

# TABLE DES MATIERES

<b>INTRODUCTION-----</b>	<b>1</b>
--------------------------	----------

## CHAPITRE I

<b>La photoionisation-----</b>	<b>5</b>
I-1 Le processus-----	6
I-2 Etude expérimentale de la photoionisation-----	9
I-3 Etude de la théorie de la photoionisation-----	10
I-4 L'étude de la méthode de diagonalisation-----	12

## CHAPITRE II

<b>La section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation-----</b>	<b>18</b>
II-1 La section efficace de photoabsorption-----	19
II-2 Le coefficient de corrélation-----	20
II-3 La largeur de la résonance-----	21
II-4 L'indexe de profil de la résonance-----	21
II-5 Calcul des éléments matriciels de transition-----	22
II-5-1 Calcul des éléments matriciels dans les transitions dipolaires-----	22
<b>II-5-1-1 Calcul des intégrales contenant les variables <math>r_1</math> ou <math>r_2</math>-----</b>	
---	
a.) Calcul de la partie angulaire-----	26
b.) Calcul de la partie radiale-----	27
<b>II-5-1-2 Calcul des intégrales contenant le terme de corrélation <math>r_{12}</math>-----</b>	
---	28
a.) Calcul de la partie angulaire-----	28
b.) Calcul de la partie radiale-----	28
<b>II-5-1-3 Calcul des intégrales contenant le carré du terme de corrélation <math>r_{12}^2</math>-----</b>	
---	30
II-5-2 Calcul des éléments matriciels de l'opérateur de l'interaction électrostatique-----	30

## **CHAPITRE III**

Résultats et Analyse sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation de l'hélium et des ions héliumoïdes-----32

III-1 Résultats sur l'hélium-----33

III-2 Résultats sur les ions  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Be}^{2+}$ ,  $\text{B}^{3+}$ ,  $\text{C}^{4+}$ ,  $\text{N}^{5+}$ ,  $\text{O}^{6+}$ ,  $\text{F}^{7+}$  et  $\text{Ne}^{8+}$ -----37

**CONCLUSION-----42**

ANNEXE 1-----44

ANNEXE 2-----51

ANNEXE 3-----53

BIBLIOGRAPHIE-----66

## Introduction

Depuis que Heisenberg [1], Born et Jordan [2] ont formulé les fondements de la mécanique quantique, Foote et Mohler [3], utilisant les techniques de neutralisation de la charge de l'espace ont fait les premières expériences de la photoionisation de l'atome de césum. L'étude de la photoabsorption des systèmes atomiques à deux électrons, correspondant à l'excitation des états d'autoionisation, a connu un essor au début des années '60, date des travaux théoriques de Fano [4] et expérimentaux de Madden et Codling [5-6]. En 1971, Doschek [7] a identifié les états doublement excités de l'hélium et des ions héliumoides dans la flamme solaire. A.B.C. Walker et al [8] ont fait de même à la même année dans la couronne solaire.

Les processus de photoionisation d'ions jouent un rôle important dans de nombreux plasmas, tels que les plasmas de laboratoire produits par laser ou les plasmas d'intérêt astrophysique. La photoionisation des ions se produit dans beaucoup de régions de l'espace (supernovae, quasars etc...) et ses résultats sont d'un intérêt considérable pour l'astronomie. En particulier, la connaissance des sections efficaces de photoabsorption des plasmas denses et chauds est primordiale pour la description du transfert de rayonnement, puisque c'est sous cette forme que se propage une grande partie de l'énergie dans ces milieux. Ce mécanisme est très important pour la fusion par confinement inertiel. Il intervient aussi en astrophysique où il contrôle, par exemple, l'équilibre radiatif gravitationnel des étoiles. Les propriétés physiques des ions héliumoides sont importantes dans les modèles de hautes de température.

Les récentes études expérimentales sur ces processus de photoionisation montrent tout l'intérêt qu'ils continuent de susciter. Actuellement, avec la mise au point de spectromètres à haute résolution en énergie utilisant la radiation synchrotron [9], de sources d'ions multichargés comme l'« Electron Cyclotron

Resonance » ainsi que de nouvelles sources lasers pulsés, beaucoup de données expérimentales ont été enregistrées, sur l'étude de la photoionisation généralement décrite en termes de sections efficaces, qui donnent la mesure de la probabilité qu'un certain type de réaction puisse avoir lieu. L'existence des données expérimentales est essentielle pour une meilleure appréciation des résultats théoriques et de la validité des différents modèles développés.

Parmi les méthodes théoriques qui ont donné les résultats les plus détaillés et qui ont permis d'obtenir des données sur les sections efficaces, les énergies d'excitation, les largeurs totales et partielles des états d'autoionisation des héliumoïdes, on peut citer la méthode de Fano [4], la méthode de rotation complexe [10, 11, 12], l'approximation du couplage fort [13,14] et la méthode de diagonalisation [15,16]. Sur la base de la méthode de diagonalisation, la description de la photoabsorption de l'atome d'hélium sous le seuil d'excitation  $n = 2$  de l'ion résiduel  $\text{He}^+$  a été faite par Balashov et al [15]. Depuis cette étude pionnière, cette méthode a été étendue aux seuils d'excitation,  $n = 3, 4, 5$  et  $6$  et a permis d'obtenir des résultats complets sur les paramètres résonants tels que les énergies, les largeurs et les forces d'oscillateurs [17,18].

Durant ces deux dernières décennies, des efforts considérables ont été réalisés pour calculer ces paramètres à l'aide de modèles très élaborés ( Dirac-Fock Multi-Configurationnel (MCDF), Matrice R...). En 2000, T.K. Fang et T.N. Chang [19] utilisant l'approche K matrice basée sur la méthode B-spline multicanale (BSK), ont déterminé les sections efficaces partielles et totales de l'ion hydrogène et de l'hélium sous les seuils  $n=2$  et  $n=3$ .

Cependant, dans la majorité des cas, les paramètres caractérisant ces processus ne sont connus qu'à travers des modèles théoriques souvent très simples ne prenant que très partiellement en compte ou pas du tout des effets de corrélations électroniques. Pour une meilleure prise en compte des corrélations électroniques, nous avons choisi dans ce présent travail, consacré à la

détermination des largeurs totales, des sections efficaces, des coefficients de corrélation et des index des profil de l'état  $2s2p$  ( $^1P^0$ ) pour l'hélium et les ions héliumoides  $Li^+$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$  et  $N^{8+}$  d'utiliser la méthode de diagonalisation qui permet par l'interaction des configurations, un meilleur traitement de ces phénomènes de corrélation. De plus, nous avons fait un choix de fonctions d'ondes tenant le plus que possible des effets de corrélations électroniques. Pour ce faire, nous utilisons pour la fonction de l'état fondamental, la fonction d'ondes bien connue de Hylleraas à six paramètres et pour la fonction d'onde de l'état final, une combinaison linéaire de produits antisymétriques de fonctions coulombiennes où le photoélectron est considéré dans un champ de charge ( $Z-1$ ).

Le présent travail comprend ainsi, trois chapitres en plus de l'introduction et la conclusion suivie des annexes et la bibliographie.

Dans le premier chapitre nous avons décrit les principes fondamentaux du processus de la photoionisation et rappeler quelques unes des principales études théoriques et expérimentales des états doublement excités. Un accent particulier sera accordé à la méthode de diagonalisation que nous avons utilisée pour l'obtention de nos résultats.

Le deuxième chapitre sera consacré à la définition et à la détermination des paramètres de résonance. Les étapes nécessaires au calcul des éléments matriciels de transitions dipolaires qui permettent d'obtenir ces paramètres seront décrites. Après avoir fait un rappel des équations de ces transitions, nous donnerons les différents termes et fonctions mathématiques utilisées dans les calculs de ces éléments matriciels. Les méthodes de résolution des différentes intégrales rencontrées seront succinctement décrites.

Dans le dernier chapitre, nous allons analyser et comparer les résultats que nous avons obtenus avec ceux d'autres travaux théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature.

Enfin une conclusion sera dégagée et des perspectives posées pour une étude beaucoup plus systématique, incluant tous les paramètres déterminés dans

ce travail mais à des seuils d'excitation plus élevés et pour des charges plus élevées et en tenant compte des interactions avec le continuum.

En annexes, seront présentés les détails des calculs des éléments matriciels et le programme Fortran que nous avons développé pour obtenir ces résultats.

# **Chapitre I**

## **La photoionisation**

## I-1 Le processus de la photoionisation

La photoionisation est un processus où un photon de fréquence  $\nu$  d'énergie  $h\nu$  interagit avec un atome ou une molécule en produisant un ou plusieurs électrons. Le processus de photoionisation simple correspond à l'expulsion d'un électron interne vers le continuum. Le processus de photoionisation double consiste à l'éjection d'un électron interne vers le continuum, suivie d'une seconde ionisation qui est celle d'Auger consistant à l'éjection d'un électron: ce processus, par opposition au précédent, se caractérise par un spectre continu avec des seuils d'ionisation.

Le processus de photoionisation intervient quand l'énergie du photon est plus élevée que l'énergie de liaison de la plus faible liaison atomique. Aux énergies supérieures au seuil d'ionisation, le photon est absorbé et l'énergie restante constitue l'énergie cinétique de l'électron éjecté. Le processus de base de la photoionisation est :



L'ion peut être laissé dans un état excité avec une énergie du photon supérieure à l'énergie du seuil ou au minimum égale à l'énergie de cet état de configuration :

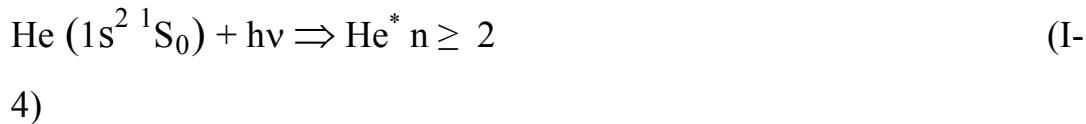


Ces deux équations (I-1) et (I-2) correspondent à des processus d'ionisation dits directs. Les processus dits indirects ou résonants, eux se produisent à des énergies spécifiques correspondant à l'excitation de deux ou plusieurs électrons vers des orbitales libres, produisant ainsi un état excité neutre. Cet état intermédiaire, de courte durée de vie ( $10^{-14}$ s) se situe au dessus du seuil d'ionisation et se désexcite par éjection d'un électron, en laissant l'ion résiduel soit au fondamental soit dans un état excité :



Lorsqu'on fait interagir un faisceau de photons d'énergie croissante à l'atome, il existe différentes voies successivement ouvertes :

- Etudions le cas le plus simple qui est l'atome d'hélium dans son état fondamental, avec ses deux électrons sur la même sous couche ( He  $1s^2$   $^1S_0$ ). Le processus d'énergie la plus faible, entre 20 et 24,6 eV, est l'excitation d'un électron vers un orbital atomique vide :

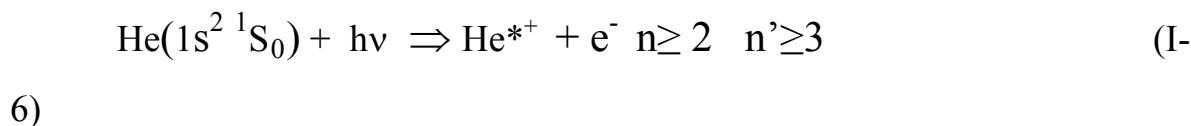


Un tel type d'interaction ne peut avoir lieu que pour des énergies de photons discrètes.

- Si l'énergie du photon dépasse le seuil de première ionisation, la photoionisation peut se produire et l'ion restant soit à son état fondamental  $n=1$  entre 24,6 à 64,5 eV :



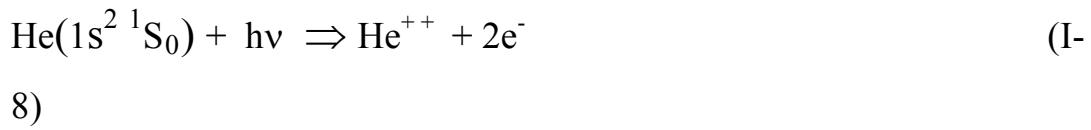
Soit dans un état excité au dessus de 64,5 eV pour  $n=2$ , de 72,9 eV pour  $n=3$ .



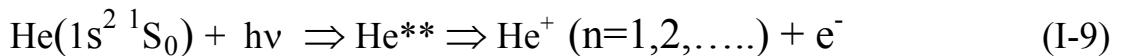
- A diverses énergies discrètes de photon, entre 60 et 79,0 eV, l'excitation simultanée des deux électrons est possible :



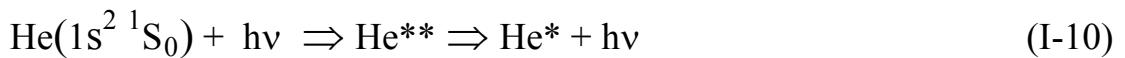
- Au-delà de 79,0 eV, la double ionisation peut se produire en compétition directe avec les processus d'ionisation simple :



L'état, doublement excité, peut se désexciter par autoionisation, processus lui aussi en compétition avec l'ionisation directe :



Ou par fluorescence



Le phénomène est plus complexe qu'il le paraît, car l'excitation peut induire des effets d'interférence du système électronique. De plus, pour les atomes lourds, l'ionisation peut s'effectuer dans une couche interne et la désexcitation du trou peut se faire par l'expulsion d'un second électron par le réarrangement d'Auger :



Soit la fluorescence peut aussi avoir lieu pour les atomes de nombre de charge z élevé.



Dans le cas des molécules, par exemple celles diatomiques, plusieurs possibilités peuvent s'opérer, principalement, soit une dissociation, soit une dissociation précédée d'une excitation, soit une ionisation dissociative, ou soit une formation d'une paire d'ion.



La fluorescence atomique peut clairement avoir lieu dans la dissociation ou l'ionisation dissociative.

L'étude de ces différents processus de photoionisation est importante pour une meilleure compréhension de la structure quantique de l'atome ou la molécule. Par ailleurs, l'observation du spectre d'énergie de la fluorescence permet l'analyse de matériaux massifs et celle du spectre des électrons Auger, l'analyse de surfaces de matériaux.

## **I-2 Etude expérimentale de la photoionisation**

Le développement rapide de l'étude expérimentale des processus de photoabsorption pour les atomes et les ions, est devenu possible grâce à l'utilisation des faisceaux intenses de photons produits par les rayonnements synchrotron et laser dans le domaine spectral de l'ultraviolet lointain et des rayons X mous. Les énergies correspondantes sont comprises entre 20 eV et 1000 eV. C'est dans ce domaine où se situent la plupart des états d'autoionisation des atomes et des ions dont la désintégration peut être radiative avec émission de photons ou non radiative avec émission d'électrons.

Dans leurs travaux, Madden et Codling [5], grâce aux sources de rayonnement synchrotron ont observé la photoabsorption de l'hélium dans le domaine spectrale correspondant à l'ultraviolet lointain (165-200 Å). Cela a permis d'observer les résonances correspondant à l'excitation des états autoionisants convergeant vers les seuils d'excitation  $n=2$ ,  $n=3$  et  $n=4$  de l'ion  $\text{He}^+$ . Les paramètres résonants tels que l'énergie d'excitation, la largeur et l'indexe de profile de la résonance (2S2P)  $^1\text{P}$  ont été déterminés ainsi que la section efficace de photoabsorption de l'hélium au voisinage de cette résonance.

L'avènement des lasers à pulsations très rapides ainsi que les nouvelles sources synchrotron à haute résolution ont donné un nouvel élan à l'étude expérimentale. En effet, les lasers offrent la possibilité de fournir de l'énergie lumineuse sous formes d'impulsions brèves, tout en conservant une puissance

moyenne à peu près constante ; des puissances instantanées très élevées et donc de très grands champs électriques donnant accès à une ionisation multiphotonique. Ces impulsions ont ainsi permis des avancées très significatives dans l'étude de ces phénomènes ultrarapides.

Les principaux paramètres décrivant le profil d'absorption de la résonance 3s3p ( $^1P$ ) de l'hélium, ont été déterminés par Dhez et Ederer [20], en utilisant une source de rayonnement synchrotron et en mesurant la section efficace de photoabsorption, avec un pouvoir de résolution énergétique plus élevé que dans les expériences de Madden et Codling [5,6]. En 1995, Domke et al [21] ont étudié les résonances des états doublement excités  $^1P^0$  sous les seuils  $n=2$  jusqu'à  $n = 9$  en utilisant une source de radiation synchrotron. Ils ont déterminé leur énergie de résonance, leur largeur de résonance ainsi que leur indexe de profil. En 1996, K.Schulz et al [22] ont, eux aussi, utilisant une résolution spectrale de rayon-X avec une gamme allant de 1.0 meV à 64.1 eV, travaillé sur la résonance des états doublement excités de l'hélium. Plus récemment en 2005, James R Harries et al [13] ont observé la photoionisation partielle de l'hélium. Grâce à des techniques de détection pour séparer les différentes phases de l'autoionisation, ils ont déterminé les sections efficaces de l'hélium de l'état 2s ( $^2s$ ) et 2p ( $^2p$ ) aux états  $3lnl'$  doublement excités.

### **I-3 Etude de la théorie de la photoionisation**

Basée sur les principes fondamentaux de la mécanique quantique, la théorie a évolué et joue un rôle important dans la description des phénomènes physiques et dans l'élaboration des perspectives expérimentales. Plusieurs modèles théoriques ont permis l'étude de la photoionisation résonante et ont aussi participé à la description des états autoionisants des héliumoïdes.

Parmi ceux-ci, on peut citer la méthode de Fano [4] qui a pris en compte l'interaction d'un ou de plusieurs états discrets avec un ou plusieurs états du

continuum dont les paramètres résonants sont déterminés à partir de la probabilité de transition de l'état initial du système vers l'état stationnaire. La section efficace de photoabsorption au voisinage d'une résonance isolée en interaction avec plusieurs continuums a été déterminé par Fano et Cooper [23]. Cette méthode a été reprise par Altick et Moore [24] pour la description de la photoabsorption de l'atome d'hélium sous le seuil d'excitation  $n=2$  de l'ion résiduel. Ramaker et Schrader [25], Chang [26] l'ont utilisé aussi pour la désintégration multicanale des résonances atomiques de l'hélium. C'est une méthode difficile et très compliquée dans son application pratique.

La méthode de l'approximation du couplage fort, considérant le problème de la photoionisation résonante comme un problème de collision entre un électron et un hydrogénoidé, est proposée par Burke et son équipe [27,28,29], qui l'ont appliquée, en développant des techniques de résolution des équations intégro-différentielles pour caractériser les états autoionisants situés sous le seuil  $n=2$  et  $n=3$  de l'ion  $\text{He}^+$ . Parmi ces techniques, on peut citer en exemple : le programme ATOMNP mis au point par Connely et al [30] et par Ormonde et al [31], le programme IMPACT de Seaton [32] et le programme de Berrington et al [33] basé sur la méthode R-matrice. De plus, U.Kleiman et al [34] ont travaillé en 2005, sur la méthode de l'approximation du couplage fort dépendant du temps. Ils ont déterminé les sections efficaces partielles des états métastables de l'ion  $\text{Li}^+$ . Cette méthode est aussi difficile que celle de Fano [5] car ayant des systèmes d'équations compliqués.

La méthode de dilatation ou de rotation complexe basée sur le théorème de Balslev et Combes [35] décrit le comportement de l'hamiltonien lors de l'extension de l'espace réel à l'espace complexe. La méthode de rotation complexe a subit plusieurs modifications et a donné naissance à de nouvelles théories : on peut en citer la méthode algébrique variationnelle de Oza [36], le calcul de R-matrix de Berrington et al [37] et le calcul perturbationnel de

Solomonson et al [38]. Il y'a aussi la théorie du défaut quantique [39] qui décrit le processus de photoabsorption atomique et de diffusion du système électron-ion, en utilisant les propriétés analytiques des électrons excités se mouvant dans un champ purement coulombien. Pour la description de ces résonances, il existe d'autres théories telles que le formalisme des opérateurs de Feschbach [40] qui a été utilisé par Bhatia et Temkin [41,42] et la méthode des coordonnées hypersphériques consacrée particulièrement à l'étude de la dynamique des corrélations électroniques qui a permis à C.D Lin [43] de classifier les états doublement excités.

Les paramètres résonants tels que l'indexe de profil, la largeur, la section efficace de photoabsorption et le facteur de corrélation sous le seuil  $n=2$  de l'ion résiduel que nous avons obtenus grâce à la méthode de diagonalisation, ont été comparés avec ceux de certaines de ces méthodes théoriques précitées.

#### **I-4 L'étude de la méthode de diagonalisation**

Cette méthode, utilisée par Balashov, [15] pour la description de la photoabsorption résonante de l'hélium sous le seuil d'excitation  $n=2$  de l'ion résiduel, tient en compte toutes les configurations du spectre continu. La description de la résonance (3S3P) de l'hélium dans l'étude de la photoionisation résonante multicanale sous le seuil  $n=3$  a été faite par Senashenko et Wagué [44] et par Wagué [16,45,46]. La considération des interactions des résonances autoionisantes avec plusieurs états du continuum fait que l'étude de la photoionisation devient un problème multicanal. Très récemment, avec cette méthode, des résultats complets ont été donnés sur les énergies et les largeurs par A.S Ndao et al [47,48] et par M. Biaye et al [49] et les forces d'oscillateurs par N.A.B Faye et al [50,51,52].

Pour la résolution du problème de la photoionisation résonante multicanale d'après, les étapes suivantes sont nécessaires :

1°) la fonction d'onde de l'état initial du système atomique considéré doit être connue.

1°) 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 la résonance.

Soit  $T_i$  l'amplitude partielle de photoionisation dans le canal  $i$  qui est la somme des interférences des transitions directes vers le spectre continu et des transitions résonantes à travers les niveaux d'autoionisation.



L'amplitude partielle  $T_i$  d'un système à deux électrons est définie par :

$$T_i = \langle \psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (I-19)$$

Où  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  sont les coordonnées d'espace des électrons,  $\vec{D}$  est l'opérateur moment dipolaire,  $\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  est la fonction d'onde de l'état atomique initial,  $\psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  représente la fonction d'onde de l'état quasi-stationnaire du système ion plus photoélectron avec l'énergie  $E$ , et  $i$  définit tous les nombres quantiques nécessaires pour décrire l'ion et le photoélectron dans un canal ouvert donné. Avec une fonction d'onde de l'état initial, le calcul des amplitudes partielles  $T_i$  se ramène à la détermination des fonctions  $\psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ . Pour cela il faut résoudre l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H} \psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E \psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (I-20)$$

où  $\hat{H}$  est l'hamiltonien du système à deux électrons.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}_1} - \frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (I-21)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \quad (I-22)$$

$\hat{H}_0$  est l'hamiltonien d'ordre zéro,  $\hat{V}$  est l'opérateur de l'interaction entre les électrons et  $Z$  est la charge nucléaire. Pour résoudre cette équation, considérons l'expression de la fonction d'onde suivante :

$$\psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{A} \sum_k^{\infty} \psi_k(\vec{r}_1) U_k(E, \vec{r}_2) \quad (I-23)$$

$\hat{A}$  est l'opérateur d'antisymétrisation,  $U_{k_i}(E, \vec{r}_2)$  sont les fonctions inconnues à déterminer décrivant le mouvement du photoélectron, et  $\psi_k(\vec{r}_1)$  sont les fonctions propres définissant les états de l'ion résiduel telles que :

$$\langle \psi_k(\vec{r}_1) | \psi_{k'}(\vec{r}_1) \rangle = \delta_{kk'} \quad (I-24)$$

$$\langle \psi_k(\vec{r}_1) | \hat{H} | \psi_{k'}(\vec{r}_1) \rangle = \varepsilon_k \delta_{kk'} + V_{kk'} \quad (I-25)$$

En première approximation, on remplace la sommation infinie de l'équation (I-23) par une sommation finie dans les sous espaces des canaux fermés et des canaux ouverts.

$$\psi_{E_i}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{A} \sum_j [\psi_j(\vec{r}_1) U_{ji}(E, \vec{r}_2) + \sum_j \Lambda_\mu(E) \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2)] \quad (I-26)$$

Ici  $i$  représente l'ensemble des nombres quantiques caractérisant le système ion + photoélectron dans le sous-espace des canaux ouverts.

Les fonctions  $\phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  sont obtenues par transformation unitaire qui diagonalise l'hamiltonien dans le sous espace des canaux fermés :

$$\phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{A} \sum_{l,m} \alpha_\mu [\psi_l(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_2)] \quad (I-27)$$

Ces fonctions satisfont la condition suivante :

$$\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{H} | \phi_\nu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = E_\mu \delta_{\mu\nu} \quad (I-28)$$

Les coefficients  $\alpha_\mu$  dans (I-23), sont déterminés par la résolution du système d'équations linéaires algébriques :

$$\sum_\nu \{(E_\mu - E_0) + \langle \chi_\mu | \hat{V} | \chi_\nu \rangle\} \alpha_\nu = 0 \quad (\text{I-29})$$

Où  $E_0$  représente l'hamiltonien à l'ordre zéro  $\hat{H}_0$  correspondant aux fonctions propres  $\chi_\nu$  définies par :

$$\chi_\nu = \hat{A} [\psi_l(\vec{r}_1) \psi_m(\vec{r}_2)] \quad (\text{I-30})$$

La détermination de la fonction d'onde du système ion+photoélectron  $\psi_{E_i}(E, \vec{r}_2)$  se ramène aux calculs des coefficients  $\Lambda_\mu(E)$  et  $U_{ji}(E, \vec{r}_2)$ . Dans ces calculs la méthode de diagonalisation en tant que simplification notable de la méthode de Feshbach ou de celle de Fano, consiste à négliger le couplage indirect des canaux fermés à travers les canaux ouverts [15, 45, 46].

Il a été montré que pour la résolution du problème de la photoionisation [45, 46], il faut avoir des fonctions  $U_{ji}^{(-)}(E, \vec{r}_2)$  qui remplissent des conditions aux limites appropriées correspondant à l'émission d'un électron par l'atome à la suite de son interaction avec le rayonnement électromagnétique. Pour cela ces fonctions doivent avoir dans chaque canal  $j \neq i$  une onde entrante et dans tous les autres canaux  $i$  une onde sortante. Avec ces conditions aux limites qui sont celles du problème de la photoionisation, les fonctions  $U_{ji}^{(-)}(E, \vec{r}_2)$  au premier ordre de l'interaction électrostatique entre les canaux ouverts prennent la forme suivante [46] :

$$U_{ji}^{(-)}(E, \vec{r}_2) = \phi_i^{(-)}(E, \vec{r}_2) \delta_{ij} + G_j^{(-)}(E) \left\{ \sum_{j \neq k} V_{jk} U_{ki}(E, \vec{r}_2) \right. \\ \left. + \sqrt{2} \sum_\nu \Lambda_\nu(E) \langle \phi_\nu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \psi_j(\vec{r}_1) \rangle \right\} \quad (\text{I-31})$$

Où  $\phi_i^{(-)}(E, \vec{r}_2)$  est l'onde sortante dans le canal  $i$  et  $G_j^{(-)}(E)$  est l'opérateur de Green. Quant aux coefficients  $\Lambda_\nu(E)$ , au premier ordre de l'interaction électrostatique dans les canaux ouverts, ils ont été obtenus sous la forme :

$$\Lambda_\nu(E) = \frac{\sum_j \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \hat{A} [\psi_j(\vec{r}_1) \tilde{U}_{ji}(E, \vec{r}_2)] \rangle}{E - E_\mu - \frac{i}{2} \Gamma^{\text{tot}} - D_\mu} \quad (\text{I-32})$$

Où

$$\tilde{U}_{ji}(E, \vec{r}_2) = \phi_i^{(-)}(E, \vec{r}_2) \delta_{ij} + G_j^{(-)}(E) (1 - \delta_{ij}) V_{ij} \phi_i^{(-)}(E, \vec{r}_2) \quad (\text{I-33})$$

et

$$\Gamma^{\text{tot}} = 2\pi \sum_j \left| \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \tilde{\phi}_j(E) \rangle \right|^2 \quad (\text{I-34})$$

$\Gamma^{\text{tot}}$  et  $D_\mu$  sont larges et le déplacement de la résonance respectivement.

$\tilde{\phi}_j(E)$  est la fonction d'onde du spectre continu sans l'effet de l'interférence des résonances quand l'interaction électrostatique est considérée au premier ordre.

$$\tilde{\phi}_j(E) = \phi_j(E) + \sum_{k \neq j} \int \phi_k(E) \frac{\langle \phi_k(E) | \hat{V} | \phi_j(E) \rangle}{E - E'} dE' \quad (\text{I-35})$$

Où  $\phi_j(E)$  est la fonction d'onde du spectre continu à l'ordre zéro.

Finalement à l'approximation de la diagonalisation [28,30], la fonction d'onde de l'état du système ion + photoélectron dans le canal  $i$  au premier ordre de l'interaction électrostatique s'écrit sous la forme suivante :

$$\psi_{Ei}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_j + \frac{\langle \phi_\mu(E) | \hat{V} | \phi_j(E) \rangle}{E - E_\mu - \frac{i}{2} \Gamma^{\text{tot}} - D_\mu} \times \left\{ \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + i\pi \sum_k \phi_k(E) \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \right\} \quad (\text{I-36})$$

L'amplitude totale de la photoionisation au voisinage d'une résonance isolée prend la forme suivante :

$$T_i = \langle \phi_j(E) | \hat{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle + \frac{q+i}{\varepsilon-i} \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_j(E) \rangle \times$$

$$\times \frac{\sum_k \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \langle \phi_k(E) | \hat{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle}{\sum_k \left| \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \right|^2} \quad (I-37)$$

$$\text{Où } \varepsilon = (E - E_\mu - D_\mu) / \frac{1}{2} \Gamma_\mu^{tot}$$

$$q = \frac{\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle}{\pi \sum_k \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \langle \phi_k(E) | \hat{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle} \quad (I-38)$$

Avec  $\varepsilon$ ,  $E_\mu$  et  $q$  qui sont respectivement l'écart relatif, l'énergie et l'indexe de profil de la résonance.

Quand on néglige le couplage des canaux ouverts entre eux dans la détermination des principales caractéristiques de la photoionisation résonante il suffit de remplacer dans les formules correspondantes précédentes les fonctions  $\tilde{\phi}_j(E)$  par les fonctions  $\phi_j(E)$  décrivant le continuum à l'ordre zéro.

$$\sigma = \sum_j |T_j|^2 = \sigma_b + \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon + 1} \quad (I-39)$$

## **Chapitre II**

**La section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation de l'hélium et des ions héliumoïdes**

## II-1 La section efficace de photoabsorption

La collision ou l'interaction entre deux particules, est généralement décrite en termes de section efficace. Cette quantité donne une mesure de la probabilité qu'une réaction ou qu'un certain type de réaction puisse se produire. Elle peut être calculée si on connaît l'interaction qui la régit.

Lorsque qu'on irradie la matière avec des photons d'énergie supérieure à l'énergie d'ionisation des atomes, il y'a absorption suivie d'une ionisation de l'atome. La section efficace, correspondant à ce processus, dépend de l'énergie des photons : on constate qu'elle décroît fortement avec l'énergie. Ce phénomène peut être expliqué par le fait que lorsque l'énergie de la liaison est largement négligeable devant celle du photon, la section efficace d'interaction avec le rayonnement, est très petite car l'électron se comporte comme étant libre.

A l'approximation de la diagonalisation, la section efficace de photoionisation est définie par la formule bien connue de Fano [4]:

$$\sigma = \sum_j |T_D^j|^2 = \sigma_b + \sigma_a \frac{(q + \varepsilon)^2}{\varepsilon^2 + 1} \quad (\text{II-1})$$

où  $\sigma_a$  est la partie de la section efficace contenant l'effet de l'interférence de la résonance avec le spectre continu.

$$\sigma_a = \frac{|\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \langle \phi_k(E) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle|^2}{|\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle|^2} \quad (\text{II-2})$$

et  $\sigma_b$  est la partie de la section efficace ne contenant pas l'effet de l'interférence de la résonance avec le spectre continu.

$$\sigma_b = |\langle \phi_k(E) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle|^2 - \sigma_a \quad (\text{II-3})$$

$$\sigma_0 = \sigma_a + \sigma_b \quad (\text{II-4})$$

Avec  $\sigma_0$ , la section efficace de photoabsorption à l'absence de la résonance et dont la formule est donnée par l'expression suivante :

$$\sigma_0 = \left| \langle \phi_k(E) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \right|^2 \quad (\text{II-5})$$

la section efficace de photoabsorption  $\sigma_0$  est une fonction décroissante de l'énergie de l'électron du continuum :(figure1 et 2).

## **II- 2 Le coefficient de corrélation**

Ce paramètre  $\rho^2$  permet la caractérisation du degré de diminution de la valeur de la section efficace de photoabsorption au point  $\varepsilon = -q$  par rapport à la section efficace définie loin de la résonance. Il est appelé coefficient de corrélation et est défini par l'expression suivante :

$$\rho^2 = \frac{\sigma_a}{\sigma_a + \sigma_b} \quad (\text{II-6})$$

## **II- 3 La largeur de la résonance**

Partant de la définition (I-34),  $\Gamma$  est caractérisée par le couplage de l'opérateur potentiel d'interaction électrostatique de l'état discret à l'état du continuum d'énergie  $E$ . La largeur de la résonance autoionisante est intrinsèque à la résonance. Elle représente la somme des largeurs partielles  $\Gamma_k$  des différents canaux ouverts  $k$  et peut être exprimée sous la forme suivante :

$$\Gamma = \sum_k \Gamma_k = 2\pi \sum_k \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_k(E) \rangle \quad (\text{II-7})$$

## **II- 4 L'indexe de profil de la résonance**

$$q = \frac{\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle}{\pi \sum_k \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \langle \phi_k(E) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle} \quad (\text{II-8})$$

L'indexe de profil caractérisant l'asymétrie de la résonance est défini par l'équation ci-dessus. Il est important de noter que l'asymétrie de la résonance autoionisante est définie par le paramètre indexe de profil  $q$ .

Les résultats bien connus du profil de Fano [4] de la section efficace montrent que le carré de l'indexe de profil représente le rapport des probabilités de transitions à l'état discret et à l'état du continuum. L'indexe de profil peut tendre vers l'infini si la probabilité de transition vers l'état discret est dominant. C'est ce qu'on nomme le profil Lorentzien. L'indexe de profil peut aussi tendre vers zéro si la probabilité de transition vers l'état discret est plus petite que celle vers le continuum.

## **II- 5 Calcul des éléments matriciels de transition**

Les processus d'absorption et d'émission sont appelés transitions radiatives. La relation  $h\nu=E_2 - E_1$  est une condition nécessaire pour qu'un rayonnement soit susceptible de provoquer une transition radiative entre les deux niveaux  $E_1$  et  $E_2$ ; mais elle n'est pas suffisante car les nombres quantiques caractérisant cette transition, doivent satisfaire certaines règles de sélection.

Concernant la transition dipolaire électrique, les fonctions d'ondes représentant les états de transition de l'état initial  $\psi_1$  à l'état final  $\psi_2$  doivent être paires où  $i$  impaires. En plus, le produit  $\psi_1\psi_2$  doit être impair pour que l'élément matriciel définissant la transition soit différent de zéro pour répondre à la règle de sélection de la parité. Donc  $\psi_1$  et  $\psi_2$  doivent avoir des parités différentes. La règle de sélection la plus caractéristique est la conservation du moment cinétique du système 'atome + rayonnement'. La parité des fonctions harmoniques sphériques est égale  $(-1)^l$ . La règle de sélection de la parité implique que  $\Delta l$  doit être un nombre impair. L'évaluation détaillée des intégrales donne la

règle  $\Delta l = \pm 1$ . Le photon n'interagit pas avec le spin de l'électron dont l'état ne change pas durant la transition.

## **II- 5- 1 Calcul des éléments matriciels dans les transitions dipolaires**

Pour le calcul des éléments matriciels de transitions dipolaires, nous avons deux cas à traiter. Nous allons en premier lieu calculer la transition de l'état fondamental  $1s^2$  à l'état d'autoionisation  $2s2p$  et ensuite calculer la transition de l'état fondamental  $1s^2$  à l'état du continuum  $1s\text{kp}$ .

$$\langle \psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{II-9})$$

Cet élément matriciel de transition dipolaire de l'état fondamental à l'état d'autoionisation n'est rien d'autre que le numérateur de l'expression de l'indexe de profil. Il est défini à partir de la fonction d'onde initiale de type Hylleraas, d'une fonction d'onde de l'état d'autoionisation choisie comme une combinaison linéaire antisymétrique de fonctions coulombiennes et de l'opérateur moment dipolaire  $\vec{D}$ . Toutes nos expressions sont exprimées en unité atomique.

L'opérateur moment dipolaire est définie par :

$$\vec{D} = \vec{r}_1 + \vec{r}_2 \quad (\text{II-10})$$

La fonction d'onde à l'état fondamental de type Hylleraas est définie par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 4\pi N \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] & \left[ 1 + c_1 r_{12} + c_2 (r_1 - r_2)^2 + c_3 (r_1 + r_2) + c_4 (r_1 + r_2)^2 \right. \\ & \left. + c_5 r_{12}^2 \right] Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \end{aligned} \quad (\text{II-11})$$

Les fonctions  $Y_{00}(\theta_1, \varphi_1)$  et  $Y_{00}(\theta_2, \varphi_2)$  sont les fonctions angulaires pour l'électron 1 et 2 pour lesquels les moments angulaires sont nuls.

Dans l'expression de l'élément matriciel, la fonction d'onde  $\psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  désigne la fonction d'onde de l'état d'autoionisation. Cette fonction

est une combinaison linéaire antisymétrique de fonctions d'ondes hydrogénoides déterminée dans le cadre de l'approximation du couplage LS.

$$\psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 2^{-1/2} \sum_{m_1 m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle \{ Rn_1 l_1(r_1) Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) Rn_2 l_2(r_2) Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \\ + Rn_1 l_1(r_2) Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) Rn_2 l_2(r_1) Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \} \quad (\text{II-12})$$

Où le terme  $\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle$  représente les coefficients de Clebsch-Gordan à déterminer [58] et  $Rnl$  est la fonction d'onde radiale de l'électron à l'état lié. Cette fonction d'onde radiale est définie par [58] :

$$Rnl(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \left[ \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \left( \frac{2Z}{n} \right)^{l+3/2} \exp(-Zr/n) r^l {}_1F_1(-(n-l-1), 2l+2, 2Zr/n) \quad (\text{II-13})$$

Où  ${}_1F_1(-(n-l-1), 2l+2, 2Zr/n)$  est la fonction hypergéométrique dégénérée. Il existe pour cette fonction, des développements en séries de puissances, des relations de récurrence et des représentations intégrales et asymptotiques [59]. La fonction hypergéométrique possède la propriété de s'exprimer sous forme de polynômes de Laguerre, que nous allons utiliser pour la commodité de certains de nos calculs. Ainsi, nous aurons la fonction d'onde radiale sous la forme suivante :

$$Rnl(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \left[ \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \left( \frac{2Z}{n} \right)^{l+3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{n}\right) r^l L_{n+l}^{2l+1}(2Zr/n) \quad (\text{II-14})$$

Pour le calcul de la transition de l'état fondamental vers l'état d'autoionisation, en remplaçant dans l'élément matriciel définissant le numérateur de l'indexe de profil les fonctions d'ondes et l'opérateur moment dipolaire par leurs expressions respectives [(II-10),(II-11),(II-12)], on obtient ainsi :

$$\begin{aligned}
& 2^{-1/2} \sum_{m_1 m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle \langle \{ R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) R n_2 l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \\
& + R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) R n_2 l_2(r_1) Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \} | \vec{r}_1 + \vec{r}_2 | \\
& 4\pi N \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \{ 1 + c_1 r_{12} + c_2 (r_1 - r_2)^2 + c_3 (r_1 + r_2) + c_4 (r_1 + r_2) \\
& + c_5 r_{12}^2 \} Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle
\end{aligned} \tag{II-15}$$

$\vec{r}_i$  est l'opérateur position de l'électron i et il est défini par :

$$\vec{r}_i = r_i \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} Y_{l\lambda}(\theta_i, \varphi_i) \tag{II-16}$$

Le facteur de corrélation représenté par la distance inter-électronique  $r_{12}$  est défini par la relation :

$$r_{12} = \sum_{k'q} U_{k'}(r_1, r_2) Y_{k'q}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) \tag{II-17}$$

La fonction  $U_{k'}(r_1, r_2)$  radiale est définie par :

$$U_{k'}(r_1, r_2) = \frac{4\pi}{2k'+1} \left[ \frac{r^{k'+2} <}{r^{k'+1} > (2k'+3)} - \frac{r^{k'} <}{r^{k'-1} > (2k'-1)} \right] \tag{II-18}$$

Où  $r <$  et  $r >$  sont respectivement la plus petite et la plus grande des valeurs de  $r_1$  et  $r_2$ .

Dans cette expression, le carré du facteur de corrélation  $r_{12}^2$  est développé en termes de polynômes de Legendre sous la forme  $P(\cos \theta_{12})$

Où  $\theta_{12}$  est l'angle entre les vecteurs  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$

D'après le théorème d'addition des harmoniques sphériques le polynôme de Legendre s'exprime sous la forme suivante

$$P(\cos \theta_{12}) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) \tag{II-19}$$

L'élément matriciel de la transition de l'état fondamental vers l'état du continuum est donné par l'expression suivante :

$$\langle \phi_k(E) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \quad (\text{II-20})$$

Cet élément matriciel intervient dans le calcul de l'indexe de profil, de la section efficace et du facteur de corrélation. La fonction  $\phi_k(E)$  de l'état du système constitué de l'ion hydrogénoidé résiduel et du photoélectron à l'état continu est définie ainsi :

$$\begin{aligned} \phi_k(E) = & 2^{-1/2} \sum_{m_1, m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle \{ R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) R \varepsilon l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \\ & + R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) R \varepsilon l_2(r_1) Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \} \end{aligned} \quad (\text{II-21})$$

Nous avons ici la présence de la fonction radiale de l'état final  $R \varepsilon l$  définie par :

$$\begin{aligned} R \varepsilon l(r) = & \frac{2\sqrt{Z-1}}{\sqrt{1-\exp(-2\pi((Z-1)/k))}} \prod_{s=1}^l \sqrt{s^2 + \left(\frac{Z-1}{k}\right)^2} \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} \exp(-ikr) \times \\ & {}_1 F_1 \left( i \frac{(Z-1)}{k} + l + 1, 2l + 2, 2ikr \right) \end{aligned} \quad (\text{II-22})$$

Avec  $k = (2\varepsilon)^{1/2}$ ,  $\varepsilon$  étant l'énergie de l'électron éjecté et  $Z$  le numéro atomique de l'atome.

Pour le calcul de la transition de l'état fondamental à l'état du continuum définie par l'expression suivante :

$$\begin{aligned} & 2^{-1/2} \sum_{m_1 m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle \langle \{ R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) R \varepsilon l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \\ & + R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) R \varepsilon l_2(r_1) Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \} | \vec{r}_1 + \vec{r}_2 | \\ & 4\pi N \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \{ 1 + c_1 r_{12} + c_2 (r_1 - r_2)^2 + c_3 (r_1 + r_2) + c_4 (r_1 + r_2) \\ & + c_5 r_{12}^2 \} Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \} \end{aligned} \quad (\text{II-23})$$

La séparation des variables angulaires et le développement des opérateurs de position des électrons ainsi que le facteur de corrélation montrent que le calcul des éléments matriciels se ramène au calcul de plusieurs intégrales de types différents selon la nature des variables que sont celles qui contiennent les

variables  $r_1$  ou  $r_2$ , celles qui contiennent le terme de corrélation  $r_{12}$  et celles qui contiennent le carré du terme de corrélation  $r_{12}^2$ .

## II- 5- 1- 1 Calcul des intégrales contenant les variables $r_1$ ou $r_2$

### a.) Calcul de la partie angulaire

Dans la partie angulaire des expressions (II-15) et (II-23), nous avons les mêmes types d'intégrales décrites sous la forme :

$$\langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{1\lambda}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle \langle Y_{l'm'}(\theta_j, \varphi_j) | Y_{00}(\theta_j, \varphi_j) \rangle \quad (\text{II-24})$$

Pour cette partie nous allons appliquer le théorème de Wigner-Eckart et la relation d'orthogonalité des harmoniques sphériques [58]. Ce qui va nous donner les relations suivantes :

$$\langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{1\lambda}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle = (-1)^m \left[ \frac{3(2l+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & 1 & 0 \\ -m & \lambda & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-25})$$

et

$$\langle Y_{l'm'}(\theta_j, \varphi_j) | Y_{00}(\theta_j, \varphi_j) \rangle = \delta_{l'0} \delta_{m'0} \quad (\text{II-26})$$

Ici  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$  et  $\begin{pmatrix} l & 1 & 0 \\ -m & \lambda & 0 \end{pmatrix}$  sont les symboles 3j de Wigner Eckart [58]

### b.) Calcul de la partie radiale

Les intégrales radiales contenant seulement les variables  $r_1$  et  $r_2$  s'écrivent sous la forme :

$$\int \int R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) r_1^{p_1+2} r_2^{p_2+2} \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] dr_1 dr_2 \quad (\text{II-27})$$

$$\int \int R n_1 l_1(r_2) R \varepsilon l_2(r_1) r_1^{p_1+2} r_2^{p_2+2} \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] dr_1 dr_2 \quad (\text{II-28})$$

Dans cette intégrale si on remplace les fonctions radiales  $Rnl$  et  $Rel$  respectivement de l'équation (II-13) et de l'équation (II-22), on aura des intégrales de type connu définies par la relation ci-dessous :

$$\int_0^\infty \exp(-\alpha x) x^\nu {}_1F_1(a, b, cx) = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu+1)} {}_2F_1(a, \nu+1, b, c/\alpha) \quad (\text{II-29})$$

Où  $\Gamma$  est la fonction gamma d'Euler. Les fonctions  ${}_1F_1(a, b, c)$  et  ${}_2F_1(a, \nu+1, b, c/\alpha)$  sont respectivement la fonction hypergéométrique dégénérée et la fonction hypergéométrique. Les détails de la procédure de calcul sont donnés dans l'annexe 1.

## **II-5-1-2 Calcul des intégrales contenant le terme de corrélation $r_{12}$**

### **a.) Calcul de la partie angulaire**

La partie angulaire du facteur de corrélation donne un élément matriciel de la forme

$$\langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{k'q}^*(\theta_i, \varphi_i) Y_{l\lambda}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle \langle Y_{l'm'}(\theta_j, \varphi_j) | Y_{k'q}(\theta_j, \varphi_j) | Y_{00}(\theta_j, \varphi_j) \rangle \quad (\text{II-30})$$

En utilisant le théorème de Wigner-Eckart, cette partie angulaire s'écrit avec les relations suivantes :

$$\begin{aligned} \langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{k'q}^*(\theta_i, \varphi_i) Y_{l\lambda}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle &= (-1)^q \left[ \frac{3(2k'+1)(2L+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \times \\ &\left( \begin{matrix} 0 & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left( \begin{matrix} k' & 1 & L \\ -q & \lambda & M \end{matrix} \right) \langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{LM}^*(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle \\ &= (-1)^{q+M+m} \sum \left[ \frac{3(2k'+1)(2L+1)}{4\pi} \right] \left[ \frac{(2l+1)(2L+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \left( \begin{matrix} k' & 1 & L \\ -q & \lambda & M \end{matrix} \right) \times \\ &\left( \begin{matrix} k' & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left( \begin{matrix} 1 & L & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \left( \begin{matrix} 1 & L & 0 \\ -m & -M & 0 \end{matrix} \right) \end{aligned} \quad (\text{II-31})$$

et

$$\left\langle Y_{l'm'}(\theta_j, \varphi_j) \middle| Y_{k'q}(\theta_j, \varphi_j) \middle| Y_{00}(\theta_j, \varphi_j) \right\rangle = (-1)^{m'} \left[ \frac{(2k'+1)(2l'+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l' & k' & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & k' & 0 \\ -m' & q & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II-32})$$

### b.) Calcul de la partie radiale

En remplaçant le facteur  $r_{12}$  par son expression dans les éléments matriciels décrits au niveau de (II-15) et de (II-23) nous aurons des intégrales de types :

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r^t}{r^{t+1}} \left| Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) r_1^{p_1+2} r_2^{p_2+2} \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] \right| dr_1 dr_2 \quad (\text{II-33})$$

et

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \frac{r^t}{r^{t+1}} \left| Rn_1 l_1(r_2) R\epsilon l_2(r_1) r_1^{p_1+2} r_2^{p_2+2} \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] \right| dr_1 dr_2 \quad (\text{II-34})$$

En tenant compte des régions où  $r_1$  est plus grand ou plus petit que  $r_2$  ces intégrales ci-dessus se calculent en utilisant la formule suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{r^\lambda}{r^{\lambda+1}} \left| \phi(r_i) \phi(r_j) dr_i dr_j \right| &= \int_0^\infty \phi(r_i) dr_i \left\{ \int_0^{r_i} \frac{r_j^\lambda}{r_i^{\lambda+1}} \phi(r_j) dr_j + \right. \\ &\quad \left. \int_{r_i}^\infty \frac{r_i^\lambda}{r_j^{\lambda+1}} \phi(r_j) dr_j \right\} \end{aligned} \quad (\text{II-35})$$

L'intégrale devient une somme de types d'intégrales suivantes :

$$\int_0^{r_i} Rnl(r_j) \exp(-\alpha r_j) dr_j \quad (\text{II-36})$$

Et

$$\int_{r_i}^\infty Rnl(r_j) \exp(-\alpha r_j) dr_j \quad (\text{II-37})$$

En faisant les remplacements nécessaires pour ces deux intégrales (II-36) et (II-37) nous aurons respectivement pour l'intégrale (II-36) la forme:

$$\int_0^{r_i} r_j^\mu \exp(-\alpha r_j) dr_j = \frac{\mu!}{\alpha^{(\mu+1)}} - \exp(-\alpha r_i) \sum_{m=0}^{\mu} \frac{\mu!}{m!} \frac{r_i^m}{\alpha^{(\mu+1-m)}} \quad (\text{II-38})$$

et pour l'intégrale (II-37), la forme connue :

$$\int_{r_i}^{+\infty} r_j^\mu \exp(-\alpha r_j) dr_j = \exp(-\alpha r_i) \sum_{m=0}^{\mu} \frac{\mu!}{m!} \frac{r_i^m}{\alpha^{(\mu+1-m)}} \quad (\text{II-39})$$

### II-5-1-3 Calcul des intégrales contenant le carré du terme de corrélation $r_{12}^2$

La partie angulaire de l'intégrale contenant le terme  $r_{12}^2$  se traite, en utilisant les relations (II-31) et (II-32) du théorème de Wigner-Eckart de la même manière que celle contenant le terme  $r_{12}$ .

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 P(\cos \omega) \quad (\text{II-40})$$

Polynôme de Legendre

$$P(\cos \omega) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) \quad (\text{II-41})$$

En développant le facteur  $r_{12}^2$ , on retrouve des intégrales avec seulement des variables  $r_1$  et  $r_2$  similaires aux intégrales de type (II-29) pour lesquelles nous avons déjà indiqué la procédure de calcul.

### II- 5- 2 Calcul des éléments matriciels de l'opérateur de l'interaction électrostatique

Les éléments matriciels de l'opérateur d'interaction électrostatique de l'état d'autoionisation 2s2p vers l'état final du continuum déterminent le couplage entre les différents niveaux et les largeurs de ces niveaux et s'expriment sous la forme suivante :

$$\langle \psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \quad (\text{II-42})$$

Vue que les fonctions d'ondes de cette expression ci-dessus ont été données précédemment, nous nous limitons à définir l'opérateur d'interaction électrostatique  $\hat{V}$  qui s'exprime sous la forme suivante :

$$\hat{V} = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{1}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2k+1} \frac{r^k}{r^{k+1}} \sum_q Y_{kq}(\theta_1, \varphi_1) Y_{kq}(\theta_2, \varphi_2) \quad (\text{II-43})$$

En remplaçant les fonctions d'ondes et l'opérateur d'interaction électrostatique par leurs expressions, nous allons nous retrouver avec un développement de ce type :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle \sum_{m_1' m_2'} \langle l_1' l_2' m_1' m_2' | L' M' \rangle \times \\ & \left\langle \left\{ R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) R n_2 l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) R n_2 l_2(r_1) Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \right\} \left| \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2k+1} \times \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{r^k}{r^{k+1}} \sum_{q=-k}^k Y_{kq}(\theta_1, \varphi_1) Y_{kq}(\theta_2, \varphi_2) \right| \left\{ R n_1' l_1'(r_1) Y l_1' m_1'(\theta_1, \varphi_1) \times \right. \right. \\ & \left. \left. R \varepsilon l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) + R n_1 l_1(r_2) Y l_1' m_1'(\theta_2, \varphi_2) R \varepsilon l_2'(r_1) Y l_2' m_2'(\theta_1, \varphi_1) \right\} \right\rangle \quad (\text{II-44}) \end{aligned}$$

Ici nous avons des intégrales de la partie angulaire de type semblable à celles de (II-32).

Pour le calcul de la partie radiale, les intégrales sont de même type que celles des éléments matriciels contenant le facteur de corrélation et la résolution se fait aussi avec les mêmes outils de calcul. Les détails de tous ces calculs seront développés au niveau de l'annexe 1.

## **Chapitre III**

**Résultats et Analyse sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation de l'hélium et des ions héliumoïdes**

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats que nous avons obtenus, en les comparant aux travaux expérimentaux et théoriques disponibles dans la littérature. Pour l'hélium qui est le cas le plus simple des systèmes atomiques à deux électrons, beaucoup de travaux ont été faits et d'importants résultats théoriques sur la section efficace et les paramètres résonants de photoabsorption ont été donnés. Sur le plan expérimental, les travaux ont pour la plus part concerné l'hélium et dans une moindre mesure, le lithium. Pour les autres ions héliumoides, auxquels nous nous intéressons, quelques travaux théoriques ont été donnés dans la littérature mais avec des résultats souvent incomplets. C'est pour cette raison que certains de nos résultats ont été donnés sans comparaison.

### **III- 1- Résultats sur l'hélium**

Dans les tableaux 1 et 2, nous présentons les résultats de ce présent travail sur la section efficace à l'absence de la résonance ainsi que l'énergie, la largeur, l'indexe de profil et le coefficient de corrélation de la photoionisation de l'état singulet 2S2P ( $^1P^0$ ) de l'hélium.

Nous comparons nos résultats théoriques dans le tableau 1 avec ceux des travaux expérimentaux de Madden et Codling [5], Rost et al [22], Kosman et al [63] et de Domke [21]. Nos résultats sont en très bon accord avec ces derniers, surtout pour ce qui concerne la largeur de la résonance et l'indexe de profil. Concernant la section efficace à l'absence de la résonance, le résultat que nous avons trouvé est en très bon accord avec le seul disponible, celui de Kosman et al [63]. Pour ce qui concerne le coefficient de corrélation aucun résultat expérimental n'est disponible. La valeur  $\rho^2 = 1$  que nous avons trouvée est en accord avec la valeur attendue, car cela signifie que lorsqu'il n'y a qu'un seul canal ouvert, comme c'est le cas ici, la partie  $\sigma_b$  de la section efficace qui est de l'ordre de  $10^{-7}$  est négligeable devant la partie  $\sigma_a$  de la section efficace. Dans le tableau 2, des comparaisons ont été faites avec des résultats théoriques de

Sanchez et Martin [62], de Bhatia et Temkin [42], de Bin Zhou et al [61] et de M. K. Chen [66]. Nos résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance et les paramètres résonants sont en bon accord avec ceux de Bin Zhou et al [61] qui ont utilisé la méthode de l'approximation du couplage fort hypersphérique. Concernant l'indexe de profil, l'accord est plus marqué avec les travaux de Bhatia et Temkin [42] qui ont utilisé le formalisme de Feshbach et de Sanchez et Martin qui ont utilisé la méthode basée sur l'intégrale  $L^2$  appliquée à la théorie de Fano-Feshbach.

### **III- 2 Résultats sur les ions $\text{Li}^+$ , $\text{Be}^{2+}$ , $\text{B}^{3+}$ , $\text{C}^{4+}$ , $\text{N}^{5+}$ , $\text{O}^{6+}$ , $\text{F}^{7+}$ et $\text{Ne}^{8+}$**

Dans le tableau III, nous présentons nos résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de l'ion  $\text{Li}^+$  comparés avec ceux de Bin Zhou et al [61], Sanchez et Martin [62], Bhatia et Temkin [42] et de Caroll et Kennedy [42]. Pour ce qui concerne la largeur, et l'indexe de profil, nos résultats sont en bon accord avec le seul résultat expérimental disponible à notre connaissance, celui de Caroll et Kennedy [42]. Par contre, nous constatons que la valeur de l'indexe de profil que nous avons trouvée est plus faible en valeur absolue que celle des autres résultats théoriques. Cette différence pourrait s'expliquer par le fait que la valeur de la section efficace, en l'absence de la résonance  $\sigma_0$ , que nous avons trouvée est plus grande que celle des autres valeurs théoriques. Cette plus grande valeur proviendrait peut être du choix que nous avons fait sur la fonction d'onde du fondamental. En effet, la fonction de Hylleraas que nous avons choisie pour le fondamental, est une fonction qui tient bien en compte la corrélation électronique. La valeur du coefficient de corrélation est égale à l'unité et, est en très bon accord avec la seule disponible, celle de Bin Zhou et al [61]. Mais pour une meilleure comparaison, Il serait donc utile d'avoir d'autres valeurs expérimentales.

Dans le tableau IV, la comparaison de nos résultats sur l'ion  $C^{4+}$  est faite avec ceux de Bin Zhou et al [61], Sanchez et Martin [62]. Ici aussi, on fait le même constat, sur la faiblesse en valeur absolue de la valeur de l'indexe que nous avons trouvée par rapport à celles des autres valeurs théoriques. La valeur de la section efficace est en accord avec les autres valeurs, mais tout en restant plus grande.

Dans le tableau V, nous présentons nos résultats seuls car n'ayant trouvé aucun élément de comparaison dans la littérature pour ces ions, pour ce qui concerne la largeur, la section efficace, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil.  $Be^{2+}$ ,  $B^{3+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $F^{7+}$  et  $Ne^{8+}$ . Nous constatons tout de même, que le coefficient de corrélation reste situé autour de l'unité, ce qui est un résultat raisonnable.

De manière générale, on voit que lorsque  $Z$  augmente, la largeur qui est proportionnelle au module au carré de l'élément matriciel d'interaction électrostatique augmente. En effet pour les grands  $Z$ , l'interaction électron-électron est petite comparée à l'interaction coulombienne avec le noyau. S'agissant de la section efficace en l'absence de la résonance, elle diminue en fonction de la charge  $Z$  et de l'énergie du photoélectron, ce qui est en accord avec les données expérimentales (figures 1 et 2). Cette diminution s'explique par le fait que l'élément matriciel de cette section efficace, qui contient la fonction d'onde du fondamental doit décroître avec la diminution de l'interaction électron-électron quand  $Z$  augmente. Pour l'indexe de profil, le comportement est moins évident à interpréter en fonction de  $Z$ . En effet, entre l'hélium et l'ion  $B^{3+}$ , l'indexe de profil augmente, allant de -2.86 à -1.193. Sa valeur subit ensuite une très faible diminution pour l'ion  $C^{4+}$ , allant à -1.197, pour ensuite remonter à partir de l'ion  $N^{5+}$  jusqu'à l'ion  $Ne^{8+}$ . Le seul constat que l'on peut faire, c'est que l'indexe de profil conserve une valeur négative pour tous les ions considérés et que sa variation reste faible entre l'ion  $Li^+$  et  $Ne^{8+}$ , se situant entre -1.53 et -1.38.

**Tableau I** : *Présents résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance, la partie de la section efficace contenant l'effet de l'interférence de la résonance avec le spectre continu la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation de l'hélium à l'état excité  $2s2p$  ( $^1P^0$ ) comparés avec des résultats expérimentaux. Les énergies sont données en électron-volt (eV) et la section efficace en  $10^{-18} \text{ cm}^2$ . Conversion utilisée  $1 \text{ u.a} = 27,211396 \text{ eV} = 2 \text{ Ry}$ .*

Les différents travaux	Présent travail Méthode de diagonalisation	R.P. Madden et K. Codling [6]	J. M. Rost et al [22]	Kosmann et al [60]	D. Wintgen et al [21]
E(eV)	60,34	60,123	60,1503	60.133	60.147
$\Gamma$ (eV)	0,0375	0,038	0,0376	0,038	0,037
$\sigma_0 (10^{-18} \text{ cm}^2)$	1,4909	-----	-----	1,376	-----
$\sigma_a (10^{-18} \text{ cm}^2)$	1,4909	-----	-----	-----	-----
$\sigma_b (10^{-18} \text{ cm}^2)$	$1,0304 \cdot 10^{-7}$	-----	-----	-----	-----
$\rho^2$	0,999	-----	-----	-----	-----
q	-2,86	$-2,80 \pm 0,25$	-2,73	-2,75	-2,75

**Tableau II** : Présents résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation de l'hélium à l'état excité  $2s2p$  ( $^1P^0$ ) comparés avec des résultats théoriques. Les énergies sont données en électron-volt (eV) et la section efficace en  $10^{-18} \text{ cm}^2$ . Conversion utilisée  $1u.a=27,211396 \text{ eV}=2 \text{ Ry}$ .

Les différents travaux	Présent travail Méthode de la diagonalisation	M. K. Chen [66]	Bin Zhou et al [61]	A. K. Bhatia et A. Temkin[42]	Sanchez et Martin [62]
E(eV)	60,34	60,149	60,154	60.1901	60.151
$\Gamma$ (eV)	0,0375	$0,0368 \pm 0,06$	0,0378	0,036 331	0,0383
$\sigma_0(10^{-18} \text{ cm}^2)$	1,4909	-----	1,4011	1,3865	1,374
$\sigma_a(10^{-18} \text{ cm}^2)$	1,4909	-----	-----	-----	-----
$\sigma_b(10^{-18} \text{ cm}^2)$	$1,0304 \cdot 10^{-7}$	-----	-----	-----	-----
$\rho^2$	0,999	-----	0,9984	-----	---
q	-2,86	-----	-2,73	-2,8521	-2,83

**Tableau III** : *Présents résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation de l'ion  $Li^+$  à l'état excité  $2s2p$  ( $^1P^0$ ) comparés avec des résultats théoriques. Les énergies sont données en electron-volt (eV) et la section efficace en  $10^{-18} cm^2$ . Conversion utilisée  $1u.a=27,211396eV=2Ry$ .*

Les différents travaux	Présent travail Méthode de la diagonalisation	Bin Zhou et al [61]	Sanchez et Martin [62]	A. K. Bhatia et A. Temkin[42]	Caroll et Kennedy [63]
E(eV)	150,642	150.260	150,295	150.2470	150,29
$\Gamma$ (eV)	0,0621	0,0648	0,0622	0,0593	$0,075 \pm 0,025$
$\sigma_0$ ( $10^{-18} cm^2$ )	0,8910	0,5759	0,573	-----	-----
$\sigma_a$ ( $10^{-18} cm^2$ )	0,8910	-----	-----	-----	-----
$\sigma_b$ ( $10^{-18} cm^2$ )	$-0,2214 \cdot 10^{-7}$	-----	-----	-----	-----
$\rho^2$	1,000	1,0029	-----	-----	-----
q	-1,534	-1,96	-2,20	-2,199	$-1,5 \left\{ \begin{array}{l} +0,3 \\ -0,5 \end{array} \right\}$

**Tableau IV** : *Présents résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation des ions  $C^{4+}$  à l'état excité  $2s2p$  ( $^1P^0$ ) comparés avec des résultats théoriques. Les énergies sont données en electron-volt (eV) et la section efficace en  $10^{-18} \text{ cm}^2$ . Conversion utilisée  $1u.a=27,211396 \text{ eV}=2 \text{ Ry}$ .*

Les différents Travaux	Présent travail Méthode de la diagonalisation	Bin Zhou 1993	Sanchez et Martin 1990
E(eV)	666,960	666,287	-----
$\Gamma$ (eV)	0,1046	0,0914	-----
$\sigma_0$ ( $10^{-18} \text{ cm}^2$ )	0,1491	0,1298	0,13
$\sigma_a$ ( $10^{-18} \text{ cm}^2$ )	0,1491	-----	-----
$\sigma_b$ ( $10^{-18} \text{ cm}^2$ )	$-0,07102 \cdot 10^{-7}$	-----	-----
$\rho^2$	1,000	0,9993	-----
q	-1,1978	-1,74	-1,72

**Tableau V** : Présents résultats sur la section efficace à l'absence de la résonance, la largeur de la résonance, le coefficient de corrélation et l'indexe de profil de la photoionisation des ions  $Be^{2+}$ ,  $B^{3+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $F^{7+}$  et  $Ne^{8+}$  à l'état excité  $2s2p$  ( $^1P^0$ ). Les énergies sont données en electron-volt (eV) et la section efficace en  $10^{-18} \text{ cm}^2$ . Conversion utilisée  $1u.a=27,211396 \text{ eV}=2 \text{ Ry}$ .

Les différents travaux	$Be^{2+}$	$B^{3+}$	$N^{5+}$	$O^{6+}$	$F^{7+}$	$Ne^{8+}$
$E(\text{eV})$	281,894	453,674	919 ,943	1214,293	1549,456	1925.433
$\Gamma(\text{eV})$	0,0810	0,0944	0,1125	0,1188	0,1239	0,1282
$\sigma_0 (10^{-18} \text{ cm}^2)$	-----	-----	0,05949	0,05839	-----	0,0270
$\sigma_a (10^{-18} \text{ cm}^2)$	-----	-----	0,05949	0,05839	-----	0,0270
$\sigma_b (10^{-18} \text{ cm}^2)$	-----	-----	$0,0121 \cdot 10^{-7}$	$0,0699 \cdot 10^{-7}$	-----	$-0,0710 \cdot 10^{-7}$
$\rho^2$	0,999	0,999	0,999	1 ,000	0,999	1,000
q	-1,366	-1,193	-1,220	-1,252	-1,332	-1,386

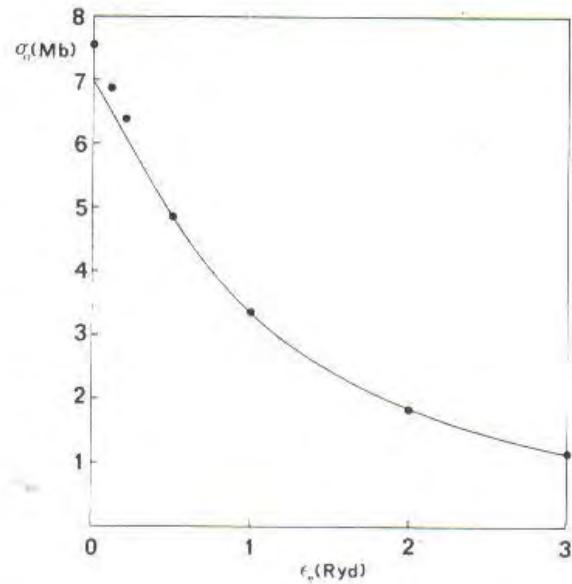


Figure 1. La section efficace de photoabsorption à l'absence de la résonance de l'hélium,  $\sigma_0$ , fonction de l'énergie de l'électron du continuum  $\epsilon_e$  (Rydberg). Données expérimentales de West and Marr(1976) [65].

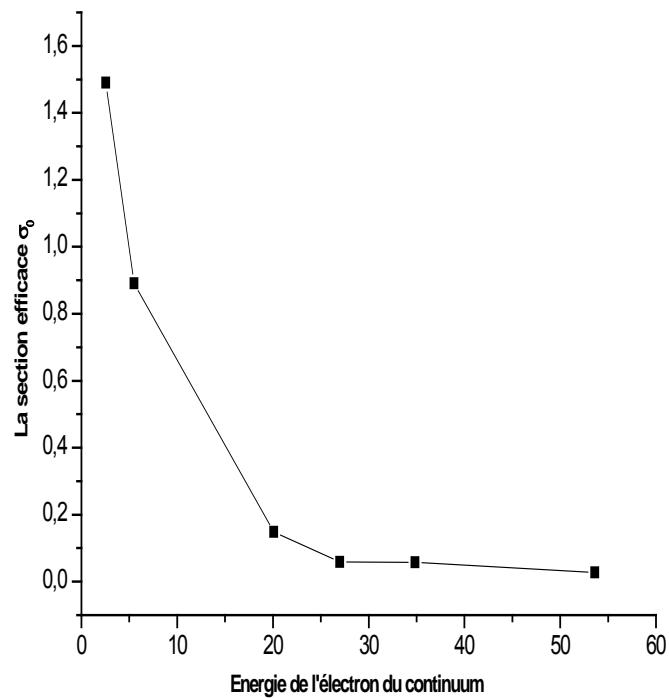


Figure 2 : Présent travail : la section efficace de photoabsorption à l'absence de la résonance  $\sigma_0$ , en fonction de l'énergie de l'électron du continuum. L'énergie de l'électron du continuum est en Rydberg et la section efficace en  $10^{-18} \text{cm}^2$ .

## **Conclusion**

Dans le cadre de la méthode de diagonalisation, nous avons effectué les calculs portant sur la largeur des niveaux d'autoionisation, la section efficace à l'absence de la résonance, la partie de la section efficace contenant l'effet de l'interférence de la résonance avec le spectre continu, la partie de la section efficace ne contenant pas l'effet de l'interférence de la résonance avec le spectre continu, le facteur de corrélation et l'indexe de profil, pour l'état  $2s2p(^1P^0)$  de l'hélium et des ions héliumoïdes  $Li^+$ ,  $Be^{2+}$ ,  $B^{3+}$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $F^{7+}$  et  $Ne^{8+}$ .

Ces calculs ont permis de trouver des résultats plus complets sur les paramètres résonants de l'état  $2s2p(^1P^0)$ . Les travaux théoriques qui ont été faits auparavant, à part l'hélium, se sont limités aux ions  $Li^+$  et  $C^{4+}$ . Les résultats que nous avons obtenus sont en très bon accord avec les résultats théoriques disponibles pour ce qui concerne l'énergie, la largeur, la section efficace en l'absence de la résonance et le coefficient de corrélation. Pour l'hélium, l'accord est parfait, aussi bien pour les résultats théoriques, que pour les résultats expérimentaux. En dehors de l'hélium, le seul ion pour lequel nous avons trouvé dans la littérature un résultat expérimental, est l'ion  $Li^+$ , et dans ce cas aussi, notre résultat est en bon accord avec ce résultat expérimental. La différence constatée entre notre résultat et ceux de la théorie, pour ce qui concerne l'indexe de profil à partir de l'ion  $Li^+$ , pourrait trouver une réponse adéquate si d'autres résultats expérimentaux étaient disponibles. Cependant, le très bon accord trouvé entre l'indexe de profil que nous avons et celui donné par l'expérience et la théorie pour le cas de l'hélium, nous conforte dans l'idée que le choix de la méthode de diagonalisation pour ce calcul reste correct. En comparaison avec les autres méthodes théoriques plus complexes et plus difficiles en termes de calcul, la méthode de diagonalisation donne une description valable des

paramètres résonants de la photoionisation. Ainsi la méthode de diagonalisation utilisée dans notre travail a permis la simplification des calculs de la photoabsorption résonante tout en donnant des résultats conformes aux résultats obtenus par d'autres méthodes plus compliquées [64].

Durant ces deux dernières décennies, on a vu évoluer la compréhension du problème coulombien à trois corps sur le plan théorique, il n'en est pas de même sur le plan expérimental qui depuis les premières expériences de Madden et Codling [4,5] n'a pas fourni beaucoup de résultats, surtout pour les ions ayant une charge  $Z$  supérieure à 3.

Dans le but d'approfondir, la connaissance que nous avons de la photoionisation de ces systèmes héliumoïdes, il serait utile dans le cadre d'un travail futur, d'étendre les calculs que nous avons fait à des seuils d'ionisation plus élevés, mais aussi de s'intéresser à d'autres paramètres, tels que les rapports de branchement. Il nous semble aussi important, d'étudier d'autres systèmes atomiques plus lourds possédant un cœur électronique (Mg, Ba,...), pour lesquels certains effets spécifiques comme le couplage spin-orbite deviennent importants.

## Annexe I

### **Calcul des éléments matriciels des transitions vers le continuum et vers l'état d'autoionisation**

Les éléments matriciels de transitions utilisés, interviennent dans la détermination de l'indexe de profil de la photoabsorption qui est sous la forme suivante :

$$q = \frac{\langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle}{\pi \sum_k \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle \langle \phi_k(E) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle} \quad \text{A1}$$

Pour montrer la méthode de résolution des intégrales qui sortent de ces éléments matriciels, on peut se limiter à l'élément matriciel dipolaire de l'état initial vers l'état excité 2s2p et à celui de l'état excité vers le continuum car on y rencontre tous les types d'intégrales de notre étude.

$$\begin{aligned} \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \\ 2^{-1/2} \sum_{m_1 m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle \langle \{ R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) R n_2 l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \\ + R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) R n_2 l_2(r_1) Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \} | \vec{r}_1 + \vec{r}_2 | \\ 4\pi N \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \{ 1 + c_1 r_{12} + c_2 (r_1 - r_2)^2 + c_3 (r_1 + r_2) + c_4 (r_1 + r_2)^2 \\ + c_5 r_{12}^2 \} Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \} \quad \text{A2} \end{aligned}$$

Dans (A2), le coefficient  $\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle$  de Clebsch-Gordan s'exprime sous la forme suivante :

$$\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | LM \rangle = (-1)^{-l_1 + l_2 - M} (2L + 1)^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix} \quad \text{A3}$$

Où  $\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{pmatrix}$  représentent les symboles 3j Wigner [58].

$\vec{r}_i$  est l'opérateur position de l'électron  $i$  et il est défini par :

$$\vec{r}_i = r_i \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} Y_{1\lambda}(\theta_i, \varphi_i) \quad \text{A4}$$

Le facteur de corrélation  $r_{12}$  s'exprime sous la forme suivante :

$$r_{12} = \sum_{k'q} \frac{4\pi}{2k'+1} \left( \frac{r^{k'+2} <}{r^{k'+1} > (2k'+3)} - \frac{r^{k'} <}{r^{k'-1} > (2k'-1)} \right) Y_{k'q}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) \quad \text{A5}$$

Et son carré  $r_{12}^2$  s'exprime sous la forme :

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) \quad \text{A6}$$

En utilisant les relations A3, A4, A5 et A6 on a :

$$\begin{aligned} & \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \\ & \frac{4\pi N}{\sqrt{2}} \left( \frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} \sum_{m_1 m_2} (-1)^{-l_1 + l_2 - M} (2L+1)^{1/2} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & L \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \{ \\ & \left[ \langle Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) | Y_{1\lambda}(\theta_1, \varphi_1) | Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \langle Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) | Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \times \right. \\ & \left. \langle Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) | r_1 | F(r_1, r_2) \rangle \right] + \left[ \langle Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) | Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \times \right. \\ & \left. \langle Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) | Y_{1\lambda}(\theta_1, \varphi_1) | Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \langle Rn_1 l_1(r_2) Rn_2 l_2(r_1) | r_1 | F(r_1, r_2) \rangle \right] + \\ & \left[ \langle Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) | Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \langle Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) | Y_{1\lambda}(\theta_2, \varphi_2) | Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \times \right. \\ & \left. \langle Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) | r_2 | F(r_1, r_2) \rangle \right] + \left[ \langle Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) | Y_{1\lambda}(\theta_2, \varphi_2) | Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \times \right. \\ & \left. \langle Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) | Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \langle Rn_1 l_1(r_2) Rn_2 l_2(r_1) | r_2 | F(r_1, r_2) \rangle \right] + \\ & \sum_{m=-l}^l - \frac{4\pi c_5}{2l+1} \left[ \langle Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) | Y_{1\lambda}(\theta_1, \varphi_1) | Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \times \right. \\ & \langle Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) | Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \times \\ & \left. \langle Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) | r_1 | \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) 2r_1 r_2 \rangle \right] + \\ & \left[ \langle Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) | Y_{1\lambda}(\theta_1, \varphi_1) | Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \langle Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) | Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \times \right. \\ & \left. \langle Rn_1 l_1(r_2) Rn_2 l_2(r_1) | r_1 | \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) 2r_1 r_2 \rangle \right] + \\ & \left[ \langle Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) | Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \rangle \langle Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) | Y_{1\lambda}(\theta_2, \varphi_2) | Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \rangle \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left[ \left\langle Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) \middle| r_2 \middle| \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) 2r_1 r_2 \right\rangle \right] + \\
& \left[ \left\langle Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{1\lambda}(\theta_2, \varphi_2) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
& \left. \left\langle Rn_1 l_1(r_2) Rn_2 l_2(r_1) \middle| r_2 \middle| \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) 2r_1 r_2 \right\rangle \right] + \\
& \sum_{k'q} \frac{4\pi c_1}{2k' + 1} \left[ \left\langle Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{1\lambda}(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{k'q}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \times \right. \\
& \left. \left\langle Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \times \right. \\
& \left. \left\langle Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) \middle| r_1 \middle| \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \left( \frac{r^{k'+2} <}{r^{k'+1} > (2k' + 3)} - \frac{r^{k'} <}{r^{k'-1} > (2k' - 1)} \right) \right\rangle \right] + \\
& \left[ \left\langle Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{1\lambda}(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{k'q}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \times \right. \\
& \left. \left\langle Rn_1 l_1(r_2) Rn_2 l_2(r_1) \middle| r_1 \middle| \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \left( \frac{r^{k'+2} <}{r^{k'+1} > (2k' + 3)} - \frac{r^{k'} <}{r^{k'-1} > (2k' - 1)} \right) \right\rangle \right] + \\
& \left[ \left\langle Yl_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{k'q}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Yl_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{1\lambda}(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
& \left. \left\langle Rn_1 l_1(r_1) Rn_2 l_2(r_2) \middle| r_2 \middle| \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \left( \frac{r^{k'+2} <}{r^{k'+1} > (2k' + 3)} - \frac{r^{k'} <}{r^{k'-1} > (2k' - 1)} \right) \right\rangle \right] + \\
& \left[ \left\langle Yl_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \middle| Y_{k'q}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Yl_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{1\lambda}(\theta_2, \varphi_2) \middle| Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
& \left. \left\langle Rn_1 l_1(r_2) Rn_2 l_2(r_1) \middle| r_2 \middle| \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \left( \frac{r^{k'+2} <}{r^{k'+1} > (2k' + 3)} - \frac{r^{k'} <}{r^{k'-1} > (2k' - 1)} \right) \right\rangle \right]
\end{aligned}$$

A7

Où

$$F(r_1, r_2) = \exp(-\alpha(r_1 + r_2)) \left[ 1 + (c_2 + c_4 + c_5)(r_1^2 + r_2^2) + c_3(r_1 + r_2) + 2(c_4 - c_2)r_1 r_2 \right]$$

A8

Pour l'élément matriciel de l'opérateur de l'interaction électrostatique vers le continuum on a la relation suivante :

$$\begin{aligned}
\langle \psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_2} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_1 l_2 LM \rangle \sum_{m_1' m_2'} \langle l_1 l_2 m_1' m_2' | l_1 l_2 LM' \rangle \times \\
&\left\langle \left\{ R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) R n_2 l_2(r_2) Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) + \right. \right. \\
&R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) R n_2 l_2(r_1) Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) \} \left| \sum_{k'=0}^{+\infty} \frac{4\pi}{2k'+1} \times \right. \\
&\left. \left. \frac{r^{k'}}{r^{k'+1}} < \sum_{q=-k'}^{k'} Y_{k'q}(\theta_1, \varphi_1) Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) \right\} R n_1 l_1(r_1) Y l_1 m_1'(\theta_1, \varphi_1) \times \right. \\
&\left. \left. R \varepsilon l_2(r_2) Y l_2 m_2'(\theta_2, \varphi_2) + R n_1 l_1(r_2) Y l_1 m_1'(\theta_2, \varphi_2) R \varepsilon l_2(r_1) Y l_2 m_2'(\theta_1, \varphi_1) \right\} \right\rangle \quad \text{A9}
\end{aligned}$$

Ici  $m_1 = m_1'$  et  $m_2 = m_2'$ . On les identifie car on a un produit de deux sommes de mêmes variables.

Si on sépare les intégrales angulaires et les intégrales radiales :

$$\begin{aligned}
\langle \psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{k'=0}^{+\infty} \sum_{q=-k'}^{k'} \frac{4\pi}{2k'+1} \sum_{m_1 m_2} \sum_{m_1' m_2'} (-1)^{-M-M'} (2L+1) \binom{l_1 l_2 L}{m_1 m_2 - M} \binom{l_1 l_2 L}{m_1' m_2' - M'} \times \\
&\left[ \left\langle Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) | Y_{k'q}(\theta_1, \varphi_1) | Y l_1 m_1'(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) | Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) | Y l_2 m_2'(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
&\left. \left\langle R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) \left| \frac{r^{k'}}{r^{k'+1}} \right. \right| R n_1 l_1(r_1) R \varepsilon l_2(r_2) \right] + \\
&\left[ \left\langle Y l_1 m_1(\theta_1, \varphi_1) | Y_{k'q}(\theta_1, \varphi_1) | Y l_2 m_2'(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Y l_2 m_2(\theta_2, \varphi_2) | Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) | Y l_1 m_1'(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
&\left. \left\langle R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) \left| \frac{r^{k'}}{r^{k'+1}} \right. \right| R n_1 l_1(r_2) R \varepsilon l_2(r_1) \right] + \\
&\left[ \left\langle Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) | Y_{k'q}(\theta_1, \varphi_1) | Y l_1 m_1'(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) | Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) | Y l_2 m_2'(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
&\left. \left\langle R n_1 l_1(r_2) R n_2 l_2(r_1) \left| \frac{r^{k'}}{r^{k'+1}} \right. \right| R n_1 l_1(r_1) R \varepsilon l_2(r_2) \right] + \\
&\left[ \left\langle Y l_2 m_2(\theta_1, \varphi_1) | Y_{k'q}(\theta_1, \varphi_1) | Y l_2 m_2'(\theta_1, \varphi_1) \right\rangle \left\langle Y l_1 m_1(\theta_2, \varphi_2) | Y_{k'q}(\theta_2, \varphi_2) | Y l_1 m_1'(\theta_2, \varphi_2) \right\rangle \right. \\
&\left. \left\langle R n_1 l_1(r_2) R n_2 l_2(r_1) \left| \frac{r^{k'}}{r^{k'+1}} \right. \right| R n_1 l_1(r_2) R \varepsilon l_2(r_1) \right] \quad \text{A10}
\end{aligned}$$

Dans notre cas où l'atome d'hélium ou les ions héliumoides sont portés à l'état d'autoionisation 2s2p et leur ion résiduel à l'état 1s1p on a :

$n_1 = 2$  ;  $l_1 = 0$  ce qui entraîne  $m_1 = 0$

$n_2 = 2$  ;  $l_2 = 1$  ce qui entraîne  $m_2 = \{-1, 0, 1\}$

En utilisant la relation

$$Y_{k'q}^*(\theta_i, \varphi_i) Y_{1\lambda}(\theta_i, \varphi_i) = (-1)^q \sum_{L,M} \sqrt{\frac{3}{4\pi} (2k'+1)(2L+1)} \begin{pmatrix} k' & 1 & L \\ -q & \lambda & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' & 1 & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} Y_{L,M}^*(\theta_i, \varphi_i)$$

A11

On va passer d'élément matriciel angulaire de type :

$$\langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{k'q}^*(\theta_i, \varphi_i) Y_{1\lambda}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle \quad A12$$

à l'élément matriciel angulaire de type :

$$\langle Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{LM}(\theta_i, \varphi_i) | Y_{00}(\theta_i, \varphi_i) \rangle = (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(2L+1)}{4\pi} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} l & L & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & L & 0 \\ -m & M & 0 \end{pmatrix}$$

A13

Et on a aussi :

$$\langle Y_{l'm'}(\theta_j, \varphi_j) | Y_{00}(\theta_j, \varphi_j) \rangle = \delta_{l'0} \delta_{m'0} \quad A14$$

$\begin{pmatrix} l & L & 0 \\ m & M & 0 \end{pmatrix}$  est un symbole 3j de Wigner Eckart [58]

Il se calcule de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} l & L & 0 \\ m & M & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{L-m} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \delta_{l,L} \delta_{-m,M}$$

A15

Après utilisation de toutes les relations nécessaires pour le calcul de la partie angulaire on a :

$$\begin{aligned} \langle \phi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \vec{D} | \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle &= 4\pi N \sqrt{2} \times \\ &\left\{ \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^{+\infty} e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_2 R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) F(r_1, r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 + \right. \end{aligned}$$

$$\int_0^{+\infty} e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1 R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \left[ \frac{c_1}{3\sqrt{3}} \left( \frac{r^3}{r^2} - r^1 \right) - \frac{2c_5 r_1 r_2}{3\sqrt{3}} \right] \times r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \} \quad \text{A16}$$

et

$$\begin{aligned} \langle \psi_\mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \hat{V} | \phi_k(E) \rangle = & \left\{ \int_0^{+\infty} R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) \frac{1}{r} R n_1 l_1(r_1) R \epsilon l_2(r_2) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 + \right. \\ & \left. \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} R n_1 l_1(r_1) R n_2 l_2(r_2) \frac{r}{r^2} R n_1 l_1(r_2) R \epsilon l_2(r_1) r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \right\} \end{aligned} \quad \text{A17}$$

Dans ces expressions ci-dessus, les fonctions radiales  $Rnl(r)$  des états liés de l'ion résiduel et  $R\epsilon l(r)$  de l'électron éjecté sont données par les expressions suivantes :

$$Rnl(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \left[ \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \left( \frac{2Z}{n} \right)^{l+3/2} \exp(-Zr/n) {}_1F_1(-(n-l-1), 2l+2, 2Zr/n) \quad \text{A18}$$

Et

$$R\epsilon l(r) = \frac{2\sqrt{Z-1}}{\sqrt{1-\exp[-2\pi((Z-1)/k)]}} \prod_{s=1}^l \sqrt{s^2 + \left(\frac{Z-1}{k}\right)^2} \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} \exp(-ikr) \times {}_1F_1\left(i\frac{(Z-1)}{k} + l + 1, 2l + 2, 2ikr\right) \quad \text{A19}$$

$$Rnl(r) = -\frac{1}{(2l+1)!} \left[ \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \left( \frac{2Z}{n} \right)^{l+3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{n}\right) r^l L_{n+l}^{2l+1}(2Zr/n) \quad \text{A20}$$

ici, on utilise l'expression des polynômes associés de Laguerre  $L_{n+l}^{2l+1}(2Zr/n)$  qui s'écrivent d'après Rodrigue [58] sous la forme suivante :

$$L_{n+l}^{2l+1}(2Zr/n) = \sum_{s=0}^{n-l-1} \frac{(n+l)!^2 (-)^{s+1} (2Zr/n)^s}{(n-l-1)!(2l+1+s)!s!} \quad \text{A21}$$

Cette expression n'est pas une formule générale du polynôme associé de Laguerre qui est une forme intégrale, elle est vérifiée pour les niveaux  $n=1$ ,  $l=0$  et  $n=2$ ,  $l=\{0,1\}$ .

Ainsi dans le calcul des éléments matriciels, lorsque nous avons des intégrales de type connu contenant des fonctions hypergéométriques nous utiliserons l'expression suivante :

$$\int_0^\infty \exp(-\alpha x) x^\nu {}_1F_1(a, b, cx) = \frac{\Gamma(\nu+1)}{\lambda^{\nu+1}} {}_2F_1(a, \nu+1, b, c/\alpha) \quad A22$$

Et les intégrales de type inconnu contenant les  $r^<$  et  $r^>$  se calcule de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{r_i^\lambda}{r_j^{\lambda+1}} \phi(r_i) \phi(r_j) dr_i dr_j &= \int_0^\infty \phi(r_i) dr_i \left\{ \int_0^{r_i} \frac{r_j^\lambda}{r_i^{\lambda+1}} \phi(r_j) dr_j + \right. \\ &\quad \left. \int_{r_i}^\infty \frac{r_i^\lambda}{r_j^{\lambda+1}} \phi(r_j) dr_j \right\} \end{aligned} \quad A23$$

$$\int_0^{r_i} r_j^\mu \exp(-\alpha r_j) dr_j = \frac{\mu!}{\alpha^{(\mu+1)}} - \exp(-\alpha r_i) \sum_{m=0}^{\mu} \frac{\mu!}{m!} \frac{r_i^m}{\alpha^{(\mu+1-m)}} \quad A24$$

$$\int_{r_i}^\infty r_j^\mu \exp(-\alpha r_j) dr_j = \exp(-\alpha r_i) \sum_{m=0}^{\mu} \frac{\mu!}{m!} \frac{r_i^m}{\alpha^{(\mu+1-m)}} \quad A25$$

On a aussi un autre type d'intégrale qui est sous la forme suivante :

$$\int_0^\infty Rnl(r) Rn'l'(r) r^{p+2} dr \quad A26$$

Dans ce cas on va exprimer l'une des fonctions radiales par la formule A18 et l'autre par A20. Le choix dépendra de la commodité des calculs. On va se retrouver avec des intégrales de types A22.

## Annexe II

# Valeurs des constantes de la fonction d'onde initiale et des énergies d'excitation des états d'autoionisation situés sous le seuil d'excitation n=2 de l'ion résiduel pour l'hélium et les ions héliumoïdes $\text{Li}^+$ , $\text{C}^{4+}$ , $\text{N}^{5+}$ , $\text{O}^{6+}$ et $\text{Ne}^{8+}$

### AII.1 Valeurs des constantes de la fonction d'onde initiale

La fonction d'onde radiale initiale à six paramètres de type Hylleraas que nous avons utilisée est définie par l'expression suivante :

$$\psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 4\pi N \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] \left[ 1 + c_1 r_{12} + c_2 (r_1 - r_2)^2 + c_3 (r_1 + r_2) + c_4 (r_1 + r_2)^2 + c_5 r_{12}^2 \right]$$

Pour chaque système atomique considéré, le paramètre  $\alpha$ , la constante de normalisation  $N$  et les coefficients  $c_i$  sont dans le tableau suivant :

Coefficients	$\alpha$	$N$	$c_1$	$c_2$	$c_3$	$c_4$	$c_5$
He	1,755656	1,3808	0,337294	0,112519	-0,145874	0,023634	-0,037024
$\text{Li}^+$	2,784751	5,8125	0,354317	0,154657	-0,127225	0,042220	-0,066761
$\text{Be}^{2+}$	3,808557	-----	0,361318	0,197144	-0,107497	0,060818	-0,066891
$\text{B}^{3+}$	4,630494	-----	0,365071	0,239794	-0,087707	0,079658	-0,126471
$\text{C}^{4+}$	5,851559	57,9876	0,367395	0,282531	-0,067960	0,098824	-0,156343
$\text{N}^{5+}$	6,872143	84,2218	0,368970	0,325319	-0,048275	0,118349	-0,186207
$\text{O}^{6+}$	7,892429	144,3928	0,370106	0,368139	-0,028643	0,138249	-0,216066
$\text{F}^{7+}$	8,912514	-----	0,370962	0,410978	-0,009052	0,158533	-0,245919
$\text{Ne}^{8+}$	9,932455	291,6730	0,371630	0,453831	-0,010487	0,179204	-0,275769

## **AII.2 Energies des états d'autoionisation situés sous le seuil d'excitation n=2 de l'ion résiduel et de l'état de l'ion résiduel pour l'hélium et les ions héliumoïdes.**

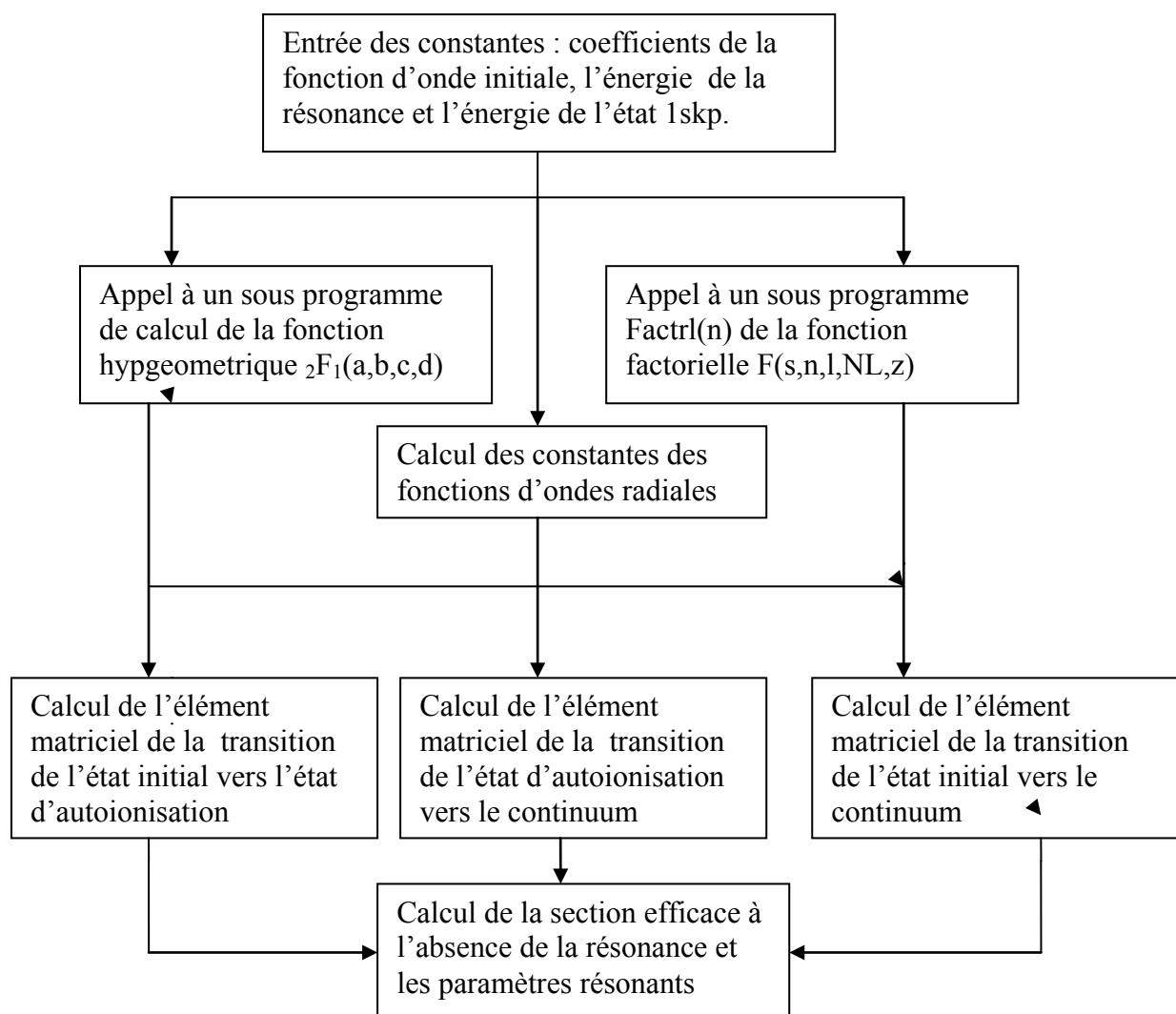
Les énergies de transitions vers les états d'autoionisation sont données dans le tableau suivant et ont été obtenues à l'approximation de la diagonalisation par Ndao [6]. Les énergies des états du continuum sont données à partir des travaux théoriques de Sakho [67]. Dans tout le travail, nous avons utilisé la conversion suivante :  $1u.a=27,211396eV=2Ry$ .

<b>Niveau</b>	<b>He</b>	<b>Li+</b>	<b>Be2+</b>	<b>B3+</b>	<b>C4+</b>	<b>N5+</b>	<b>O6+</b>	<b>F7+</b>	<b>Ne8+</b>
<b>1s1p (eV)</b>	25,72	75,64	154,98	260,42	393,08	552,94	740,02	954,31	1195,81
<b>2s2p (eV)</b>	-18,65	-47,44	-89,81	-145,79	-215,38	-298,59	-395,41	-505,83	-629,87

### Annexe III

#### Programmes principaux de calcul de la section efficace à l'absence de la résonance et des paramètres résonants de la photoionisation

Nous avons ici les programmes principaux des programmes que nous avons mis au point, pour le calcul des différentes transitions l'état initial vers l'état d'autoionisation, de l'état d'autoionisation vers le continuum et de l'état initial vers le continuum. Ces programmes sont en fortran, et tous les calculs ont été effectués sur un PC (Pentium M). Voici l'organigramme de ces programmes.



### Annexe III

Program Indexe\_Profile

Implicit none

!La déclaration des entiers

Integer::n1,n2,l1,l2,NL1,NL2,NL11,NL22,L11,L22,L00,L01

Integer::L02,L03,L04,L05,L06,L07,L08,L09

Integer::m102,m103,m105,m106,m202,m203,m205,m206

Integer::m302,m303,m305,m306

Integer::p102,p103,p105,p106,p202,p203,p205,p206

Integer::j101,j102,j103,j104,j105,j106

Integer::j201,j202,j203,j204,j205,j206

Integer::b101,b102,b103,b104,b105,b106,b107

Integer::b0102,b0103,b0105,b0106

Integer::b201,b202,b203,b204,b205,b206,b207

Integer::b0201,b0202,b0203,b0204,b0205,b0206

Integer::b0302,b0303,b0305,b0306

!La déclaration des réels

Real::KMAX,KOUNT,DXSAV,XP,YP

!les termes de la fonction factorielle doivent etre des entiers

!Gammaaua est la largeur de la résonance en unité atomique et

!GammaeV en electron volt

Real::factrl,E,E1,zz,zz1,NN,NN1,NN2,NN3,k,Gammaaua,GammaeV,Sigma0Mb

Real::c1,c2,c3,c4,c5,t1,t2,t3,t4,t5,alpha

Real::C01,Cn01a,Cn01b,Cn01c,Cn01

Real::a00,a11,a12,c11,c12,z101,z102,z103,z301

Real::Cn02a,Cn02b,Cn02c,Cn02

Real::Cd201a,Cd201b,Cd201c,Cd201d,Cd201,Cd202

Real::Cd301a,Cd301b,Cd301,Cd302a,Cd302b,Cd302

! Numer est l'élément matriciel de l'état initial à l'état excité

! Numer est un réel et tous les variables doivent etre déclarés

! comme des réels

Real::q101,q102,q103,q201,q202,q301,Numer1,Numer2,Numer

!Déclaration des fonctions du numérateur

Real::h101a,h101b,h101c,h101d,h101,h102a,h102b,h102c,h102d,h102

Real::h103a,h103b,h103c,h103d,h103,h104a,h104b,h104c,h104d,h104

Real::h105a,h105b,h105c,h105d,h105,h106a,h106b,h106c,h106d,h106

Real::h107a,h107b,h107c,h107,h108a,h108b,h108c,h108

Real::h109a,h109b,h109c,h109,h110a,h110b,h110c,h110

Real::h111a,h111b,h111c,h111,h112a,h112b,h112c,h112

Real::h113a,h113b,h113c,h113

!La déclaration des complexes

! les termes déclarés avec common nous permettent de faire appel

! aux fonctions hypgéo et factorielle

```

Complex::hypgeo,aa,bb,cc,z0,dz
Complex::qi201,qi202,qi203,qi301,qi302
Complex::ai21,ai22
Complex::zi201,zi202,zi203
Complex::zi302,zi303
!Déclaration des fonctions du dénominateurs D1
Complex::h201a,h201b,h201c,h201d,h201
Complex::h202a,h202b,h202c,h202d,h202
Complex::h203a,h203b,h203c,h203d,h203
Complex::h204a,h204b,h204c,h204d,h204
Complex::h205a,h205b,h205c,h205d,h205
Complex::h206a,h206b,h206c,h206d,h206
!Déclaration des fonctions du dénominateurs D2
! Pour les fonctions radiales de D2 on doit appliquer
! la conjugaison vu que la fonction est à l'intérieur d'un bra
Complex::h301a,h301b,h301c,h301,h302a,h302b,h302c,h302
Complex::h303a,h303b,h303c,h303,h304a,h304b,h304c,h304
Complex::h305a,h305b,h305c,h305,h306a,h306b,h306c,h306
Complex::h307a,h307b,h307c,h307,h308a,h308b,h308c,h308
Complex::h309a,h309b,h309c,h309,h310a,h310b,h310c,h310
Complex::h311a,h311b,h311c,h311,h312a,h312b,h312c,h312
Complex::h313a,h313b,h313c,h313
Complex::Index
Complex::Denom11,Denom12,Denom1,Denom21,Denom22,Denom2,Denom
Parameter PI=3.141593
Print*,'Entrer la valeur de E'
Read*,E
!E représente l'énergie à l'état excité
E1=(E-24.58)/27.21
Print*,'E1='!,E1
!E1 est l'énergie de l'électron du continuum
k=sqrt(2.*E1)
Print*,'k='!,k
! k est associé au vecteur d'onde
zz=2.
zz1=sqrt(zz-1)
NN1=(zz-1)/k
Print*,'NN1='!,NN1
NN2=sqrt(1.+NN1**2.)
Print*,'NN2='!,NN2
NN3=sqrt(1.-exp(-2.*PI*NN1))
Print*,'NN3='!,NN3
pause
! alpha, NN, c1, c2, c3, c4 et c5 représentent les constantes

```

! de la fonction d'onde de hyllérass

alpha=1.755656

NN= 1.3808

c1= 0.337294

c2= 0.112519

c3=-0.145874

c4= 0.023634

c5=-0.037024

t1=c1

t2=c2+c4+c5

t3=c3

t4=2.\* (c4-c2)

t5=c5

!Déclaration des nombres quantiques principales des deux électrons

! (n1,n2) et orbitales (l1,l2) et leur constantes utilisées dans

! le programme qui leur est associé

n1=2

n2=2

l1=0

l2=1

NL1=n1-l1-1

NL2=n2-l2-1

NL11=n1+l1

NL22=n2+l2

L11=2\*l1+1

L22=2\*l2+1

L00=l1+l2

L01=l1+l2+1

L02=l1+l2+2

L03=l1+l2+3

L04=l1+l2+4

L05=l1+l2+5

L06=l1+l2+6

L07=l1+l2+7

L08=l1+l2+8

L09=l1+l2+9

!déclaration des paramètres a de la fonction hypergéométrique

a00=0

a11=-NL1

a12=-NL2

ai21=cmplx(b201,NN1)

ai22=cmplx(b201,-NN1)

!Les termes b de la fonction hypgéométrique

b101=l1+1

```

b102=l1+2
b103=l1+3
b104=l1+4
b105=l1+5
b106=l1+6
b107=l1+7
b201=l2+1
b202=l2+2
b203=l2+3
b204=l2+4
b205=l2+5
b206=l2+6
b207=l2+7
!Déclaration des termes quotients
!Les termes c de la fonction hypgéo
c11=2.*l1+2
c12=2.*l2+2
!Déclaration des constantes
C01=4.*PI*NN*sqrt(2.)
Print*,'C01=';C01
!Déclaration des constantes du numérateur N
Cn01a=t1*(2.**L02)*(zz**L03)*sqrt(factrl(NL11))*sqrt(factrl(NL22))
Cn01b=3.*sqrt(3.)*(n1***(l1+2))*(n2***(l2+2))*factrl(L22)
Cn01c=sqrt(factrl(NL1))*sqrt(factrl(NL2))*9.
Cn01=Cn01a/(Cn01b*Cn01c)
Print*,'Cn01=';Cn01
Cn02a=(2.**L02)*(zz**L03)*sqrt(factrl(NL11))*sqrt(factrl(NL22))
Cn02b=sqrt(3.)*(n1***(l1+2))*(n2***(l2+2))*factrl(L11)*factrl(L22)
Cn02c=sqrt(factrl(NL1))*sqrt(factrl(NL2))*9.
Cn02=Cn02a/(Cn02b*Cn02c)
Print*,'Cn02=';Cn02
Pause
!les quotients réels N
q101=zz/n1+alpha
q102=zz/n2+alpha
q103=zz/n1+zz/n2+2*alpha
!Les termes z de la fonction hypgéo N
z101=1.+(n1*alpha)/zz
z102=1.+(n2*alpha)/zz
z103=1.+n1/n2+(2*n1*alpha)/zz
!Déclaration des fonctions du numérateur N
! Nous avons 13 intégrales au niveau du numérateur
! Les six premières fonctions sont de même types et elles
! ont une Cn01 qui leur est commune et les sept aussi sont

```

```

! sont aussi de meme types elles aussi avec la constantes Cn02
h101=0
do j101=0,NL1
h101a=(-1)**(j101+1))*((2.*zz)**j101)*factrl(l1+j101+6)*factrl(l2)
h101b=hypgeo(a12,b201,c12,z102)
h101c=5.*(n1**j101)*factrl(L11+j101)*factrl(j101)
h101d=(q101***(b107+j101))*(q102**b201)
h101=h101+(h101a*h101b)/(h101c*h101d)
end do
Print*,h101='h101
h102=0
do j102=0,NL1
p102=j102+b106
do m102=0,p102
b0102=l2+m102+1
h102a=(-1)**(j102+2))*((2.*zz)**j102)*factrl(l1+j102+6)*factrl(l2+m102)
h102b=hypgeo(a12,b0102,c12,z103)
h102c=5.*factrl(m102)*(n1**j102)*factrl(L11+j102)*factrl(j102)
h102d=(q101***(b107+j102-m102))*(q103**b0102)
h102=h102+(h102a*h102b)/(h102c*h102d)
end do
end do
Print*,h102='h102
h103=0
do j103=0,NL1
p103=j103+b101
do m103=0,p103
b0103=l2+m103+6
h103a=(-1)**(j103+1))*((2.*zz)**j103)*factrl(l1+j103+1)*factrl(l2+m103+5)
h103b=hypgeo(a12,b0103,c12,z103)
h103c=5.*factrl(m103)*(n1**j103)*factrl(L11+j103)*factrl(j103)
h103d=(q101***(b102+j103-m103))*(q103**b0103)
h103=h103+(h103a*h103b)/(h103c*h103d)
end do
end do
Print*,h103='h103
h104=0
do j104=0,NL1
h104a=(-1)**(j104+2))*((2.*zz)**j104)*factrl(l1+j104+4)*factrl(l2+2)
h104b=hypgeo(a12,b203,c12,z102)
h104c=(n1**j104)*factrl(L11+j104)*factrl(j104)
h104d=(q101***(b105+j104))*(q102**b203)
h104=h104+(h104a*h104b)/(h104c*h104d)
end do

```

```

Print*,h104=',h104
h105=0
do j105=0,NL1
p105=j105+b104
do m105=0,p105
b0105=l2+m105+3
h105a=(-1)**(j105+1))*((2.*zz)**j105)*factrl(l1+j105+4)*factrl(l2+m105+2)
h105b=hypgeo(a12,b0105,c12,z103)
h105c=factrl(m105)*(n1**j105)*factrl(L11+j105)*factrl(j105)
h105d=(q101***(b105+j105-m105))*(q103**b0105)
h105=h105+(h105a*h105b)/(h105c*h105d)
end do
end do
Print*,h105=',h105
h106=0
do j106=0,NL1
p106=j106+b103
do m106=0,p106
b0106=l2+m106+4
h106a=(-1)**(j106+2))*((2.*zz)**j106)*factrl(l1+j106+3)*factrl(l2+m106+3)
h106b=hypgeo(a12,b0106,c12,z103)
h106c=factrl(m106)*(n1**j106)*factrl(L11+j106)*factrl(j106)
h106d=(q101***(b104+j106-m106))*(q103**b0106)
h106=h106+(h106a*h106b)/(h106c*h106d)
end do
end do
Print*,h106=',h106
h107a=-2*t5*factrl(l1+4)*factrl(l2+3)
h107b=hypgeo(a11,b105,c11,z101)*hypgeo(a12,b204,c12,z102)
h107c=3.*(q101**b105)*(q102**b204)
h107=(h107a*h107b)/h107c
Print*,h107=',h107
h108a=factrl(l1+2)*factrl(l2+3)
h108b=hypgeo(a11,b103,c11,z101)*hypgeo(a12,b204,c12,z102)
h108c=(q101**b103)*(q102**b204)
h108=(h108a*h108b)/h108c
Print*,h108=',h108
h109a=t3*factrl(l1+3)*factrl(l2+3)
h109b=hypgeo(a11,b104,c11,z101)*hypgeo(a12,b204,c12,z102)
h109c=(q101**b104)*(q102**b204)
h109=(h109a*h109b)/h109c
Print*,h109=',h109
h110a=t3*factrl(l1+2)*factrl(l2+4)
h110b=hypgeo(a11,b103,c11,z101)*hypgeo(a12,b205,c12,z102)

```

```

h110c=(q101**b103)*(q102**b205)
h110=(h110a*h110b)/h110c
Print*,h110
h111a=t4*factrl(l1+3)*factrl(l2+4)
h111b=hypgeo(a11,b104,c11,z101)*hypgeo(a12,b205,c12,z102)
h111c=(q101**b104)*(q102**b205)
h111=(h111a*h111b)/h111c
Print*,h111
h112a=t2*factrl(l1+4)*factrl(l2+3)
h112b=hypgeo(a11,b105,c11,z101)*hypgeo(a12,b204,c12,z102)
h112c=(q101**b105)*(q102**b204)
h112=(h112a*h112b)/h112c
Print*,h112
h113a=t2*factrl(l1+2)*factrl(l2+5)
h113b=hypgeo(a11,b103,c11,z101)*hypgeo(a12,b206,c12,z102)
h113c=(q101**b103)*(q102**b206)
h113=(h113a*h113b)/h113c
Print*,h113
Pause
Numer1=Cn01*C01*(h101+h102+h103+h104+h105+h106)
Numer2=Cn02*C01*(h107+h108+h109+h110+h111+h112+h113)
Numer=Numer1+Numer2
Print*,Numer
Pause
! Au niveau du premier élément matriciel du dénominateur
! de l'état du continuum à l'état excité 2s2p
!Déclaration des constantes du dénominateur D1
Cd201a=(2.**2*(l2+l1+4))*zz1*(zz**2*(l1+l2+9./2.))*sqrt(factrl(NL11))
Cd201b=sqrt(factrl(NL22))*NN2*(k**l2)
Cd201c=(n1**2*(l1+2))*(n2**2*(l2+2))*(factrl(L22)**2.)*sqrt(factrl(NL1))
Cd201d=sqrt(factrl(NL2))*NN3*9.
Cd201=(Cd201a*Cd201b)/(Cd201c*Cd201d)
Print*,Cd201
Cd202=Cd201/3.
Print*,Cd202
!les quotients réels D1
q201=zz/n1+zz
q202=zz/n2+zz
!Les quotients complexes D1
qi201=cmplx(zz/n1,k)
qi202=cmplx(zz/n2,k)
qi203=cmplx(zz/n1+zz/n2+zz,k)
!Les termes z de la fonction hypgéo
zi201=2./cmplx(1.,-zz/(n1*k))

```

```

zi202=2./cmplx(1.,-zz/(n2*k))
zi203=2./cmplx(1.,-zz/(n1*k)-zz/(n2*k)-zz/k)
Pause
!Déclaration des fonctions du dénominateur D1
!Ici nous avons six intégrales
h201=0
do j201=0,NL1
b0201=2*l2+2
h201a=(-1)**(j201)*((2.*zz)**(j201))*factrl(l1+j201+2)*factrl(L22)
h201b=hypgeo(ai21,b0201,c12,zi202)
h201c=(n1**(j201))*factrl(2*l1+1+j201)*factrl(j201)
h201d=(q201**(l1+j201+3))*(qi202**b0201)
h201=h201+(h201a*h201b)/(h201c*h201d)
end do
Print*,h201=h201
h202=0
do j202=0,NL1
p202=j202+b102
do m202=0,p202
b0202=L22+m202+1
h202a=(-1)**(j202+1)*((2*zz)**(j202))*factrl(b102+j202)*factrl(L22+m202)
h202b=hypgeo(ai21,b0202,c12,zi203)
h202c=(n1**j202)*factrl(2*l1+1+j202)*factrl(j202)*factrl(m202)
h202d=(q201**(b103+j202-m202))*(qi203**b0202)
h202=h202+(h202a*h202b)/(h202c*h202d)
end do
end do
Print*,h202=h202
h203=0
do j203=0,NL1
p203=j203+b101
do m203=0,p203
b0203=L22+m203+2
h203a=(-1)**(j203)*((2*zz)**(j203))*factrl(b101+j203)*factrl(L22+m203+1)
h203b=hypgeo(ai21,b0203,c12,zi203)
h203c=(n1**j203)*factrl(2*l1+1+j203)*factrl(j203)*factrl(m203)
h203d=(q201**(b102+j203-m203))*(qi203**b0203)
h203=h203+(h203a*h203b)/(h203c*h203d)
end do
end do
Print*,h203=h203
h204=0
do j204=0,NL1
b0204=L01+j204

```

```

h204a=(-1)**(j204))*((2*zz)**(j204))*factrl(L2+3)*factrl(L00+j204)
h204b=hypgeo(ai21,b0204,c12,zi201)
h204c=(n1**j204)*factrl(2*l1+1+j204)*factrl(j204)
h204d=(q202**b204)*(q1201**b0204)
h204=h204+(h204a*h204b)/(h204c*h204d)
end do
Print*,h204=',h204
h205=0
do j205=0,NL1
do m205=0,b203
b205=L01+j205+m205
h205a=(-1)**(j205+1))*((2*zz)**(j205))*factrl(l2+3)*factrl(L00+m205+j205)
h205b=hypgeo(ai21,b0205,c12,zi203)
h205c=(n1**j205)*factrl(2*l1+1+j205)*factrl(j205)*factrl(m205)
h205d=(q202**b204-m205)*(q1203**b0205)
h205=h205+(h205a*h205b)/(h205c*h205d)
end do
end do
Print*,h205=',h205
h206=0
do j206=0,NL1
do m206=0,l2
b206=L04+j206+m206
h206a=(-1)**(j206))*((2*zz)**(j206))*factrl(l2)*factrl(L03+m206+j206)
h206b=hypgeo(ai21,b0206,c12,zi203)
h206c=(n1**j206)*factrl(2*l1+1+j206)*factrl(j206)*factrl(m206)
h206d=(q202**b201-m206)*(q1203**b0206)
h206=h206+(h206a*h206b)/(h206c*h206d)
end do
end do
Print*,h206=',h206
Pause
Denom11=Cd201*(h201+h202+h203)
Denom12=Cd202*(h204+h205+h206)
Denom1=Denom11+Denom12
Print*,Denom1=',Denom1
Pause
!Déclaration des constantes du dénominateur D2
!Nous avons ici l'élément mariciel de l'initial à l'état excité 2s2p
Cd301a=t1*(2.**l2+2))*(zz**3./2.)*zz1*NN2*(k**l2)
Cd301b=3.*sqrt(3.)*factrl(L22)*NN3*3.
Cd301=Cd301a/Cd301b
Print*,Cd301=',Cd301
Cd302a=(2**l2+2)*(zz**3./2.)*zz1*NN2*(k**l2)

```

```

Cd302b=sqrt(3.)*factrl(L22)*NN3*3.
Cd302=Cd302a/Cd302b
Print*,'Cd302=',Cd302
!les quotients réels D2
q301=alpha+zz
!Les quotients complexes D2
qi301=cmplx(alpha,-k)
qi302=cmplx(2*alpha+zz,-k)
!Les termes z de la fonction hypgéo
z301=2./(1.+alpha/zz)
zi302=2./cmplx(1.,alpha/k)
zi303=2./cmplx(1.,2*alpha/k+zz/k)
!Déclaration des fonctions du dénominateur D2
h301a=factrl(l1+6)*factrl(l2)
h301b=hypgeo(ai22,b201,c12,zi302)
h301c=5*(q301**b107)*(qi301**b201)
h301=(h301a*h301b)/h301c
Print*,'h301=',h301
h302=0
do m302=0,b106
b0302=l2+m302+1
h302a=-factrl(l1+6)*factrl(l2+m302)
h302b=hypgeo(ai22,b0302,c12,zi303)
h302c=5*factrl(m302)*(q301**b107)*(qi302**b0302)
h302=h302+(h302a*h302b)/h302c
end do
Print*,'h302=',h302
h303=0
do m303=0,b101
b0303=l2+m303+6
h303a=factrl(l1+1)*factrl(l2+m303+5)
h303b=hypgeo(ai22,b0303,c12,zi303)
h303c=5*factrl(m303)*(q301**b102)*(qi302**b0303)
h303=h303+(h303a*h303b)/h303c
end do
Print*,'h303=',h303
h304a=-factrl(l1+4)*factrl(l2+2)
h304b=hypgeo(ai22,b203,c12,zi302)
h304c=(q301**b105)*(qi301**b203)
h304=(h304a*h304b)/h304c
Print*,'h304=',h304
h305=0
do m305=0,b104
b0305=l2+m305+3

```

```

h305a=factrl(l1+4)*factrl(l2+m305+2)
h305b=hypgeo(ai22,b0305,c12,zi303)
h305c=factrl(m305)*(q301**(b105-m305))*(qi302**b0305)
h305=h305+(h305a*h305b)/h305c
end do
Print*,h305=',h305
h306=0
do m306=0,b103
b0306=l2+m306+4
h306a=-factrl(l1+3)*factrl(l2+m306+3)
h306b=hypgeo(ai22,b0306,c12,zi303)
h306c=factrl(m306)*(q301**(b104-m306))*(qi302**b0306)
h306=h306+(h306a*h306b)/h306c
end do
Print*,h306=',h306
h307a=-2*t5*factrl(l1+4)*factrl(l2+3)
h307b=hypgeo(a00,b105,c11,z301)*hypgeo(ai22,b204,c12,zi302)
h307c=3.*(q301**b105)*(qi301**b204)
h307=(h307a*h307b)/h307c
Print*,h307=',h307
h308a=factrl(l1+2)*factrl(l2+3)
h308b=hypgeo(a00,b103,c11,z301)*hypgeo(ai22,b204,c12,zi302)
h308c=(q301**b103)*(qi301**b204)
h308=(h308a*h308b)/h308c
Print*,h308=',h308
h309a=t3*factrl(l1+3)*factrl(l2+3)
h309b=hypgeo(a00,b104,c11,z301)*hypgeo(ai22,b204,c12,zi302)
h309c=(q301**b104)*(qi301**b204)
h309=(h309a*h309b)/h309c
Print*,h309=',h309
h310a=t3*factrl(l1+2)*factrl(l2+4)
h310b=hypgeo(a00,b103,c11,z301)*hypgeo(ai22,b205,c12,zi302)
h310c=(q301**b103)*(qi301**b205)
h310=(h310a*h310b)/h310c
Print*,h310=',h310
h311a=t4*factrl(l1+3)*factrl(l2+4)
h311b=hypgeo(a00,b104,c11,z301)*hypgeo(ai22,b205,c12,zi302)
h311c=(q301**b104)*(qi301**b205)
h311=(h311a*h311b)/h311c
Print*,h311=',h311
h312a=t2*factrl(l1+4)*factrl(l2+3)
h312b=hypgeo(a00,b105,c11,z301)*hypgeo(ai22,b204,c12,zi302)
h312c=(q301**b105)*(qi301**b204)
h312=(h312a*h312b)/h312c

```

```

Print*,'h312=',h312
h313a=t2*factrl(l1+2)*factrl(l2+5)
h313b=hypgeo(a00,b103,c11,z301)*hypgeo(ai22,b206,c12,zi302)
h313c=(q301**b103)*(qi301**b206)
h313=(h313a*h313b)/h313c
Print*,'h313=',h313
Denom21=C01*Cd301*(h301+h302+h303+h304+h305+h306)
Denom22=C01*Cd302*(h307+h308+h309+h310+h311+h312+h313)
Denom2=Denom21+Denom22
Print*,'Denom2=',Denom2
Pause
!Denom c'est le produit dénomiteur
Denom=PI*Denom1*Denom2
Print*,'Denom=',Denom
Pause
!C'est la largeur de la résonance calculée en unité atomique (u.a)
! On utilise l'élément matriciel du continuum à l'état excité 2s2p
Gammaua=2.*PI*((sqrt(real(Denom1)**2.+imag(Denom1)**2.))**2)
Print*,'Gammaua=',Gammaua
!C'est la largeur de la résonance calculée en électron volt (eV)
GammaeV=Gammaua*27.207
Print*,'GammaeV=',GammaeV
!La section efficace de résonance
Sigma0Mb=((sqrt(real(Denom2)**2.+imag(Denom2)**2.))*0.529E-
10)**2.)/1.E-22
Print*,'Sigma0Mb=',Sigma0Mb
Index=Numer/Denom
Print*,'Index=',Index
End Program Indexe_Profile

```

## Bibliographie

1. W.Heisenberg Z.Phys.Rev. 33,(1925)879.
2. M. Born and P. Jordan, z. Phys. Rev. 34, (1925) 858.
3. P.D.Foote and F.L.Mohler,Phys.Rev.26,(1925)195
4. U. Fano, Phys.Rev.124, 1866(1961)
5. Madden R.P. Codling K., Phys. Rev. Lett.10, 516(1963)
6. Madden R.P. codling K., Astr. J.141, 364 (1965)

7. Doschek G.A., Meekins J.F., Kreplin R.W., Chubb T.A. and Friedman H.. *Astrophys.J.* 164, 165 (1971)
8. A. Walker and H.R. Rugge, *Astrophys.J.* 164, 181 (1971)
9. James R. Harries, James P. Sullivan, S. Obara, Y. Azuma, J.G. Lambourne, and P. Hammond. *J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys.* 38 (2005) L153-L160
10. Y.K. Ho, *Phys.B: Atom.Molec.Phys.* 12, 387 (1979)
11. Y.K. Ho, *Phys.B: Atom.Molec.Phys.* 12, L543 (1979)
12. Callaway J., Ho Y.K., *J.Phys.B.* 18, 3481 (1985)
13. P.G. Burke, D.D. Mc Vicar and K. Smith, *Phys.Rev.Lett.* 11, 559 (1963)
14. Smith K., Henry R.J.W., Burke P.G., *Phys.Rev.Lett.* 157, 51 (1967)
15. V.V. Balashov, S.I. Grishanova, I.M. Kruglova and V.S. Senashenko, *Opt. Spektrosk.* 28, 859 (1970)
16. Wagué A., *Z.Phys.D: Atoms, Molecules and Clusters* 6, 337 (1987)
17. Faye. A-Thèse doctorat troisième cycle.  
Université.Cheikh.Anta.DIOP.Dakar.(1993)
18. Faye. A-Thèse doctorat d'état Université.Cheikh.Anta.DIOP.Dakar.(2002)
19. T.K. Fang, T.N. Chang. *Phys.Rev.A.* V61062704 (2000)
20. Dhez., Ederer D.L., *J.Phys.B: Atom.Molec.Phys.* 6, L59 (1973)
21. M. Domke, K. Schulz, G. Remmers, G. Kaindl. and  
D. Wintgen, *Phys.Rev.A.* 53, 1424 (1996)
22. K. Schulz, G. Kaindl, M. Domke, J.D. Bozek, P.A. Hermann, A.S. Schlachter and  
J.M. Rost, *Phys.Rev.Lett.* 77, 3086 (1996)
23. Fano U, Cooper J.W, Prats F., *Phys.Rev.Lett.* 10, 518 (1963)
24. Altick. P.L., Moore E.N. Configuration.interaction.in.the.helium continuum. –  
*Phys. Rev.*, 1966, V. 147, N. 1, p. 59-65.
25. Ramaker D.E., Schrader D.M. Multichannel configuration interaction
26. T.N. Chang, *J.Phys.B: AT.Mol.Phys.* 13, L551 (1980)
27. P.G. Burke and D.D. Mc Vicar, *Proc.Phys.Soc.*, 989 (1965)
28. Smith. K., Henry. R.J.W and Burke. P.G., *Phys.Rev.Lett.* 157, 51 (1967)
29. Burke. P.G, Seaton. M.J, *Meth.Comp.Phys.* 10, 1 (1971)

30. Conneely.M.J,Lipsky.L,Smith.K,Burke.P.G,Henry.R.J.W.,Comp.Phys.Comm. 1,306(1970)
31. Ormonde.S.,Conneely.M.J.,Phys.Rev.A.4,1432(1971)
32. Seaton.M.J.,J.Phys.B:Atom.Molec.Phys7,1817(1974)
33. Berrington.K.A.,Burke.P.G.,Chang.T.N,Chivers.A.T.,Robb.W.D,Taylor.K.T., Comp.Phys.Comm.8, 149(1974)
34. U.Kleiman,M.S.Pindzola, and F.Robicheaux.,Phys.Rev.A.72,022707(2005)
35. Balslev.E.,Combes.J.L.,Comm.Math.Phys.8,525(1975)
36. D.H.Oza, Phys. Rev. A 33, 824 (1986)
37. K.A.Berrington, P.G.Burke, W.C.Fon and K.T.Taylor, J.Phys.B.15, L 603 (1980)
38. S.Solomonson, S.L.Carter and H.P.Kelly, Phys.Rev.A.39,5111 (1989)
39. Burke.P.G.,Hibert.A,Robb.W.D.,J.Phys.B:Atom.Molec.Phys.4,153(1971)
40. H.Feschbach, Ann.Phys.19,287 (1962)
41. A.K.Bhatia and A. Temkin, Phys.Rev. A11, 2018 (1975)
42. A.K.Bhatia and A. Temkin, Phys.Rev. A29,1895 (1984)
43. C.D.Lin, Phys.Rev.A.29, 1019 (1984)
44. V.S.Senashenko and Waghé, J.Phys.B.12, L 269 (1979)
45. Wagué A. –Thèse Doctorat d'état, N. 1125, Université Paul Sabatier.Toulouse (1984)
46. Wagué A., Z.Phys.D: Atoms, Molecules and Clusters 8, 251 (1988)
47. A.S.Ndao,A.Wagué,N.A.B.Faye and A.Konté,Eur.Phys.J.D.5,327(1999)
48. A.S.Ndao,A.Wagué,N.A.B.Faye and  
A.Konté,J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.31,3489(1998)
49. M.Biaye,A.Konté,N.A.B.Faye and A.Wagué,Eur.Phys.J.D.13,21(2000)
50. N.A.B.Faye and A.Wagué,Z.Phys.D.31,37(1994)
51. N.A.B.Faye and A.Wagué,J.Phys.B:At.Mol.Opt.Phys.28,1735(1995)
52. N.A.B.Faye, A.S.Ndao, M.Biaye,A.Konté and  
A.Wagué.Phys.Rev.A.75,1(2007)
53. K.L.Bell and A.E.Kingston,J.Phys.B : At.Mol.Opt.Phys.3,1433(1971)

54. V.V.balashov,S.I.Grishanova,I.M.Kruglova and V.S.Senashenko,Opt.Spektrosk.28,859(1970)
55. V.S.Senashenko and A.Wagué,J.Phys.b.12,L 269(1979)
56. A.Wagué.Z.Phys.D-Atoms,Molecules and Clusters 15,199-202(1990)
57. Sakho. I. Thèse doctorat 3<sup>ème</sup> cycle (2007)
58. I.I.Sobel'man, Introduction to the theory of atomic spectra
59. Abramovitz M. Handbook of mathematical functions
60. Kossman S. Krassig B, Schidt V.. J. Phys. B: Atom, Molec Opt. Phys. 21. 1489(1988)
61. Bin Zhou. C.D Iin, Jian-Zhi, Tang, Shinichi Watanabe, and Michio Matsuzawa. J. Phys. B: At, Mol. Opt. Phys. 26(1993) 2555-2573.
62. I. Sanchez and F. Martin Phys. B: Mol. Opt. Phys. 23(1990) 4263-4274
63. Carroll. P. K. And Kennedy E T 1977 Phys. Rev. Lett. 38 1068
64. Burke P.G.,Taylor.A.J.-J.Phys.B: Atom.Molec.Phys.,1969,V.11,p44-45.
65. West J B and Marr G V 1976 Proc. R. Soc. 349 397
66. M. K. Chen Phys. Rev. A 56, 4537(1997).
67. Sakho.I Thèse doctorat 3ème cycle Université.C.Anfa.DIOP