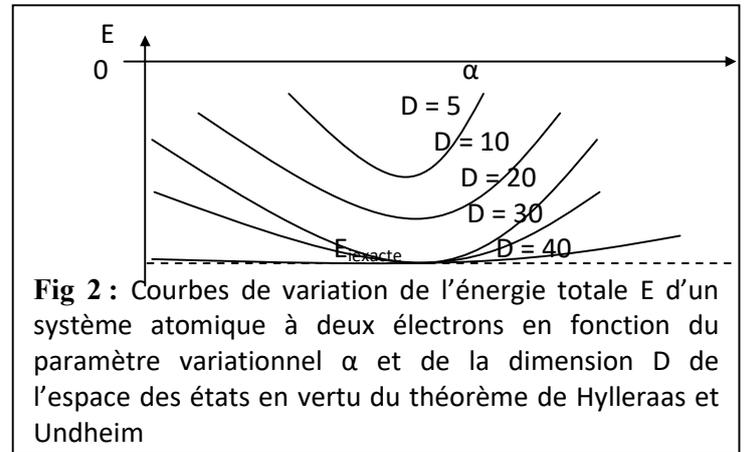
Dans cette relation,  $\hat{T}$  représente l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons,  $\hat{C}$  désigne l'opérateur d'énergie d'interaction coulombienne des deux électrons avec le noyau et  $\hat{W}$  traduit l'opérateur de corrélation électronique traduisant la répulsion coulombienne entre les deux électrons.

Ces trois opérateurs sont donnés respectivement par les expressions :

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}(A_1 + A_2) \quad (I_46)$$

$$\hat{C} = -\frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} \quad (I_47)$$

$$\hat{W} = \frac{e^2}{r_{12}} = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad (I_48)$$



**Fig 2 :** Courbes de variation de l'énergie totale  $E$  d'un système atomique à deux électrons en fonction du paramètre variationnel  $\alpha$  et de la dimension  $D$  de l'espace des états en vertu du théorème de Hylleraas et Undheim

L'originalité de la méthode de Hylleraas réside dans le fait de pouvoir calculer de façon séparée les trois composantes (I\_46) à (I\_47) de l'hamiltonien total (I\_48).

Ce qui permet alors de résoudre l'équation de Schrödinger par la séparation des variables par l'introduction de la partie radiale du terme de corrélation électronique dans la fonction d'onde comme l'indique l'expression (I\_48). L'énergie totale E de l'état fondamental est alors donnée par la somme de la valeur moyenne de chacun des trois termes précédents de l'Hamiltonien total (I\_53) dans l'état fondamental de fonction d'onde non normée définie par la relation :

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{C} \rangle + \langle \hat{W} \rangle \quad (\text{I}_49)$$

En considérant un opérateur  $\hat{A}$  dans le cas général, la valeur moyenne  $\langle \hat{A} \rangle$  dans l'état fondamental de fonction d'onde non normée (I\_49) est donnée par la relation :

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \Phi_{jkm} | \hat{A} | \Phi_{j'k'm'} \rangle}{\langle \Phi_{jkm} | \Phi_{j'k'm'} \rangle} = \frac{\langle \Phi_{jkm} | \hat{A} | \Phi_{j'k'm'} \rangle}{N_{JKM}} \quad (\text{I}_50)$$

avec  $N_{JKM} = \langle \Phi_{jkm} | \Phi_{j'k'm'} \rangle$ , (I\_51)

l'élément matriciel de la constante de normalisation. Les paramètres J, K et M sont respectivement égaux à :  $J = j + j'$  ;  $K = k + k'$  et  $M = m + m'$ .

En utilisant l'expression (I\_50) de la fonction d'onde  $\Psi_{jkm}$ , la relation (II.63) donne:

$$N_{JKM} = \iiint d^3r_1 d^3r_2 (r_1 + r_2)^J (r_1 - r_2)^K \left| \rho_{r_1} - \rho_{r_2} \right|^M \exp -2\lambda (r_1 + r_2) \quad (\text{I}_52)$$

En fonction des éléments matriciels, l'énergie totale E de l'état fondamental vérifie alors la relation :

$$E N_{JKM} = T_{jkmj'k'm'} + C_{JKM} + W_{JKM}, \quad (\text{I}_53)$$

Dans la méthode de Hylleraas le calcul des éléments matriciels dans la relation (I\_53), est facilité en opérant les changements de variables suivants par:

$$v = (r_1 + r_2) ; w = (r_1 - r_2) ; u = \cos\theta_{12} \quad (\text{I}_53)$$

Quant aux limites d'intégration, elles vérifient les inégalités ci-dessous :

$$0 \leq v < \infty ; -v \leq w \leq +v ; -1 \leq u \leq +1 \quad (\text{I}_54)$$

En utilisant les changements de variables précédents, on obtient les éléments matriciels des opérateurs intervenant dans l'équation (I\_54) :

Pour la constante de normalisation :

$$N_{JKM} = \frac{2\pi^2}{(M+2)} \left[ \frac{1}{(K+1)} - \frac{1}{(K+3)} - \frac{1}{(K+M+3)} + \frac{1}{(K+M+5)} \right] x^{(J+K+M+5)} \left( \frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+6} \quad (\text{I}_55)$$

Pour le terme de corrélation électronique :

$$W_{JKM} = e^2 N_{JKM-1} \quad (\text{I}_56)$$

Pour l'énergie potentielle d'interaction électrons -noyau :

$$C_{JKM} = -\frac{8\pi^2 Z e^2}{(M+2)} \left[ \frac{1}{(K+1)} - \frac{1}{(K+M+3)} \right] x^{(J+K+M+4)} \left( \frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+5} \quad (\text{I}_57)$$

Pour l'énergie cinétique des deux électrons :

$$T_{jkmj'k'm'} = \frac{\eta^2}{2m} \left[ 2 \left\{ \lambda^2 N_{JKM} - J \lambda N_{J-1, KM} + jj' N_{J-2, KM} + kk' N_{J, K-2, M} + mm' N_{J, K, M-2} \right\} \right. \\ \left. + 1/2 \left\{ -M\lambda (C_{JKM} - C_{J, K+2, M-2}) + (mj' + m'j) (C_{J-1, KM} - C_{J-1, K+2, M-2}) \right. \right. \\ \left. \left. + (mk' + m'k) (C_{J+1, K, M-2} - C_{J-1, KM}) \right\} \right] \quad (\text{I}_58)$$

Les expressions (I\_55) à (I\_58) sont les formules de base de la méthode de Hylleraas utilisées pour le calcul séparé de l'énergie de corrélation électroniques (I\_56), de l'énergie potentielle d'interaction électrons –noyau (I\_57) et de l'énergie cinétique des deux électrons (I\_58) de l'état fondamental de l'hélium et des ions héliumoïdes. Ce qui permet alors de calculer l'énergie totale E de l'état fondamental du système atomique à deux électrons considéré d'après l'équation (I\_57) ; soit :  $E = \langle \hat{T} \rangle + \langle \hat{C} \rangle + \langle \hat{W} \rangle$  (I\_59)

La méthode de Hylleraas a été appliquée avec succès dans le cas de l'état fondamental de l'hélium et de série isoélectronique par Hylleraas [77]. La méthode est aussi très pratique pour le calcul des énergies totales des états doublement excités des systèmes atomiques.

Pour ce qui concerne les états doublement excités, le seul problème réside dans la construction des fonctions d'onde corrélées adaptée à la description de ces états. Le principe de construction de ces fonctions d'onde est le suivant.

Les fonctions d'onde corrélées  $\Psi_{jkm\lambda}(r_1, r_2)$  sont construites en faisant le produit des fonctions d'onde radiales hydrogénoïdes  $R_{n\lambda}(r_1, r_2)$  incomplètes, par les fonctions d'onde de type Hylleraas donnée par (I\_49). Soit :  $\Psi_{jkm\lambda}(r_1, r_2) = R_{n\lambda}(r_1, r_2) x \Phi_{jkm\lambda}(r_1, r_2)$  (I\_60)

En utilisant (I\_59), les fonctions d'onde (I\_60) s'écrivent alors généralement sous la forme:

$$\Psi_{jkm\lambda}(\rho_1, \rho_2) = R_{n\lambda}(r_1, r_2) (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\rho_1 - \rho_2|^m \exp -\lambda(r_1 + r_2) \quad (I_61)$$

Dans cette expression le paramètre  $\lambda$  est fonction du nombre quantique principal  $n$  et généralise la relation (I\_61) relatif à l'état fondamental; soit donc:  $\lambda = \frac{Z}{\alpha r_0 n}$  (I\_62)

Sous la direction du Professeur Amadou Wagué du laboratoire Atomes Lasers, la méthode de Hylleraas a été appliquée avec succès par Biaye et al., [17-21] dans l'étude de la dynamique des corrélations électroniques dans les états doublement excités  $(2p^2)^1D$ ,  $(2p^2)^1D$  et  $(2p^2)^1D$  de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire  $Z \leq 12$ . Dans cette étude la fonction d'onde (I\_61) est de la forme:

$$\Psi_{jkm\lambda}(\rho_1, \rho_2) = (2r_1, 2r_2)^{n-1} (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\rho_1 - \rho_2|^m \exp -\lambda(r_1 + r_2) \quad (I_63)$$

De même, poursuivant ses recherches toujours sous la direction du Professeur Ahmadou Wagué, Biaye et Wagué [17-21] ont mis en œuvre une nouvelle description des états singulets doublement excités  $(n\lambda)^2$  et  $(n\lambda n\lambda')$  avec  $n \leq 4$  de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire  $Z \leq 12$ . Dans cette nouvelle description, la fonction d'onde (I\_63) est de la forme:  $\Psi_{jkm\lambda}(\rho_1, \rho_2) = (2r_1, 2r_2)^\lambda \sum_{\nu=0}^{n-\lambda-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^\nu x (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\rho_1 - \rho_2|^m \exp -\lambda(r_1 + r_2)$  (I\_64)

En guise de conclusion générale, nous noterons que pour l'ensemble des méthodes théoriques de calculs approchés présentées à divers endroits de ce paragraphe, la description correcte des propriétés de l'état fondamental et des états doublement excités:

1. Utilisent des procédés de calcul approchés très rigoureux et nécessitent un support mathématique très compliqué;
2. Nécessitent l'utilisation d'ordinateurs modernes via un programme informatique qui dépend de la méthode préconisée.

## CHAPITRE II :

Applications de la méthode variationnelle à l'étude  
des états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2$   
 $\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1I^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  ( $Z = 2-10$ )

Nous assistons actuellement à un développement rapide des études sur les systèmes atomiques à deux électrons aussi bien à l'état fondamental que dans les états de double excitation électronique encore appelés états d'auto-ionisation [13, 14, 81 - 89]. L'intérêt de ces études consiste à mieux comprendre les phénomènes de corrélations électroniques dans les systèmes atomiques à deux électrons qui sont des systèmes grâce auxquels on peut tester de nouvelles méthodes expérimentales et théoriques pouvant s'étendre par la suite à des systèmes plus complexes. Plusieurs études sont axées sur les calculs des énergies de l'état fondamental et des états doublement excités de l'hélium et des systèmes héliumoïdes en rapport avec l'importance des corrélations électroniques.

C'est dans ce cadre que nous avons trouvé de nouvelles fonctions d'onde de deux termes pour calculer les énergies des états singulets doublement excités  $(ns^2)^1S^e$ ,  $(np^2)^1D^e$ ,  $(nd^2)^1G^e$ ,  $(nf^2)^1I^e$ ,  $(nh^2)^1M^e$  et  $(ng^2)^1K^e$  avec  $n \leq 10$  et  $Z \leq 10$  en utilisant la méthode variationnelle.

## II-1- Etude de la théorie de la méthode variationnelle

L'un des principaux problèmes dans les études théoriques portant sur les états doublement excités est lié à l'importance et à l'influence des phénomènes de corrélation électronique qui existe dans ces états. Les effets de corrélation dans les états doublement excités sont si importants que la structure et les fonctions d'onde de ces états ne peuvent être décrites comme dans l'approximation des particules indépendantes. Et c'est surtout dans les états où les deux électrons excités occupent la même couche, que cet effet de corrélation devient prédominant [40].

Pour une description efficace de la dynamique des corrélations électroniques dans les états doublement excités, le choix de la fonction d'onde devient donc déterminant. Les fonctions d'onde de type Hylleraas [76] sont celles qui décrivent le mieux cette corrélation électronique [78], car les fonctions contiennent de façon explicite le terme de corrélation à savoir la

$$\text{distance inter-électronique } r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_{12} \quad (\text{II}_1)$$

Le terme  $r_{12}$  dans la fonction d'onde permet de générer des ensembles complets de fonctions angulaires. En effet, le développement de  $\theta_{12}$  obtenu grâce au théorème d'addition des harmoniques sphériques [79].

$$\cos \theta_{12} = \frac{4\pi}{3} \sum (-1)^m Y_1^m(r_1) Y_2^m(r_2) \quad (\text{II}_2)$$

Cette expression montre que le terme  $r_{12}$  peut coupler les moment angulaires s-s et p-p pour former les états S. De même, le terme  $r_{12}$  produirait le couplage des orbitales s-s, p-p et d-d pour former un état S. Ainsi donc les calculs d'interaction des configurations [61] pour l'état S est équivalent au calcul utilisant des fonctions de type Hylleraas [76] contenant les termes  $r_{12}^0, r_{12}^2, \dots, r_{12}^n$ , où l est le moment cinétique orbital. Cependant, il faut noter que ce sont les termes  $r_{12}$  ayant des puissances impaires qui accélèrent la convergence des calculs avec des fonctions de type Hylleraas [76]. Le terme de corrélation  $r_{12}$  contenu dans l'opérateur de l'énergie d'interaction coulombienne. électron-électron qui rend l'équation de Schrödinger (1\_1) non séparable, a conduit Hylleraas en 1928 [76] à proposer une fonction d'onde  $\Psi(r_1, r_2)$  mise sous une forme contenant de façon explicite ce terme de corrélation. Plusieurs méthodes telles que la rotation complexe [105], le formalisme des opérateurs de projection [61], ont eu à utiliser les fonctions d'onde corrélées de type d'Hylleraas [76], mais ce type de fonctions a surtout servi à la méthode variationnelle que nous avons adoptée dans ce présent travail.

Dans ce chapitre nous allons décrire en détail les différentes étapes des principes de base de la méthode variationnelle que nous avons utilisée pour le calcul des énergies des états doublement excités et nous avons montré les effets de la constante d'écran sur la charge nucléaire dans les états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1F^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  des systèmes héliumoides ( $Z \leq 10$ ).

### II-1-1- Procédure variationnelle

Comme la méthode des perturbations, la méthode variationnelle est une des techniques de calcul permettant de fournir des solutions approximatives à la résolution de l'équation de Schrödinger appliquée aux systèmes atomiques à deux électrons. Cette méthode est basée sur le principe variationnelle que nous rappelons.

Si  $E_0$  est la plus petite des valeurs propres de l'Hamiltonien  $\hat{H}$ , la valeur moyenne  $\langle \hat{H} \rangle$  dans un état quelconque  $|\psi\rangle$  de l'espace des états des systèmes atomiques est telle que :

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (\text{II}_3)$$

L'égalité de l'expression (II\_3) se produit lorsque  $|\psi\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}$  avec la valeur propre  $E_0$ .

Dans le cadre de la procédure variationnelle, la fonction d'onde d'essais de type  $\psi(r_1, r_2, \alpha)$ , où  $\alpha$  est le paramètre variationnel. On détermine le paramètre en minimisant la valeur moyenne  $\langle \hat{H} \rangle$  de l'énergie totale du système atomique ; soit :

$$\left. \frac{d \langle \hat{H} \rangle}{d \alpha} \right|_{\alpha = \alpha_0} = 0 \quad (\text{II}_4)$$

La connaissance de  $\alpha_0$  permet alors de déterminer puis d'exprimer l'énergie totale des systèmes Hélioïdes dans l'état considéré.

### II-1-2- Construction De La Fonction D'onde

L'impossibilité de résoudre de façon analytique l'équation de Schrödinger correspondante :  $H\Psi = E\Psi$  provient du terme en  $r_{12} = u = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  qui fait intervenir les positions des deux électrons. La résolution exacte de cette équation est alors impossible sans approximation à cause du terme de corrélation intervenant dans l'expression de l'Hamiltonien total H.

La fonction d'onde totale  $\Psi_{jkm}$  du Système atomique à deux électrons que nous avons utilisé pour l'étude des états  $(nl)^2$  est une combinaison linéaire des fonctions de base  $\Psi_{jkm}$  qui est sous la forme suivante:

$$\Psi_{jkm} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1} \binom{2v}{n^2 r_0^2}^v \left( C_{jkm} (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{r_1 - r_2} \right|^m + C_{jkmz} z (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \frac{\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2}{r_1 - r_2} \right|^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$$

(II\_5)

ou j, k et m sont des exposants entiers affectés aux distances  $r_1$ ,  $r_2$  et  $r_{12}$  ;

les éléments trivalents (j, k, m) forment la base et  $\alpha$  est un paramètre non linéaire.

n est le nombre quantique principale,  $r_0$  le rayon de Bohr (L'unité atomique de longueur correspond au rayon de la première orbite électronique du modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène. Elle porte le nom de Niels Bohr) :  $1 \text{ Bohr} = a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ , z la charge du noyau et  $\alpha$  la constante d'écran ;

Dans le deuxième terme l'équation (II\_5) on pose :  $j=k=0$  devient :

$$\Psi_{jkm} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1-1} \binom{2}{n} \binom{2}{r_0}^v \left( C_{jkm} (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \frac{r_1}{r_1} - \frac{r_2}{r_2} \right|^m + C_{jkm} z \left| \frac{r_1}{r_1} - \frac{r_2}{r_2} \right|^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$$

(II\_6)

En utilisant les coordonnées d'Hylleraas [76],  $s = r_1 + r_2$  ;  $t = r_1 - r_2$  ;  $u = r_1 r_2$  .

L'équation (II\_6) devient :

$$\Psi_{jkm} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1-1} \binom{2}{n} \binom{2}{r_0}^v \left( C_{jkm} s^j t^k u^m + C_{jkm} z u^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$$

(II\_7)

On pose  $\Psi_{jkm} = \Phi_{jkm} + \Phi'_{jkm}$  (II\_8)

avec  $\Phi_{jkm} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1-1} \binom{2}{n} \binom{2}{r_0}^v \left( C_{jkm} s^j t^k u^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$  (II\_9)

et

$$\Phi'_{jkm} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1-1} \binom{2}{n} \binom{2}{r_0}^v \left( C_{jkm} z u^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$$

(II\_10)

Pour  $j=k=0$  et  $m=0$  ou  $m=1$  on a :  $\Phi_{000} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1-1} \binom{2}{n} \binom{2}{r_0}^v \left( C_{000} \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$  (II\_11)

Et  $\Phi'_{001} = \frac{1}{4\pi} \sum_{v=0}^{v=n-1-1} \binom{2}{n} \binom{2}{r_0}^v \left( C_{001} z u \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)}$  (II\_12)

Le paramètre  $C_{000}$  est déterminé par une procédure semi empirique et  $C_{001}$  par une procédure variationnelle d'équation linéaire homogène:

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial c_{001}} = 0$$

(II\_13)

### II-1-3- Transformation de l'hamiltonien

Les calculs variationnels utilisant des fonctions d'onde de type Hylleraas [76] conduisent généralement à une transformation de l'hamiltonien en coordonnées non orthogonales. Cette transformation prend en compte l'introduction explicite de la distance inter électronique  $r_{12}$  dans la fonction d'onde. C'est ainsi qu'on passe d'un hamiltonien en coordonnées cartésiennes  $(x, y, z)$  ou sphériques  $(r, \theta, \Phi)$  à celui d'un hamiltonien exprimé en fonction des coordonnées de Hylleraas  $(r_{12}, \theta, \Phi, r)$  où  $r_{12}$  représente la distance entre deux électrons. Cette méthode de transformation qui est basée sur la technique des dérivées partielles se fait sans trop de difficultés. Dans ce travail, nous avons exprimé l'hamiltonien en coordonnées cartésiennes.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i \left( \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \sum_i \frac{Z}{(x_i^2 + y_i^2 + z_i^2)^{1/2}} + \sum_{i,j} \frac{1}{\left[ (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 \right]^{1/2}}$$

(II\_14)

et effectué la transformation en coordonnées de Hylleraas [39] en utilisant les relations aux dérivées partielles suivantes:

$$H = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{en a.u.}) \quad (\text{II}_{15})$$

$\Delta_1$  est le Laplacien se reportant aux coordonnées du rayon vecteur  $r_1$  qui repèrent la position de l'électron 1,

$\Delta_2$  est le Laplacien se reportant aux coordonnées du rayon vecteur  $r_2$  qui repèrent la position de l'électron 2 et  $r_{12} = \left| \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \right|$  la distance inter électronique.  $Z$  est la charge nucléaire et

$\frac{1}{r_{12}}$  l'Hamiltonien de perturbation correspondant au terme de corrélation électron

(énergie de répulsion coulombienne entre les deux électrons).

Le Laplacien s'exprime sous la forme :

$$\Delta_i = \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left( r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left( \sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \quad (\text{II}_{16})$$

## II-2- Calcul d'énergie des états singulets doublement excités (nl)<sup>2</sup>

Pour le calcul de l'énergie, on utilise la formule :

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \Psi_{jkm} | H | \Psi_{jkm} \rangle}{\langle \Psi_{jkm} | \Psi_{jkm} \rangle} \quad (\text{II}_{17})$$

Dans cette équation,  $H$  est l'Hamiltonien défini par :

Les intégrales de volume peuvent être écrites de la manière suivante:

$$\int d\tau = 8\pi^2 \int r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \sin\theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{II}_{18})$$

En outre, la relation de fermeture traduisant le fait que les kets  $|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle$  sont des bases continues dans l'espace  $E_r$  des états des deux électrons s'écrit :

$$\iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \left| \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right\rangle \left\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right| = 1 \quad (\text{II}_{19})$$

En utilisant cette relation, on tire à partir de la valeur moyenne de l'équation

$$E \iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \left\langle \Psi_{jkm} \left| \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right\rangle \times \left\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| \Psi_{jkm} \right\rangle = \iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \left\langle \Psi_{jkm} \left| \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \right\rangle \hat{H} \left\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \left| \Psi_{jkm} \right\rangle \quad (\text{II}_{20})$$

En développant cette expression on obtient :

$$E \iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \Psi_{jkm} \times \Psi_{jkm}^* = \iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \Psi_{jkm} \hat{H} \Psi_{jkm}^* \quad (\text{II}_{21})$$

C'est-à-dire :

$$N * E = \iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \Psi_{jkm} \hat{H} \Psi_{jkm}^* \quad (\text{II}_{22})$$

avec

$$N = \iint d\mathbf{r}_1^3 d\mathbf{r}_2^3 \left| \Psi_{jkm} \right|^2 \quad (\text{II}_{22})$$

la constante de normalisation.

Sur la base de ces changements de variable:

$$\text{L'élément de volume élémentaire est: } d\tau = dr_1^3 dr_2^3 \quad (\text{II}_{23})$$

$$\text{s'écrit : } d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du \quad (\text{II}_{24})$$

$$\text{Or } u^2 = r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_{12} \quad (\text{II}_{25})$$

$$\text{ceux qui donne: } u du = r_1 r_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{II}_{26})$$

$$\text{et } \begin{cases} \frac{du^2}{du} = 2u \\ \frac{du^2}{d\theta_{12}} = 2r_1 r_2 \sin \theta_{12} \end{cases} \quad (\text{II}_{27})$$

$$\begin{cases} du^2 = 2u du \\ du^2 = 2r_1 r_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} \end{cases} \quad (\text{II}_{28})$$

$$u du = r_1 r_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{II}_{29})$$

$$\int d\tau = 8\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \int_0^\pi \sin \theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{II}_{31})$$

L'équation (II\_31) devient :

$$\int d\tau = 8\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty r_1 r_2 dr_1 dr_2 \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} u du \quad (\text{II}_{32})$$

et Eq.(II\_32) apparaît dans le travail de Hylleraas [88]

Avec :

$$\begin{cases} \text{pour } \theta_{12} = \pi, & u = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_{12}} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2} = \sqrt{(r_1 + r_2)^2} = r_1 + r_2 \\ \text{pour } \theta_{12} = 0, & u = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_{12}} = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2} = \sqrt{(r_1 - r_2)^2} = |r_1 - r_2| \end{cases} \quad (\text{II}_{33})$$

De même :

$$s^2 - t^2 = r_1^2 + r_2^2 + 2r_1r_2 - (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2) = 4r_1r_2 \quad (\text{II}_{34})$$

$$r_1 r_2 = \frac{1}{4} (s^2 - t^2) \quad (\text{II}_{35})$$

$$\text{Et } d r_1 d r_2 = \frac{1}{2} d s d t \quad (\text{II}_{36})$$

Enfin nous obtenons (pour un volume infini):

$$\int d\tau = 2\pi^2 \int_0^\infty ds \int_0^s dt \int_t^s (s^2 - t^2) u du \quad (\text{II}_{37})$$

$$\text{Ce qui permet de décrire : } d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du \quad (\text{II}_{38})$$

et la constante de normalisation

$$N = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^t dt u (s^2 - t^2) \times \Psi_{jkm}^2 \quad (\text{II}_{39})$$

Et l'équation (II\_36) devient:

$$N * E = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^t dt \left\{ u (s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial u} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. 2 \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial u} \right) \times \left[ s (u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial s} + t (s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial t} \right] - \Psi_{jkm}^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (\text{II}_{40})$$

$$\text{Puisse que } \Psi_{jkm} \text{ est indépendante de } t \text{ donc : } \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial t} = 0 \quad (\text{II}_{41})$$

$$N * E = \int_0^{\infty} ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial u} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. 2 \left( \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial u} \right) \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi_{jkm}}{\partial s} \right] - \Psi_{jkm}^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (\text{II}_{42})$$

L'expression (II\_41) montre bien le fait que la fonction d'onde corrélée de l'état fondamental est indépendante des coordonnées elliptiques  $s$  et  $u$ . L'expression (II\_42) se simplifie alors comme suit :

$$NE = \int_0^{\infty} ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \times \left( \frac{d\Psi}{ds} \right)^2 - \Psi^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (\text{II}_{43})$$

Le ket d'essai  $|\psi\rangle$  est exprimé sous la forme d'une combinaison linéaire de vecteurs de base approchés, soit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_{jkm} |\phi_{jkm}\rangle \quad (\text{II}_{44})$$

Où  $c_{jkm}$  sont des paramètres appelés coefficients de Ritz et  $|\phi_{jkm}\rangle = |\phi_i\rangle$  sont les kets approximatés. En portant cette dernière équation dans (4), on obtient :

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i c_j \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle}{\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^{q'} c_i c_j \delta_{ij}} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i^2 \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle}{\sum_{i=1}^n c_i^2} \quad (\text{II}_{45})$$

avec  $c_i = C_{000} = C_{001}$

Les coefficients  $c_i$  sont déterminés en calculant la valeur moyenne  $\langle H \rangle$  et en minimisant

$$\text{cette valeur par rapport aux paramètres } c_i : \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial c_i} = 0 \quad (\text{II}_{46})$$

### II-3- Résultats et Discussions

Dans les tableaux 1 ,2,3,4,5 nous présentons nos résultats des calculs que nous avons obtenus pour les états singulets doublement excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1I^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  de l'hélium et des ions héliumoides de charge nucléaire  $Z \leq 10$ . Ensuite dans les 6,7,8,9,10 nous comparons nos résultats avec d'autres auteurs.

En fixant:  $C_{000} = 0,25$  et  $\alpha = 0,24$  et on calcule les paramètres  $C_{001}$  par la formule (II\_60). Pour la comparaison avec les autres résultats théoriques, nous utilisons pour la conversion de l'énergie:

1 a.u. = 27,211396 eV et toutes les énergies sont rapportées dans eV: 1 Ryd = 13,605698 eV.

L'obtention des valeurs des résultats a nécessité l'utilisation d'un programme de calcul numérique MAXIMA 5.20.1. Ce logiciel MAXIMA est un logiciel libre de calcul formel assez complet. Il a été réalisé en COMMON LISP par William F. Schelter, à partir de la version originale de Macsyma réalisée au MIT (Massachusetts Institute of Technology) en 1968 through 1982 as part of Project MAC. et fut distribuée par le Department Of Energy (DOE). Le DOE ayant accordé la permission à W. Schelter d'en faire des copies dérivées, et en particulier de le distribuer sous licence publique GNU, les fichiers de MAXIMA peuvent désormais être redistribués selon les termes de la licence publique GNU. Maxima bénéficie d'un environnement agréable pour faire le calcul numérique des équations complexes en déterminant leurs racines réelles, d'intégrer ou de dériver des fonctions, de manipuler des matrices (inversion, combinaison, calcul de déterminant etc....), des séries entières, des limites, des séries de Poisson (utilisées en mécanique céleste) etc. ...., car on dispose sous la main des méthodes usuelles de cette discipline entre autre la résolution des systèmes linéaires et le calcul des valeurs propres et vecteurs propres.

**Tableau 2 :** Energies (eV) des états doublement excités ( $ns^2$ )  $^1S^e$  ( $n \leq 10$ ) des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z= 2- 10$ .

Etats	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$2s^2\ ^1S^e$	$C_{001}$	0,500	0,500	0,500	0,500	0,500	0,330	0,185	0,084	0,084
	$\alpha$	0,650	1,000	1,400	1,820	2,400	2,950	3,000	3,000	3,420
	-E	21,0911	51,0011	95,9474	153,7411	226,9079	312,0015	408,6070	520,4341	646,9293
$3s^2\ ^1S^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,273	0,420	0,570	0,720	0,860	1,013	1,160	1,310	1,460
	-E	9,6415	23,3721	43,2951	69,2880	100,1855	138,4109	181,7657	231,3508	286,6510
$4s^2\ ^1S^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,150	0,235	0,320	0,400	0,489	0,569	0,652	0,730	0,820
	-E	5,3518	13,1868	24,4968	38,7983	57,4189	78,4371	103,1881	130,4292	163,2090
$5s^2\ ^1S^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,09	0,145	0,200	0,250	0,31	0,360	0,412	0,465	0,520
	-E	3,2208	8,1537	15,3367	24,2847	36,4525	49,6952	65,2990	83,2072	103,6793

<b>6s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,065	0,102	0,140	0,177	0,214	0,250	0,287	0,325	0,362
	-E	2,3281	5,7388	10,7395	17,1974	25,1685	34,5148	45,4918	58,1609	72,1843
<b>7s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,048	0,076	0,102	0,130	0,157	0,184	0,211	0,238	0,265
	-E	1,7200	4,2767	7,8249	12,6305	18,4632	25,3999	33,4405	42,5850	52,8333
<b>8s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,04	0,061	0,082	0,1022	0,123	0,1437	0,1645	0,186	0,206
	-E	1,4336	3,4328	6,2904	9,9287	14,4632	19,8341	26,0668	33,2751	41,0631
<b>9s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,032	0,0481	0,0645	0,081	0,0973	0,1137	0,131	0,147	0,163
	-E	1,1470	2,7069	4,9477	7,8684	11,4398	15,6912	20,7554	26,2939	32,4862
<b>10s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,026	0,039	0,053	0,066	0,079	0,093	0,106	0,119	0,1322
	-E	0,9321	2,1947	4,0653	6,4107	9,2873	12,8331	16,7923	21,2827	26,3441

**Tableau 3 :** Energies (eV) des états doublement excités ( $np^2$ )  $^1D^e$  ( $n \leq 10$ ) des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z= 2- 10$ .

Etats	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$2p^2\ ^1D^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,175	0,108
	$\alpha$	0,565	0,910	1,250	1,640	2,030	2,480	3,200	3,500	3,500
	-E	19,1069	48,3479	90,2343	147,9406	217,3051	300,1269	397,2334	508,3765	632,7219
$3p^2\ ^1D^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,240	0,390	0,530	0,680	0,830	0,980	1,130	1,280	1,430
	-E	8,5036	21,7398	40,3227	65,5273	96,7788	134,0326	177,2247	177,2247	281,0517
$4p^2\ ^1D^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,135	0,220	0,300	0,380	0,460	0,550	0,630	0,714	0,795
	-E	4,8209	12,3506	22,9744	36,8686	54,0316	75,8325	99,7270	127,5893	158,2704
$5p^2\ ^1D^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,086	0,140	0,190	0,240	0,290	0,350	0,400	0,455	0,510
	-E	3,0781	7,8732	14,5711	23,3145	34,1031	48,3161	63,3988	81,4195	101,6877

<b>6p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,061	0,097	0,133	0,170	0,207	0,244	0,281	0,318	0,355
	-E	2,1851	5,4577	10,2028	16,5173	24,3452	33,6863	44,5405	56,9078	70,7880
<b>7p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,043	0,071	0,098	0,125	0,152	0,179	0,207	0,230	0,261
	-E	1,5410	3,9954	7,5180	12,1445	17,8750	24,7094	32,8062	41,1526	52,0353
<b>8p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,0395	0,0601	0,0808	0,1016	0,123	0,143	0,164	0,185	0,205
	-E	1,4156	3,3822	6,1984	9,8704	14,4632	19,7374	25,9876	33,0961	40,8636
<b>9p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,032	0,048	0,064	0,081	0,097	0,114	0,1297	0,1464	0,163
	-E	1,1471	2,7012	4,9093	7,8684	11,4045	15,7326	20,5493	26,1865	32,4862
<b>10p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,026	0,039	0,052	0,0656	0,079	0,092	0,105	0,1185	0,132
	-E	0,9321	2,1947	3,9886	6,3719	9,2873	12,6951	16,6338	21,1932	26,3042

**Tableau 4 :** Energies (eV) des états doublement excités ( $nd^2$ )  $^1G^e$  ( $n \leq 10$ ) des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z= 2- 10$ ,

Etats	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b>3d<sup>2</sup><sup>1</sup>G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,240	0,390	0,540	0,680	0,830	0,980	1,140	1,290	1,440
	-E	8,5036	21,7398	41,0673	65,5273	96,7788	134,0326	178,7402	227,9650	282,9209
<b>4d<sup>2</sup><sup>1</sup>G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,15	0,22	0,30	0,39	0,47	0,55	0,64	0,72	0,80
	-E	5,3518	12,3506	22,9744	37,8337	55,2001	75,8325	101,3006	128,6545	159,2585
<b>5d<sup>2</sup><sup>1</sup>G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,085	0,135	0,190	0,243	0,296	0,350	0,403	0,456	0,510
	-E	3,0424	7,5926	14,5711	23,6056	34,8081	48,3161	63,8739	81,5983	101,6877
<b>6d<sup>2</sup><sup>1</sup>G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,057	0,095	0,132	0,250	0,285	0,321	0,358	0,394	0,431
	-E	2,0420	5,3453	10,1261	24,2847	33,5157	44,3155	56,7457	70,5096	85,9444

<b>7d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,042	0,070	0,097	0,124	0,152	0,178	0,206	0,233	0,260
	-E	1,5052	3,9392	7,4413	12,0474	17,8750	24,5712	32,6476	41,6898	51,8358
<b>8d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,039	0,0596	0,0801	0,101	0,122	0,143	0,1632	0,18	0,205
	-E	1,3977	3,3541	6,1446	9,8121	14,3455	19,7374	25,8607	32,2011	40,8636
<b>9d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,031	0,047	0,063	0,080	0,0964	0,113	0,129	0,146	0,1622
	-E	1,1112	2,6451	4,8326	7,7712	11,3341	15,5945	20,4383	26,1149	32,3267
<b>10d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,0252	0,0384	0,052	0,065	0,079	0,0916	0,105	0,1183	0,1315
	-E	0,9033	2,1611	3,9886	6,3136	9,2873	12,6398	16,6338	21,1574	26,2045

**Tableau 5 :** Energies (eV) des états doublement excités ( $nf^2$ )  $^1I^e$ , ( $n \leq 10$ ) des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z= 2- 10$ ,

Etats	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$4f^2\ ^1I^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,141	0,216	0,306	0,387	0,470	0,554	0,637	0,720	0,800
	-E	5,0334	12,1274	23,4313	37,5443	55,2094	76,3810	100,8286	128,6545	159,2585
$5f^2\ ^1I^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,082	0,135	0,188	0,242	0,295	0,349	0,401	0,455	0,503
	-E	2,9354	7,5926	14,4180	23,5086	34,6906	48,1782	63,5572	81,4195	100,2934
$6f^2\ ^1I^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,058	0,094	0,131	0,167	0,205	0,242	0,279	0,316	0,353
	-E	2,0778	5,2891	10,0494	16,2259	24,1099	33,4101	44,2234	56,5498	70,3891
$7f^2\ ^1I^e$	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,042	0,069	0,096	0,123	0,151	0,178	0,205	0,232	0,259
	-E	1,5052	3,8829	7,3646	11,9502	17,7573	24,5712	32,4890	41,5107	51,6363

<b>8f<sup>2</sup>1Γ<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
<b>3</b>	α	0,038	0,0588	0,0795	0,1002	0,121	0,142	0,1626	0,1834	0,2042
	-E	1,3619	3,3091	6,0986	9,7343	14,2279	19,5993	25,7656	32,8097	40,7041
<b>9f<sup>2</sup>1Γ<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,031	0,047	0,063	0,0796	0,096	0,113	0,129	0,145	0,162
	-E	1,1112	2,6451	4,8326	7,7323	11,2869	15,5945	20,4383	25,9359	32,2868
<b>10f<sup>2</sup>1Γ<sup>e</sup></b>	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	α	0,025	0,039	0,052	0,065	0,078	0,091	0,105	0,118	0,132
	-E	0,8962	2,1947	3,9886	6,3136	9,1697	12,5569	16,6338	21,1038	26,3042

**Tableau 6 :** Energies (eV) des états doublement excités ( $ng^2$ )  $^1K^e$ , ( $nh^2$ )  $^1M^e$  ( $n \leq 10$ ) des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z= 2- 10$ ,

Etats	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b><math>5g^2^1K^e</math></b>	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,082	0,135	0,188	0,241	0,295	0,347	0,402	0,454	0,508
	-E	2,9354	7,5926	14,4180	23,4115	34,6906	47,9023	63,7156	81,2408	101,2893
<b><math>6g^2^1K^e</math></b>	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,057	0,093	0,131	0,167	0,205	0,242	0,279	0,316	0,353
	-E	2,0420	5,2328	10,0494	16,2259	24,1099	33,4101	44,2234	56,5498	70,3891
<b><math>7g^2^1K^e</math></b>	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,042	0,069	0,096	0,123	0,151	0,177	0,205	0,232	0,259
	-E	1,5052	3,8829	7,3646	11,9502	17,7573	24,4331	32,4890	41,5107	51,6363
<b><math>8g^2^1K^e</math></b>	$C_{001}$	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
	$\alpha$	0,038	0,058	0,079	0,0998	0,121	0,141	0,162	0,183	0,204
	-E	1,3619	3,2641	6,0602	9,6954	14,2279	19,4612	25,6704	32,7381	40,6641

	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
<b>9g<sup>21</sup>K<sup>e</sup></b>	α	0,031	0,047	0,063	0,079	0,096	0,112	0,1286	0,145	0,162
	-E	1,1112	2,6451	4,8326	7,6741	11,2869	15,4564	20,3749	25,9359	32,2868
	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
<b>10g<sup>21</sup>K<sup>e</sup></b>	α	0,025	0,038	0,051	0,064	0,078	0,091	0,105	0,1178	0,131
	-E	0,8962	2,1384	3,9119	6,2164	9,1697	12,5569	16,6338	21,0681	26,1048
	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
<b>6h<sup>21</sup>M<sup>e</sup></b>	α	0,057	0,093	0,130	0,167	0,205	0,241	0,278	0,315	0,352
	-E	2,0420	5,2328	9,9727	16,2259	24,1099	33,2720	44,0648	56,3707	70,1896
	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25
<b>7h<sup>21</sup>M<sup>e</sup></b>	α	0,041	0,068	0,096	0,123	0,150	0,177	0,204	0,232	0,259
	-E	1,4693	3,8267	7,3646	11,9502	17,6397	24,4331	32,3305	41,5107	51,6363
	C <sub>001</sub>	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25	0,25

Le tableau 6 compare nos résultats avec les résultats théoriques de Gning [38] pour les états  $2s^2\ ^1S^e$  et  $3s^2\ ^1S^e$  en utilisant une méthode de rotation complexe, Sakho [25] pour les états  $2s^2\ ^1S^e$ ,  $3s^2\ ^1S^e$ ,  $4s^2\ ^1S^e$ ,  $5s^2\ ^1S^e$ ,  $6s^2\ ^1S^e$ ,  $7s^2\ ^1S^e$ ,  $8s^2\ ^1S^e$ ,  $9s^2\ ^1S^e$ ,  $10s^2\ ^1S^e$  en utilisant la méthode de sélection des constantes par unité de charge nucléaire (SCUNC), Ho [100]  $2s^2\ ^1S^e$  et  $3s^2\ ^1S^e$  en utilisant la méthode de rotation de coordonnées complexes. On observe un bon accord en comparant nos énergies totales pour  $(ns^2)\ ^1S^e$ ,  $n \leq 10$  à celles disponibles. Nous notons un petit désaccord entre nos résultats et les autres calculs théoriques. Pour les  $3s$ ,  $4s$  et  $5s\ ^1S^e$  indique la comparaison avec les valeurs théoriques de Gning, Ho donne un bon accord. Ces désaccords s'expliquent par le choix des fonctions de l'onde.

Dans le tableau 7, nous comparons nos résultats avec ceux d'Ivanov [5] pour les états  $2p^2\ ^1D^e$  et  $3p^2\ ^1D^e$  en utilisant la méthode à double somme sur le spectre complet de l'hydrogène, A. K. Roy [101] pour les états  $2p^2\ ^1D^e$ ,  $3p^2\ ^1D^e$ ,  $4p^2\ ^1D^e$  et  $5p^2\ ^1D^e$  en utilisant les résultats de la théorie fonctionnelle de densité, S. Diehl [102] pour les états  $2p^2\ ^1D^e$  et  $3p^2\ ^1D^e$ . Avec le résultat expérimental disponible de  $Li^+$  obtenu et pour les états aussi doublement excités, nous voyons un excellent accord entre nos valeurs et celles de Sakho [24] pour les états  $2p^2\ ^1D^e$ ,  $3p^2\ ^1D^e$ ,  $4p^2\ ^1D^e$ ,  $5p^2\ ^1D^e$ ,  $6p^2\ ^1D^e$ ,  $7p^2\ ^1D^e$ ,  $8p^2\ ^1D^e$ ,  $9p^2\ ^1D^e$ ,  $10p^2\ ^1D^e$ . Pour ces états, nous notons généralement un assez bon accord entre nos résultats et ceux de Sakho, Ivanov et Roy pour des valeurs faibles.

Nous avons aussi comparé nos résultats dans le tableau 8 avec les valeurs de Sakho [25] pour les états  $3d^2\ ^1G^e$ ,  $4d^2\ ^1G^e$ ,  $5d^2\ ^1G^e$ ,  $6d^2\ ^1G^e$ ,  $7d^2\ ^1G^e$ ,  $8d^2\ ^1G^e$ ,  $9d^2\ ^1G^e$ ,  $10d^2\ ^1G^e$  et avec les valeurs de Biaye [103], Roy [101], Ray [22] et Diehl [102] pour les états  $3d^2\ ^1G^e$  et  $4d^2\ ^1G^e$ . La comparaison montre également un bon accord avec les résultats variés de Hylleraas de Biaye et al [103], les résultats de la théorie fonctionnelle de densité de Roy et al. [101] et les résultats de la théorie des perturbations dépendantes du temps de Ray et Mukherjee [22]. Un très bon accord est également noté entre nos résultats et celui de Diehl [102]. Nous trouvons généralement un accord satisfaisant entre les calculs actuels avec  $Z \leq 10$  et ceux de Biaye et al.

Le tableau 9 compare nos résultats avec les résultats théoriques de Sakho [25] pour les états  $4f^2\ ^1I^e$ ,  $5f^2\ ^1I^e$ ,  $6f^2\ ^1I^e$ ,  $7f^2\ ^1I^e$ ,  $8f^2\ ^1I^e$ ,  $9f^2\ ^1I^e$ ,  $10f^2\ ^1I^e$  et Biaye [103] pour l'état  $4f^2\ ^1I$ . Nous notons généralement un accord satisfaisant entre nos résultats et ceux de Sakho et Biaye.

Nous comparons nos résultats dans le tableau 10 avec ceux de Sakho [25] pour les états  $5g^2\ ^1K^e$ ,  $6g^2\ ^1K^e$ ,  $7g^2\ ^1K^e$ ,  $6h^2\ ^1M^e$ ,  $7h^2\ ^1M^e$ . Nous trouvons des résultats satisfaisants par rapport à ces résultats expérimentaux disponibles de Sakho.

En résumé, nous avons calculé les énergies des états singulets doublement excités de l'hélium et des ions héliumoïdes en utilisant des fonctions d'ondes de formes spéciales, de type Hylleraas et en développant une approximation qui nous a permis de faire les calculs dans ces états. Ces derniers ont été faits à l'aide de la méthode variationnelle. Nous notons généralement, un accord assez satisfaisant entre nos résultats et les autres calculs disponibles. Les légers désaccords notés entre nos résultats et ceux obtenus par d'autres méthodes de calculs peuvent être expliqués par le fait que nous avons négligé dans nos calculs les effets provenant des interactions entre les canaux ouverts et fermés.

Ces désaccords peuvent aussi être expliqués par le choix de la partie angulaire des fonctions d'onde qui ne tient pas compte assez des effets des corrélations électroniques dans les systèmes atomiques doublement excités.

**Tableau 7 :** Comparaison des énergies des 'états doublement excités  $(ns^2) ^1S^e$   $2 \leq n \leq 10$  de l'Hélium et des ions Héliumoïdes de charge nucléaire ( $Z = 2- 10$ ) avec d'autres résultats théoriques.

Etats $ns^2 ^1S^e$	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$2s^2 ^1S^e$	-E <sup>P</sup>	21,09	51,00	95,94	153,74	226,90	312,00	408,60	520,43	646,92
	E <sup>a</sup>	21,16	51,86	96,15	154,03	225,53	310,62	409,33	521,62	647,54
	E <sup>b</sup>	21,19	52,00	96,43	154,45	226,09	311,32	410,17	522,62	648,67
	E <sup>c</sup>	21,16	51,86	96,15	154,04	225,53	310,63	409,33	521,62	647,54
$3s^2 ^1S^e$	-E <sup>P</sup>	9,64	23,37	43,29	69,28	100,18	138,41	181,76	231,35	286,65
	E <sup>a</sup>	9,61	23,40	43,23	69,10	101,02	138,98	182,99	233,05	289,15
	E <sup>b</sup>	9,42	23,11	42,86	68,65	100,48	138,37	182,30	232,27	288,30
	E <sup>c</sup>	9,61	23,40	43,22	69,10	101,02	138,98	182,99	233,05	289,15
$4s^2 ^1S^e$	-E <sup>P</sup>	5,35	13,18	24,49	38,08	57,95	78,43	103,18	130,42	163,20
	E <sup>b</sup>	5,30	13,00	24,11	38,61	56,52	77,83	102,54	130,65	162,17
$5s^2 ^1S^e$	-E <sup>P</sup>	3,22	8,15	15,33	24,28	36,45	49,69	65,29	83,20	103,67
	E <sup>b</sup>	3,39	8,32	15,43	24,71	36,17	49,81	65,63	83,62	103,79

<b>6s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	2,35	5,78	10,71	17,16	25,12	34,59	45,57	58,07	72,07
	E <sup>b</sup>	2,35	5,78	10,71	17,16	25,12	34,59	45,57	58,07	72,07
<b>7s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,72	4,27	7,82	12,63	18,46	25,39	33,44	42,58	52,83
	E <sup>b</sup>	1,73	4,24	7,87	12,61	8,46	25,41	33,48	42,66	52,95
<b>8s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,43	3,43	6,29	9,92	14,46	19,83	26,06	33,27	41,06
	E <sup>b</sup>	1,32	3,25	6,02	9,65	14,13	19,45	25,63	32,66	40,54
<b>9s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,14	2,71	4,94	7,86	11,43	15,69	20,75	26,29	32,48
	E <sup>b</sup>	1,04	2,56	4,76	7,62	11,16	15,37	20,25	25,81	32,03
<b>10s<sup>2</sup>1S<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	0,93	2,19	4,06	6,41	9,28	12,83	16,79	21,28	26,34
	E <sup>b</sup>	0,84	2,08	3,85	6,17	9,04	12,45	16,41	20,91	25,94

<sup>P</sup> Présent travail , <sup>a</sup>Gning [38], <sup>b</sup> Sakho [25], <sup>c</sup> Ho [100]

**Tableau 8 :** Comparaison des énergies des états doublement excités ( $np^2$ )  $^1D^e$   $2 \leq n \leq 10$  de l'Hélium et des ions Héliumoïdes de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.

Etats $np^2$ $^1D^e$	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$2p^2$ $^1D^e$	-E <sup>P</sup>	19,10	48,34	90,23	147,94	217,30	300,12	397,23	508,37	632,72
	E <sup>a</sup>	19,4	48,39	90,97	147,16	216,95	300,35	397,35	507,97	632,18
	E <sup>b</sup>		47,77	90,54	146,91					
	E <sup>c</sup>		48,18	90,82	147,04					
	E <sup>d</sup>	19,12	48,73	91,95	148,77	219,20	303,24	400,88	512,13	636,98
$3p^2$ $^1D^e$	-E <sup>P</sup>	8,50	21,73	40,32	65,52	96,77	134,03	177,22	177,22	281,05
	E <sup>a</sup>	8,99	22,11	41,28	66,50	97,76	135,07	178,43	227,83	283,29
	E <sup>b</sup>		21,83	41,09	66,41					
	E <sup>c</sup>		21,67	40,79	65,94					
	E <sup>d</sup>	8,50	21,66	40,87	66,12	97,42	134,77	178,17	227,61	283,10
$4p^2$ $^1D^e$	-E <sup>P</sup>	4,82	12,35	22,97	36,86	54,03	75,83	99,72	127,58	158,27
	E <sup>b</sup>		12,38	23,26	37,54					
	E <sup>d</sup>	4,78	12,18	22,99	37,19	54,80	75,81	100,22	128,03	159,24

<b>5p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	3,07	7,87	14,57	23,31	34,10	48,31	63,39	81,41	101,68
	E <sup>b</sup>		7,95	14,93	24,08					
	E <sup>d</sup>	3,06	7,80	14,71	23,80	35,07	48,52	64,14	81,94	101,92
<b>6p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	2,18	5,45	10,20	16,51	24,34	33,68	44,54	44,54	70,78
	E <sup>d</sup>	2,12	5,41	10,22	16,53	24,36	33,69	44,54	56,90	70,77
<b>7p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,54	3,99	7,51	12,63	17,87	24,70	32,80	41,15	52,03
	E <sup>d</sup>	1,56	3,98	7,51	12,14	17,89	24,75	32,72	41,81	52,00
<b>8p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,41	3,38	6,19	9,87	14,46	19,73	25,98	33,09	40,86
	E <sup>d</sup>	1,19	3,04	5,74	9,29	13,70	18,95	25,05	32,00	39,81
<b>9p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,14	2,70	4,91	7,86	11,40	15,73	20,54	26,18	32,48
	E <sup>d</sup>	0,94	2,41	4,54	7,34	10,82	14,97	19,79	25,29	31,45
<b>10p<sup>2</sup>1D<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	0,93	2,19	3,98	6,37	9,28	12,69	16,63	21,19	26,30
	E <sup>d</sup>	0,76	1,94	3,67	5,95	8,76	12,12	16,03	20,48	25,47

<sup>P</sup> Présent travail, <sup>a</sup> Ivanov [5], <sup>b</sup> Roy [101], <sup>c</sup> Diehl [102], <sup>d</sup> Sakho [25]

**Tableau 9 :** Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $nd^2$ )  $^1G^e$   $2 \leq n \leq 10$  de l'Hélium et des ions Héliumoïdes de charge nucléaire ( $Z = 2- 10$ ) avec d'autres résultats théoriques.

Etats $nd^2$ $^1G^e$	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b>3d<sup>2</sup> <math>^1G^e</math></b>	-E <sup>P</sup>	8,50	21,73	41,06	65,52	96,77	134,03	178,74	227,96	282,92
	E <sup>a</sup>	8,58	8,58	40,49	65,46	96,44	133,46	133,46	225,60	280,73
	E <sup>b</sup>	7,96	20,74	39,57	64,44					
	E <sup>c</sup>	8,49	21,15	39,84	64,56					
	E <sup>d</sup>	8,35								
<b>4d<sup>2</sup> <math>^1G^e</math></b>	-E <sup>P</sup>	5,35	12,35	22,97	37,83	55,20	75,83	101,30	128,65	159,25
	E <sup>a</sup>	4,89	12,24	22,94	37,02	54,50	75,36	99,63	127,31	158,38
	E <sup>b</sup>	4,70	12,06	22,82	36,98					
	E <sup>c</sup>	5,31	12,52	23,33	37,55					
<b>5d<sup>2</sup> <math>^1G^e</math></b>	-E <sup>P</sup>	3,04	7,59	14,57	23,60	34,80	48,31	63,87	81,59	101,68
	E <sup>b</sup>	3,07	7,81	14,74	23,84					

<b>6d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	2,04	5,34	10,12	24,28	33,51	44,31	56,74	70,50	85,94
	E <sup>b</sup>	2,15	5,46	10,28	16,61					
<b>7d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,50	3,93	7,44	12,04	17,87	24,57	32,64	41,68	51,83
	E <sup>b</sup>	1,59	4,02	7,57	12,23					
<b>8d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,39	3,35	6,14	9,81	14,34	19,73	25,86	32,20	40,86
	E <sup>c</sup>	1,17	3,01	5,70	9,24	13,63	18,87	24,96	31,90	39,69
<b>9d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	1,11	2,64	4,83	7,77	11,33	15,59	20,43	26,11	32,32
	E <sup>c</sup>	0,92	2,38	4,51	7,30	10,77	14,91	19,72	25,21	31,36
<b>10d<sup>2</sup>1G<sup>e</sup></b>	-E <sup>P</sup>	0,90	2,16	3,98	6,31	9,28	12,63	16,63	21,15	26,20
	E <sup>c</sup>	0,75	1,92	3,64	5,91	8,72	12,07	15,97	20,41	25,41

<sup>P</sup> Présent travail , <sup>a</sup> Biaye [103], <sup>b</sup> Roy [101] , <sup>c</sup> Ray [22] , <sup>d</sup> Diehl [102], <sup>e</sup> Sakho [25]

**Tableau 10 :** Comparaison des énergies des 'états doublement excités ( $nf^2$ )  $^1I^e$   $2 \leq n \leq 10$  de l'Hélium et des ions Héliumoides de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.

Etats $nf^2$ $^1I^e$	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$4f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	5,03	12,12	23,43	37,54	55,20	76,38	100,82	128,65	159,25
	E <sup>a</sup>	4,62	11,92	22,63	36,74	54,25	75,16	99,47	127,18	158,30
	E <sup>c</sup>	4,89	12,22	22,90	36,95	54,38	75,19	99,40	126,99	157,98
$5f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	2,93	7,59	14,41	23,50	34,69	48,17	63,55	81,41	100,29
	E <sup>a</sup>	2,95	7,63	14,48	23,51	34,72	48,10	63,66	81,40	101,31
$6f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	2,07	5,28	10,04	16,22	24,10	33,41	44,22	56,54	70,38
	E <sup>a</sup>	2,05	5,30	10,06	26,33	24,11	33,40	44,21	56,53	70,35
$7f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	1,50	3,88	7,36	11,95	17,75	24,57	32,48	41,51	51,63
	E <sup>a</sup>	1,51	3,89	7,39	11,99	17,71	24,54	32,48	41,53	51,69
$8f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	1,36	3,31	6,09	9,73	14,22	19,59	25,76	32,81	40,70
	E <sup>a</sup>	1,15	2,98	5,65	9,18	13,56	18,78	24,86	31,79	39,57
$9f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	1,11	2,64	4,83	7,73	11,28	15,59	20,43	25,93	32,28
	E <sup>a</sup>	0,91	2,35	4,46	7,25	10,71	14,84	19,64	25,12	31,26
$10f^2$ $^1I^e$	-E <sup>P</sup>	0,89	2,19	3,98	6,31	9,16	12,55	16,63	21,10	26,30
	E <sup>a</sup>	0,73	1,91	3,62	5,87	8,67	12,02	15,91	20,34	25,32

<sup>P</sup> Présent travail , <sup>a</sup> Sakho [25], <sup>c</sup> Biaye [103]

**Tableau 11 :** Comparaison des énergies des 'états doublement excités  $(ng^2)^1K^e$  et  $(nh^2)^1M^e$   $2 \leq n \leq 10$  de l'Hélium et des ions Héliumoides de charge nucléaire ( $Z=2-10$ ) avec d'autres résultats théoriques.

Etats $ng^2^1K^e$ $nh^2^1M^e$	Z	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$5g^2^1K^e$	$-E^P$	2,93	7,59	14,41	23,41	34,69	47,90	63,71	81,24	101,28
	$E^a$	2,93	7,59	14,42	23,44	34,63	47,99	63,54	81,26	101,16
$6g^2^1K^e$	$-E^P$	2,04	5,23	10,04	16,22	24,10	33,41	44,22	56,54	70,38
	$E^a$	2,03	5,27	10,02	16,27	24,05	33,33	44,12	56,43	70,25
$7g^2^1K^e$	$E^a$	1,50	3,88	7,36	11,95	17,75	24,43	32,48	41,51	51,63
	$E^a$	1,49	3,87	7,36	11,96	17,67	24,49	32,42	41,46	51,61
$6h^2^1M^e$	$-E^P$	2,04	5,23	9,97	16,22	24,10	33,27	44,06	56,37	70,18
	$E^a$	2,02	5,25	9,99	16,24	24,01	33,28	44,07	56,37	70,18
$7h^2^1M^e$	$-E^P$	1,46	3,82	7,36	11,95	17,63	24,43	32,33	41,51	51,63
	$E^a$	1,48	3,86	7,34	11,93	17,64	24,45	32,38	41,42	51,56

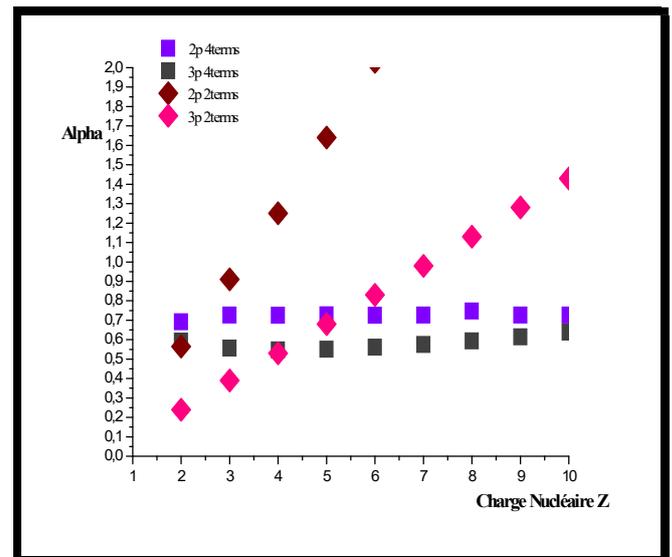
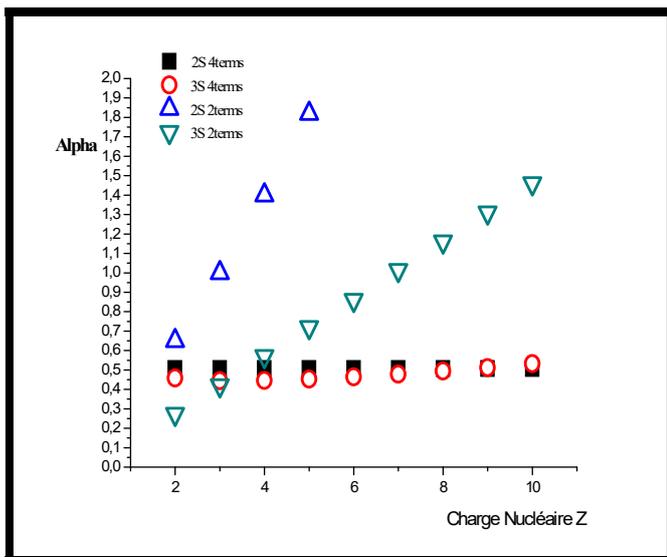
<sup>P</sup> Présent travail , <sup>a</sup> Sakho [25]

Les figures 1-6 comparent nos résultats sur les valeurs des constantes d'écran  $\alpha$  en fonction de  $Z$  des états  $2s, 3s, 2p, 3p, 3d, 4d$  et  $4f$  des états singulets doublements excités avec ceux obtenues par Sow et al.[105], utilisant une fonction d'onde à quatre termes. Nous pouvons y remarquer le bon accord qu'il a en général sur l'augmentation de la constante d'écran  $\alpha$  lorsque  $Z$  augmente pour la fonction d'onde à deux termes.

Dans le cas de la fonction d'onde à quatre termes, on voit pour chaque état presque  $\alpha$  est une constante et cela peut être expliqué par le choix de la fonction d'onde et la position de  $\alpha$  dans cette fonction.

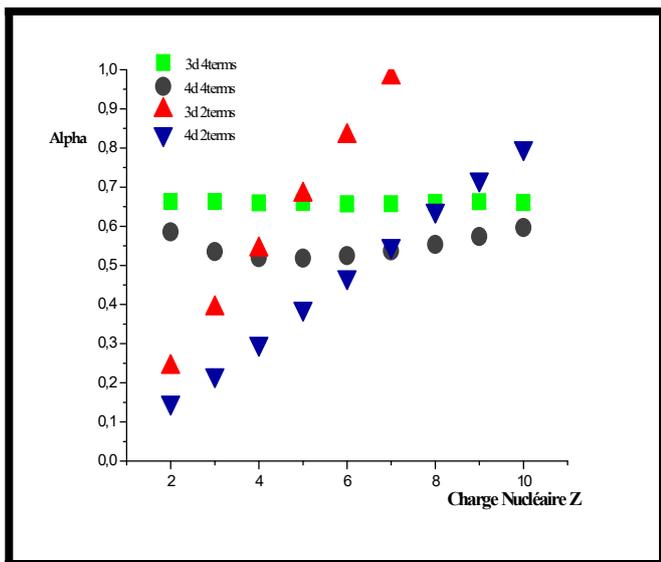
Car on sait bien que l'électron devient de plus en plus lié à mesure que  $Z$  augmente car la charge électrique du noyau augmente en même temps que  $Z$ , ce qui augmente l'attraction des électrons entraînant aussi l'augmentation de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  ceux-ci est clairement observés avec l'utilisation de la fonction d'onde à deux termes.

Cette comparaison met en évidence un aspect important des corrélations électroniques à savoir : l'espacement des niveaux d'énergie des multiplets des états atomiques de même valence  $n$ , est identique à celui des spectres de rotation des molécules linéaires triatomiques. En effet dans les états doublement excités de charge nucléaire  $Z$  faible où les interactions électron-électron sont du même ordre de grandeur que les interactions électron-noyau, et donc importantes, les deux électrons ont toujours une forte tendance à se trouver opposer l'un à l'autre de part et d'autre du noyau [93,65].

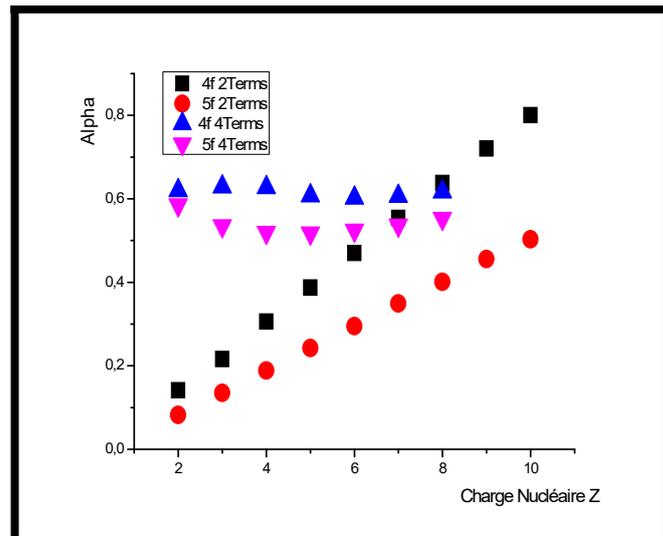


**Figure 3 :** Comparaison de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  pour les états  $ns^2$  ( $2s$  et  $3s$ ) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes

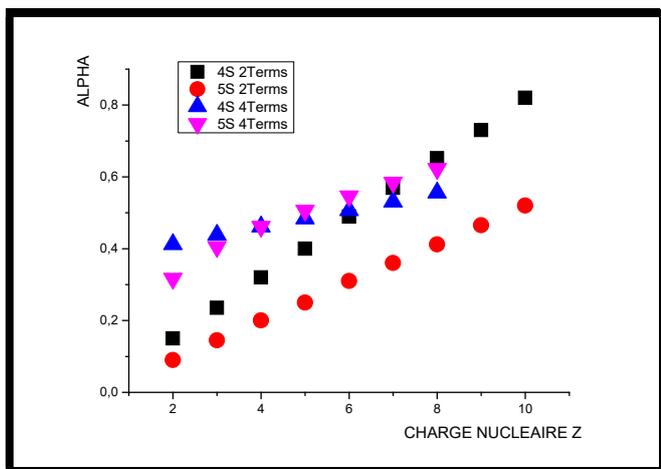
**Figure 4 :** Comparaison de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  pour les états  $np^2$  ( $2p$  et  $3p$ ) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes



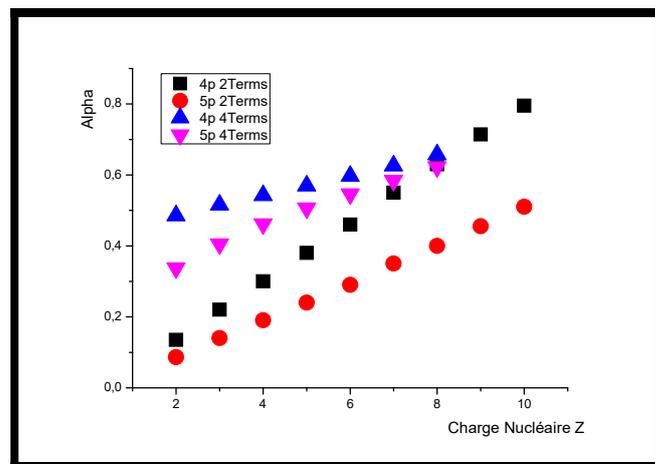
**Figure 6 :** Comparaison de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  pour les états  $nd^2$  des (3d et 4d) fonctions d'ondes de 2 et 4 termes



**Figure 5 :** Comparaison de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  pour les états  $nf^2$  (4f et 5f) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes



**Figure 7 :** Comparaison de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  pour les états  $ns^2$  les états (4s et 5s) fonctions d'ondes de 2 et 4 termes



**Figure 8 :** Comparaison de  $\alpha$  en fonction de  $Z$  pour  $np^2$  (4p et 5p) des fonctions d'ondes de 2 et 4 termes

Il en résulte une répartition linéaire de la densité de charge électronique identique à celle que l'on observe dans une molécule linéaire triatomique. Cette ressemblance disparaît au fur et à mesure que la charge nucléaire  $Z$  augmente à cause du fait que les interactions électron-électron devenant de plus en plus négligeable devant les interactions électron-noyau, les deux électrons ont surtout tendance à se trouver du même côté du noyau. Ces aspects de

l'espacement des énergies sont en bon accord avec les résultats que nous avons obtenus dans les figures 1-4 de la fonction d'onde à deux termes.

C'est pour la première fois à notre connaissance que nous avons utilisé une fonction d'onde de deux termes pour le calcul des énergies des états singulets doublement excités. De même des constantes d'écran qui sont comparés en fonction des termes utilisés dans les fonctions d'onde de deux et quatre termes utilisé par Sow et al. [105].

La lecture des résultats regroupés dans les figures 1-4 montre que l'utilisation de fonctions d'onde de deux termes explique clairement les variations de constantes d'écran en fonction de  $z$  est plus précise que celle d'une fonction d'onde de quatre termes.

L'intérêt de ces études consiste à mieux comprendre les phénomènes de corrélations électroniques dans les systèmes atomiques à deux électrons qui sont des systèmes grâce auxquels on peut tester de nouvelles méthodes expérimentales et théoriques pouvant s'étendre par la suite à des systèmes plus complexes. Ces études mettent en évidence l'importance et l'influence des phénomènes de corrélations électroniques dans l'état fondamental et dans les états de double excitation électronique de l'hélium et de sa série iso-électronique. Et aussi ces résultats très important apportent des facilités à l'analyse des énergies de résonance via une procédure très souple contrairement aux procédures complexes des méthodes expérimentales et théoriques basées sur la détermination de la section efficace de photo-ionisation.

## CHAPITRE III :

Application de la méthode de rotation complexe aux calculs des énergies de quelques états singulets et triplets doublement excités et des largeurs d'états doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$  des systèmes atomiques à deux électrons

### III-1- La méthode de rotation complexe

La méthode de rotation complexe a été utilisée en physique atomique par Doolen [111] pour déterminer les paramètres de la résonance dans le système e- +H. La méthode de la rotation complexe a été appliquée avec succès par Gning et al. [38,113] avec succès au sein du laboratoire Atome Laser dirigé par le Professeur Ahmadou WAGUE du Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques pour les calculs des paramètres de résonance atomiques des états singulets et triplets doublement excités ((2s<sup>2</sup>)<sup>1</sup>Se, (2s2p)<sup>1,3</sup>P<sup>o</sup>) et ((3s<sup>2</sup>)<sup>1</sup>Se, (3s3p)<sup>1,3</sup>P<sup>o</sup>) des systèmes héliumoides de charge nucléaire  $Z \leq 10$ . Ainsi dans cette même procédure nous avons utilisé de nouvelles fonctions d'onde de moindre termes de forme spéciale de type Hylleraas pour calculer les paramètres de résonance  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$ .

#### III-1-1- Formalisme de la méthode de rotation complexe et formes des fonctions d'ondes

La méthode de rotation complexe ou méthode de dilatation est basée sur le théorème de Balslev et al [41] concernant l'étude du système régi par des interactions coulombiennes. Cette méthode est très utilisée en physique atomique pour la détermination des paramètres de résonances autoionisantes des systèmes atomiques à deux électrons [95, 109]. L'application de ce théorème dans l'étude des résonances atomiques consiste en une transformation de l'Hamiltonien réel du système  $\hat{H}(r)$  en un Hamiltonien complexe  $\hat{H}(r,\theta)$ .

D'après ce théorème [95], l'Hamiltonien complexe  $\hat{H}(r,\theta)$  obtenu après transformation des coordonnées réelles en coordonnées complexes, comprend en plus des états résonants, un spectre continu formé d'une série de raies dans le plan complexe commençant au seuil d'ionisation de l'ion résiduel du système atomique étudié, aussi des états discrets liés qui restent invariant dans la rotation. Cette transformation se traduit par un changement de la variable radiale  $r$  en une variable complexe  $re^{i\theta}$  où  $\theta$  est un réel positif désignant l'angle de rotation. Par cette transformation, l'Hamiltonien dans le cas du système à interaction coulombienne s'écrit:

$$H(r, \theta) = -(\Delta_1 + \Delta_2)e^{-2i\theta} - 2Ze^{-i\theta} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{2e^{-i\theta}}{r_{12}} \quad (\text{III}_1)$$

$$H(r, \theta) = T(r, \theta) + C(r, \theta) + W(r, \theta) \quad (\text{III}_2)$$

Dans cette expression:

$$\triangleright T(r, \theta) = -(\Delta_1 + \Delta_2)e^{-2i\theta} \quad (\text{III\_2\_a})$$

est l'énergie cinétique des deux électrons.

Le Laplacien s'exprime sous la forme :

$$\Delta_i = \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left( r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left( \sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2}$$

(III\_3)

Avec  $i=1, 2$

$$\triangleright C(r, \theta) = -2Z e^{-i\theta} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (\text{III\_2\_b})$$

est l'opérateur d'interaction électron-noyau,

$$\triangleright W(r, \theta) = + \frac{2 e^{-i\theta}}{r_{12}} \quad (\text{III\_2\_c})$$

est l'opérateur de l'énergie d'interaction entre les deux électrons.

Dans cette méthode, les paramètres de la résonance, c'est-à-dire la position et la largeur de résonance, sont obtenus en résolvant l'équation aux valeurs propres complexes ci-dessous:

$$\left\langle \psi_{jkm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left| \hat{H}(\mathbf{r}, \theta) - W \right| \psi_{j'k'm'}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle = 0 \quad (\text{III\_4})$$

Où  $W = E_r - \frac{1}{2} \Gamma_r$  représente la valeur propre complexe dont la partie réelle  $E_r$  donne la position et la partie imaginaire  $\Gamma_r$  donne la largeur de la résonance.

La fonction d'onde d'essai  $\psi_{jkm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$  est souvent une fonction de carré intégrable de type Hylleraas [55, 94]. Le choix d'une fonction d'essai de carré sommable pour la description de l'état quasi stationnaire ne se justifie pas a priori, car à l'énergie de résonance, la fonction d'onde contient une composante divergente de la forme :

$$u(r)_{r \rightarrow \infty} \approx e^{ikr} \quad (\text{III\_6})$$

$$\text{Avec} \quad k = |k| e^{-i\beta} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{2} \arg(W) \quad (\text{III\_7})$$

Le changement de variable  $r \rightarrow re^{i\theta}$  permet de transformer la fonction divergente en une fonction d'onde d'un état lié de la forme :

$$f \approx e^{i|k|r e^{-i(\theta-\beta)}} = e^{i|k|r \cos(\theta-\beta) - |k|r \sin(\theta-\beta)} \quad (\text{III}_8)$$

Dans cette nouvelle expression, on voit que pour  $\theta > \beta$ ,  $(\theta-\beta) < \pi/2$ , les oscillations dans la région asymptotique sont amorties par le facteur exponentiel. Dans ces conditions l'état résonant se comporte ainsi comme un état lié.

Pour simuler le terme oscillant contenu dans les fonctions d'ondes exactes, il est nécessaire d'utiliser une base suffisamment large de fonctions d'ondes de carré sommable pour la fonction d'onde d'essai. Ainsi, les valeurs propres complexes qui doivent simuler la position et la largeur de résonance, doivent dépendre non seulement de l'angle de rotation  $\theta$  et du paramètre vibrationnel non linéaire  $\alpha$ , mais aussi de la taille de la base  $\Omega$ . Ces valeurs propres complexes doivent donc satisfaire les trois conditions suivantes :

$$\frac{\partial |W|}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial |W|}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial |W|}{\partial \Omega} = 0 \quad (\text{III}_9)$$

Dans son utilisation pratique, la méthode de rotation complexe consiste à déterminer les paramètres de résonance à partir du comportement de la trajectoire de rotation des valeurs propres.

Pour cela trois étapes sont nécessaires :

- 1- On applique la méthode de stabilisation [110] à l'Hamiltonien réel pour la recherche de valeurs propres réelles qui sont stables par rapport à la variation du paramètre non linéaire  $\alpha$ .
- 2- On applique la méthode de rotation complexe ( $\theta \neq 0$ ) aux fonctions d'onde qui sont restées stables par rapport à  $\alpha$ . Dans cette zone de stabilisation les trajectoires de rotations, pour différentes valeurs de  $\alpha$  se croisent en un point du plan complexe déterminant ainsi la position et la largeur de la résonance.
- 3- Les deux premières étapes sont répétées avec des bases de différentes dimensions pour l'étude de la convergence des résultats.

L'introduction de la méthode de rotation complexe en physique a permis d'obtenir des résultats complets sur les énergies et les largeurs totales des résonances auto ionisantes dans les systèmes atomiques à deux électrons.

La méthode de rotation complexe a été utilisée en physique atomique par Doolen [111] pour déterminer les paramètres de la résonance dans le système  $e^- + H$  et par Lonnie W. Manning et Frank C. Sanders [112] à l'étude des paramètres de résonances ( $^1P^0$  et  $^3P^0$ ) des systèmes héliumoides. Par la suite d'autres calculs ont été faits, à l'aide des fonctions d'ondes variationnelles construites sur une base de Hylleraas, par Ho [107, 109]. Certains de ses travaux [107] ont portés sur la détermination des énergies et largeurs des deux premières résonances  $^1S^e$  et  $^{1,3}P^0$  de l'hélium et les ions  $H^-$  et  $Li^+$  sous le seuil d'excitation  $n=4$ .

### III-1-2- Expressions des fonctions d'onde des états $nln'l'$

Les fonctions d'ondes de forme spéciales de type Hylleraas ont été utilisées avec succès dans le laboratoire Atome Laser par M. Biaye [17 –21], puis par M. Dieng [114, 115] et par Y. Gning [38, 113] dans le calcul des paramètres de résonances des états excités de l'hélium et de sa série iso-électronique. On peut adapter ces fonctions d'onde de forme spéciales de type Hylleraas à la description de ces états. Elles s'écrivent sous de la forme :

$$\Psi_{ijnp}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \phi_{np}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{III}_{10})$$

Où les  $\phi_{np}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  sont des fonctions spatiales de base et les  $\chi_{ij}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  sont des fonctions faisant intervenir les harmoniques sphériques et la parité du système atomique.

Les fonctions spatiales de base sont conventionnellement de la forme Hylleraas.

La fonction utilisée est de la forme:

$$\begin{aligned} \psi_{jkm} = & \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1} \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1} (N^2 r_0^2)^\nu (N^2 r_0^2)^{\nu'} \\ & \left( C_{jkm} (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \frac{\mathbf{r}_1}{r_1} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2} \right|^m + (-1)^S C_{jkm} z (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \frac{\mathbf{r}_1}{r_1} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2} \right|^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \end{aligned} \quad (\text{III}_{11})$$

Dans le premier terme l'équation (III\_11) on pose :  $j=k=m=0$  et le deuxième terme on pose :  $j=k=0$  devient :

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1} \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1} (N^2 r_0^2)^\nu (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z \left| \frac{\mathbf{r}_1}{r_1} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2} \right|^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \quad (\text{III}_{12})$$

L'équation (III\_12) devient :

$$\text{On pose } \Psi_{jkm} = \Phi_{jkm} + \Phi'_{jkm} \quad (\text{III}_{13})$$

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm}) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \quad (\text{III}_{14})$$

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( (-1)^S C_{jkm} z \left| \frac{\mathbf{r}_1}{r_1} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2} \right|^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \quad (\text{III}_{15})$$

$$\text{Avec } \left| \frac{\mathbf{r}_1}{r_1} - \frac{\mathbf{r}_2}{r_2} \right| = r_{12} \quad (\text{III}_{16})$$

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \quad (\text{III}_{17})$$

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \quad (\text{III}_{18})$$

Avec  $(j, k, m)$  sont les paramètres d'Hylleraas,  $(j, k, m \geq 0)$ ,  $j$  et  $k$  sont des paramètres qui tiennent compte respectivement de la proximité et de l'éloignement des deux électrons du noyau,  $m$  est le paramètre qui tient compte de la distance entre les deux électrons; cet ensemble constitué par les trois paramètres  $(j, k, m)$  représente une base d'états du système à deux électrons.

Où  $k+m+j \leq \Omega$ ,  $\Omega$  étant un entier positif;

$\mathbf{L} = \mathbf{l} + \mathbf{l}'$  étant le moment angulaire total; pour les termes  $L=0$ ,  $k \geq m$ ;  $\alpha$  est le paramètre non linéaire et  $S$  le spin total du système atomique.

$\mathbf{r}_1$  et  $\mathbf{r}_2$  correspondent aux positions des deux électrons;

$n$  et  $n'$  sont des nombres quantique principaux;

$l$  et  $l'$  sont les moments angulaires orbitaux des deux électrons;

$$\lambda = \frac{Z}{\alpha n r_0} \text{ avec } \alpha = \frac{Z}{\alpha n r_0} \quad (\text{III}_{19})$$

Où  $Z$  est la charge nucléaire

$\alpha$  est un paramètre variationnel et  $r_0$  est le rayon de Bohr.

L'existence de ce terme rend impossible la résolution exacte de l'équation fondamentale de la mécanique quantique (équation de Schrödinger):

$$H\psi_{jkm} = E\psi_{jkm}$$

(III<sub>20</sub>)

Dans cette équation,  $\psi_{jkm}$  est la fonction d'onde de l'état quantique du système (noyau d'électrons) et  $E$  est l'énergie totale du même état quantique. La solution exacte de la dernière équation est impossible en raison du terme de corrélation impliqué dans l'expression de l'hamiltonien total. Il est donc nécessaire de mettre en œuvre une méthode de calcul approximatif utilisant une fonction d'onde corrélée, donnée par:

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1, -1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1, -1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} \mathbf{z}_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2)$$

(III<sub>21</sub>)

Où  $j + k + m \leq \Omega$ ,  $\Omega$  est un nombre entier positif qui détermine la longueur d'expansion  $N$ ;  $\alpha$  est un paramètre non linéaire et  $S$  le spin total du système atomique,  $r_1$  et  $r_2$  sont les coordonnées des électrons par rapport au noyau;  $N$  est le numéro principal;  $\ell_1$  et  $\ell_2$  sont angulaires orbitaux,  $Z$  la charge nucléaire.  $C_{jkm}$  sont des paramètres à déterminer,  $r_0$  est le rayon de Bohr.

$$\text{Ou } Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) = \sum_{m=-1}^1 Y_{1,m}^*(\Omega_1) Y_{1,m}(\Omega_2) \quad (\text{III}_{22})$$

représentent les harmoniques sphériques de l'électron 1 ou 2

Lequel  $\Omega_i = (\theta_i, \varphi_i)$  (III<sub>22</sub>) et  $i = 1, 2$ .

Les paramètres de résonance sont déterminés en recherchant un taux de changement stable par rapport aux paramètres non linéaires  $\alpha$  et à la valeur complexe de l'énergie

$$E = E_r - i \frac{\Gamma}{2} = \frac{\langle \psi_{jkm} / H / \psi_{jkm} \rangle}{\langle \psi_{jkm} / \psi_{jkm} \rangle}$$

(III\_23)

où  $E_r$  donne la position de résonance et donne la largeur.

Et l'hamiltonien peut être écrit comme

$$H = -(\Delta_1 + \Delta_2)e^{-2i\theta} - 2Ze^{-i\theta} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{2e^{-i\theta}}{r_{12}} = T + C + W$$

(III\_24)

$$\text{Avec } T = -(\Delta_1 + \Delta_2)e^{-2i\theta} = -e^{-2i\theta} \langle \psi_{jkm}^* / \Delta_1 + \Delta_2 / \psi_{jkm} \rangle \quad (\text{III}_25)$$

$$C = -2Ze^{-i\theta} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) = -2Ze^{-i\theta} \left\langle \psi_{jkm}^* / \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} / \psi_{jkm} \right\rangle \quad (\text{III}_26)$$

$$W = \frac{2e^{-i\theta}}{r_{12}} = 2e^{-i\theta} \left\langle \psi_{jkm}^* / \frac{1}{r_{12}} / \psi_{jkm} \right\rangle \quad (\text{III}_27)$$

où T est l'énergie cinétique, C est l'interaction de Coulomb entre le noyau de l'atome et les deux électrons et W est l'interaction de Coulomb entre les électrons. Dans l'étude des résonances atomiques, l'application de ce théorème consiste en la transformation du système hamiltonien réel  $H(r)$  en un complexe  $H(r, \theta)$  où  $r$  est la coordonnée radiale entre les particules et  $\theta$  est un nombre réel positif dénotant l'angle de rotation. Ce traitement est exécuté par un changement de la variable réelle  $r$  en variable complexe  $r \exp(i\theta)$

L'élément de matrice de la constante de normalisation  $N_{jkm}$  est défini par

$$N_{jkm} = \iiint d\tau \psi_{jkm}^* \psi_{jkm}$$

(III\_28)

Où  $d\tau$  est élément de volume élémentaire.

L'existence du terme de perturbation (équation (III\_27)) rend impossible la résolution exacte de l'équation (III\_26). C'est ainsi que nous avons utilisé la méthode de rotation complexe en introduisant une nouvelle méthode de calcul du coefficient de corrélation, qui est l'une des techniques de calcul pour fournir les paramètres de résonance aux systèmes atomiques à deux électrons. Selon le calcul des coefficients de corrélation proposé par Varshalovich D.A et al. [138], nous avons trouvé une nouvelle formule proposée par Gning et al. [113]

$$r_{12}^m = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} a_1^m(r_1, r_2) \times (Y_l(\Omega_1)Y_l(\Omega_2)) \text{ pour } r_1 < r_2 \quad (\text{III}_{29})$$

$$\text{Avec } a_1^m(r_1, r_2) = \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_1}{\left(\frac{1}{2}\right)_1} r_2^m \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l F\left(1 - \frac{m}{2}, -\frac{1}{2} - \frac{m}{2}, 1 + \frac{3}{2}, \frac{r_1^2}{r_2^2}\right) \quad (\text{III}_{30})$$

la fonction d'onde hypergéométrique définie par Samarskogo [139]

$$F\left(1 - \frac{m}{2}, -\frac{1}{2} - \frac{m}{2}, 1 + \frac{3}{2}, \frac{r_1^2}{r_2^2}\right) = 1 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times \frac{r_1^2}{r_2^2} \quad (\text{III}_{31})$$

Remplacement de l'équation (III\_30) par sa valeur dans l'équation

$$a_1^m(r_1, r_2) = \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_1}{\left(\frac{1}{2}\right)_1} r_2^m \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l \times \left(1 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times \frac{r_1^2}{r_2^2}\right) \quad (\text{III}_{32})$$

Donc l'équation (III\_32) devient

$$a_1^m(r_1, r_2) = \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_1}{\left(\frac{1}{2}\right)_1} \times \frac{r_1^l}{r_2^{l-m+2}} \times \left(r_2^2 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times r_1^2\right) \quad (\text{III}_{33})$$

Et en remplaçant l'équation (III\_33) dans l'équation (III\_29)

$$r_{12}^m = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} \times \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_1}{\left(\frac{1}{2}\right)_1} \times \frac{r_1^l}{r_2^{l-m+2}} \times \left(r_2^2 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times r_1^2\right) (Y_l(\Omega_1)Y_l(\Omega_2)) \quad (\text{III}_{34})$$

pour  $2sns^{+1,3}S^e$  states ( $\ell=0 ; S=0$ ),  $Y_{0,0}(\Omega_1)Y_{0,0}(\Omega_2) = \frac{1}{4\pi}$  (III\_35)

donc l'équation (III\_21) devient:

$$\psi_{jkm} = \left(\frac{1}{4\pi}\right) \sum_{\nu=0}^{\nu=N_1-1} \left(N^2 r_0^2\right)^{\nu} \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N_2-1} \left(N^2 r_0^2\right)^{\nu'} \left(C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m\right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad (\text{III}_{36})$$

Pour  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$  les états correspondants

On utilise  $Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \sum_{m=-1}^1 Y_{1,m}^*(\Omega_1)Y_{1,m}(\Omega_2)$

$$\ell=1, Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = Y_{1,-1}^*(\Omega_1)Y_{1,-1}(\Omega_2) + Y_{1,0}^*(\Omega_1)Y_{1,0}(\Omega_2) + Y_{1,1}^*(\Omega_1)Y_{1,1}(\Omega_2) \quad (\text{III}_{37})$$

avec  $Y_{1,-1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$   $Y_{1,-1}(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$  (III\_38)

$$Y_{1,0}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{1,0}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (\text{III}_{39})$$

$$Y_{1,1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i-\varphi} \quad Y_{1,1}(\Omega_2) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \quad (\text{III}_{40})$$

en remplaçant les valeurs des harmoniques sphériques de  $\ell=1$  ou  $2$ , on obtient :

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \frac{3}{4\pi} (\sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \varphi_{12} + \cos \theta_1 \cos \theta_2) \quad (\text{III}_{41})$$

Pour  $\varphi_1 = \varphi_2$  on a  $\cos \varphi_{12} = 1$   $Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \frac{3}{4\pi} (\sin \theta_1 \sin \theta_2 + \cos \theta_1 \cos \theta_2)$  (III\_42)

Pour  $3d4d^{+1,3}Ge$  états

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \sum_{m=-1}^1 Y_{1,m}^*(\Omega_1)Y_{1,m}(\Omega_2)$$

Pour  $\ell = 2$  on a:

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = Y_{2,-2}^*(\Omega_1)Y_{2,-2}(\Omega_2) + Y_{2,-1}^*(\Omega_1)Y_{2,-1}(\Omega_2) + Y_{2,0}^*(\Omega_1)Y_{2,0}(\Omega_2) + Y_{2,1}^*(\Omega_1)Y_{2,1}(\Omega_2) + Y_{2,2}^*(\Omega_1)Y_{2,2}(\Omega_2) + Y_{1,-1}^*(\Omega_1)Y_{1,-1}(\Omega_2) + Y_{1,0}^*(\Omega_1)Y_{1,0}(\Omega_2) + Y_{1,1}^*(\Omega_1)Y_{1,1}(\Omega_2) \quad (\text{III}_{43})$$

$$Y_{2,2}(\Omega_2) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{i2\varphi} \quad Y_{2,2}^*(\Omega_1) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-i2\varphi} \quad (\text{III\_44})$$

$$Y_{2,-2}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^2}{\sin^2 \theta} e^{i2\varphi} \quad Y_{2,-2}^*(\Omega_2) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^2}{\sin^2 \theta} e^{-i2\varphi} \quad (\text{III\_45})$$

$$Y_{2,-1}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} (\cos^2 \theta - 1) e^{i2\varphi}$$

$$Y_{2,-1}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} (\cos^2 \theta - 1) e^{-i2\varphi} \quad (\text{III\_46})$$

$$Y_{2,0}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{(3\cos^2 \theta - 1)^2}{2} \quad Y_{2,0}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{(3\cos^2 \theta - 1)^2}{2} \quad (\text{III\_47})$$

$$Y_{2,1}(\Omega_2) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \quad Y_{2,1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} \quad (\text{III\_48})$$

$$\text{avec } Y_{1,-1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \quad Y_{1,-1}(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \quad (\text{III\_49})$$

$$Y_{1,0}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{1,0}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (\text{III\_50})$$

$$Y_{1,1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i-\varphi} \quad Y_{1,1}(\Omega_2) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \quad (\text{III\_51})$$

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \frac{15\sin^2\theta_1 \sin^2\theta_2}{16\pi} - \frac{15\cos\theta_1 \sin\theta_1 \sin\theta_2}{8\pi} - \frac{\sqrt{75} (3\cos^2\theta_1 - 1) \sin\theta_2^2}{2^{9/2} \pi}$$

(III\_52)

### III-1-3- Expressions littérales des éléments matriciels et de l'énergie totale des états nln'l'

Les paramètres de résonances sont déterminés en trouvant un taux de variation qui est stable avec un respect des paramètres non linéaires  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\theta$  plus grand que  $\arg. (E_{res}/2)$  avec  $E_{res}$  est la valeur complexe de l'énergie.

$$E_{res} = E_r - i \frac{\Gamma_r}{2} = \frac{\langle \psi / H / \psi \rangle}{\langle \psi / \psi \rangle} \quad (III\_53)$$

$E_r$  = l'énergie de résonance

$\Gamma_r$  = la largeur de résonance

L'hamiltonien  $H$  peut se décomposer en trois termes permettant de séparer l'énergie cinétique  $T$ , l'énergie d'interaction coulombienne entre le noyau et les deux électrons  $C$  et l'énergie d'interaction coulombienne entre les deux électrons  $W$  sous la forme:

$$H = -(\Delta_1 + \Delta_2)e^{-2i\theta} - 2Ze^{-i\theta} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{2e^{-i\theta}}{r_{12}} = T + C + W \quad (III\_54)$$

Dans cette expression

$$T = -(\Delta_1 + \Delta_2)e^{-2i\theta} \quad (III\_55\_a)$$

est l'énergie cinétique des deux électrons ;

Le laplacien s'exprime sous la forme :

$$\Delta_i = \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left( r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left( \sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \phi_i^2} \quad (III\_56)$$

Avec  $i=1,2$

$$C = -2Ze^{-i\theta} \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (III\_55\_b)$$

est l'opérateur d'interaction électron-noyau,

$$W = + \frac{2 e^{-i\theta}}{r_{12}} \quad (\text{III\_55\_c})$$

est l'opérateur de l'énergie d'interaction entre les deux électrons

► **Les éléments matriciels de la constante de normalisation des états nln'l'**

Les éléments matriciels  $N_{JKMnl'n'l}$  de la constante de normalisation des états nln'l' sont ainsi définis:

$$N_{jkmnl'n'l'} = \langle \psi_{jkmnl'n'l'} | \psi_{jkmnl'n'l'} \rangle \quad (\text{III\_57})$$

$$N_{jkmnl'n'l'} = \iiint dr_1^3 dr_2^3 \psi_{jkmnl'n'l'}^* \times \psi_{jkmnl'n'l'} \quad (\text{III\_58})$$

$$N_{jkmnl'n'l'} = \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \times \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right)^2 \quad (\text{III\_59})$$

$$\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \right\rangle^2 e^{-2\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))$$

$$N_{jkmnl'n'l'} = \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \times \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right)^2$$

$$\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \right\rangle^2 e^{-2\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))$$

(III\_60)

► **Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons des états nln'l'**

Les éléments matriciels  $T_{jkmnl'n'l'}$  de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons des états nln'l' sont donnés par les expressions ci-dessous:

$$T_{jkmnl'n'l'} = -e^{-2i\theta} \left\langle \psi_{jkmnl'n'l'}^* / \Delta_1 + \Delta_2 / \psi_{jkmnl'n'l'} \right\rangle \quad (\text{III\_61})$$

Avec

$$\Delta_i = \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} \left( r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left( \sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \quad (\text{III\_62})$$

i= 1 , 2;

$$\Delta_i = \Delta_{r_i} + \Delta_{\theta_i} + \Delta_{\varphi_i} \quad (\text{III}_{63})$$

$$\Delta_{r_i} = \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} (r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i}) \quad (\text{III}_{64})$$

$$\Delta_{\theta_i} = \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}) \quad (\text{III}_{65})$$

$$\Delta_{\varphi_i} = \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \quad (\text{III}_{66})$$

On peut écrire  $T_{jkmnl'n'l'}$  sous la forme générale suivante :

$$T_{jkmnl'n'l'} = T'_{jkmnl'n'l'} + T''_{jkmnl'n'l'} + T'''_{jkmnl'n'l'} \quad (\text{III}_{67})$$

Les éléments matriciels  $T_{jkmnl'n'l'}$  de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons des états  $nl'n'l'$  sont donnés par les expressions ci-dessous:

$$T'_{jkmnl'n'l'} = -e^{-2i\theta} \left\langle \psi^*_{jkmnl'n'l'} / \left( \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} (r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i}) \right) / \psi_{jkmnl'n'l'} \right\rangle \quad (\text{III}_{68})$$

$$T'_{jkmnl'n'l'} = -e^{-2i\theta} \iiint dr_1^3 dr_2^3 \psi^*_{jkmnl'n'l'} \left( \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} (r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i}) \right) \psi_{jkmnl'n'l'} \quad (\text{III}_{69})$$

$$T'_{jkmnl'n'l'} = -e^{-2i\theta} \times \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2$$

$$\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} \left( Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2)^* \right) \right\rangle \quad (\text{I})$$

$$\times (\Delta_{r_1} + \Delta_{r_2}) \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right\rangle$$

II\_70)

$$T''_{jkmnl'n'l'} = -e^{-2i\theta} \left\langle \psi^*_{jkmnl'n'l'} / \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}) / \psi^*_{jkmnl'n'l'} \right\rangle \quad (\text{III}_{71})$$

$$T''_{jkmnl'n'l'} = -e^{-2i\theta} \iiint dr_1^3 dr_2^3 \psi^*_{jkmnl'n'l'} \left( \frac{1}{r_i^2 \sin \theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} (\sin \theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}) \right) \psi_{jkmnl'n'l'} \quad (\text{III}_{72})$$

$$T_{jkmnl'l'}^n = -e^{-2i\theta} \times \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2$$

$$\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* \right\rangle$$

$$/ (\Delta_{\theta_1} + \Delta_{\theta_2}) / \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right\rangle$$

(III\_73)

$$T_{jkmnl'l'}^m = -e^{-2i\theta} \left\langle \psi_{jkmnl'l'}^* / \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} / \psi_{jkmnl'l'} \right\rangle \quad (\text{III}_74)$$

$$T_{jkmnl'l'}^m = -e^{-2i\theta} \iiint dr_1^3 dr_2^3 \psi_{jkmnl'l'}^* \left( \frac{1}{r_i^2 \sin^2 \theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2} \right) \psi_{jkmnl'l'} \quad (\text{III}_75)$$

$$T_{jkmnl'l'}^m = -Ze^{-2i\theta} \times \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2$$

$$\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* \right\rangle$$

$$/ (\Delta_{\theta_1} + \Delta_{\theta_2}) / \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right\rangle$$

(III\_76)

➤ **Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction coulombienne entre le noyau et les deux électrons des états nln'l'**

Les éléments matriciels  $C_{jkmnl'l'}$  de l'opérateur de l'énergie d'interaction coulombienne entre les deux électrons des états nln'l' sont définis ci-dessous:

$$C_{jkmnl'l'} = -2Ze^{-i\theta} \left\langle \psi_{jkmnl'l'}^* / \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} / \psi_{jkmnl'l'} \right\rangle \quad (\text{III}_77)$$

$$C_{jkmnl'l'} = -e^{-2i\theta} \iiint dr_1^3 dr_2^3 \psi_{jkmnl'l'}^* \left( \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} (r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i}) \right) \psi_{jkmnl'l'} \quad (\text{III}_78)$$

$$\begin{aligned}
C_{jkmnl'n'} &= -2Ze^{-i\theta} \times \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \\
&\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* \right\rangle \\
&\times \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \times \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right\rangle \\
&\text{(III_79)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_{jkmnl'n'} &= -2Ze^{-i\theta} \times \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \\
&\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* \right\rangle \\
&\times \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \times \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right\rangle \\
&\text{(III_80)}
\end{aligned}$$

➤ **Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction coulombienne entre les deux électrons des états  $nl'n'$**

Les éléments matriciels  $W_{jkmnl'n'}$  de l'opérateur de l'énergie d'interaction coulombienne entre les deux électrons des états  $nl'n'$  sont définis ci-dessous:

$$W_{jkmnl'n'} = 2e^{-i\theta} \left\langle \psi_{jkmnl'n'}^* / \frac{1}{r_{12}} / \psi_{jkmnl'n'} \right\rangle \quad \text{(III_81)}$$

$$W_{jkmnl'n'} = 2e^{-i\theta} \iiint dr_1^3 dr_2^3 \psi_{jkmnl'n'}^* \left( \frac{1}{r_{12}} \right) \psi_{jkmnl'n'} \quad \text{(III_82)}$$

$$\begin{aligned}
W_{jkmnl'n'} &= -2e^{-i\theta} \times \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin \theta_1 \sin \theta_2 \\
&\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2))^* \right\rangle \\
&\times \left( \frac{1}{r_{12}} \right) \times \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1_1-1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1_2-1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} (C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right\rangle \\
&\text{(III_83)}
\end{aligned}$$

$$W_{jkmnl'n'l'} = 2e^{-i\theta} \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_0^\pi d\theta_1 \int_0^\pi d\theta_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 r_1^2 r_2^2 \sin\theta_1 \sin\theta_2$$

$$\left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1, \nu=1} (N^2 r_0^2)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1, \nu'=1} (N^2 r_0^2)^{\nu'} \right\rangle^2 \times \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} Z r_{12}^m \right)^2 e^{-2\alpha(r_1+r_2)} \left( Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right)^* \left( Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \right)$$

(III\_84)

### III-2- Calcul des paramètres de résonance de quelques états singulets et triplets doublement excités $2sns^{+1,3}S^e$ , $2snp^{+1,3}P^0$ , $2pnp^{+1,3}D^e$ , $3d4d^{+1,3}G^e$ des systèmes atomiques à deux électrons par la méthode de rotation complexe

Dans ce travail, nous rapportons le calcul des paramètres de résonance pour certains états doublement excités des systèmes de type He  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$  sont calculés.

#### III-2-1- Procédure de calcul

Dans cette partie, nous avons établi une procédure analytique d'encadrement des paramètres (j, k, m) pour la création de la base fixée.

Au démarrage de la procédure de calcul, nous initialisons les paramètres (j, k, m) satisfaisant à la condition (j, k et m  $\geq 2$ ). Ensuite la procédure rotationnelle tourne sur l'ensemble des paramètres. La valeur minimale de l'énergie correspond à la valeur de l'énergie quasi-stationnaire avec une erreur absolue de  $10^{-3}$  près. Dans nos calculs la convergence au minimum sont atteints lorsque (j+ k + m  $\geq 3$ ). Après itération du paramètre  $\alpha$  de l'énergie minimale retenue symbolise sa valeur quasi-stationnaire. Cependant pour chaque valeur du paramètre  $\alpha$  correspond à un minimum d'énergie. Ce programme de calcul MAXIMA figure en détail dans l'annexe et les résultats obtenus sont listés dans les tableaux 11, 12, 13, 14 ci-dessous et comparés avec les résultats théoriques et expérimentaux disponibles dans les tableaux 15, 16, 17, 18, 19.

#### III-2-2- Résultats et Discussions

Nous présentons les résultats sur les calculs des paramètres de résonances, à savoir l'énergie et la largeur de résonance, des états singulets et triplets doublement excités de type  $nln'l'$  de l'hélium et des ions Héliumoïdes de charge nucléaire  $Z \leq 10$ .

Dans nos calculs, nous fixons la dimension  $\Omega$  à 4 pour les états  $2s3s^{1,3}S^e$ ,  $2s4s^{1,3}S^e$  et  $\beta = 0,25$  rad.  $\Omega = 3$  pour les états  $2s2p^{1,3}P^0$ ,  $2s3p^{1,3}P^0$  et  $\beta = 0,2$  rad. De même, pour les états  $2p3p^{1,3}D^e$ ,  $2p4p^{1,3}D^e$ ,  $3d4d^{1,3}G^e$   $\beta = 0,2$  rad et  $\Omega = 4$ . La valeur minimale de l'énergie est

obtenue suite à une stabilisation de cette dernière avec une variation du paramètre non linéaire  $\alpha$ . A chaque valeur minimale de l'énergie correspond une valeur minimale de la largeur de résonance.

Sur la base du traitement des calculs, la conversion d'énergie de 1 a.u. =  $2Ry = 27,211385$  eV a été utilisé et les résultats obtenus sont en Rydberg. Dans les tableaux 11, 12, 13 et 14 nous présentons les résultats des énergies des états  $2s3s$   $^{1,3}S^e$ ,  $2s4s$   $^{1,3}S^e$ ,  $2s2p$   $^{1,3}P^0$ ,  $2s3p$   $^{1,3}P^0$ ,  $2p3p$   $^{1,3}D^e$ ,  $2p4p$   $^{1,3}D^e$ ,  $3d4d$   $^{1,3}G^e$

**Tableau 12 :** Paramètres de résonances des états doublement excités  $2sns + ^{1,3}S^e$  ( $Z=2-10$ ).

<b>Z</b>	<b>2s3s <math>^1S^e</math></b>			<b>2s3s <math>^3S^e</math></b>			<b>2s4s <math>^1S^e</math></b>			<b>2s4s <math>^3S^e</math></b>		
	<b><math>\alpha</math></b>	<b>-E</b>	<b><math>\Gamma</math></b>									
<b>2</b>	0,963	1,174857	0,001110	0,955	1,222736	0,0004957	0,970	1,078567	0,000161	0,935	1,089823	0,000556
<b>3</b>	1,150	2,837435	0,002682	1,135	2,885916	0,0011700	1,125	2,549938	0,000241	1,110	2,559737	0,001307
<b>4</b>	1,300	5,215416	0,004930	1,280	5,245563	0,0021266	1,284	4,912449	0,000464	1,250	4,622176	0,002360
<b>5</b>	1,427	8,283079	0,007831	1,440	8,398197	0,0091759	1,390	7,697545	0,000245	1,374	7,395109	0,003776
<b>6</b>	1,541	12,12459	0,011463	1,555	12,289478	0,0134275	1,510	10,99787	0,000103	1,480	10,699627	0,005464
<b>7</b>	1,643	16,65804	0,015749	1,657	16,837186	0,0183963	1,600	14,67166	0,000138	1,578	14,710585	0,007512
<b>8</b>	1,736	21,88285	0,020689	1,750	22,067967	0,0241115	1,700	19,80088	0,001872	1,666	19,261070	0,009836
<b>9</b>	1,823	27,87674	0,026356	1,838	28,130958	0,0307360	1,790	25,55697	0,000241	1,750	24,583568	0,012554
<b>10</b>	1,904	34,56911	0,032683	1,918	34,738038	0,0379549	1,850	30,15211	0,000285	1,825	30,279830	0,015463

**Tableau 13** : Paramètres de résonances des états doublement excités  $2snp \ ^{+1,3}P^0$  ( $Z=2-10$ ).

<b>Z</b>	<b>2s2p <math>^1P^0</math></b>			<b>2s2p <math>^3P^0</math></b>			<b>2s3p <math>^1P^0</math></b>			<b>2s3p <math>^3P^0</math></b>		
	<b><math>\alpha</math></b>	<b>-E</b>	<b><math>\Gamma</math></b>	<b>A</b>	<b>-E</b>	<b><math>\Gamma</math></b>	<b><math>\alpha</math></b>	<b>-E</b>	<b><math>\Gamma</math></b>	<b><math>\alpha</math></b>	<b>-E</b>	<b><math>\Gamma</math></b>
<b>2</b>	0,411	1,384520	0,00277	0,435	1,518125	0,000583	0,374	1,128617	0,0004575	0,380	1,157603	0,000169
<b>3</b>	0,535	3,529412	0,00494	0,555	3,754265	0,000753	0,473	2,718729	0,0009894	0,488	2,790356	0,000172
<b>4</b>	0,635	6,635136	0,00797	0,655	6,976910	0,000653	0,558	5,026144	0,0002037	0,575	5,164385	0,000195
<b>5</b>	0,740	10,74939	0,00688	0,760	11,257263	0,0006964	0,633	8,085786	0,0003278	0,645	8,238113	0,000207
<b>6</b>	0,810	15,87203	0,00676	0,828	16,450448	0,0006669	0,699	11,832375	0,0004797	0,712	12,045357	0,000130
<b>7</b>	0,825	21,979827	0,00891	0,902	22,975692	0,0006944	0,760	16,319597	0,0006616	0,785	16,558325	0,000120
<b>8</b>	0,945	29,123500	0,00880	0,962	29,990312	0,0007232	0,816	21,501381	0,0008717	0,843	21,822549	0,000159
<b>9</b>	1,0055	37,245801	0,00898	1,085	38,079336	0,0009183	0,869	27,434005	0,0011122	0,895	27,672276	0,000179
<b>10</b>	1,0630	46,356087	0,00930	1,080	47,395576	0,0008554	0,919	34,091587	0,0013821	0,947	34,422331	0,000197

**Tableau 14** : Paramètres de résonances des états doublement excités  $2pnp\ ^{+1,3}D^e$  ( $Z=2-10$ ).

z	$2p3p\ ^1D^e$			$2p3p\ ^3D^e$			$2p4p\ ^1D^e$			$2p4p\ ^3D^e$		
	A	-E	$\Gamma$	A	-E	$\Gamma$	$\alpha$	-E	$\Gamma$	$\alpha$	-E	$\Gamma$
2	0,680	1,137185	0,000461	0,684	1,170925	0,0004747	0,670	1,076210	0,000428	0,651	1,096103	0,000444
3	0,812	2,757372	0,001117	0,815	2,810212	0,0011393	0,798	2,530060	0,001025	0,800	2,561816	0,001038
4	0,918	5,092810	0,002064	0,921	5,176195	0,0020985	0,900	4,614617	0,001870	0,899	4,589138	0,001860
5	1,008	8,125539	0,003294	1,012	8,2675704	0,0033518	0,986	7,280419	0,002951	0,987	7,317252	0,002966
6	1,090	12,008379	0,004868	1,091	12,063260	0,0048906	1,063	10,599764	0,004297	1,065	10,699378	0,004337
7	1,161	16,415429	0,006655	1,163	16,599058	0,0067295	1,133	14,576301	0,005909	1,134	14,640411	0,005935
8	1,227	21,691387	0,008794	1,229	21,867623	0,0088655	1,197	19,180034	0,007775	1,198	19,229848	0,007808
9	1,288	27,638463	0,011205	1,289	27,842274	0,0112918	1,255	24,294058	0,009849	1,256	24,439044	0,009888
10	1,344	34,183866	0,013858	1,347	34,534397	0,0140131	1,310	30,098139	0,012202	1,287	30,673410	0,012435

**Tableau 15** : Paramètres de résonances des états doublement excités  $3d4d^{+1,3}G^e$  ( $Z=2-10$ ).

$3d4d^1G^e$				$3d4d^3G^e$		
$z$	$\alpha$	$-E$	$\Gamma$	$\alpha$	$-E$	$\Gamma$
2	0,102	0,525520	0,002130	0,103	0,535886	0,00001170
3	0,130	1,280462	0,005191	0,132	1,320193	0,00002352
4	0,154	2,395852	0,016132	0,155	2,427124	0,00002440
5	0,175	3,857269	0,017678	0,176	3,911686	0,00002585
6	0,193	5,644482	0,022889	0,194	5,713264	0,00002812
7	0,210	7,796414	0,025608	0,211	7,871034	0,00003191
8	0,226	10,319652	0,029183	0,226	10,319906	0,00004183
9	0,240	13,092518	0,030079	0,242	13,241968	0,00004396
10	0,254	16,309918	0,036605	0,256	16,441943	0,00004498

Pour le calcul des paramètres de résonance des systèmes héliumoïdes de charge  $Z \leq 10$  sous les seuils d'excitation  $n=2$  et  $n=3$  de l'ion résiduel, plusieurs auteurs ont utilisés différentes méthodes. Ainsi, Ho [100, 135] a utilisé la méthode de rotation complexe associée à une fonction d'onde de type Hylleraas, Dieng [115] a utilisé des formes spéciales de fonctions d'onde de type Hylleraas, Ivanov et Safronova [5] ont effectué un calcul utilisant la méthode de la double somme sur le spectre complet de l'hydrogène, Sakho [130, 131] avec la méthode constante d'écran de charge nucléaire, Ivanov et Safronova [5] utilisant la méthode de calculs doubles sommes, Bachau [136], à l'aide de la méthode du formalisme de projection de Fechbach.

Dans le tableau 15 nous comparons nos résultats avec les valeurs obtenues par Ho [100] pour l'état  $2s3s \ ^1S^e$ , Dieng [115] pour les états  $2s3s \ ^1S^e$   $2s3s \ ^3S^e$ , Sakho et al. [130, 131] pour les états  $2s3s \ ^3S^e$ ,  $2s4s \ ^1S^e$  et  $2s4s \ ^3S^e$  et Ivanov et Safronova [5] pour les états  $2s4s \ ^1S^e$  et  $2s4s \ ^3S^e$ . Nous notons un bon accord entre nos résultats et l'ensemble des auteurs cités. Les légères différences notées entre nos résultats avec ceux de Dieng et al. [114] s'expliquent par le fait qu'ils ont utilisé la méthode d'Hylleraas en tenant compte uniquement de la partie radiale dans la fonction d'onde.

Le tableau 16 compare les résultats avec ceux de Ho [121,100] pour les états  $2s2p \ ^1P^0$ ,  $2s3p \ ^1P^0$  et  $2s3p \ ^3P^0$ , Dieng [115] pour les états  $2s2p \ ^1P^0$  et  $2s2p \ ^3P^0$  Seminario et Sanders [132] pour les états  $2s2p \ ^1P^0$  et  $2s2p \ ^3P^0$ , Drake et al [133] pour les états  $2s2p \ ^1P^0$  et  $2s2p \ ^3P^0$ , Sakho et al. [130,134] pour les états  $2s3p \ ^1P^0$  et  $2s3p \ ^3P^0$  on note généralement un assez bon accord.

Dans le tableau 17, les résultats des états  $2p3p \ ^1,3D^e$ ,  $2p4p \ ^1,3D^e$  ont été comparés à ceux de Ho [100] pour les états  $2p3p \ ^1D^e$  et  $2p3p \ ^3D^e$ , Sakho et al. [131] et Dieng [115] pour les états  $2p4p \ ^1D^e$  et  $2p4p \ ^3D^e$ , Seminario and Sanders [132] pour les états, Sakho et al. [134] pour les états  $2p3p \ ^1D^e$ ,  $2p3p \ ^3D^e$ ,  $2p4p \ ^1D^e$  et  $2p4p \ ^3D^e$ . Pour ces états, nous notons généralement un très bon accord et peu de divergence avec les résultats de Dieng.

Nous avons également comparé dans le tableau 18 nos résultats avec ceux d'Ivanov et Ho [135] pour les états  $3d4d \ ^1G^e$  et  $3d4d \ ^3G^e$  et de Bachau [136] pour les états  $3d4d \ ^1Ge$  et  $3d4d \ ^3G^e$ . Nous notons une bonne cohérence.

Dans le tableau 19, nos résultats de largeur de résonance des mêmes états ci-dessus sont énumérés en conséquence et comparés à ceux de Ho [100,120] pour les états  $2s3s \ ^1S^e$ ,  $2s2p \ ^1P^0$ ,  $2s2p \ ^3P^0$ ,  $2p3p \ ^1D^e$  et  $2p3p \ ^3D^e$ , Seminario et Sanders [132] pour les états  $2s2p \ ^1P^0$  et  $2s2p \ ^3P^0$ , Ivanov and Ho [136] pour les états  $3d4d \ ^1G^e$  et  $3d4d \ ^3G^e$ , Manning et Sanders [137] pour

les états  $2s2p\ ^1P^0$  et  $2s2p\ ^3P^0$ . On constate alors qu'un bon accord dans l'ensemble entre nos valeurs sur les largeurs comparées avec les valeurs des autres auteurs.

En résumé, nous avons calculé les énergies des états singulets et triplets doublement excités de l'hélium et des ions héliumoïdes en utilisant de nouvelles fonctions d'ondes de formes spéciales, de type Hylleraas et en développant une expression du facteur de corrélation qui nous a permis de faire les calculs dans ces états. Nous notons généralement, un accord assez satisfaisant entre nos résultats et les autres calculs disponibles. Les légers désaccords notés entre nos résultats et ceux obtenus par d'autres méthodes de calculs peuvent être expliqués par le fait que nous avons négligé dans nos calculs les effets provenant des interactions entre les canaux ouverts et fermés

**Tableau 16 :** Comparaison des énergies des états  $2sns \ ^1,3S^e$

Etats		Z								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
$2s3s \ ^1S^e$	-E <sup>a</sup>	1,174857	2,837435	5,215416	8,283079	12,12459	16,65804	21,88285	27,87674	34,56911
	-E <sup>b</sup>	1,179850	2,831150	5,204100	8,299000	12,11600	16,65500	21,91640	27,89980	34,60540
	-E <sup>c</sup>	1,179902	2,823779	5,189878	8,278200	12,08874	16,62150	21,87649	27,85370	34,55314
$2s3s \ ^3S^e$	-E <sup>a</sup>	1,222736	2,885916	5,245563	8,398197	12,28947	16,83718	22,06796	28,13095	34,73803
	-E <sup>f</sup>	1,202960	2,876740	5,274440	8,395040	12,23816	16,80370	22,09158	28,10176	34,83420
	-E <sup>c</sup>	1,225489	2,903172	5,303077	8,425204	12,26955	16,83612	22,12491	28,13593	34,86917
$2s4s \ ^1S^e$	-E <sup>a</sup>	1,078567	2,549938	4,912449	7,697545	10,99787	14,67166	19,80088	25,55697	30,15211
	-E <sup>g</sup>	1,070599	2,525598	4,605598	7,310597	10,64059	14,59559	19,17559	24,37999	30,20998
	-E <sup>h</sup>	1,088999	2,552039	4,640338	7,353717	10,69217	14,65563	19,24413	24,45763	30,29612
$2s4s \ ^3S^e$	-E <sup>a</sup>	1,089823	2,559737	4,622176	7,395109	10,699627	14,710585	19,261070	24,583568	30,279830
	-E <sup>g</sup>	1,082400	2,547000	4,636600	7,351200	10,690800	14,655200	19,244800	24,458000	30,298000
	-E <sup>h</sup>	1,098200	2,571120	4,669640	7,393420	10,742320	14,716280	19,315280	24,539320	30,388380

<sup>a</sup> Présent travail <sup>b</sup> Ho [100] <sup>c</sup> Dieng [115] <sup>f, h</sup> Sakho et al. [130,131] <sup>g</sup> Ivanov [5]

**Tableau 17 :** Comparaison des énergies des états  $2snp\ 1,3P^0$

Etats		Z								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b><math>2s2p\ 1P^0</math></b>	-E <sup>a</sup>	1,38452	3,52941	6,63513	10,74939	15,87203	21,97982	29,123500	37,245801	46,35608
	-E <sup>b</sup>	1,38627	3,51512	6,63896	10,76042	15,88056	21,99993	29,11878	37,23735	46,35555
	-E <sup>c</sup>	1,38875	3,51124	6,63574	10,75592	15,88274	22,00624	29,12974	37,25324	46,37670
	-E <sup>d</sup>	1,38508	3,51402	6,63778	10,75916	15,87924	21,99854	29,11734	37,23574	46,35394
	-E <sup>e</sup>	1,38610	3,51472	6,63874	10,76030	15,88052	21,99990	29,11878	37,23728	46,35552
<b><math>2s2p\ 3P^0</math></b>	-E <sup>a</sup>	1,51812	3,754265	6,976910	11,257263	16,450448	22,975692	29,990312	38,079336	47,39557
	-E <sup>e</sup>	1,52099	3,75637	6,99127	11,22598	16,46057	22,69511	29,92561	38,16408	47,39853
	-E <sup>c</sup>	1,52765	3,75406	6,68046	11,20686	16,43326	22,36966	29,88606	38,11246	47,33886
	-E <sup>d</sup>	1,52294	3,75877	6,99391	11,22875	16,46345	22,69805	29,93260	38,16705	47,40155
	-E <sup>e</sup>	1,52114	3,75650	6,99140	11,22610	16,46069	22,69522	29,92972	38,16419	47,39862
<b><math>2s3p\ 1P^0</math></b>	-E <sup>a</sup>	1,12861	2,71872	5,02614	8,085786	11,83237	16,31959	21,50138	27,43400	34,09158
	-E <sup>b</sup>	1,12800	2,72286	5,03650	8,070700	11,82630	16,30350	21,50260	27,42380	34,06690
	-E <sup>f</sup>	1,12478	2,72140	5,04040	8,081290	11,84458	16,33008	21,53781	27,46775	34,11992
<b><math>2s3p\ 3P^0</math></b>	-E <sup>a</sup>	1,15760	2,79035	5,16438	8,238113	12,04535	16,55832	21,82254	27,67227	34,42233
	-E <sup>b</sup>	1,15806	2,79702	5,15851	8,242240	12,04818	16,57633	21,82669	27,79926	34,49405
	-E <sup>f</sup>	1,17200	2,80960	5,16942	8,251460	12,05573	16,58221	21,9669	27,80185	34,49501

<sup>a</sup> Présent travail <sup>b</sup> Ho [100] <sup>c</sup> Dieng [115] <sup>d</sup> Seminario and Sanders [132] <sup>e</sup> Drake et al [133] <sup>f, h</sup> Sakho et al. [134,130,131]

**Tableau 18** : Comparaison des énergies des états  $2pnp\ ^{1,3}D^e$

Etats		Z								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b>2p3p<sup>1</sup>D<sup>e</sup></b>	-E <sup>a</sup>	1,13718	2,75737	5,09281	8,12553	12,00837	16,41542	21,69138	27,63846	34,18386
	-E <sup>i</sup>	1,13844	2,74820	5,08057	8,13553	11,91292	16,41266	21,63470	27,57902	34,24560
	-E <sup>h</sup>	1,13813	2,74779	5,07984	8,13415	11,91073	16,40956	21,63064	27,57390	34,23942
<b>2p3p<sup>3</sup>D<sup>e</sup></b>	-E <sup>a</sup>	1,17092	2,81021	5,17619	8,26757	12,06326	16,59905	21,86760	27,84227	34,53439
	-E <sup>i</sup>	1,16756	2,81113	5,17667	8,26426	12,07398	16,60586	21,85992	27,83617	34,53463
	-E <sup>h</sup>	1,16673	2,80705	5,17081	8,25728	12,06619	16,59747	21,85105	27,82692	34,52504
<b>2p4p<sup>1</sup>D<sup>e</sup></b>	-E <sup>a</sup>	1,07621	2,53006	4,61461	7,28041	10,59976	14,57630	19,18003	24,29405	30,09813
	-E <sup>h</sup>	1,07289	2,52064	4,59343	7,29123	10,61405	14,56189	19,13471	24,33255	30,15540
	-E <sup>c</sup>	0,97594	2,37821	4,35081	7,07026	10,36590	14,29590	18,86061	24,06019	29,89473
<b>2p4p<sup>3</sup>D<sup>e</sup></b>	-E <sup>a</sup>	1,09610	2,56181	4,58913	7,31725	10,69937	14,64041	19,22984	24,43904	30,67341
	-E <sup>h</sup>	1,08149	2,54134	4,62709	7,33821	10,67452	14,63593	19,22240	24,43417	30,27046
	-E <sup>c</sup>	1,00752	2,44490	4,51385	7,21527	10,54944	14,51651	19,11652	24,34951	30,21551

<sup>a</sup> Présent travail <sup>i</sup> Ho [100] <sup>c</sup> Dieng [115] <sup>d</sup> Seminario and Sanders [132] <sup>h</sup> Sakho et al. [134]

**Tableau 19** : Comparaison des énergies des états  $3d4d^{1,3}G^e$

Etats		Z								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
$3d4d^1G^e$	$-E^a$	0,525520	1,280462	2,395852	3,857269	5,644482	7,796414	10,319652	13,092518	16,309918
	$-E^j$	0,523664	1,282352	2,389035	3,843409	5,645259	7,794478	10,291009	13,134823	16,325900
	$-E^k$	0,524200	1,282000	2,388000	3,840000	5,640000	7,790000	10,284000	13,128000	16,318000
$3d4d^3G^e$	$-E^a$	0,535886	1,320193	2,427124	3,911686	5,713264	7,871034	10,319906	13,241968	16,441943
	$-E^j$	0,539138	1,313835	2,434874	3,902706	5,717525	7,879424	10,388452	13,244640	16,448006
	$-E^k$	0,539400	1,314000	2,434000	3,902000	5,716000	7,878000	10,386000	13,242000	16,444000

<sup>a</sup> Present travail <sup>j</sup> Ivanov and Ho[135] <sup>k</sup> Bachau [136]

**Tableau 20** : Comparaison des résonances des états  $2s2p\ ^{1,3}P^0$

Etats		Z								
		2	3	4	5	6	7	8	9	10
<b>2s3s <sup>1</sup>S<sup>e</sup></b>	$\Gamma^a$	0,001110	0,002682	0,004930	0,007831	0,011463	0,015749	0,020689	0,026356	0,032683
	$\Gamma^b$	0,002700	0,004300	0,005300	0,005930	0,006370	0,006700	0,006900	0,007100	0,007250
<b>2s2p <sup>1</sup>P<sup>0</sup></b>	$\Gamma^a$	0,00277	0,00494	0,00797	0,00688	0,00676	0,00891	0,00880	0,00898	0,00930
	$\Gamma^b$	0,00273	0,00438	0,00546	0,00619	0,00670	0,00707	0,00739	0,00762	0,00780
	$\Gamma^d$	0,00274	0,00436	0,00542	0,00614	0,00666	0,00706	0,00736	0,00760	0,00780
	$\Gamma^L$	0,00274	0,004 41	0,00547	0,006 92	0,00671	0,00710	0,00741	0,00765	0,00784
<b>2s2p <sup>3</sup>P<sup>0</sup></b>	$\Gamma^a$	0,00058	0,00075	0,00065	0,00069	0,00066	0,00069	0,00072	0,00091	0,00085
	$\Gamma^b$	0,00059	0,00062	0,00063	0,00064	0,00064	0,00065	0,00065	0,00065	0,00065
	$\Gamma^d$	0,00060	0,00064	0,00066	0,00066	0,00066	0,00066	0,00066	0,00066	0,00066
	$\Gamma^L$	0,00059	0,00063	0,00063	0,00064	0,00065	0,00065	0,00065	0,00065	0,00065
<b>2p3p <sup>1</sup>D<sup>e</sup></b>	$\Gamma^a$	0,000461	0,001117	0,002064	0,003294	0,004868	0,006655	0,008794	0,011205	0,013858
	$\Gamma^i$	0,001110	0,002208	0,002852	0,003246	0,003504	0,003686	0,003824	0,003928	0,004010
<b>2p3p <sup>3</sup>D<sup>e</sup></b>	$\Gamma^a$	0,0004747	0,0011393	0,0020985	0,0033518	0,0048906	0,0067295	0,0088655	0,0112918	0,0140131
	$\Gamma^i$	5,72X10 <sup>-8</sup>	3,32X10 <sup>-8</sup>	1,92X10 <sup>-8</sup>	1,26X10 <sup>-8</sup>	0,94X10 <sup>-8</sup>	0,94X10 <sup>-8</sup>	< 10 X10 <sup>-8</sup>	< 10 X10 <sup>-8</sup>	< 10 X10 <sup>-8</sup>
<b>3d4d <sup>1</sup>G<sup>e</sup></b>	$\Gamma^a$	0,002130	0,005191	0,016132	0,017678	0,022889	0,025608	0,029183	0,030079	0,036605
	$\Gamma^j$	0,005088	0,011441	0,015325	0,017687	0,019237	0,020324	0,021124	0,021737	0,022222
<b>3d4d <sup>3</sup>G<sup>e</sup></b>	$\Gamma^a$	0,000011	0,000023	0,000024	0,000025	0,000028	0,000031	0,000041	0,000043	0,000044
	$\Gamma^j$	0,000001	0,000008	0,000016	0,000024	0,000030	0,000036	0,000040	0,000044	0,000048

<sup>a</sup> Present travail <sup>b,i</sup> Ho [120,100] <sup>d</sup> Seminario and Sanders [132] <sup>j</sup> Ivanov and Ho[136] <sup>L</sup> Manning and Sanders [137]

Nous avons effectué les calculs des paramètres de résonances des états singulets et triplets doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$  en utilisant la méthode de rotation complexe et de nouvelles fonctions d'onde. Les résultats des paramètres de résonance rapportés concordent mieux avec ceux d'autres calculs théoriques et données expérimentales pour  $Z$  faible que ceux avec  $Z$  élevé. Les résultats que nous avons obtenus montrent qu'il est possible, en utilisant notre approche théorique, pour décrire les états à deux électrons doublement excités. Cependant, les techniques expérimentales utilisant le rayonnement synchrotron deviennent de plus en plus sophistiquées et peuvent fournir des valeurs très précises des paramètres de résonance de la série Rydberg de systèmes atomiques multi-électrons. Nous pouvons toujours utiliser la méthode de rotation complexe et de nouvelles fonctions d'ondes pour obtenir d'autres résultats théoriques des systèmes atomiques à deux ou trois électrons.

## CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans ce mémoire de Thèse, après avoir fait une revue de quelques méthodes théoriques et expérimentales, nous avons calculé les énergies des états singulets doublement excités  $(nl)^2$  et les paramètres de résonances des états singulets et triplets doublement excités de type  $nl n'l$  et  $nl n'l'$  (avec  $l = l'$  ou  $l \neq l'$ ) de l'Hélium et des ions Héliumoïdes par la méthode variationnelle et la méthode de rotation complexe.

Les principaux résultats obtenus dans ce travail sont les suivants :

1- La méthode variationnelle nous a permis de calculer les énergies des systèmes atomiques à deux électrons des états excités  $ns^2\ ^1S^e$ ,  $np^2\ ^1D^e$ ,  $nd^2\ ^1D^e$ ,  $nf^2\ ^1F^e$ ,  $ng^2\ ^1K^e$  et  $nh^2\ ^1M^e$  en utilisant de nouvelles fonctions d'onde de formes spéciales à deux termes de type Hylleraas. C'est la première fois à notre connaissance que des fonctions d'onde de cette forme à deux termes sont utilisés pour le calcul des énergies de ces états.

2- En analysant la variation de la constante d'écran  $\alpha$  en fonction de la charge nucléaire  $Z$  nous avons montré des particularités importantes concernant les fonctions d'ondes à deux termes et quatre termes qui montrent que les fonctions se comportent différemment en fonction de la charge nucléaire. Ainsi pour les fonctions à deux termes,  $\alpha$  augmente en fonction  $Z$  alors pour les fonctions à quatre termes,  $\alpha$  reste constante avec  $Z$ . En conséquence, l'augmentation de la distance interélectronique  $r_{12}$  pour les fonctions à deux termes diminue avec l'accroissement de la charge nucléaire  $Z$ , ce qui signifie que les deux électrons se rapproche l'un de l'autre au fur et à mesure que  $Z$  augmente. Ce comportement des électrons a pour effet d'une part, d'intensifier les effets de corrélations électroniques qui deviennent très importants dans les systèmes héliumoïdes lourds ( $Z$  très élevé) et, d'autre part, de diminuer la probabilité de trouver les deux électrons de part et d'autre du noyau à l'état fondamental.

3- Les résultats obtenus par la méthode de rotation complexe par utilisation des fonctions d'onde à deux termes permettent d'obtenir des résultats satisfaisants pour ces paramètres des résonances  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$ . Ces résultats sont en bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux disponibles.

4- Les résultats que nous avons obtenus permettent d'avoir une meilleure compréhension des processus de Photoexcitation et de Photoionisation dans les ions multichargés, tout en mettant en évidence l'importance des phénomènes de corrélations électroniques dans les systèmes atomiques.

Ces résultats ont été comparés aux résultats théoriques et expérimentaux disponibles et ont permis de faire deux publications dans des revues internationales « International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics » et « International Journal of Physics ».

En perspective pour un futur travail, nous envisageons d'étendre cette étude à la description des états excités du lithium et des ions Lithiumoïdes en utilisant de nouvelles fonctions d'ondes pour le calcul des paramètres de résonances des états singulets et triplets doublements excités dans les ions Lithiumoïdes.

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1]-Madden R. P and Codling K., Phys. Rev. Lett. 10, 516(1963)
- [2]- Madden R P. and Codling K., Astrophys. J 141,364 (1965)
- [3]-Tang J., Watanabe S., and Matsuzama M., Phys. Rev. A 46, 97 (1992).
- [4]-Arias F. de Saavedra, Porrás I., Buendía E., and Galvez J. F. J., Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.28, 3123 (1995).
- [5]-Ivanov A. I. and Safronova I. U., Opt. Spectrosc 75, 516 (1993).
- [6]-Herzberg G. and Moore H. R., Can. J. Phys. 37, 1293 (1959).
- [7]-Berry H. G., Phy. Scr. 12, 5–20 (1975)
- [8]-Wague A., Z. Phys. D. Atoms, Molecules and Clusters 6, 337 (1987).
- [9]-Wague A., Thèse de Doctorat d'Etat, Université Paul Sabatier, Toulouse (1984)
- [10]-Wague A., Application of the diagonalization approximation to the  $n=3$  resonant photoionization of helium-like systems. Z. Phys. D. Atoms, Molecules and Clusters 6, 337 (1987)
- [11]-Wague A., Resonance photoionisation of the metastable  $2^{1,3}S$  helium near the  $n=2$  and  $n=3$  excitation thresholds of He.Z. Phys.D.Atoms,Molecules and Clusters 13, 337 (1989)
- [12]-Wague A., Z. Phys. D. Atoms, Molecules and Clusters 15, 337 (1990)
- [13]-Faye N.A.B., Wagué A., Doubly-excited state resonances of the helium-like nitrogen ion  $N^{5+}$  near the  $n=3$  threshold of  $N^{6+}$ . Z. Phys. D .Atoms, Molecules and Clusters 31, 37(1994)
- [14]-Faye N.A.B., Wagué A., J.Phys.B 28, 1335 (1995)
- [15]-Ndao, A.S., Wague, A., Faye, N.A.B., and Konte, A., Eur. Phys. J.D.5 327 (1987)
- [16]-Ndao, A.S., Wague, A., Faye, N.A.B., and Konte, A., J.Phys.B 31, 3489 (1998)
- [17]-Biaye, M., Konté, A., Faye, N. A. B., and wagué, A., Eur. Phys. J. D. 13, 21 (2001)
- [18]-Biaye M., Konte A., Ndao A.S., Faye N. A. B. and Wague A., The Singlet Doubly Excited ( $nl^2$ ) States of Helium-Like Systems., Physica Scripta.,71: p.39-42 (2005)
- [19]-Biaye, M., Konté. A., Ndao A. S. and Wague A., s. Scr.72 373 (2005)

- [20]-Biaye M., . These de Doctorat d'état, Université Cheikh Anta Diop de Dakar (2005)
- [21]-Biaye M., Dieng M., Sakho I., and Wagué A., , Chin. J. Phys. 47, 166 (2009)
- [22]-Ray D. and Mukherjee P. K.(1991). J. Phys.B. At. Mol. Opt. Phys. N.19, p. 1241-1249
- [23]-Stewart, A. L., *The 1s2p <sup>3</sup>P triplet continuum and the photoionisation of the 1s2s <sup>3</sup>S state of helium.* J. Phys. B, 12, 401 (1979).
- [24]-Sakho I., Thèse de doctorat<sup>3<sup>ème</sup></sup> cycle, Université Cheikh Anta Diop de Dakar (2007)
- [25]-Sakho., I., J. At. Mol. Sci., Vol. 1. No. 2, p: 103-117 (2010).
- [26]-Diop. B., Faye, M., Dieng, M., Sow, M., Gueye, M., Sakho, I., Biaye, M. and Wague, A.
- [27]-Diop, B., Mémoire de DEA en Physique Atomique et Nucléaire, Institut de Technologie Nucléaire Appliquée, Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2011).
- [28]-Diop, B., Faye, M., Sow, M., Dieng, M., Guèye, M., Sakho, I., Biaye, M., and Wagué, A., Phys. Chem. 86, 1, (2013).
- [29]-Faye, M., Mémoire de DEA en Physique Atomique et Nucléaire, Institut de Technologie Nucléaire Appliquée, Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2011).
- [30]-Faye, M., Diop, B., Guèye, M., Sakho, I., Ndao, A. S., Biaye, M., and Wagué, A., , Rad. Phys. Chem. 85, 1, (2013)
- [31]-Sow. M., Dieng M., Tine, M., Faye, M., Diop, B., Gueye, M., Sakho, I., Biaye, M., and Wague, A., , Chin. J. Phys., **52**, N°5, 1459, (2014).
- [32]-Sow. M.,. Thèse de Doctorat en Physique Atomique, Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2014).
- [33]- Diop, B., Faye, M., Dieng, M., Sow, M., Gueye, M., Sakho, I., Biaye, M. and Wague, A.,, Chin. J. Phys., **52**, N° 4, 1, (2014).
- [34]-Faye, M., Diop, B., Sow, M., Sakho, I., Ndao, A. S., Biaye, M., and Wague, A.,, Chin. J. Phys., **53**, N°5, 1, (2015).
- [35]-Biaye M. Thèse de Doctorat d'état, Université Cheikh Anta Diop de Dakar (2005).
- [36]- Sow B., Sow M., Gning Y., Traoré A., Ndao A. S., Wague. A. . Radiation Physics and Chemistry 123, 25–30. (2016).
- [37]-Lin.C.D.. Physical Review A ; Vol 29 , N 3 ( 1984 )

- [38]- Gning Y., Sow M., Traoré A., Dieng M., Diakhate B., Biaye M., Wagué A. Radiation Physics and Chemistry 106, 1–6. (2015).
- [39]-Peart, B., and Lyon, I. C., Measurements of absolute photoionisation cross. Sections of K<sup>+</sup> ions. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **20**, L673. (1987).
- [40]-Fano U., Correlations of two excited electrons. Rep.Prog.Phys.46 97 (1983).
- [41]-Balslev E. and Combes. J. M.. Commun. Math. Phy . Vol. 22, P . 280 294 ( 1971 )
- [42]-Dhez P., Ederer D. L., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **6**, L 59. (1973)
- [43]-Kossmann H, Kdissig B, Schmidt V., J. Phys. B : Atom. Molec. Opt. Phys.**21**, 1489. (1988)
- [44]-Woodruff P. R, Samson J.A.R.. Phys. Rev. Lett. **45**, 110. (1980)
- [45]-Bizau J. M., Wulleumier F., Dhez P., Ederer D. L., Chang T.N., Krummacher S.,Schmidt V., Phys. Rev. Lett. **48**, 588. (1982)
- [46]-Lindle D.W, FelTet T.A, Becker U., Kobrin P. H, Truesdale C. M, Kerkhoff H. G,Shirley D. A., Phys. Rev. A **31**, 714. (1985)
- [47]-Carroll P. K., Kennedy E. T., , Phys. Rev. LeU. **38**, 1068. (1977)
- [48]-Letokhov, V. S., In laser Photoionization Spectroscopy, (Academic, new York, 1987).
- [49]-Faisal F. M. H., in News from ICTP 64/65, *Novi Dec* 1992.
- [50]-Cohen-Tanoundji C, Bernard D et Franck L Mécanique Quantique 2 (Paris : Herman Editeurs des Sciences et des Arts, ch. **14**, p 1413. (1992)
- [51]-Silverman S.M and Lassetre E. N., J. Chem. **40**, 1265. (1964)
- [52]-Daly N.R and Powell R.E., , Phys. Rev.Lett. **19**, 1165. (1967)
- [53]-M E.Rudd,Phys. Rev. Let!. 15, 580 (1965)
- [54]- Oza D.H; Benoit-Cattin P., Bordenave-Montesquieu A,Boudiema M. and Gleize, A., J Phys B 21, LI31 (1988)
- [55]-Stolterfoht N., Sommer K, Swenson J. K, Havener C. C. and Meyer F. W. Phys. Rev. A 42, 5396 (1990)
- [56]- Bordenave-Montesquieu A et al, Physica Scripta T80, 372 (.1999)
- [57 ]-Bruch R, Altick P L., Trabert E., Heckman P. H. J. Phys. B 17, L655 (1984)

- [58]- Berry H. G., *Physica Scripta* 12, 5 ([975])
- [59]-Cederquist H., Kisielinski M, Mannervik S. *J Phys. B* 16, L4679 (1983)
- [60]-Bordenave-Montesquieu, A., Benoit Cattin, P., Gleizes, A., Marrakchi, A. I., Dousson, S., and Hitz, D., (1984)., at 4.9Kev amu<sup>-1</sup>. *J. Phys. B.*, 1973. **17**, L127.
- [61]-Fano U., . *Phys. Rev.* 124, 1866. (1961).
- [62]-Macek, J. H., Properties of autoionizing states of He. *J. Phys: B*: 2, 3287. (1968).
- [63]-Kellman M. E, Herrick D. R., Dipole channels of two-electron atoms. *J. Phys. B.* Vol 11, L 755 (1978).
- [64] -Stolterfoht N., Brandt D., Prost M.,. *Phys. Rev. Lett.* 43, 1654 (1979).
- [65]-Lin C. D.,. *Phys. Rev.A.* 25, 1536 (1982).
- [66]-Watanabe S., *Phys. Rev. A* 25, 2074 (1982).
- [67]-Pedersen J. O. P. , Positron and electron impact double ionisation of helium. *Physica Scripta* . 42, 180. (1990).
- [68]-Balashov V.V.,Grishanova S.I.,Kruglova I.M., Senashenko V.S., *Opt. Spectra* T28,858 (1970)
- [69]-Senashenko V.S and Wague A., *J.Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.* 12, L269 (1979)
- [70]-Fano U., Cooper J .W., *Phys. Rev.* 137, A1364 (1965)
- [71]-Feshbach H., *Ann. Phys.:* 19,287 (1962)
- [72]-Slater, C.J., *Phys. Rev.* 36, 57.( 1930).
- [73]-Minkine V, Simkine B et Minianev R *Théorie de la structure moleculaire*, Editions Mir Moscou, Chap.7, p. 109. (1979)
- [74]-Macek J. H. and Burke P. G., *Proc Phys Soc London* 92,35 (1961)
- [75]-Fano U. Cooper J. W, Prats F., *Phys. Rev. Leu* 10,518 (1963)
- [76]-Hylleraas E. A., Über den Grundzustand des Heliumatoms; *Z Phys.* 48 469, (1928)
- [77]-Hylleraas E. A. and Undheim B., Numerische Berechnung der 2S-Terme von Ortho- und Par-Helium; *Z., Phys.* 65, 759 (1930)
- [78]-Bethe H A. and Salpeter E. E., (Springer-Verlag, New York 1957), Section 32.

- [79]-Cowail R D, "The theory of atomic structure and spectral! (University of California Press, 1981)
- [80]-Bhatia A K. and Temkin A., *Phys Rev* 153, 177 (1967)
- [81]- Hall R. I., Avaldi L., Dawber G., Zubek M., Ellis K. and King. G. C .. *J . Phys. B: At .Moi. Pot. Phys.* **24**, p 115 - 125(1991)
- [82]- Dmitrieva K. and Plindov. G.I. . *Vol. 77, N . 6* , pp 785 - 789 (1994).
- [83]- Artemyev A., Grobe R., and Eberly . J . H . . *Physical Review A* , Vol. 51 , No1 (1995)
- [84]-Ivanov. I. A. *Physical Review A. Vol 52 , N 3* (1995)
- [85]-Nadezhdin B. B. and Oks. E. A. *Opt. Spectrosk . Vol. 68* , p . 22 (1990)-
- [86]-Wagué. A .. *Z . Phys. D - atoms , molecules and clusters* 8 , p. 251 - 254 (1988)
- [87]- Rau. A .R.P.. *Rep . Prog . Phys .* **53** , p . 181 - 220 (1990 )
- [88]-Ray D., Kundu B., Mukherjee P.K., Ohtsuki K. and Ohno. K..*Phys. Lett.*136 A 23 (1989)
- [89]-Godunov A.L.,Novikov N.V., Senashenko.V.S..*Physics letters A*Vol.145,p437- 40(1990)
- [90]-Konstantinov O.V., Nasibulaev Sh. K. and Ponomarev. O.A..*Opt. Spectrosk* Vol. 68 . p. 248 - 250(1990)
- [91]- Herrick D . R . and Sinanoglu. O . . *Phys. Rev. A* II , . 97 (1975)
- [92]- Herrick D.R.and Kellman. M .E.. *Physical Review A* . vol 21 , N02 (1980)
- [93]-Herrick D.R.,Kellman M. E.and Poliak. R . D..*Phys .Review A. Vol 22. N0 4*(1980)
- [94]- Mahecha Gamez. J. *Review A. Vol 34. N.4*(1980)
- [95]- Ho. Y. K .. *J. Phys. B: Atom. Molec . Phys .* , Vol. 12 ,N . 18 (1979)
- [96]-Cerjan C.,Hedges R ., HoIt C.,Reinhardt W. P.,Scheibner K. and Wendoloskl. J. J. . *Int . J. Quantum Chem.* vol. 14, P. 393 - 418 (1978)
- [97]-Varis R.and Winkler. P..*J. Phys. B : Atom. Molec . Phys . Vol. 8* , p . 1475 - 1480(1978)
- [98]-Sow B, Gning Y.,Sow M., Traore A., Wagué A.. *American Journal of Modern Physics* .5(5): 146-153 (2016)
- [99]-Hylleraas .E. A.. *Z. Phys.* 54, 347 (1929)
- [100]-Ho Y. K., *Phys. Rev. A.* 23, 2137. *PhysRevA.* 23. 2137(1981)

- [101]- Roy A. K., Singh R., and Deb. B. M. . J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30, 4763(1997)
- [102]- Diehl S.,Cubaynes D.,Bizau J. P.,Wuilleumier F.J.,Kenedy E.P. et al. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 32, 503 (1999)
- [103]-Biaye M.. Thèse de Doctorat d'état, Université Cheikh Anta Diop de Dakar(2005)
- [104]-Stewart, A. L., *The 1s2p <sup>3</sup>P triplet continuum and the photoionisation of the 1s2s <sup>3</sup>S state of helium.* J. Phys. B, 12, 401 (1979).
- [105]- Sow B., Sow M., Gning Y., Traoré A., Ndao A. S., Wague. A.. Radiation Physics and Chemistry 123, 25–30. (2016)
- [106]-Ho Y K, Phys. Rep. 99,1 (1 983)
- [107]-Ho Y. K. and Callaway J., Multichannel resonances in electron-hydrogen scattering ".Phys. Rev. A., 27: p. 1887 (1983)
- [108]-Ho Y. K. and Callaway J., Doubly excited of helium atoms between the N=2 and N=3 He+ thresholds . J. Phys. B.,18: p. 3481 (1985)
- [109]-Ho Y. K., Doubly-excited <sup>1,3</sup>P<sup>0</sup> autoionization states of He between the N=4 and N=6 thresholds of He+ ions ‘’. Z. Phys. D, 42: p. 77 -81 (1997)
- [110]-Hazi A. U. and Taylor H. S., Stabilization Method of Calculating Resonance Energies: Model Problem; Phys. Rev. A 1, 1109 (1970)
- [111]-Doolen G. D., A procedure for calculating resonance eigenvalues; J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 8, 525 (1975)
- [112]-Lonnie W. Manning and Frank C. Sanders;; Phys. Rev. A 44, 11 (1991)
- [113]-Gning Y. Thèse de Doctorat en Physique Atomique, Université Cheikh Anta Diop de Dakar, (2016).
- [114]- Dieng M., Sakho, I., Biaye M., and Wague A.,. Chin. J. Phys., 48, 1 (2010).
- [115]-Dieng M.,Biaye M., Gning Y. and Wague A.,. Chin. J. Phys., 51, 4 (2013).
- [116]-Ho Y. K. and Kar S., Few-Body Syst. 53, 437 (2012).
- [117]-Jiao L. G. and Ho Y. K., Phys. Plasmas 20, 083303 (2013).
- [118]-A. F. Ordonez-Lasso, J. C. Cardona, and J. L. Sanz-Vicario, Phys. Rev. A 88, 012702 (2013).

- [119]-Jiang P., Kar S., and Zhou Y., *Phys. Plasmas* 20, 012126 (2013).
- [120]-Ho Y. K. and Bathia A. K., Complex-coordinate calculation of  $^{1,3}\text{D}$  resonances in two electrons systems. *Phys. Rev. A*, 44: p. 2895(1991).
- [121]-Ho Y. K.,, *Z. Phys. D*, 38: p. 191 -196 (1996)
- [122]- Maquet A., Shih-I. Chu, and W.P. Reinhardt, *Phys. Rev. A* 27, 2946 (1983).
- [123]- Reinhardt W.P., *Annu. Rev. Phys. Chem.* 33, 223 (1982).
- [124]-Ho Y.K. *Phys. Rev. A* 44, 4154 (1991).
- [125] -Ivanov I.A. and Ho Y.K., *Phys. Rev. A* 61, 032501 (2000)
- [126]-Ho Y.K. and I.A. Ivanov, *Phys. Rev. A* 63, 062503 (2001).
- [127]-Oza D H *Phys. Rev. A* 33 824 (1986)
- [128]-Bhatia A K and Temkin A. *Phys. Rev. A* 36 1050 (1964)
- [129]-Bhatia A K and Temkin A. *Phys. Rev. A* 29 1895(1984)
- [130]-Sakho, I, Konte, A., Ndao, A. S, Biaye, M. and Wague, A.. *Scr.* 77 (2008)
- [131]-Sakho, I., *Eur. Phys. J. D* 61, 267-283 (2011)
- [132]-Seminario J. M., Sanders F. C.,; *Phys Rev A* 42, 2562 (1990)
- [133]-Drake G. W. F. and Dalgarno A., A; *Proc. Roy. Soc. Lond. Scr A* 320 549 (1971)
- [134]-Sakho, I., *Eur. Phys. J. D* 47, 37–44, (2008)
- [135]-Ivanov I. A. and Ho Y. K., , *Chin. J. Phys.* 39, 415 (2001).
- [136]-Bachau, H., Martin, F., Riere, A., Yanez, M. *At. Data Nucl. Data Tables* 48, 167 (1991)
- [137]-Manning, L.W., Sanders, F.C. *Phys. Rev. A* 44, 11. (1991)
- [138]-Varshalovich D.A et al, *Quantum Theory of Angular. Momentum.*, (Copyright by Scientific Publishing copte ltd 1988)
- [139]-Samarskogo A., *A Base de la théorie des fonctions spéciales.* Edition science, Moscou 281 (1974).
- [140]- Martin F. H., Riere. A and Yanez M., Helium-like doubly excited states; *Atomic data and Nuclear Data Tables* 48, 167 (1991)
- [141]-Ivanov I. A. and Safronova U.I. *Opt. Spectrosc.* 75 506 (1993)

# ANNEXES

**Annexe A** : l'énergie de l'état fondamental de l'Hélium en utilisant la fonction d'onde à 2 termes. Le terme 2 est utilisé ici, car le calcul n'est pas trop désordonné et une bonne approximation peut déjà être trouvée.

$$\psi = (1 + czu) e^{-\alpha s} \quad (\text{A}_1)$$

$$E[\psi] = \frac{\int \psi H \psi d\tau}{\int \psi^2 d\tau} \quad (\text{A}_2)$$

On remarque que  $\psi$  est indépendante de  $t$

L'hamiltonien (En utilisant les coordonnées d'Hylleraas) s'écrit sous la forme :

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \frac{1}{s^2 - t^2} \left[ 4s \frac{\partial}{\partial s} - 4t \frac{\partial}{\partial t} + \frac{2}{u} (s(u^2 - t^2) \frac{\partial}{\partial s} - t(u^2 - s^2) \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial u} \right] - \frac{2}{u} \frac{\partial}{\partial u} - \frac{4Z}{s^2 - t^2} + \frac{1}{u} \quad (\text{A}_3)$$

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2, \quad u = r_{12} \quad (\text{A}_4)$$

$$NE(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s dt \int_0^u dk \left\{ u(s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 \right] + 2 \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right) \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - \Psi^2 [4Zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (\text{A}_5)$$

Après différenciation et simplification, on obtient :

$$-e^{-2\alpha s} (1 + czu) (s(czu^2(8 - 6\alpha) - 4u(-2 + \alpha) + 2ct^2\alpha) + s^2(-1 + u\alpha^2 + c(2 - u + u^2\alpha^2)) - t^2(-1 + u\alpha^2 + c(2 - u + u^2\alpha^2))) \quad (\text{A}_6)$$

Après integration :

$$\frac{\pi^2 (2\alpha^2 (-27 + 8\alpha) + 2c\alpha (-104 + 25\alpha) + c^2 (-253 + 64\alpha))}{16\alpha^7} \quad (\text{A}_7)$$

La constante de Normalisation devient:

$$\frac{\pi^2 (48c^2 + 35c\alpha + 8\alpha^2)}{8\alpha^8} \quad (\text{A}_8)$$

La valeur moyenne de l'énergie sera :

$$\frac{\alpha(2\alpha^2(-27 + 8\alpha) + 2c\alpha(-104 + 25\alpha) + c^2(-253 + 64\alpha))}{2(48c^2 + 35c\alpha + 8\alpha^2)} \quad (\text{A}_9)$$

Après minimisation, on trouve :

$$E = -2.89112 \text{ a.u}$$

Avec  $\alpha = 1.84968$  pour  $c = 0.365796$

$$\text{Avec une erreur de } \frac{-2.903724377 - (-2.89112)}{-2.903724377} * 100 = 0.43\% \quad (\text{A}_{10})$$

Nous pouvons également voir que lorsque nous ajoutons plus de termes à notre fonction d'onde, la valeur énergétique est améliorée dans tous les cas. Même si la fonction d'onde choisie n'est pas optimale, ajouter de nouveaux termes abaissant toujours la valeur énergétique.

Donc, tant que nous ne modifions pas les termes précédents, nous pouvons ajouter n'importe quel terme que nous voulons et encore améliorer notre résultat.

Quelques combinaison des valeurs des termes  $l+m+n$

$l+m+n$	$s^l t^m u^n$
<b>0</b>	1
<b>1</b>	s, t, u
<b>2</b>	$s^2, t^2, u^2, st, su, tu$
<b>3</b>	$s^3, t^3, u^3, stu, s^2t, s^2u, t^2s, t^2u, u^2s, u^2t$
<b>4</b>	$s^4, t^4, u^4, s^3t, s^3u, t^3s, t^3u, u^3s, u^3t, s^2u^2, s^2t^2, u^2t^2, st^2u, stu^2, s^2tu, st^2u$
<b>5</b>	$s^5, t^5, u^5, s^4t, s^4u, t^4s, t^4u, u^4s, u^4t, s^3tu, st^3u, stu^3, s^2t^2u, st^2u^2, s^2tu^2$

## **Annexe B : Volume d'intégration et la constante de Normalisation avec une fonction**

**d'essai**  $\psi = Cze^{-\alpha s}$

Où  $\alpha$  est un paramètre variationnel, C est la constante de normalisation. Puis, en coordonnées polaires sphériques pour un volume fini de rayon R.

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (\text{B}_1)$$

Avec  $\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$  (B\_2)

$$E[\psi] = \frac{\int \psi \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^2 d\tau} \quad (\text{B}_3)$$

Concentrons-nous d'abord sur l'élément de volume  $d\tau$  de l'équation (B.3). En utilisant la symétrie du système,  $d\tau$  peut être réécrit comme :

$$d\tau = dr_1 dr_2 = J(r_1, r_2, \theta_{12}) dr_1 dr_2 d\theta_{12} \quad (\text{B}_4)$$

Où  $J(r_1, r_2, \theta_{12})$  est le Jacobien de la transformation de coordonnées. En fixant  $r_1$  d'abord, exécutez l'intégrale de  $r_2$  par rapport à  $r_1$  pour arriver à

$$\int d\tau = \int dr_1 r_2^2 dr_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} d\phi_{12} = 2\pi \int dr_1 r_2^2 dr_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{B}_5)$$

Ensuite, en intégrant sur  $r_1$ , on note qu'il n'y a pas de dépendance sur les angles d'Euler, de sorte que l'équation (B.5) se réduit à :

$$\int d\tau = 8\pi^2 \int r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{B}_6)$$

Nous introduisons maintenant la nouvelle variable u, la distance entre  $r_1$  et  $r_2$ :

$$u^2 = r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_{12} \quad (\text{B}_7)$$

Lors des étapes d'intégration précédentes, si  $r_1$  et  $r_2$  sont fixés en premier,

$$u du = r_1 r_2 \sin \theta_{12} d\theta_{12} \quad (\text{B}_8)$$

De sorte que (pour le cas du volume infini) :

$$\int d\tau = 8\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \int_0^\pi \sin \theta_{12} d\theta_{12} = 8\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} u du \quad (\text{B}_9)$$

Equation (B\_9) Apparaît dans les travaux de Hylleraas [161].

Limitons ensuite les deux électrons dans un volume fini d'espace tel que  $0 \leq r_1 \leq R$  et  $0 \leq r_2 \leq R$ .

La raison pour laquelle nous choisissons la même  $R$  est due à la symétrie entre les deux électrons. La limite  $R \rightarrow \infty$  conduit alors à l'intégrale de l'espace infini. Pour les coordonnées elliptiques  $s$  et  $t$  ( $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_1 - r_2$ ,  $u = r_{12}$ ), il est facile de montrer que :

$$dr_1 dr_2 = \frac{1}{2} ds dt \quad \text{et} \quad r_1 r_2 = \frac{1}{4} (s^2 - t^2) \quad (\text{B}_{10})$$

Par conséquent, pour toute intégrale  $f$  qui est une fonction de  $(s, t, u)$ , on a des équations (B\_9) et (B\_10) que l'intégrale en termes de nouvelles coordonnées  $(s, t, u)$  est :

$$\int f d\tau = 8\pi^2 \int_0^R \int_0^R r_1 r_2 dr_1 dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} u f(s, t, u) du = 8\pi^2 \int_{s'} \int_{|t|}^s \frac{1}{2} ds dt \int f(s, t, u) \frac{s^2 - t^2}{4} u du \quad (\text{B}_{11})$$

Ou  $S'$  désigne le domaine d'intégration dans les nouvelles coordonnées  $(s, t)$ . Ce domaine a été changé de  $S : [0 \leq r_1 \leq R; 0 \leq r_2 \leq R]$  vers  $S' : [0 \leq s \leq 2R; -R \leq t \leq R]$

La fonction  $f(s, t, u)$  pourrait être  $\psi \hat{H} \psi$  ou  $\psi^2$ . Comme l'indique Bethe [123]: "L'exigence de symétrie exacte [de la fonction d'onde] prend alors la forme simple que  $\psi$  soit une fonction paire de  $t$  pour le para-Hélium, fonction impaire de  $t$  pour l'ortho-Hélium. Comme l'hamiltonien est une fonction paire de  $t$  et que les intégrales de l'équation (B.3) contiennent deux facteurs, la contribution à l'intégrale de  $-t$  est identique à celle de  $+t$ . Nous nous limitons donc aux valeurs positives de  $t$  dans les intégrales et multiplions l'élément de volume par un facteur de 2 ". Dans cet esprit, l'équation (B\_12) peut être réécrite comme :

$$\int f d\tau = 2\pi^2 \int_{s'} \int_{|t|}^s ds dt \int f(s, t, u) (s^2 - t^2) u du = 2\pi^2 \int_0^R \int_0^S ds \int_0^s dt \int f(s, t, u) (s^2 - t^2) u du + 2\pi^2 \int_0^{2R} ds \int_0^{2R-s} dt \int f(s, t, u) (s^2 - t^2) u du \quad (\text{B}_{12})$$

On voit maintenant à partir de l'équation (B\_12) que l'intégrale a deux composantes. Pour plus de commodité, désignons-les par A et B, où :

$$A = 2\pi^2 \int_0^R ds \int_0^s dt \int_t^s f(s, t, u) (s^2 - t^2) u du \quad (\text{B}_13)$$

$$\text{Et } B = 2\pi^2 \int_0^{2R} ds \int_0^{2R-s} dt \int_t^s f(s, t, u) (s^2 - t^2) u du \quad (\text{B}_14)$$

Nous donnons ci-après des exemples pour démontrer l'exactitude de cette séparation du volume d'intégration.

### ➤ Volume d'intégration

Nous considérons d'abord le volume d'intégration en choisissant  $f(s, t, u) = 1$ . Le résultat devrait être le carré du volume d'une sphère de rayon R. En effet, un moyen plus facile de le déterminer est d'utiliser l'équation (B\_6) :

$$\int d\tau = 8\pi^2 \cdot 2 \left( \frac{R^3}{3} \right)^2 = \left( \frac{4\pi R^3}{3} \right)^2 \quad (\text{B}_15)$$

D'autre part, nous pouvons réaliser l'intégrale via ses composantes dérivées dans l'équation (B\_12). Lors de l'utilisation des intégrales suivantes :

$$\int_t^s (s^2 - t^2) u du = \frac{(s^2 - t^2)^2}{2} \quad (\text{B}_16)$$

$$\int_0^R ds \int_0^s du \frac{(s^2 - t^2)^2}{2} = \frac{2R^6}{45} \quad (\text{B}_17)$$

$$\int_R^{2R} ds \int_0^{2R-s} du \frac{(s^2 - t^2)^2}{2} = \frac{38R^6}{45} \quad (\text{B}_18)$$

Nous avons aussi

$$\int d\tau = A + B = 2\pi^2 \left( \frac{2R^6}{45} + \frac{38R^6}{45} \right) = \left( \frac{4\pi R^3}{3} \right)^2 \quad (\text{B}_19)$$

L'accord des deux manières d'obtenir le volume démontre que la nouvelle façon d'exprimer les intégrales dans les coordonnées (s, t, u) telles que définies par l'équation (B\_12) est correcte.

➤ **Normalisation**

l'intégrale de normalisation est :

$$1 = \int \psi^2 d\tau = C^2 \left( 4\pi \int_0^R e^{-2\alpha r} r^2 dr \right)^2 = \frac{C^2 \pi^2}{\alpha^6} \left[ 1 - e^{-2\alpha R} (1 + 2\alpha R + 2\alpha^2 R^2) \right]^2 \quad (\text{B}_20)$$

Pour  $R \rightarrow \infty$ ,  $C = \alpha^3 / \pi$  le résultat bien connu.

Dans les coordonnées (s, t, u), la contribution de A de l'équation (B\_13) est :

$$A = \int_A \psi^2 d\tau = 2\pi^2 C^2 \int_0^R e^{-2\alpha s} ds \int_0^s dt \int_t^s (s^2 - t^2) u du = \frac{C^2 \pi^2}{\alpha^6} \left[ 1 - \frac{e^{-2\alpha R}}{15} (15 + 30\alpha R + 30\alpha^2 R^2 + 20\alpha^3 R^3 + 10\alpha^4 R^4 + 4\alpha^5 R^5) \right] \quad (\text{B}_21)$$

La contribution à la normalisation à partir de B de l'équation (B.14) est :

$$B = \int_B \psi^2 d\tau = 2\pi^2 C^2 \int_0^{2R} e^{-2\alpha s} ds \int_0^{2R-s} dt \int_t^s (s^2 - t^2) u du \\ = \frac{C^2 \pi^2}{\alpha^6} \left[ e^{-4\alpha R} (1 + 2\alpha R + 2\alpha^2 R^2)^2 - \frac{e^{-2\alpha R}}{15} (15 + 30\alpha R + 30\alpha^2 R^2 - 20\alpha^3 R^3 - 10\alpha^4 R^4 - 4\alpha^5 R^5) \right] \quad (\text{B}_22)$$

On vérifie aisément que la somme de A et B de l'équation (B\_21) et de l'équation (B\_22) est équivalente à celle de l'équation (B\_20). Ceci démontre à nouveau la justesse des deux intégrales dérivées.

**Annexe C : Calcul détaillé de la valeur propre  $E(\alpha) = H(\alpha)$  avec une fonction d'onde d'essai**

de type :  $\Psi(r_1, r_2, \alpha) = \exp -\alpha(r_1 + r_2)$  (B\_1) en unité atomique ( $a_0 = 1$ ) [134] sakho

Sachant que le paramètre variationnel :  $\alpha$  (C\_2)

Le calcul de la valeur propre  $E(\alpha) = \langle H \rangle(\alpha)$  se fait à partir de la relation de définition que nous rappelons :

$$E(\alpha) = \langle H \rangle(\alpha) = \frac{\langle \Psi(\alpha) | H | \Psi(\alpha) \rangle}{\langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle} \quad (C_3)$$

Dans cette équation, où la fonction d'onde corrélée est donnée par (C\_1) et l'hamiltonien  $H$  par (en a.u) :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \Delta_1 - \frac{1}{2} \Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (C_4)$$

En outre, la relation de fermeture traduisant le fait que les kets  $|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle$  sont des bases continues dans l'espace  $E_r$  des états des deux électrons s'écrit :

$$\iint dr_1^3 dr_2^3 |\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2| = \quad (C_5)$$

En utilisant cette relation, on tire à partir de la valeur moyenne (C\_3):

$$E(\alpha) \iint dr_1^3 dr_2^3 \langle \Psi(\alpha) | \Psi(\alpha) \rangle = \iint dr_1^3 dr_2^3 \langle \Psi(\alpha) | \hat{H} | \Psi(\alpha) \rangle \quad (C_6)$$

En développant cette expression on obtient

$$E(\alpha) \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \times \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) = \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \hat{H} \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \quad (C_7)$$

C'est-à-dire :

$$NE(\alpha) = \iint dr_1^3 dr_2^3 \Psi(r_1, r_2, \alpha) \hat{H} \Psi^*(r_1, r_2, \alpha) \quad (C_8)$$

avec,

$$N = \iint dr_1^3 dr_2^3 |\Psi(r_1, r_2, \alpha)|^2 \quad (C_9)$$

la constante de normalisation. Pour faciliter l'intégration de l'équation (C\_7), on opère des changements en coordonnées elliptiques et on pose :

$$s = (r_1 + r_2) ; t = (r_1 - r_2) ; u = r_{12} \quad (C_{10})$$

Sur la base de ces changements de variable, l'élément de volume élémentaire  $d\tau = dr_1^3 dr_2^3$  s'écrit :

$$d\tau = 2\pi^2 (s^2 - t^2) u ds dt du \quad (C_{11})$$

Quant à l'équation (C.8), elle s'écrit en coordonnées elliptiques :

$$NE(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \times \left[ \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right)^2 \right] + 2 \left( \frac{\partial \Psi}{\partial u} \right) \times \left[ s(u^2 - t^2) \frac{\partial \Psi}{\partial s} + t(s^2 - u^2) \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right] - \Psi^2 [4zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (C_{12a})$$

En utilisant les changements de variables (C\_10), la fonction d'onde corrélée (C\_1) s'écrit sous la forme simple :

$$\Psi(s, \alpha) = \exp -\alpha s \quad (C_{13})$$

L'expression (C.13) montre bien le fait que la fonction d'onde corrélée de l'état fondamental est indépendante des coordonnées elliptiques  $t$  et  $u$ . L'expression (C.12a) se simplifie alors comme suit :

$$NE(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt \left\{ u(s^2 - t^2) \times \left( \frac{\partial \Psi}{\partial s} \right)^2 - \Psi^2 [4zsu - s^2 + t^2] \right\} \quad (C_{12b})$$

Cette expression est la somme de deux intégrales que nous écrivons sous la forme :

$$NE(\alpha) = E_1(\alpha) + E_2(\alpha) \quad (C_{14})$$

avec

$$E_1(\alpha) = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt u (s^2 - t^2) \times \left( \frac{d\Psi}{ds} \right)^2 \quad (C_{15})$$

et

$$E_2(\alpha) = - \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u dt [4zsu - s^2 + t^2] \Psi^2 \quad (C_{16})$$

Par ailleurs, d'après (C\_9), la constante de normalisation s'écrit en coordonnées elliptiques :

$$N = \int_0^{\infty} ds \int_0^s du \int_0^u dt u (s^2 - t^2) \times \Psi^2 \quad (C_{17})$$

En utilisant l'expression (C\_13) de la fonction d'onde corrélée, l'intégrale (C\_15) donne successivement :

$$\begin{aligned} E_1(\alpha) &= \alpha^2 \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \int_0^u dt (uzs^2 - ut^2) \\ &= \alpha^2 \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \left[ uzs^2 \int_0^u dt - u \int_0^u t^2 dt \right] \\ &= \alpha^2 \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \left[ u^2 zs^2 - \frac{1}{3}u^4 \right] \\ &= \alpha^2 \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \left[ s^2 z \int_0^s u^2 du - \frac{1}{3} \int_0^s u^4 du \right] \\ &= \alpha^2 z \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \left[ \frac{1}{3}s^5 - \frac{1}{15}s^5 \right] \end{aligned}$$

Soit:

$$E_1(\alpha) = \frac{4}{15} \alpha^2 \int_0^{\infty} s^5 e^{-2\alpha s} ds \quad (C_{18})$$

De même, l'intégrale (C\_16) donne de même successivement :

$$\begin{aligned} E_2(\alpha) &= - \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \left[ 4Zsu \int_0^u dt - s^2 \int_0^u dt + \int_0^u t^2 dt \right] \\ &= - \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \left[ 4Zsu^2 - s^2u + \frac{1}{3}u^3 \right] \\ &= - \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \left[ 4Zs \int_0^s u^2 du - s^2 \int_0^s u du + \frac{1}{3} \int_0^s u^3 du \right] \\ &= - \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \left[ \frac{4}{3}Zs^4 - \frac{1}{2}s^4 + \frac{1}{12}s^4 \right] \text{ Soit :} \end{aligned}$$

$$E_2(\alpha) = - \frac{4}{3} Z \int_0^{\infty} s^4 e^{-2\alpha s} ds + \frac{5}{12} \int_0^{\infty} s^4 e^{-2\alpha s} ds \quad (C_{19})$$

Quant à l'intégrale (C\_17) donne en fin successivement :

$$\begin{aligned}
 N &= \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \int_0^u dt (uzs^2 - ut^2) \\
 &= \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \left[ uz s^2 \int_0^u dt - u \int_0^u t^2 dt \right] \\
 &= \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \int_0^s du \left[ s^2 zu^2 - \frac{1}{3} u^4 \right] \\
 &= \int_0^{\infty} e^{-2\alpha s} ds \left[ s^2 z \int_0^s u^2 du - \frac{1}{3} \int_0^s u^4 du \right]
 \end{aligned}$$

Soit après intégration et arrangement :

$$N = \frac{4}{15} \int_0^{\infty} s^5 e^{-2\alpha s} ds \quad (\text{C}_{20})$$

Les intégrales (C\_18),(C\_19) et (C\_20) sont toutes du type :

$$\int_0^{\infty} x^n e^{ax} dx = \frac{1}{a} \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (\text{C}_{21})$$

utilisant ce résultat, les équations (C\_18),(C\_19)et (C\_20) donnent respectivement après intégration :

$$E_1(\alpha) = \frac{4}{15} \alpha^2 \times \frac{5!}{2(2\alpha)^6} \quad (\text{C}_{22})$$

$$E_2(\alpha) = -\frac{4}{3} Z \times \frac{4!}{2(2\alpha)^5} + \frac{5}{12} \times \frac{4!}{2(2\alpha)^5} \quad (\text{C}_{23})$$

$$N = \frac{4}{15} \times \frac{5!}{2(2\alpha)^6} \quad (\text{C}_{24})$$

Considérant ces résultats, (C\_14) donne :

$$\frac{4}{15} \times \frac{5!}{2(2\alpha)^6} E(\alpha) = \frac{4}{15} \alpha^2 \times \frac{5!}{2(2\alpha)^6} - \frac{4}{3} Z \times \frac{4!}{2(2\alpha)^5} + \frac{5}{12} \times \frac{4!}{2(2\alpha)^5} \quad (\text{C}_{25})$$

Après simplification, on obtient :

$$E(\alpha) = \alpha^2 - (2\alpha)Z + \frac{5}{16}(2\alpha)$$

Soit en définitive :

$$E(\alpha) = \alpha^2 - \left(2Z - \frac{5}{8}\right)\alpha \quad (\text{C}_26)$$

➤ Expression de l'énergie de l'état fondamental des systèmes héliumoïdes

En vertu du principe variationnel de Ritz appliqué à l'équation (C\_26), il vient :

$$\left. \frac{d}{d\alpha} E(\alpha) \right|_{\alpha=\alpha_0} = 0 \quad (\text{C}_27)$$

**Annexe D:** calcul des Energies des états singulets doublement excités  $(ns^2)^1S^e$

```
/* [wxMaxima: input start ] */
```

**DECLARATION DES PARAMETRES**

a: .....

m: .....

z: .....

alpha: .....

n: .....

l: .....

r[0]: .....

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

phi(s,t,u):=(sum((n^2\*(r[0])^2)^nu,nu,0,n-1-1))\*(1+z\*a\*u^m)\*exp(-  
alpha\*s)\*(Y1[0,0]\*Y2[0,0]);

phi(s,t,u);

N(alpha):=integrate(integrate(integrate(phi(s,t,u)\*phi(s,t,u)\*u\*(s^2-t^2),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

N(alpha);

/\*dérivée de phi\*/

A(s):='diff(phi(s,t,u),s);

A(s):=diff(phi(s,t,u),s);

A(s);

/\*dérivée de phi\*/

B(t):='diff(phi(s,t,u),t);

B(t):=diff(phi(s,t,u),t);

B(t);

/\*dérivée de phi\*/

C(u):='diff(phi(s,t,u),u);

C(u):=diff(phi(s,t,u),u);

C(u);

E[1](alpha):='integrate('integrate('integrate((u\*(s^2-t^2)\*A(s)^2+B(t)^2+C(u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

E[1](alpha):=integrate(integrate(integrate((u\*(s^2-t^2)\*A(s)^2+B(t)^2+C(u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

E[1](alpha);

E[2](alpha):='-integrate('integrate('integrate(((4\*z\*s\*u-s^2+t^2)\*phi(s,t,u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

E[2](alpha):=-integrate(integrate(integrate(((4\*z\*s\*u-s^2+t^2)\*phi(s,t,u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

E[2](alpha);

E[3](alpha):='integrate('integrate('integrate((2\*C(u)\*(s\*(u^2-t^2)\*A(s))+(s^2-u^2)\*B(t)),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

E[3](alpha):=integrate(integrate(integrate((2\*C(u)\*(s\*(u^2-t^2)\*A(s))+(s^2-u^2)\*B(t)),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

E[3](alpha);

E(alpha):=((E[1](alpha)+E[2](alpha)+E[3](alpha))/N(alpha))\*13.605698;

E(alpha);

ev(E(alpha),numer

**Annexe E:** calcul des Energies des états singulets doublement excités  $(np^2)^1P^0$ ,  $(nd^2)^1G^e$ ,  $(nf^2)^1I^e$

/\* [wxMaxima: input start ] \*/

### DECLARATION DES PARAMETRES

a: .....

m: .....

z: .....

alpha: .....

n: .....

l: .....

r[0]: .....

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

phi(s,t,u):=(sum((n^2\*(r[0])^2)^nu,nu,0,n-1-1))\*(1+z\*a\*u^m)\*exp(-alpha\*s)\*(Y1[0,0]\*Y2[0,0]);

phi(s,t,u);

N(alpha):=integrate(integrate(integrate(phi(s,t,u)\*phi(s,t,u)\*u\*(s^2-t^2),t,0,u),u,0,s),s,0,inf);

N(alpha);

/\*dérivée de phi\*/

A(s):='diff(phi(s,t,u),s);

A(s):=diff(phi(s,t,u),s);

A(s);

/\*dérivée de phi\*/

B(t):='diff(phi(s,t,u),t);

B(t):=diff(phi(s,t,u),t);

B(t);

/\*dérivée de phi\*/

$C(u) := \text{diff}(\text{phi}(s,t,u),u);$

$C(u) := \text{diff}(\text{phi}(s,t,u),u);$

$C(u);$

$E[1](\alpha) := \text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((u*(s^2-t^2)*A(s)^2+B(t)^2+C(u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,\text{inf});$

$E[1](\alpha) := \text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((u*(s^2-t^2)*A(s)^2+B(t)^2+C(u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,\text{inf});$

$E[1](\alpha);$

$E[2](\alpha) := \text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(((4*z*s*u-s^2+t^2)*\text{phi}(s,t,u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,\text{inf});$

$E[2](\alpha) := -\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(((4*z*s*u-s^2+t^2)*\text{phi}(s,t,u)^2),t,0,u),u,0,s),s,0,\text{inf});$

$E[2](\alpha);$

$E[3](\alpha) := \text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((2*C(u)*(s*(u^2-t^2)*A(s))+(s^2-u^2)*B(t)),t,0,u),u,0,s),s,0,\text{inf});$

$E[3](\alpha) := \text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((2*C(u)*(s*(u^2-t^2)*A(s))+(s^2-u^2)*B(t)),t,0,u),u,0,s),s,0,\text{inf});$

$E[3](\alpha);$

$E(\alpha) := ((E[1](\alpha)+E[2](\alpha)+E[3](\alpha))/N(\alpha))*13.605698;$

$E(\alpha);$

$\text{ev}(E(\alpha),\text{numer});$

**Annexe F:** calcul des Energies des états singulets et triplets doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  
 $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$

/\* [wxMaxima: input start ] \*/

### DECLARATION DES PARAMETRES

```

j: .....;
m: .....;
n: .....;
N: .....;
l: .....;
q: .....;
r[0]: .....;
Z: .....;
a: .....;
alpha: .....;
Y1[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
Y2[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
Lambda:Z/(n*alpha*r[0]);
theta[1]:%pi/3;
theta[2]:%pi/4;
phi(j,m,n,l,nu):=(sum((n^2*(r[0])^2)^nu,nu,0,n-1-1))*(sum((N^2*(r[0])^2)^q,q,0,n-1-1))*(1-
z*a*sqrt((r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2]))^m)*exp(-
alpha*((r1+r2)^j))*(Y1[0,0]*Y2[0,0]);
phi(j,m,n,l,nu);
T1(j,k,m,n,l,nu):=laumber(1/r1^2*diff(r1^2*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),r1,1),r1,1)+1/r2^2*diff(r2^
2*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),r2,1),r2,1));
T1(j,k,m,n,l,nu);

```

T2(j,k,m,n,l,nu):=laumber(1/(r1^2\*sin(theta[1]))\*diff(sin(theta[1])\*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),theta[1],1),theta[1],1)+1/(r2^2\*sin(theta[2]))\*diff(sin(theta[2])\*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),theta[2],1),theta[2],1));

T2(j,k,m,n,l,nu);

A(j,k,m,n,l,nu):=T1(j,k,m,n,l,nu)+T2(j,k,m,n,l,nu);

A(j,k,m,n,l,nu);

B(j,k,m,n,l,nu):=Phi(j,k,m,n,l,nu)\*A(j,k,m,n,l,nu);

B(j,k,m,n,l,nu);

N:laumber(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,m,n,l,nu)\*Phi(j,k,m,n,l,nu)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf));

ev(N, numer);

C:integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,m,n,l,nu)\*(-2\*Z\*(1/r1+1/r2))\*Phi(j,k,m,n,l,nu)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf));

ev(C, numer);

W:lauber(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,m,n,l,nu)\*(2/sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2])))\*Phi(j,k,m,n,l,nu)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf));

ev(W, numer);

T:integrate(integrate(integrate(integrate((B(j,k,m,n,l,nu)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf));

ev(T, numer);

E:(T+C+W)/N;

ev(E, numer);

**Annexe G: Détails de calculs des éléments matriciels de la fonction d'onde pour L=1 (1P<sup>0</sup> et 3P<sup>0</sup>) dans le cas où les deux électrons occupent le même niveau.**

Dans cette partie de l'Annexe, nous présentons les détails de calculs des éléments matriciels de la fonction d'onde pour L=1 (1P<sup>0</sup> et 3P<sup>0</sup>) dans le cas où les deux électrons occupent le même niveau.

La fonction utilisée est de la forme [107] :

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1, \nu-1} \left( N^2 r_0^2 \right)^{\nu} \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1, \nu'-1} \left( N^2 r_0^2 \right)^{\nu'} \left( C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z_{12}^m \right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_l(\Omega_1) Y_l(\Omega_2)$$

(G\_1)

Où  $Y_l(\Omega_1)$  et  $Y_l(\Omega_2)$  représentent les harmoniques sphériques de l'électron 1 ou 2.

$r_{12}^m$  Représente le facteur de corrélation définit sous la forme [138]

$$r_{12}^m = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2l+1} a_l^m(r_1, r_2) \times (Y_l(\Omega_1) Y_l(\Omega_2))$$

(G\_2)

Pour  $r_1 < r_2$

$$a_l^m(r_1, r_2) = \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_l}{\left(\frac{1}{2}\right)_l} r_2^m \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l F\left(l - \frac{m}{2}, -\frac{1}{2} - \frac{m}{2}, l + \frac{3}{2}, \frac{r_1^2}{r_2^2}\right)$$

(G\_2\_a)

$$F\left(l - \frac{m}{2}, -\frac{1}{2} - \frac{m}{2}, l + \frac{3}{2}, \frac{r_1^2}{r_2^2}\right)$$

(G\_2\_b)

est la fonction d'onde hypergéométrique

Cette fonction d'onde hypergéométrique est définie par [139]:

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_m (\beta)_m}{(\gamma)_m} \times \frac{z^m}{m!} \quad \text{Avec } z < 1 \text{ et}$$

(G\_2\_c)

$$(\chi)_m = \frac{\Gamma(\chi + m)}{\Gamma(\chi)} = \chi(\chi + 1) \dots (\chi + m - 1)$$

(G\_2\_d)

En remplaçant  $\alpha, \beta, \gamma$  et  $z$  par leur valeur définie dans (A\_2\_c) on obtient:

$$F\left(l - \frac{m}{2}, -\frac{1}{2} - \frac{m}{2}, l + \frac{3}{2}, \frac{r_1^2}{r_2^2}\right) = 1 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times \frac{r_1^2}{r_2^2} \quad (\text{A}_2\text{_e})$$

En remplaçant (A\_2\_c) par sa valeur dans (A\_2\_b) on obtient:

$$a_l^m(r_1, r_2) = \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_l}{\left(\frac{1}{2}\right)_l} r_2^m \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l \times \left(1 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times \frac{r_1^2}{r_2^2}\right) \quad (\text{G}_2\text{_f})$$

$$a_l^m(r_1, r_2) = \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_l}{\left(\frac{1}{2}\right)_l} \times \frac{r_1^l}{r_2^{l-m+2}} \times \left(r_2^2 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times r_1^2\right) \quad (\text{G}_2\text{_g})$$

En remplaçant (A\_2\_g) par sa valeur dans (A\_2\_a) on obtient :

$$r_{12}^m = 4\pi \sum_{l=0}^m \frac{1}{2l+1} \times \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_l}{\left(\frac{1}{2}\right)_l} \times \frac{r_1^l}{r_2^{l-m+2}} \times \left(r_2^2 - \frac{(2l-m)(1+m)}{2(2l+3)} \times r_1^2\right) (Y_l(\Omega_1) Y_l(\Omega_2)) \quad (\text{G}_2\text{_h})$$

$$r_{12}^m = 4\pi \left\{ \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_0}{\left(\frac{1}{2}\right)_0} \times \frac{r_1^0}{r_2^{0-m+2}} \times \left(r_2^2 + \frac{m(1+m)}{6} \times r_1^2\right) (Y_0(\Omega_1) Y_0(\Omega_2)) + \frac{1}{3} \times \frac{\left(-\frac{m}{2}\right)_1}{\left(\frac{1}{2}\right)_1} \times \frac{r_1^1}{r_2^{1-m+2}} \times \left(r_2^2 - \frac{(2-m)(1+m)}{10} \times r_1^2\right) (Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2)) \right\}$$

$$Y_l(\Omega_1) Y_l(\Omega_2) = \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}^*(\Omega_1) Y_{l,m}(\Omega_2) \quad (\text{G}_2\text{_i})$$

avec  $\Omega_i = (\theta_i, \varphi_i)$

Pour les états  $^1P^0$  et  $^3P^0$  nous avons  $L=1$  d'où la fonction d'onde définie ci-dessus devient:

$$\psi_{jkm} = \sum_{\nu=0}^{\nu=N-1, -1} \left(N^2 r_0^2\right)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N-1, -1} \left(N^2 r_0^2\right)^{\nu'} \left(C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z_{12}^m\right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} Y_1(\Omega_1) Y_1(\Omega_2) \quad (\text{G}_3)$$

$$Y_{0,0}(\Omega_1) \times Y_{1,0}(\Omega_2) = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cos \theta_2, \quad Y_{1,0}(\Omega_1) \times Y_{0,0}(\Omega_2) = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cos \theta_1 \quad (\text{G}_4)$$

$$Y_l(\Omega_1) Y_l(\Omega_2) = Y_{l,-1}^*(\Omega_1) Y_{l,-1}(\Omega_2) + Y_{l,0}^*(\Omega_1) Y_{l,0}(\Omega_2) + Y_{l,1}^*(\Omega_1) Y_{l,1}(\Omega_2) \quad (\text{G}_5)$$

$$Y_{0,0}(\Omega_1) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \quad , \quad Y_{1,-1}(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta_1 e^{-i\varphi_1} \quad , \quad Y_{1,1}(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta_1 e^{+i\varphi_1} \quad (\text{G}_6)$$

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \frac{3}{4\pi} (\sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos \varphi_{12} + \cos \theta_1 \cos \theta_2) \quad (\text{G}_7)$$

Pour  $\varphi_1 = \varphi_2$  on a  $\cos \varphi_{12} = 1$  d'où

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \frac{3}{4\pi} (\sin \theta_1 \sin \theta_2 + \cos \theta_1 \cos \theta_2) \quad , \quad Y_0(\Omega_1)Y_0(\Omega_2) = \frac{1}{4\pi} \quad (\text{G}_8)$$

Pour  $3d4d^{+1,3}\text{Ge}$  états

$$Y_l(\Omega_1)Y_l(\Omega_2) = \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}^*(\Omega_1)Y_{l,m}(\Omega_2) \quad (\text{G}_9)$$

Pour  $l = 2$  on a:

$$Y_2(\Omega_1)Y_2(\Omega_2) = Y_{2,-2}^*(\Omega_1)Y_{2,-2}(\Omega_2) + Y_{2,-1}^*(\Omega_1)Y_{2,-1}(\Omega_2) + Y_{2,0}^*(\Omega_1)Y_{2,0}(\Omega_2) + Y_{2,1}^*(\Omega_1)Y_{2,1}(\Omega_2) + Y_{2,2}^*(\Omega_1)Y_{2,2}(\Omega_2) + Y_{1,-1}^*(\Omega_1)Y_{1,-1}(\Omega_2) + Y_{1,0}^*(\Omega_1)Y_{1,0}(\Omega_2) + Y_{1,1}^*(\Omega_1)Y_{1,1}(\Omega_2) \quad (\text{G}_{10})$$

$$Y_{2,2}(\Omega_2) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{i2\varphi} \quad Y_{2,2}^*(\Omega_1) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{-i2\varphi} \quad (\text{G}_{11})$$

$$Y_{2,-2}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^2}{\sin^2 \theta} e^{i2\varphi} \quad Y_{2,-2}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} \frac{(\cos^2 \theta - 1)^2}{\sin^2 \theta} e^{-i2\varphi} \quad (\text{G}_{12})$$

$$Y_{2,-1}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} (\cos^2 \theta - 1) e^{i2\varphi} \quad Y_{2,-1}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{\cos \theta}{\sin \theta} (\cos^2 \theta - 1) e^{-i2\varphi} \quad (\text{G}_{13})$$

$$Y_{2,0}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{(3\cos^2 \theta - 1)^2}{2} \quad Y_{2,0}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{(3\cos^2 \theta - 1)^2}{2} \quad (\text{G}_{14})$$

$$Y_{2,1}(\Omega_2) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \quad Y_{2,1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} \quad (\text{G}_{15})$$

$$\text{avec } Y_{1,-1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \quad Y_{1,-1}(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \quad (\text{G}_{16})$$

$$Y_{1,0}^*(\Omega_1) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_{1,0}(\Omega_2) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (\text{G}_{17})$$

$$Y_{1,1}^*(\Omega_1) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i-\varphi} \quad Y_{1,1}(\Omega_2) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \quad (\text{G}_{18})$$

$$Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2) = \frac{15\sin^2\theta_1 \sin^2\theta_2}{16\pi} - \frac{15\cos\theta_1 \sin\theta_1 \sin\theta_2}{8\pi} - \frac{\sqrt{75}(3\cos^2\theta_1 - 1)\sin\theta_2^2}{2^{9/2}\pi}$$

(G\_19)

D'où la fonction d'onde devient :

$$\psi_{jkm} = \left(\frac{1}{4\pi}\right) \sum_{\nu=0}^{\nu=N_1-1} \left(N^2 r_0^2\right)^\nu \sum_{\nu'=0}^{\nu'=N_2-1} \left(N^2 r_0^2\right)^{\nu'} \left(C_{jkm} + (-1)^S C_{jkm} z r_{12}^m\right) e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad (\text{G}_{20})$$

$$(A.3) \quad r_{12}^m = 4\pi \left\{ \frac{\binom{m}{2}_0}{\binom{1}{2}_0} \times \frac{r_1^0}{r_2^{0-m}} \times \left(r_2^2 + \frac{m(1+m)}{6} \times r_1^2\right) (Y_0(\Omega_1)Y_0(\Omega_2)) + \frac{1}{3} \times \frac{\binom{m}{2}_1}{\binom{1}{2}_1} \times \frac{r_1^1}{r_2^{1-m}} \times \left(r_2^2 - \frac{(2-m)(1+m)}{10} \times r_1^2\right) (Y_1(\Omega_1)Y_1(\Omega_2)) \right\} \quad (\text{G}_{21})$$

$$r_{12}^m = r_2^m + \frac{m(m+1)}{6} \times r_1^2 r_2^{m-2} - m(r_1 r_2^{m-1} + \frac{(m+1)(m-2)}{10} \times r_1^3 r_2^{m-3}) \cos(\theta_1 - \theta_2)$$

(G\_22)

## **Annexe H: Programme écrit en Maxima pour le calcul de l'énergies et de la largeurs de résonance (Ry) des états d'autoionisation [2sns<sup>+1,3</sup>S<sup>e</sup>, 2snp<sup>+1,3</sup>P<sup>0</sup>, 2pnp<sup>+1,3</sup>D<sup>e</sup>, 3d4d<sup>+1,3</sup>G<sup>e</sup>] de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire (Z ≤ 10)**

### **H\_1\_Description du Logiciel Maxima**

**MAXIMA 5.20.1** est un logiciel libre de calcul formel assez complet. Il a été réalisé en COMMON LISP par William F. Schelter, à partir de la version originale de Macsyma réalisée au MIT (Massachusetts Institute of Technology) en 1968 through 1982 as part of Project MAC. et fut distribuée par le Department Of Energy (DOE). Le DOE ayant accordé la permission à W. Schelter d'en faire des copies dérivées, et en particulier de le distribuer sous licence publique GNU, les fichiers de MAXIMA peuvent désormais être redistribués selon les termes de la licence publique GNU. Maxima bénéficie d'un environnement agréable pour faire le calcul numérique des équations complexes en déterminant leurs racines réelles, d'intégrer ou de dériver des fonctions, de manipuler des matrices (inversion, combinaison, calcul de déterminant etc...), des séries entières, des limites, des séries de Poisson (utilisées en mécanique céleste) etc...., car on dispose sous la main des méthodes usuelles de cette discipline entre autre la résolution des systèmes linéaires et le calcul des valeurs propres et des vecteurs propres.

### **H\_2\_Programme écrit en Maxima pour le calcul de paramètres de résonances**

L'obtention des paramètres de résonances (énergies et largeurs de résonances) des états singulets et triplets [2sns<sup>+1,3</sup>S<sup>e</sup>, 2snp<sup>+1,3</sup>P<sup>0</sup>, 2pnp<sup>+1,3</sup>D<sup>e</sup>, 3d4d<sup>+1,3</sup>G<sup>e</sup>] de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire (Z = 2-10) a nécessité l'utilisation d'un programme de calcul numérique écrit en MAXIMA 5.20.1. Ce programme est défini comme suit:

```
n1:.....;
n2:.....;
l1:.....;
l2:.....;
L:l1+l2;
S:.....;
r[0]:.....;
```

$\alpha[1]:\dots\dots\dots;$

$\alpha[2]:\dots\dots\dots;$

$Z:\dots\dots\dots;$

$a:\dots\dots\dots;$

$l:\dots\dots\dots;$

$\Lambda[1]:Z/(n1*\alpha[1]*r[0]);$

$\Lambda[2]:Z/(n2*\alpha[2]*r[0]);$

$Y1[0,0]:1/\sqrt{4*\%pi};$

$Y2[0,0]:1/\sqrt{4*\%pi};$

$Y1[1,0]:\sqrt{3/(4*\%pi)}*\cos(\theta[1]);$

$Y2[1,0]:\sqrt{3/(4*\%pi)}*\cos(\theta[2]);$

$Y1[1,1]:\sqrt{3/(8*\%pi)}*\sin(\theta[1])*exp(i*\phi[1]);$

$Y2[1,1]:\sqrt{3/(8*\%pi)}*\sin(\theta[2])*exp(i*\phi[2]);$

$Y1[1,-1]:\sqrt{3/(8*\%pi)}*\sin(\theta[1])*exp(-i*\phi[1]);$

$Y2[1,-1]:\sqrt{3/(8*\%pi)}*\sin(\theta[2])*exp(-i*\phi[2]);$

$Y1[2,0]:\sqrt{5/(16*\%pi)}*(1-3*(\cos(\theta[1]))^2);$

$Y2[2,0]:\sqrt{5/(16*\%pi)}*(1-3*(\cos(\theta[2]))^2);$

$Y1[2,1]:i*\sqrt{15/(8*\%pi)}*\cos(\theta[1])*sin(\theta[1])*exp(i*\phi[1]);$

$Y2[2,1]:i*\sqrt{15/(8*\%pi)}*\cos(\theta[2])*sin(\theta[2])*exp(i*\phi[2]);$

$Y1[2,-1]:-i*\sqrt{15/(8*\%pi)}*\cos(\theta[1])*sin(\theta[1])*exp(-i*\phi[1]);$

$Y2[2,-1]:-i*\sqrt{15/(8*\%pi)}*\cos(\theta[2])*sin(\theta[2])*exp(-i*\phi[2]);$

$Y1[2,2]:-\sqrt{15/(32*\%pi)}*(\sin(\theta[1]))^2*exp(2*i*\phi[1]);$

$Y2[2,2]:-\sqrt{15/(32*\%pi)}*(\sin(\theta[2]))^2*exp(2*i*\phi[2]);$

$Y1[2,-2]:-\sqrt{15/(32*\%pi)}*(\sin(\theta[1]))^2*exp(-2*i*\phi[1]);$

$Y2[2,-2]:-\sqrt{15/(32*\%pi)}*(\sin(\theta[2]))^2*exp(-2*i*\phi[2]);$

$Y1[3,0]: -i \sqrt{7/(16\pi)} \cos(\theta[1]) (5 \cos(\theta[1]))^{2-3};$   
 $Y2[3,0]: -i \sqrt{7/(16\pi)} \cos(\theta[2]) (5 \cos(\theta[2]))^{2-3};$   
 $Y1[3,1]: i \sqrt{21/(64\pi)} \sin(\theta[1]) (5 \cos(\theta[1]))^{2-3} \exp(i\phi[1]);$   
 $Y2[3,1]: i \sqrt{21/(64\pi)} \sin(\theta[2]) (5 \cos(\theta[2]))^{2-3} \exp(i\phi[2]);$   
 $Y1[3,-1]: -i \sqrt{21/(64\pi)} \sin(\theta[1]) (5 \cos(\theta[1]))^{2-3} \exp(-i\phi[1]);$   
 $Y2[3,-1]: -i \sqrt{21/(64\pi)} \sin(\theta[2]) (5 \cos(\theta[2]))^{2-3} \exp(-i\phi[2]);$   
 $Y1[3,2]: -i \sqrt{105/(8\pi)} \cos(\theta[1]) (\sin(\theta[1]))^2 \exp(2i\phi[1]);$   
 $Y2[3,2]: -i \sqrt{105/(8\pi)} \cos(\theta[2]) (\sin(\theta[2]))^2 \exp(2i\phi[2]);$   
 $Y1[3,2]: -i \sqrt{105/(8\pi)} \cos(\theta[1]) (\sin(\theta[1]))^2 \exp(-2i\phi[1]);$   
 $Y2[3,2]: -i \sqrt{105/(8\pi)} \cos(\theta[2]) (\sin(\theta[2]))^2 \exp(-2i\phi[2]);$   
 $Y1[3,3]: i \sqrt{35/(64\pi)} (\sin(\theta[1]))^3 \exp(3i\phi[1]);$   
 $Y2[3,3]: i \sqrt{35/(64\pi)} (\sin(\theta[2]))^3 \exp(3i\phi[2]);$   
 $Y1[3,-3]: -i \sqrt{35/(64\pi)} (\sin(\theta[1]))^3 \exp(-3i\phi[1]);$   
 $Y2[3,-3]: -i \sqrt{35/(64\pi)} (\sin(\theta[2]))^3 \exp(-3i\phi[2]);$   
 $Y1[4,0]: (144 \cos(\theta[1])^{21})^2 + 384 \cos(\theta[1])^4 + 1152 \cos(\theta[1])^2 (\cos(\theta[1])^{21}) / (256 \sqrt{\pi});$   
 $Y2[4,0]: (144 \cos(\theta[2])^{21})^2 + 384 \cos(\theta[2])^4 + 1152 \cos(\theta[2])^2 (\cos(\theta[2])^{21}) / (256 \sqrt{\pi});$   
 $Y1[0,0]: 1/\sqrt{4\pi};$   
 $Y2[0,0]: 1/\sqrt{4\pi};$   
 $\text{Lambda}: Z/(n \alpha r[0]);$   
 $\theta[1]: \pi/3;$   
 $\theta[2]: \pi/4;$   
 $\phi(j,m,n,l,\nu) := (\sum((n^2 (r[0])^2)^{\nu}, \nu, 0, n-1-1)) * (\sum((N^2 (r[0])^2)^{q,q,0, n-1-1})) * (1 - z^a \sqrt{(r1^2 + r2^2 - 2r1r2 \cos(\theta[1] - \theta[2]))^m} \exp(-\alpha (r1+r2)^j)) * (Y1[0,0] * Y2[0,0]);$   
 $\phi(j,m,n,l,\nu);$

$T1(j,k,m,n,l,nu):=laumber(1/r1^2*diff(r1^2*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),r1,1),r1,1)+1/r2^2*diff(r2^2*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),r2,1),r2,1));$

$T1(j,k,m,n,l,nu);$

$T2(j,k,m,n,l,nu):=laumber(1/(r1^2*sin(theta[1]))*diff(sin(theta[1])*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),theta[1],1),theta[1],1)+1/(r2^2*sin(theta[2]))*diff(sin(theta[2])*diff(Phi(j,k,m,n,l,nu),theta[2],1),theta[2],1));$

$T2(j,k,m,n,l,nu);$

$A(j,k,m,n,l,nu):=T1(j,k,m,n,l,nu)+T2(j,k,m,n,l,nu);$

$A(j,k,m,n,l,nu);$

$B(j,k,m,n,l,nu):=Phi(j,k,m,n,l,nu)*A(j,k,m,n,l,nu);$

$B(j,k,m,n,l,nu);$

$N:laumber(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,m,n,l,nu)*Phi(j,k,m,n,l,nu)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf));$

$ev(N, numer);$

$C:integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,m,n,l,nu)*(-2*Z*(1/r1+1/r2))*Phi(j,k,m,n,l,nu)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);$

$ev(C, numer);$

$W:lauber(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,m,n,l,nu)*(2/sqrt(r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2])))*Phi(j,k,m,n,l,nu)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf));$

$ev(W, numer);$

$T:integrate(integrate(integrate(integrate((B(j,k,m,n,l,nu)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);$

$ev(T, numer);$

$E:(T+C+W)/N;$

$ev(E, numer);$

```
expand(ev(C, numer)),  
expand(ev(W, numer)),  
expand(ev(T, numer)),  
expand(ev(E, numer)),  
expand(ev(2*E, numer));
```

**Annexe I: Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C, W et T des deux électrons des états singulets et triplets doublement excités  $2sns^{+1,3}S^e$ ,  $2snp^{+1,3}P^0$ ,  $2pnp^{+1,3}D^e$ ,  $3d4d^{+1,3}G^e$**

*Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C des deux électrons avec le noyau de l'état  $2s3s^{1,3}S^e$*

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
n1 : 2;  
n2:3;  
N:.....;  
L:0;  
r[0]:0.53;  
Z : 2-10;  
a :.....;  
b:.....;  
S:0;  
alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s3s^{1,3}S^e$**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2s3s^{1,3}S^e$**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp( alpha\* (r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);  
phi(m,N,L).....;  
C:integrate(integrate(integrate(integrate((phi(m,N,L)\*(2\*Z\*(1/r1+1/r2))\*phi(m,N,L)\*r1^2\*r2  
^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);

ev(C,).....;

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons W de l'état  $2s3s\ ^1,3S^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:3;

N:.....;

L:0;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s3s\ ^1,3S^e$**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2s3s\ ^1,3S^e$**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*(r12)^m)\*exp( alpha\* (r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

W:integrate(integrate(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*(2\*exp(-%i\*a)/r12[1,n])\*Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),phi[1],0,2\*%pi),phi[2],0,2\*%pi),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf),

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état  $2s3s\ 1,3S^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
 n1 : 2;  
 n2:3;  
 N:.....;  
 L:0;  
 r[0]:0.53;  
 Z : 2-10;  
 a :.....;  
 b:.....;  
 S:0;  
 alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s3s\ 1,3S^e$**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
 Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
 r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2s3s\ 1,3S^e$**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*(r12)^m)\*exp(alpha\*(r1+r2)) \*  
 (Y1[0,0] \*Y2[0,0]);  
 phi(m,N,L).....;  
 T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

B(m,N,L):=phi(m,N,L)\*A(m,N,L);

B(m,N,L);

T:=integrate(integrate(integrate(integrate((B(m,N,L)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);

ev(T,numer);

Calcul de l'opération d'interaction coulombienne  $C$  des deux électrons avec le noyau de l'état  $2s4s \ ^1,3S^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:4;

N:.....;

L:0;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2s4s 1,3S<sup>e</sup>**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2s4s 1,3S<sup>e</sup>**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp(alpha\*(r1+r2)) \* (Y1[0,0] \* Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

C:integrate(integrate(integrate(integrate((phi(m,N,L)\*(2\*Z\*(1/r1+1/r2))\*phi(m,N,L)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);

ev(C).....;

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons W de l'état 2s4s 1,3S<sup>e</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:4;

N:.....;

L:0;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2s4s 1,3S<sup>e</sup>**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2s4s 1,3S<sup>e</sup>**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp(alpha\*(r1+r2)) \* (Y1[0,0] \* Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

W:integrate(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*(2\*exp(-%i\*a)/r12[l,n])\*Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),phi[1],0,2\*%pi),phi[2],0,2\*%pi),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf),

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état 2s4s 1,3S<sup>e</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:4;

N:.....;

L:0;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2s4s 1,3Se**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2s3s 1,3Se**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp(alpha\*(r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

B(m,N,L):=phi(m,N,L)\*A(m,N,L);

B(m,N,L);

T:integrate(integrate(integrate(integrate((B(m,N,L)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),the  
ta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);

ev(T,numer);

Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C des deux électrons avec le noyau de l'état  $2s2p^{1,3}P^0$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

```
m:.....;
n1 : 2;
n2:2;
N:.....;
L:1;
r[0]:0.53;
Z : 2-10;
a :.....;
b:.....;
S:1;
alpha:.....;
```

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s2p^{1,3}P^0$**

```
Y1[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
Y2[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2]));
```

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2s3s^{1,3}S^e$**

```
phi(m,N,L):=(sum((N^2*)^nu,nu,0,N-L-1))*(b+(-1)^S*Z*a*(r12)^m)*exp( alpha* (r1+r2)) *
(Y1[0,0] *Y2[0,0]);
phi(m,N,L).....;
C:integrate(integrate(integrate(integrate((phi(m,N,L)*(2*Z*(1/r1+1/r2))*phi(m,N,L)*r1^2*r2
^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);
ev(C,).....;
```

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons  $\hat{W}$  de l'état  $2s2p^1,3P^0$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

```
m:.....;
n1 : 2;
n2:2;
N:.....;
L:1;
r[0]:0.53;
Z : 2-10;
a :.....;
b:.....;
S:1;
alpha:.....;
```

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s2p^1,3P^0$**

```
Y1[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
Y2[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2]));
```

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2s4s^1,3S$**

```
phi(m,N,L):=(sum((N^2*)^nu,nu,0,N-L-1))*(b+(-1)^S*Z*a*(r12)^m)*exp( alpha* (r1+r2)) *
(Y1[0,0] *Y2[0,0]);
```

```
phi(m,N,L).....;
```

```
W:integrate(integrate(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,n,n1,n2,L,S))*(2*exp(-
%i*a)/r12[l,n])*Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),phi[1],0,2*%pi),p
hi[2],0,2*%pi),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf),
```

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état  $2s2p\ ^1,3P^0$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
n1 : 2;  
n2:2;  
N:.....;  
L:1;  
r[0]:0.53;  
Z : 2-10;  
a :.....;  
b:.....;  
S:1;  
alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s2p\ ^1,3P^0$**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2s2p\ ^1,3P^0$**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp( alpha\* (r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

```
T1(m,N,L):=1/r1^2*diff(r1^2*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*diff(r2^2*diff(phi(m,N,L),r2,1),r2,1);
```

```
T1(m,N,L);
```

```
B(m,N,L):=phi(m,N,L)*A(m,N,L);
```

```
B(m,N,L);
```

```
T:=integrate(integrate(integrate(integrate((B(m,N,L)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);
```

```
ev(T,numer);
```

Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C des deux électrons avec le noyau de l'état  $2s3p^{1,3}P^O$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

```
m:.....;
```

```
n1 : 2;
```

```
n2:3;
```

```
N:.....;
```

```
L:1;
```

```
r[0]:0.53;
```

```
Z : 2-10;
```

```
a :.....;
```

```
b:.....;
```

```
S:1;
```

```
alpha:.....;
```

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2s3p^{1,3}P^O$**

```
Y1[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
```

```
Y2[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
```

```
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2]));
```

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2s3s 1,3Se**

$\text{phi}(m,N,L):=(\text{sum}((N^2)^{\text{nu},\text{nu},0,N-L-1}))(b+(-1)^S Z^a (r12)^m) \exp(\alpha (r1+r2)) * (Y1[0,0] * Y2[0,0]);$

$\text{phi}(m,N,L).....;$

$C:\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((\text{phi}(m,N,L)*(2*Z*(1/r1+1/r2))*\text{phi}(m,N,L)*r1^2*r2^2*\sin(\text{theta}[1])*\sin(\text{theta}[2])),\text{theta}[1],0,\%pi),\text{theta}[2],0,\%pi),r1,0,\text{inf}),r2,0,\text{inf});$

$\text{ev}(C,).....;$

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons W de l'état 2s3p <sup>1,3</sup>P<sup>0</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:4;

N:.....;

L:0;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2s4s 1,3Se**

$Y1[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$

$Y2[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$

$r12:\text{sqrt}(r1^2+r2^2-2*r1*r2*\cos(\text{theta}[1]-\text{theta}[2]));$

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2s4s 1,3Se**

$\text{phi}(m,N,L):=(\text{sum}((N^2)^{\text{nu}},\text{nu},0,N-L-1))*(b+(-1)^S*Z*a*(r12)^m)*\exp(\text{alpha}*(r1+r2)) * (Y1[0,0] * Y2[0,0]);$

$\text{phi}(m,N,L).....;$

$W:\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((\text{Phi}(j,k,n,n1,n2,L,S))*(2*\exp(-\%i*a)/r12[1,n])*\text{Phi}(j,k,n,n1,n2,L,S)*r1^2*r2^2*\sin(\text{theta}[1])*\sin(\text{theta}[2])),\text{phi}[1],0,2*\%pi),\text{phi}[2],0,2*\%pi),\text{theta}[1],0,\%pi),\text{theta}[2],0,\%pi),r1,0,\text{inf}),r2,0,\text{inf}),$

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état 2s3p<sup>1,3P<sup>0</sup></sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:3;

N:.....;

L:0;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2s3s 1,3Se**

$Y1[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$

$Y2[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$

$r12:\text{sqrt}(r1^2+r2^2-2*r1*r2*\cos(\text{theta}[1]-\text{theta}[2]));$

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2s3s 1,3Se**

$\phi(m,N,L):=(\sum((N^2)^{\nu,\nu,0,N-L-1})*(b+(-1)^S*Z*a*(r1^2)^m)*\exp(\alpha*(r1+r2)) * (Y1[0,0] * Y2[0,0]));$

$\phi(m,N,L).....;$

$T1(m,N,L):=1/r1^2*\text{diff}(r1^2*\text{diff}(\phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*\text{diff}(r2^2*\text{diff}(\phi(m,N,L),r2,1),r2,1);$

$T1(m,N,L);$

$T1(m,N,L):=1/r1^2*\text{diff}(r1^2*\text{diff}(\phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*\text{diff}(r2^2*\text{diff}(\phi(m,N,L),r2,1),r2,1);$

$T1(m,N,L);$

$T1(m,N,L):=1/r1^2*\text{diff}(r1^2*\text{diff}(\phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*\text{diff}(r2^2*\text{diff}(\phi(m,N,L),r2,1),r2,1);$

$T1(m,N,L);$

$B(m,N,L):=\phi(m,N,L)*A(m,N,L);$

$B(m,N,L);$

$T:\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((B(m,N,L)*r1^2*r2^2*\sin(\theta[1])*\sin(\theta[2])),\theta[1],0,\pi),\theta[2],0,\pi),r1,0,\infty),r2,0,\infty);$

$\text{ev}(T,\text{numer});$

Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C des deux électrons avec le noyau de l'état  $2p3p^{1,3}D^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

$m:.....;$

$n1 : 2;$

$n2:3;$

$N:.....;$

$L:0;$

$r[0]:0.53;$

Z : 2-10;  
a :.....;  
b:.....;  
S:0;  
alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2p3p 1,3De**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2p3p 1,3De**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp( alpha\* (r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);  
phi(m,N,L).....;  
C:integrate(integrate(integrate(integrate((phi(m,N,L)\*(2\*Z\*(1/r1+1/r2))\*phi(m,N,L)\*r1^2\*r2  
^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);  
ev(C,).....;

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons W de l'état 2p3p <sup>1,3</sup>D<sup>e</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
n1 : 2;  
n2:4;  
N:.....;  
L:0;  
r[0]:0.53;  
Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:0;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2p3p 1,3De**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2p3p 1,3D<sup>e</sup>**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp(alpha\*(r1+r2)) \* (Y1[0,0] \*Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

W:integrate(integrate(integrate(integrate(integrate(integrate((Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*(2\*exp(-%i\*a)/r12[1,n])\*Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*r1^2\*r2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),phi[1],0,2\*%pi),phi[2],0,2\*%pi),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf),

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état 2p3p 1,3D<sup>e</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;

n1 : 2;

n2:3;

N:.....;

L:1;

r[0]:0.53;

Z : 2-10;

a :.....;

b:.....;

S:1;

alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 2p3p 1,3De**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);

r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état 2p3p 1,3De**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp(alpha\*(r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);

T1(m,N,L);

B(m,N,L):=phi(m,N,L)\*A(m,N,L);

B(m,N,L);

T:integrate(integrate(integrate(integrate((B(m,N,L)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1]))\*sin(theta[2])),the  
ta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0);

ev(T,numer);

Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C des deux électrons avec le noyau de l'état  $2p4p^{1,3}D^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

```
m:.....;
n1 : 2;
n2:4;
N:.....;
L:1;
r[0]:0.53;
Z : 2-10;
a :.....;
b:.....;
S:1;
alpha:.....;
```

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2p4p^{1,3}D^e$**

```
Y1[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
Y2[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2]));
```

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2p4p^{1,3}D^e$**

```
phi(m,N,L):=(sum((N^2*)^nu,nu,0,N-L-1))*(b+(-1)^S*Z*a*(r12)^m)*exp( alpha* (r1+r2)) *
(Y1[0,0] *Y2[0,0]);
phi(m,N,L).....;
C:integrate(integrate(integrate(integrate((phi(m,N,L)*(2*Z*(1/r1+1/r2))*phi(m,N,L)*r1^2*r2
^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);
ev(C,).....;
```

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons W de l'état  $2p4p\ ^1,3D^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
 n1 : 2;  
 n2:4;  
 N:.....;  
 L:1;  
 r[0]:0.53;  
 Z : 2-10;  
 a :.....;  
 b:.....;  
 S:1;  
 alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2p4p\ 1,3De$**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
 Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
 r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2p4p\ 1,3De$**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp( alpha\* (r1+r2)) \*  
 (Y1[0,0] \*Y2[0,0]);

phi(m,N,L).....;

W:integrate(integrate(integrate(integrate(intte(integrate((Phi(j,k,n,n1,n2,L,S))\*(2\*exp(-  
 %i\*a)/r12[l,n])\*Phi(j,k,n,n1,n2,L,S)\*r1^2\*r2^2\*sin(theta[1])\*sin(theta[2])),phi[1],0,2\*%pi),p  
 hi[2],0,2\*%pi),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf),

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état  $2p4p^{1,3}D^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
n1 : 2;  
n2:4;  
N:.....;  
L:1;  
r[0]:0.53;  
Z : 2-10;  
a :.....;  
b:.....;  
S:1;  
alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $2p4p^{1,3}D^e$**

Y1[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
Y2[0,0]:1/sqrt(4\*%pi);  
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2\*r1\*r2\*cos(theta[1]-theta[2]));

➤ **Fonction d'essai pour l'état  $2p4p^{1,3}D^e$**

phi(m,N,L):=(sum((N^2\*)^nu,0,N-L-1))\*(b+(-1)^S\*Z\*a\*(r12)^m)\*exp( alpha\* (r1+r2)) \*  
(Y1[0,0] \*Y2[0,0]);  
phi(m,N,L).....;  
T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);  
T1(m,N,L);  
T1(m,N,L):=1/r1^2\*diff(r1^2\*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2\*diff(r2^2\*diff(phi(m,N,L),r  
2,1),r2,1);  
T1(m,N,L);

```
T1(m,N,L):=1/r1^2*diff(r1^2*diff(phi(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*diff(r2^2*diff(phi(m,N,L),r2,1),r2,1);
```

```
T1(m,N,L);
```

```
B(m,N,L):=phi(m,N,L)*A(m,N,L);
```

```
B(m,N,L);
```

```
T:=egrate(integrate(integrate(integrate((B(m,N,L)*r1^2*r2^2*sin(theta[1])*sin(theta[2])),theta[1],0,%pi),theta[2],0,%pi),r1,0,inf),r2,0,inf);
```

```
ev(T,numer);
```

Calcul de l'opération d'interaction coulombienne C des deux électrons avec le noyau de l'état  $3d4d^{1,3}G^e$

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

```
m:.....;
```

```
n1 : 3;
```

```
n2:4;
```

```
N:.....;
```

```
L:2;
```

```
r[0]:0.53;
```

```
Z : 2-10;
```

```
a :.....;
```

```
b:.....;
```

```
S:2;
```

```
alpha:.....;
```

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état  $3d4d^{1,3}G^e$**

```
Y1[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
```

```
Y2[0,0]:1/sqrt(4*%pi);
```

```
r12:sqrt(r1^2+r2^2-2*r1*r2*cos(theta[1]-theta[2]));
```

➤ **Fonction d'essai pour l'état 3d4d 1,3Ge**

$\text{phi}(m,N,L):=(\text{sum}((N^2)^{\text{nu}},\text{nu},0,N-L-1))*(b+(-1)^S*Z*a*(r12)^m)*\exp(\text{alpha}*(r1+r2)) * (Y1[0,0] * Y2[0,0]);$

$\text{phi}(m,N,L).....;$

$C:\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((\text{phi}(m,N,L)*(2*Z*(1/r1+1/r2))*\text{phi}(m,N,L)*r1^2*r2^2*\sin(a[1])*sin(\text{theta}[2])),\text{theta}[1],0,\%pi),\text{theta}[2],0,\%pi),r1,0,\text{inf}),r2,0,\text{inf});$

$\text{ev}(C,).....;$

Calcul de l'opération de corrélation électronique ou répulsion coulombienne entre les deux électrons W de l'état 3d4d <sup>1,3</sup>G<sup>e</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

$m:.....;$

$n1 : 3;$

$n2:4;$

$N:.....;$

$L:2;$

$r[0]:0.53;$

$Z : 2-10;$

$a :.....;$

$b:.....;$

$S:2;$

$\text{alpha}:.....;$

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 3d4d 1,3Ge**

$Y1[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$

$Y2[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$

$r12:\text{sqrt}(r1^2+r2^2-2*r1*r2*\cos(\text{theta}[1]-\text{theta}[2]));$

➤ **Fonction d'essai pour l'état 3d4d 1,3Ge**

$\text{phi}(m,N,L):=(\text{sum}((N^2)^{\text{nu}},\text{nu},0,N-L-1))*(b+(-1)^Z*a*(r12)^m)*\exp(-\alpha*(r1+r2)) * (Y1[0,0] * Y2[0,0]);$

$\text{phi}(m,N,L)\dots\dots\dots;$

$W:\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((\text{Phi}(j,k,n,n1,n2,L,S))*(2*\exp(-\%i*a)/r12[1,n])*\text{Phi}(j,k,n,n1,n2,L,S)*r1^2*r2^2*(\text{theta}[1])*\sin(\text{theta}[2])),\text{phi}[1],0,2*\%pi),\text{phi}[2],0,2*\%pi),\text{theta}[1],0,\%pi),\text{theta}[2],0,\%pi),r1,0,\text{inf}),r2,0,\text{inf}),$

Calcul de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons T de l'état 3d4d <sup>1,3</sup>G<sup>e</sup>

➤ **Déclaration des paramètres d'entrée**

m:.....;  
 n1 :3;  
 n2:4;  
 N:.....;  
 L:2;  
 r[0]:0.53;  
 Z : 2-10;  
 a :.....;  
 b:.....;  
 S:2;  
 alpha:.....;

➤ **Déclaration des harmoniques pour l'état 3d4d 1,3Ge**

$Y1[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$   
 $Y2[0,0]:1/\text{sqrt}(4*\%pi);$   
 $r12:\text{sqrt}(r1^2+r2^2-2*r1*r2*\cos(\text{theta}[1]-\text{theta}[2]));$

➤ **Fonction d'essai pour l'état 3d4d 1,3Ge**

$\text{phi}(m,N,L):=(\text{sum}((N^2)^{\text{nu},\text{nu},0,N-L-1})*(b+(-1)^S*Z*a*(r12)^m)*( \text{alpha}^* (r1+r2)) * (Y1[0,0] *Y2[0,0]));$

$\text{phi}(m,N,L).....;$

$T1(m,N,L):=1/r1^2*\text{diff}(r1^2*\text{diff}(\text{phi}(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*\text{diff}(r2^2*\text{phi}(m,N,L),r2,1),r2,1);$

$T1(m,N,L);$

$T1(m,N,L):=1/r1^2*\text{diff}(r1^2*\text{diff}(\text{phi}(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*\text{diff}(r2^2*\text{diff}(\text{phi}(m,N,L),r2,1),r2,1);$

$T1(m,N,L);$

$T1(m,N,L):=1/r1^2*\text{diff}(r1^2*\text{diff}(\text{phi}(m,N,L),r1,1),r1,1)+1/r2^2*\text{diff}(r2^2*\text{diff}(\text{phi}(m,N,L),r2,1),r2,1);$

$T1(m,N,L);$

$B(m,N,L):=\text{phi}(m,N,L)*A(m,N,L);$

$B(m,N,L);$

$T:\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}(\text{integrate}((B(m,N,L)*r1^2*r2^2*\sin(\text{theta}[1])*\sin(\text{theta}[2])),\text{theta}[1],0,\%pi),\text{theta}[2],0,\%pi),r1,0,\text{inf}),r2,0,\text{inf});$

$\text{ev}(T,\text{numer});$

**Annexes J : Publications.**

**1- “The Ground State ( $1s^22s$ )  $^2S$  and the low-lying excited ( $1s^2ns$ )  $^2S$  States Energy Calculations of Li-Like Ions Using Special Forms of the Hylleraas-Type Wave Functions”**

B. Diop, Y. Gning, **A. Diouf**, B. Sow, M. Dieng, and M. Biaye

“Chinese Journal of Physics, in press (2018)”

**2- “The Singlet Doubly Excited  $(nl)^2$  ( $n \leq 7$ ) States of He-Like Systems up to  $Z=10$  and the Effect of Screen Constant ( $\alpha$ ) on the Nuclear Charge ( $Z$ ) ”**

**Abdou Diouf**, Boubacar Sow\*, Youssou Gning, Malick Sow, Alassane Traore, Ahmadou Wague

“International Journal of Applied Mathematics and Theoretical Physics, in press (2017)”

**3-“Application of Complex Rotation Method for Calculate to Correlation Factor and the  $2sns+1,3Se$ ,  $2snp+1,3P0$ ,  $2pnp+1,3De$ ,  $3d4d +1,3Ge$  Autoionizing States of He-like Atoms ”**

A. Sow\*, **A. Diouf**, Y. Gning, B. Diop, M. Sow, A. Wague

” *International Journal of Physics*, in press (2019) ”