

UNIVERSITE CHEIKH ANTA DIOP DE DAKAR

FACULTE DES SCIENCES ET TECHNIQUES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



THESE D'ETAT

Présentée par

Mr MAMADI BIAYE

Docteur 3^{ème} cycle

pour obtenir le titre de

Nouvelle description des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nl\,nl'$ avec $n \leq 4$ de l'hélium et des ions héliumoides de charge nucléaire $Z \leq 12$.

Docteur ès Sciences

Soutenue le 28 Mai 2005 devant la commission d'examen:

Jury

Président : Mr. Libasse Diop Professeur

Examineurs:

Mr El Hadj Abib Ngom Professeur

Mr Pierre Benoît-Cattin Professeur

Mr Marie – Teuw Niane Professeur

Mr M. Mansour Faye Maître de Conférences

Mr Ahmadou Wagué Professeur

Je dédie ce travail à mes enfants

Remerciements

Ce travail a été entièrement réalisé sous la direction du professeur Ahmadou Wagué, au Laboratoire Atomes – Lasers du Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh anta diop de Dakar. Je voudrais ici lui témoigner mes sincères remerciements et ma profonde gratitude pour toute l'assistance qu'il m'a apportée.

J'adresse mes sincères remerciements au professeur Libasse Diop, du Département de Chimie de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Que le professeur Habib Ngom, Directeur de l'Ecole Supérieure Polytechnique de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, trouve ici ma profonde gratitude pour le temps précieux qu'il m'a accordé en acceptant de juger ce travail.

J'adresse mes remerciements au professeur Pierre Benoît – Cattin de l'Université Paul Sabatier de Toulouse, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de faire un long voyage afin de juger ce travail malgré ses multiples tâches.

Je remercie sincèrement le professeur Marie – Teuw Niane, à l'UFR Sciences appliquées et Technologies de l'Université Gaston berger de Saint – Louis, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'évaluer ce travail.

J'adresse mes remerciements à Monsieur Mouhamadou Mansour Faye, Maître de conférences au Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, pour l'intérêt qu'il a accordé à ce travail en acceptant de le juger.

Ce travail a été réalisé en partie grâce à une contribution matérielle et financière de l'Office des Activités Extérieures (OAE) du Centre International de Physique Théorique (ICTP de Trieste en Italie. Je tiens à remercier très sincèrement le professeur Gallieno Denardo et le centre international de Physique Théorique Abdus Salam de Trieste pour ce soutien important. Je voudrais également remercier le programme International de Sciences Physiques de l'Université de Uppsala en Suède pour leur soutien matériel et financier.

Je voudrais remercier très sincèrement Monsieur Almamy Konté, Maître Assistant à l'UFR Mathématiques Appliquées et informatique de l'université Gaston Berger de Saint – Louis, pour son appui dans la conception du programme des calculs, utilisé dans ce travail. Mes remerciements vont également à Monsieur Ababacar Sadikhe Ndao Maître Assistant et à Madame Ndèye Arame Boye Faye Maître de Conférences, au Département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, pour leurs précieux conseils. J'associe également à ces remerciements tous les autres collègues membres du Laboratoire Atomes – Lasers pour leur soutien moral.

Je remercie le Département de Didactiques des Sciences expérimentales de la Faculté des Sciences et Technologies de l'Education et de la Formation (Ex : ENS) de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar, pour son soutien matériel et logistique. J'associe également à ces remerciements tous mes collègues du Département de Sciences Physiques et plus particulièrement le Chef de département, Monsieur Ibrahim Cissé, Maître de Conférences, pour leur soutien moral.

Avant de terminer je tiens à remercier les collègues du département de Physique de la Faculté des Sciences et Techniques de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar pour leur soutien moral.

Résumé de thèse

Titre : Nouvelle description théorique des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nlnl'$ avec $n \leq 4$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$.

Nature : Thèse de Doctorat d'Etat en Physique Atomique

Présentée par : M. Mamadi Biaye

Date de soutenance devant la commission d'examen : 28 Mai 2005 à 10 heures

Lieu : Amphi Kocc Barma Faal de la Faculté des Sciences et Technologies de l'Education et de la Formation (Ex : ENS) de l'Université Cheikh Anta Diop de Dakar.

Composition du Jury :

Président : M. Libasse Diop

Examineurs : M. El Hadji Abib Ngom
M. Pierre Benoît – Cattin
M. Marie – Teuw Niane
M. M. Mansour Faye
M. M. Ahmadou Wagué

Mots clés : corrélations électroniques, états singulets, héliumoïdes, autoionisation.

Résumé

Le présent travail est consacré aux calculs des énergies totales des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nlnl'$ avec $n \leq 4$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$ en introduisant pour la première fois des fonctions d'ondes de forme spéciale combinant des fonctions d'ondes radiales hydrogénoïdes avec les fonctions d'ondes de type Hylleraas.

Après une revue de quelques méthodes théoriques utilisées dans l'étude des états doublement excités, nous avons d'abord étudié les états singulets doublement excités $(nl)^2$ de l'hélium et des ions héliumoïdes en construisant des fonctions d'ondes de forme spéciale décrivant ces états et en calculant les énergies totales de plusieurs de ces états singulets doublement excités. Nous avons également calculé pour certains de ces états, les composantes des vecteurs propres intervenant dans la détermination des énergies totales. Ensuite nous avons étendu les études précédentes aux états singulets doublement excités $nlnl'$ de l'hélium et des ions héliumoïdes en utilisant une forme généralisée des fonctions d'ondes précédentes et en calculant les énergies totales de plusieurs de ces états singulets $nlnl'$. Tous ces calculs ont été effectués en utilisant la méthode variationnelle combinée à la théorie de l'interaction des configuration dans une base de faible dimension. Les résultats que nous avons obtenus sont en général en bon accord avec les valeurs théoriques et expérimentales disponibles.

Table des figures et des tableaux

Les figures

Figure 1	19
Figure 2	24
Figures 3a et 3b	57
Figures 3c et 4	58
Figure 5	59
Figure 6	79
Figure 7	80
Figure 8	81

Les tableaux

Tableau 1	50
Tableau 2	51
Tableau 3	52
Tableau 4	53
Tableau 5	54
Tableau 6	55
Tableau 7	56
Tableau 8	73
Tableau 9	74
Tableau 10	75
Tableau 11	76
Tableau 12	77
Tableau 13	78

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION	1
CHAPITRE I. REVUE DE QUELQUES METHODES THEORIQUES ET EXPERIMENTALES DANS L'ETUDE DES ETATS DOUBLEMENT EXCITES	6
I . 1 . Méthodes expérimentales	7
I . 1 . 1 . Excitation par impact photonique	7
I . 1 . 2 . Excitation par impact électronique	10
I . 1 . 3 . Excitation par impact ionique	11
I . 2 . Méthodes théoriques	13
I . 2 . 1 . La méthode de diagonalisation	13
I . 2 . 2 . La méthode de la théorie des groupes	18
I . 2 . 3 . La méthode des coordonnées hypersphériques	23
I . 2 . 4 . La théorie variationnelle des perturbations dépendantes du temps ..	29
I . 2 . 5 . La méthodes des opérateurs de projection de Fescbach	32
I . 2 . 6 . La méthode de la rotation complexe	35
CHAPITRE II. CALCUL DES ENERGIES ET DE QUELQUES VECTEURS PROPRES DES ETATS SINGULETS DOUBLEMENT EXCITES (nl)²DE L'HELIUM ET DES IONS HELIUMOIDES DE CHARGE NUCLEAIRE $Z \leq 12$	39
II . 1 . Fonctions d'ondes des états singulets doublement excités (nl)²	40
II . 1 . 1 . Construction des fonctions d'ondes	40
II . 1 . 2 . Expression des fonctions d'ondes	40

II . 2 .	Calculs des éléments matriciels et de l'énergie totale -----	42
II . 2 . 1 .	Définitions -----	42
II . 2 . 2 .	Les éléments matriciels de la constante de normalisation -----	43
II . 2 . 3 .	Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons -----	44
II . 2 . 4 .	Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction entre le noyau et les deux électrons -----	46
II . 2 . 5 .	Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction entre les deux électrons -----	47
II . 2 . 6 .	Procédure de calculs des éléments matriciels et de l'énergie totale -	48
II . 3 .	Résultats et discussions -----	49

**CHAPITRE III. CALCULS DES ENERGIES DES ETATS SINGULETS
DOUBLEMENT EXCITES $nlnl'$ DE L'HELIUM ET DES IONS
HELIUMOIDES DE CHARGE NUCLEAIRE $Z \leq 12$ -----** 63

III . 1 .	Expressions des fonctions d'ondes des états singulets doublement excités $nlnl'$ -----	64
III . 2 .	Calculs des éléments matriciels et de l'énergie totale -----	65
III . 2 . 1 .	Les éléments matriciels de la constante de normalisation -----	65
III . 2 . 2 .	Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux Electrons -----	66

III. 2 . 3 .	Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction entre le noyau et les deux électrons -----	68
III. 2 . 4 .	Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction entre les deux électrons -----	69
III. 3 .	Résultats et discussions -----	71
Conclusion	-----	83
Annexes	-----	85
Annexe 1.	Calculs des expressions de quelques éléments matriciels -----	86
Annexe 1.1.	Les détail des calculs des éléments matriciels de la constante de normalisation de l'état état singulet doublement excités $2s^2 \ ^1S$ -----	86
Annexe 1.2.	Expressions de quelques éléments matriciels des états doublement excités $(nl)^2$ -----	90
Annexe 2.	Organigramme et programme principal relatif aux calculs des énergies -----	110
Annexe 2.1.	Organigramme du programme des calculs -----	110
Annexe 2.2.	Programme principal relatif aux calculs des énergies des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nl\ n'l'$ des systèmes héliumoides -----	111
Bibliographie	-----	115

CHAPITRE I

REVUE DE QUELQUES METHODES THEORIQUES ET
EXPERIMENTALES DANS L'ETUDE DES
ETATS DOUBLEMENT EXCITES

I.1. Méthodes expérimentales

Parmi les diverses techniques d'investigations des états doublement excités, celles que nous abordons ici sont classées suivant trois modes d'excitation : l'excitation par impact photonique (sources synchrotron, laser), l'excitation par impact électronique et l'excitation par impact ionique (protons, ions).

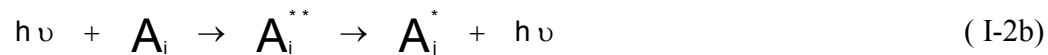
I.1.1 Excitation par impact photonique

Le mode d'excitation par impact de photons ne permet que des transitions optiques et obéit au processus suivant :



où A_i est un atome (un ion ou une molécule) dans l'état initial i et A_j^+ est l'ion résiduel dans l'état j . Ce processus peut être direct ou indirect.

Dans le processus indirect, l'atome A_i passe d'abord par un état excité qui peut se désexciter par autoionisation ou par fluorescence.



L'analyse des spectres d'absorption de l'atome, de l'ion ou de la molécule constituent l'étude expérimentale de photoabsorption.

Par contre la spectroscopie des photoélectrons et celle de l'ion résiduel, représente l'expérience de photoionisation.

I.1.1.1. Les expériences de photoabsorption.

L'utilisation de faisceaux intenses de photons [14-18] produits par rayonnement synchrotron et laser dans des domaines spectraux très étendus a largement contribué au développement des études expérimentales sur la photoabsorption résonante des atomes et des ions.

Les premières expériences sur la photoabsorption ont été effectuée sur l'hélium à l'aide de sources de rayonnement synchrotron par Madden et Codling [2, 3], dans le domaine spectral de l'ultraviolet lointain (165-200 Å). Ces expériences ont permis non seulement l'observation de plusieurs résonances autoionisantes convergeant vers les seuils d'excitation $n = 2$, $n = 3$ et $n = 4$ de l'ion résiduel He^+ mais aussi la détermination des caractéristiques (énergies d'excitation, largeur et indice de profil) de la résonance $2s2p\ ^1P$ de hélium.

Dhez et Ederer [83], et plus tard Kossmann et al [84], par des mesures de photoabsorption effectuées avec toujours le rayonnement synchrotron, mais avec une meilleure résolution que dans les expériences de Madden et Codling [2,3], ont obtenu les principaux paramètres de la résonance $3s3p\ ^1P^o$ de hélium. Cependant ces premières expériences étaient limitées à la détection des résonances dans la section efficace totale de photoabsorption.

Woodruff et Samson [85,86] surmontèrent ce problème en étudiant les états de résonance de hélium sous les seuils d'excitation $n = 3,4$ et 5 de l'ion He^+ . Ils fourniront d'une part des informations complémentaires sur les sections efficaces partielles de photoabsorption par de mesures de fluorescence émise lors de la désintégration des niveaux excités $n = 2$ de l'ion résiduel He^+ et d'autre part les énergies et les largeurs totales des résonances autoionisantes allant jusqu'au seuil $n = 5$ de l'ion résiduel.

I.1.1.1. Les expériences de photoionisation

Les expériences de photoionisation par rayonnement synchrotron sont venues accroître le champ d'investigation des processus photoniques.

Depuis les travaux de Wuilleumier [87] et ceux de Lindle et al [88] sur hélium au dessus du seuil d'excitation $n = 2$ de He, cette technique a connu un essor remarquable, marqué par plusieurs travaux à haute résolution qui ont permis d'atteindre les états $^1P^o$ de He convergeant vers les seuils $n = 4$ à 9 de l'ion He⁺.

Carroll et Kennedy [89] ont mené une expérience de photoexcitation des ion Li⁺ sous le seuil d'excitation $n = 2$ en utilisant un rayonnement laser comme source excitatrice et pour la préparation des ions cibles.

Zubek et al [90] ont observé les états autoionisants sous forme de résonance dans les sections efficaces partielles de photoabsorption de l'atome d'hélium sous les seuils d'excitation $n = 2, 3$ et 4 de l'ion résiduel He⁺. Les énergies des résonances observées ont été données ainsi que les largeurs des structures prédominantes.

Très récemment, les investigations expérimentales de photoionisation avec les sources de rayonnement synchrotron de la nouvelle génération, ont porté sur la spectroscopie du photo-ion résiduel en traitant principalement les phénomènes d'interférences existant entre les différentes séries se trouvant au-dessus des seuils d'excitation $n = 4$ à 9 .

C'est ainsi que Domke et al [14-16] ont fourni d'importantes informations sur le profil d'absorption des résonance situées au-dessus de ces seuils ; tandis que Menzel et al [17] ont pu obtenir les sections efficaces partielles et les distributions angulaires du photoelectron correspondant aux états de l'ion résiduel He⁺ ($n = 1-4$) dans les zones interférences des séries situées sous le seuil d'excitation $n = 5$.

A l'aide de la spectroscopie du photoelectron à deux dimension, Sokell et al [18] ont étendu les travaux de Menzel et al [17] aux seuils d'excitation $n = 4, 5$ et 6 de l'ion résiduel.

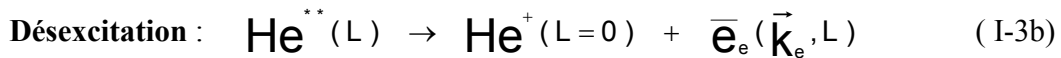
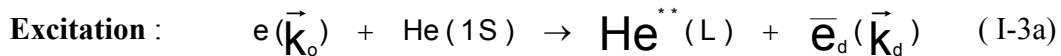
Diehl et al [19] ont effectué des mesures des paramètres de résonance (énergies d'excitation et largeur) des états doublement excités $nln'l'$ de l'ion Li⁺.

L'excitation par impact photonique a permis tant pour les processus de photoionisation que de photoabsorption, la collecte de résultats qualitatifs et quantitatifs sur les états singulet $^1P^0$ de plusieurs systèmes atomiques à deux électrons. Ce mode d'excitation est cependant restrictif car n'induit pas de transition vers les états triplets qui avec les états singulets forment le spectre complet des systèmes à deux électrons.

C'est ce qui va accroître l'intérêt des investigations expérimentales vers d'autres sources excitatrices telles que l'impact électronique

I.1.2 Excitation par impact électronique

Le mode d'excitation par impact électronique présente l'avantage de permettre l'observation des transitions aussi bien optiques que non optiques. Le mécanisme d'excitation se résume par les équations suivantes :



Où \vec{k}_0, \vec{k}_d , et \vec{k}_e sont respectivement les vecteurs d'onde des électrons incidents, diffusé et éjecté.

L'étude des états autoionisants obtenus par impact électronique consiste en la détermination des caractéristiques de l'électron éjecté, de l'électron diffusé ainsi que ceux de l'ion résiduel.

Ainsi Silverman et Lassetre [91], dans leur travaux, se sont intéressés à la distribution spectrale de l'électron diffusé et ont pu observer les deux premières résonances de la série $^1P^0$ de hélium convergeant vers le seuil $n = 2$ de l'ion résiduel He^+ .

Daly et Power [92], en mesurant le courant résiduel d'ions He^{++} dans la collision $(e^- + \text{He}^+)$, ont pu mettre en évidence les trois résonances $^1S, ^1P$ et 1D attribués aux états doublement excités de hélium sous le seuil $n = 3$.

D'autres expériences par collision électronique s'intéressant au spectre de électron éjecté ont permis aussi l'observation de plusieurs résonances appartenant aux états doublement excités de hélium [4, 5, 8]

Les expériences par impact électronique sont également orientées vers d'autres types d'analyse : il s'agit notamment des mesures de fluorescence induite par laser effectuées sur des états autoionisants générés par impact électronique [93] et de l'étude de la dynamique de formation des états métastables de hélium [94].

I.1.3. Excitation par impact ionique

Cette mode d'excitation apporte non seulement des informations complémentaires sur les caractéristiques des résonances telle que la durée de vie des états d'autoionisation (excitation par impact protonique), mais aussi permet l'observation des transitions vers les états triplets à partir de état fondamental (excitation par impact d'ions lourds).

Depuis les premières expériences par impact ionique effectuées par Rudd [6], les investigations portant sur les collisions ions-atomes ont connu un essor important.

L'intérêt porté sur les collisions entre faisceaux d'ions et les cibles atomiques s'explique par le fait que le spectre d'émission de l'électron éjecté lors de la collision présente diverses caractéristiques qui peuvent être associées à des mécanismes particuliers d'ionisation.

C'est ainsi que oza et al [95], en analysant le processus de transfert de charge électronique lors de la collision entre l'ion N^{7+} et divers cibles (He, H₂, Ar), ont pu déterminer les énergies d'excitation des états autoionisants $3lnl'$ de l'ion N^{5+} . La formation états autoionisants par la capture de deux électrons par un ion multichargé dans la collision est venue élargir le champ d'investigation dans les expériences par impact ionique et elle permet de mener des mesures quantitatives et qualitatives sur plusieurs ions multichargés des systèmes héliumoïdes [96-98].

Un autre procédé d'analyse spectroscopique dans les expériences par impact ionique, se fait à partir du spectre des photons émis après désexcitation radiative des états d'autoionisation. Ainsi Bruch et al [99], en étudiant la collision entre l'ion C^{4+} (5 Mev) avec hélium, ont pu détecter les états doublement excités de l'ion heliumoide C^{4+} convergeant vers le seuil d'excitation $n = 3$.

La technique du « beam foil » constitue un autre type d'investigations expérimentales des résonances par impact ionique [100, 101]. La technique du « beam foil » est une méthode expérimentale qui permet non seulement d'étudier les transitions non radiatives des états autoionisants, mais aussi les transitions optiques qui ont lieu lorsque le processus d'émission photonique l'emporte sur celui d'émission électronique. Deux méthodes d'analyse sont ainsi devenues possibles avec la technique du « beam foil » : la spectroscopie du photon et celle de l'électron.

Le mode d'excitation par impact ionique a apporté une contribution essentielle dans la compréhension de la dynamique collisionnelle et post-collisionnelle des ions multichargés avec les atomes.

I.2. Méthodes théoriques

I.2.1. La méthode de diagonalisation

Le fondement de la méthode de diagonalisation consiste à introduire dans les équations générales de la théorie unifiée des réactions nucléaires de Feshbach [45] certaines simplifications liées à une prise en compte approximative de l'interaction des niveaux d'autoionisation avec le spectre continu. Cette méthode a été utilisée avec succès dans l'étude de la photoabsorption et de la photoionisation résonante des systèmes atomiques à deux électrons sous le seuil d'excitation $n = 2$ et $n = 3$ de l'ion résiduel [21-24]. Dans son utilisation pratique, la méthode de diagonalisation consiste à résoudre des systèmes d'équations algébriques pour la détermination des fonctions d'onde et des énergies des résonances autoionisantes. La détermination de ces fonctions d'onde ainsi que celle de l'état initial et du continuum permet de calculer les largeurs partielles et totales, ainsi que la section efficace de la photoionisation. Cette section efficace au voisinage d'une résonance autoionisante est défini par la relation suivante [27] :

$$\sigma = \sum |T_i|^2 \quad (I-4)$$

ou T_i est l'amplitude partielle de photoionisation dans le canal i :

$$T_i = \left\langle \Psi_{iE}(\bar{r}, \bar{r}') \left| D \right| \Psi_o(\bar{r}, \bar{r}') \right\rangle \quad (I-5)$$

Dans cette formule :

\bar{r} et \bar{r}' sont les coordonnées des deux électrons ;

D est l'opérateur du moment dipolaire ;

$\Psi_0(\vec{r}, \vec{r}')$: est la fonction d'onde de l'état initial de l'atome ;

$\Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}')$: représente la fonction d'onde d'énergie E de état final du système
ion + photo – électron ;

i : définit l'ensemble des nombres quantiques décrivant le système.

Le calcul de l'amplitude partielle T_i revient à la résolution de l'équation de Schrödinger pour l'obtention de la fonction d'onde de état final $\Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}')$:

$$H \Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}') = E \Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (I-6)$$

ou H est l'Hamiltonien total du système à deux électrons :

$$H = -\frac{1}{2} \Delta_r - \frac{1}{2} \Delta_{r'} - \frac{Z}{r} - \frac{Z}{r'} + \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (I-7)$$

On peut écrire l'Hamiltonien H sous la forme :

$$H = H_0 + V \quad (I-8)$$

ou H_0 est l'Hamiltonien d'ordre zéro et V opérateur de l'interaction électrostatique des électrons .

Comme dans la méthode de Fano [102-105], on détermine $\Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}')$ en la décomposant de la manière suivante :

$$\Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}') = \hat{A} \sum_k \Psi_k(\vec{r}) U_{ik}(E, \vec{r}) + \sum_{\mu} a_{\mu}(E) \phi_{\mu}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (I-9)$$

où

\hat{A} est opérateur d'antisymétrisation

$\Psi_k(\vec{r})$ est la fonction d'onde déterminant l'état de l'ion résiduel

$U_{ik}(E, \vec{r}')$ est une fonction inconnue qu'il faut déterminer ; elle décrit le mouvement de l'électron éjecté. La fonction $\Psi_k(\vec{r})$ satisfait aux relations suivantes :

$$\langle \Psi_k(\vec{r}) | \Psi_{k'}(\vec{r}) \rangle = \delta_{kk'} \quad (\text{I-10a})$$

$$\langle \Psi_k(\vec{r}) | H | \Psi_{k'}(\vec{r}) \rangle = \epsilon_k \delta_{kk'} + V_{kk'} \quad (\text{I-10b})$$

$\phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}')$ représente des fonctions d'ondes des états d'autoionisation. Ces fonctions sont obtenues par une transformation unitaire de l'Hamiltonien total H dans le sous espace des canaux fermés constitués par les états de double excitation électronique.

$$\phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{j,l} [\alpha_\mu(j,l) \chi_\mu(\vec{r}, \vec{r}')] \quad (\text{I-11})$$

avec

$$\chi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') = \hat{A} [\Psi_j(\vec{r}) \Psi_l(\vec{r}')] \quad (\text{I-12})$$

$$\text{avec } \langle \phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') | \hat{H} | \phi_{\mu'}(\vec{r}, \vec{r}') \rangle = \epsilon_{\mu\mu'} \delta_{\mu\mu'} \quad (\text{I-13})$$

Les coefficients $\alpha_\mu(j,l)$ sont déterminés par la résolution du système d'équations algébriques :

$$\sum_v \left\{ (E - E_o) \delta_{\mu v} + \langle \chi_\mu | \hat{V} | \chi_v \rangle \right\} \alpha_v = 0 \quad (\text{I-14})$$

E_0 représente la valeur propre de l'Hamiltonien d'ordre zéro \hat{H}_0 correspondant aux fonctions propres χ_μ .

Après plusieurs opérations intermédiaires sur lesquelles nous n'allons pas nous étendre, il a été montré que la fonction d'onde de l'état final du système ion-

photoelectron peut être défini par l'expression suivante [27] :

$$\Psi_{iE}(\vec{r}, \vec{r}') = \varphi_j(E) + \frac{\langle \phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') | \hat{V} | \varphi_j(E) \rangle}{E - \varepsilon_\mu - \Delta_\mu - \frac{i}{2} \Gamma_\mu^{\text{tot}}} \left[\phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') + i\pi \sum_i \varphi_i \langle \phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') | \hat{V} | \varphi_i(E) \right] \quad (\text{I-15})$$

où

$$\Gamma_\mu^{\text{tot}} = 2\pi \sum_i \left| \langle \phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') | \hat{V} | \varphi_i(E) \rangle \right|^2 \quad (\text{I-16})$$

désigne la largeur totale du niveau d'autoionisation μ

$\varphi_j(E)$ représente la fonction d'onde du spectre continu avec le couplage électronique d'ordre un dans le canal ouvert

Δ_μ représente le déplacement du niveau résonant

L'indice de profil, caractérisant la forme des raie de résonance, est donné par la relation :

$$q = \frac{\langle \phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') | \hat{D} | \Psi_0(\vec{r}, \vec{r}') \rangle}{\pi \sum_k \langle \phi_\mu(\vec{r}, \vec{r}') | \hat{V} | \varphi_k(E) \rangle \langle \varphi_k(E) | \hat{D} | \Psi_0(\vec{r}, \vec{r}') \rangle} \quad (\text{I-17})$$

La section efficace de photoabsorption au voisinage de la résonance est définie par :

$$\sigma = \sum_i |T_i|^2 = \sigma_b + \sigma_a \frac{q + \varepsilon}{1 + \varepsilon^2} \quad (\text{I-18})$$

$$\text{ou } \varepsilon = \frac{E - E_\mu}{\frac{1}{2} \Gamma_\mu^{\text{tot}}} \quad (\text{I-19})$$

est l'écart relatif par rapport à la résonance

E_μ est l'énergie de la résonance autoionisante.

σ_a est la partie de la section efficace incluant les effets de l'interférence de la résonance avec le spectre continu, tandis que σ_b est la partie qui n'inclut pas les effets de l'interférence de la résonance avec le spectre continu.

On définit

$$\rho^2 = \frac{\sigma_a}{\sigma_a + \sigma_b} \quad (\text{I-20})$$

ou ρ est représenté le coefficient de corrélation électronique. Il caractérise le degré de diminution de la valeur de la section efficace de photoabsorption au point

$\varepsilon = -q$ par rapport à la valeur de la section efficace définie loin de la résonance [27].

I.2.2. La méthode de la théorie des groupes

Dans les états doublement excités des atomes, il existe une forte interaction électron-électron qui se traduit par un important mixage des configurations. Pour la description de ces états, le modèle des électrons indépendants est inapproprié. C'est ainsi que des méthodes théoriques plus adéquates telles que la méthode de la théorie des groupes et la méthode des coordonnées hypersphériques, ont été élaborées pour la description de ces états doublement excités.

La théorie des groupes étudie la destruction de symétrie dans les atomes, due à l'interaction Coulombienne $\frac{1}{r_{12}}$ des électrons [31, 32]. A cet effet chaque

configuration est déterminé par une série d'opérateurs $(\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{b}_1, \vec{b}_2)$ dans un sous espace où on définit les nombres quantiques N et n .

N est le nombre quantique des électrons internes,

n le nombre quantique des électrons externes,

\vec{l}_1 et \vec{l}_2 sont les vecteurs moments angulaires orbitaux des deux électrons,

\vec{b}_1 et \vec{b}_2 sont les vecteurs de Runge-Lenz.

Le module du vecteur de Runge-Lenz représente la valeur maximale de la distance de l'électron au foyer de l'ellipse de Kepler, c'est-à-dire la valeur du demi grand axe de l'ellipse comme c'est indiqué sur la figure 1 [40].

Les quatre vecteurs $\vec{l}_1, \vec{l}_2, \vec{b}_1, \vec{b}_2$ sont appelés générateurs. Ils permettent la description du mixage des configurations. Un autre générateur \vec{B} a été construit :

$$\vec{B} = \vec{b}_1 - \vec{b}_2 \quad (I-21)$$

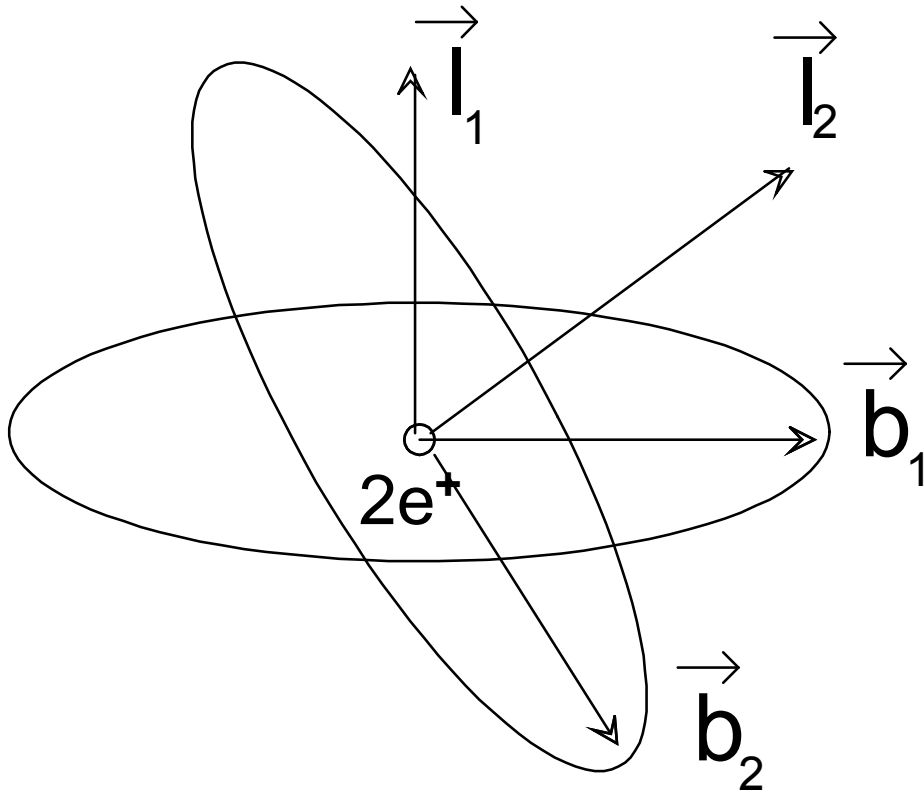


Figure 1 [40]. Les vecteurs moments angulaires orbitaux \vec{l}_1 , \vec{l}_2 et de Runge-Lenz \vec{b}_1 , \vec{b}_2 des deux électrons .

Ce générateur mesure la distance interelectronique r_{12} . Le mixage des configurations est du à la diagonalisation de l'opérateur \vec{B}^2 . Les états résultants du mixage des configurations sont décrits par de nouveaux nombres quantiques P et T (i.e. K et T avec $P = n - 1 + K$), introduit par Herrick et Sinanoglu [32] à la place des générateurs \vec{l}_1 et \vec{l}_2 .

Le nombre quantique T décrit de façon approximative l'orientation relative entre les orbitales des deux électrons. Si les deux électrons sont dans le même plan, on aura $T = 0$.

Les états de nombres quantiques P et T résultant du mixage des configurations sont des combinaisons linéaires des états $|N l_1 n l_2\rangle$.

$$|N n P T\rangle = \sum_{l_1 l_2} |N l_1 n l_2\rangle \langle N l_1 n l_2 | N n P T\rangle \quad (\text{I-22})$$

où $\langle N l_1 n l_2 | N n P T\rangle$ représentent les coefficients de Clebsch-Gordan. Ces coefficients sont associés aux quatre opérateurs des moments angulaires suivants des deux électrons :

$$J_1(1) + J_1(2) ; J_2(1) + J_2(2) ; J_1(1) + J_2(2) ; J_2(1) + J_1(2) \quad (\text{I-23})$$

$$\text{ou } J_1 = \frac{1}{2}(l + b) \quad \text{et} \quad J_2 = \frac{1}{2}(l - b) \quad (\text{I-24})$$

Les indices supérieurs (1) et (2) désignent respectivement l'électron (1) et l'électron (2).

L'introduction des nombres quantiques K et T est particulièrement importante à cause du fait que la matrice Hamiltonienne des deux électrons dans le sous espace contenant les nombres quantiques N et n est diagonale. Les éléments digonaux $E(K,T)$ de la matrice Hamiltonienne sont très voisins du niveau énergie des deux électrons dans ce sous-espace.

L'importance des corrélations électroniques et du taux d'auionisation des niveaux énergie est détermine à partir des relations suivantes :

$$\left| (l_1 \pm b_1) + (l_2 \pm b_2) \right|^2 = J^\pm (J^\pm + 1) \quad (\text{I-25})$$

$$\frac{1}{2}(n-1+K \pm T) = J^\pm \quad (\text{I-26})$$

ou J^+ et J^- sont les moments angulaires liés aux corrélations positives et négatives selon l'importance des interactions électron-électron

Le rapport des valeurs moyennes $\left| \langle \vec{b} \rangle \right| \left| \langle \vec{l} \rangle \right|^{-1}$ indique le degré d'hybridation d'une orbitale (i.e. la valeur moyenne de la position d'un électron à partir de

$\langle r \rangle = 0$ dans la direction de $\langle b \rangle$ [40].

Dans les deux types de mixage de configurations qui ont été étudiés à savoir : le cas des électrons occupant la même valence (intrashell state) et le cas des électrons occupant différentes valences (intershell state), la méthode de la théorie des groupes a permis de montrer que les spectres observés dans les états doublement excités sont identiques à ceux des molécules triatomiques XYX [39, 40] où on observe des

mouvements de rotation et de vibration. Ces spectres s'interprètent par les positions des deux électrons X et X par rapport au noyau Y .

Si la théorie des groupes permet de mieux rendre compte des corrélations angulaires, il n'en est pas de même pour les corrélations radiales (liées aux mouvements de translations des électrons). Pour bien décrire ces deux types de corrélations en même temps, il faut faire appel à la méthode des coordonnées hypersphériques.

I.2.3. La méthode des coordonnées hypersphériques

Cette méthode introduite par Macek [43, 44], décrit les corrélations électroniques en terme de structures nodales des fonctions d'onde des deux électrons. Ce caractère nodale des fonctions d'onde permet de mettre en évidence les mouvements radial et angulaire des deux électrons dans les états doublement excités. Pour décrire ces mouvements, la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ a été construite en utilisant les coordonnées hypersphériques indiquées sur la figure 2 [39].

$$R = (r_1^2 + r_2^2)^{\frac{1}{2}} \quad \text{est l'hyperrayon} \quad (\text{I-27a})$$

$$\alpha = \arctan\left(\frac{r_2}{r_1}\right) \quad \text{est l'hyperangle} \quad (\text{I-27b})$$

$$\theta_{12} \quad \text{est l'angle interélectronique}$$

La corrélation angulaire est représentée par les courbes donnant la probabilité de distribution des positions des électrons $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ en fonction de l'angle θ_{12} .

La corrélation radiale est représentée par les courbes donnant la probabilité de distribution des électrons $|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2$ en fonction de l'angle α .

La corrélation d'échange est représentée sur la figure 2 par les pointilles symétriques par rapport à \vec{r}_1 et \vec{r}_2 . Elle correspond à l'angle $\alpha = 45^\circ$.

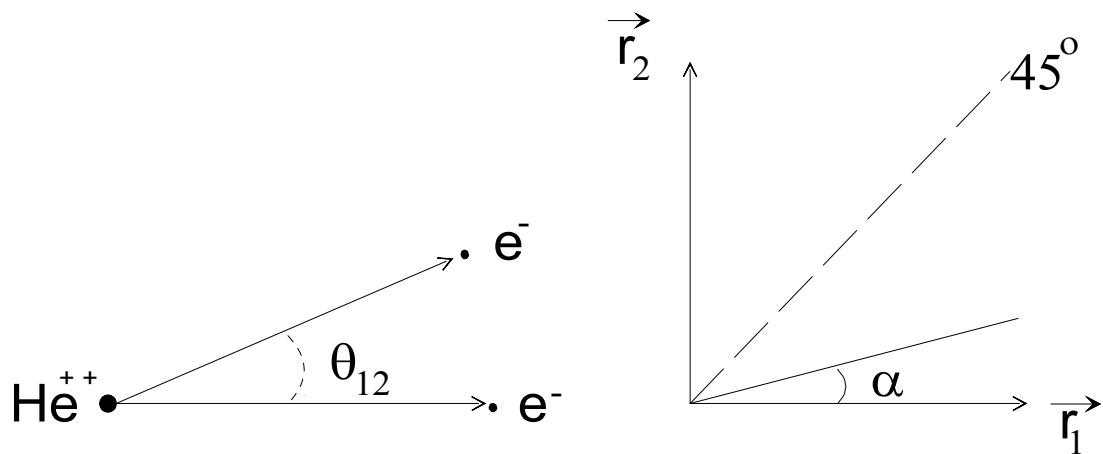


Figure 2 [39] . Les coordonnées hypersphériques

Le couplage dans les canaux de double excitation électronique est défini mathématiquement par l'équation :

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} - \frac{\lambda^2 + 15/4}{R^2} + \frac{C(\alpha, \theta_{12})}{R} + 2E \right] R^{5/2} \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0 \quad (\text{I-28})$$

où :

λ^2 est le carré du moment angulaire dans la configuration d'espace ;

$\frac{-C(\alpha, \theta_{12})}{R}$ représente le potentiel Coulombien dans tout le système.

Lorsque R tend vers zéro ou l'infini, la fonction $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ peut être décomposé en un produit de deux fonctions :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_\mu(R, \Omega) F_\mu(R) \quad (\text{I-29})$$

$$\text{avec } \Omega = (\alpha, \vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{I-30})$$

$\phi_\mu(R, \Omega)$ est la fonction d'onde dans le canal μ . Elle dépend des paramètres R et Ω , et contient toutes les informations concernant les corrélations électroniques dans le canal μ . Elle introduit en particulier deux nombres quantiques :

- le nombre quantique de corrélation radiale n_{rc} , qui indique le nombre de nœuds pour une valeur donnée de α .
- le nombre quantique de corrélation angulaire n_{ac} , qui mesure la force de la corrélation angulaire.

Les fonctions d'onde $\phi_\mu(R, \Omega)$ sont obtenues en résolvant l'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{d^2}{d\alpha^2} - \frac{l_1^2}{\cos^2 \alpha} - \frac{l_2^2}{\sin^2 \alpha} + R C(\alpha, \theta_{12}) \right] \phi_\mu(R, \Omega) = U_\mu(R) \phi_\mu(R, \Omega) \quad (\text{I-31})$$

où

$U_\mu(R)$ représente le potentiel effectif du mouvement radial des deux électrons dans le canal μ . Elle dépend du paramètre R .

Les fonctions $F_\mu(R)$ sont obtenues en résolvant l'équation radiale à une dimension en partant du potentiel $U_\mu(R)$.

Dans le cas des états doublement excités, l'effet du couplage spin-orbite (L, S) entraîne un mixage des configurations tellement fort qu'il devient difficile de décrire la structure des nouveaux multiplets obtenus avec les anciens nombres quantiques $n_1, n_2, l_1, l_2, S, L, M_L, M_S$. Ces nouveaux multiplets sont des séries de raies qui apparaissent lors du mixage des configurations appartenant aux états atomiques de même valence (intrashell states). Ces multiplets ont reçu le nom de supermultiplets. C'est pour définir, décrire et interpréter ces multiplets que C.D. Lin a introduit un ensemble de nombre quantique correspondant au canal μ .

$$\mu \equiv \left\{ N, n, (K, T)^A, L, S, \pi \right\} \quad (\text{I. 32})$$

où

N nombre quantique des électrons internes (seuil d'excitation ou encore limite de dissociation des canaux)

n nombre quantique des électrons externes (électrons de valence)

π est la parité

L et S désignent respectivement le moment cinétique orbital total et le spin ;

$(K, T)^A$ défini un groupe de nombre quantique de corrélation

Ainsi , à chaque canal μ donné correspond des supermultiplets définis par :

$$N(K, T)^A \quad {}^{2S+1}L^\pi \quad (\text{I-33})$$

Les nombres quantiques $A = \pm 1, 0$ décrivent les corrélations radiales. L'existence des supermultiplets n'est possible que si $A = \pm 1$.

Pour $A = +1$: translation (étirement) symétrique par rapport au noyau.

Pour $A = -1$: translation (étirement) antisymétrique par rapport au noyau

Pour $A = 0$, il n'y a pas de supermultiplets. Ce cas est identique à l'excitation d'un seul électron.

Les régions internes (R petit) sont décrites par les nombres quantiques A .

Les nombres K et T introduits par Herrick et Sinanoglu [32], décrivent les corrélations angulaires. Les canaux possédant les mêmes $(K, T)^\pm$ avec différentes valeurs de L décrivent des structures de rotation. Dans le cas où les valeurs de L sont identiques tandis que S et π sont différents, il y a une dégénérescence approchée des énergies propres.

Les régions asymptotiques (R grand) sont décrites par K et T .

L'introduction par Macek [43, 44] de l'approximation adiabatique en coordonnées hypersphériques a permis de calculer de façon précise les énergies des états doublement excités dans l'hélium et les ions héliumoïdes multichargés.

Ces calculs concernent les énergies des états doublement excités $nS n'S$ des systèmes héliumoïdes[50] et des calculs sur la dépendance des énergies et des fonctions d'onde de

la charge nucléaire Z dans les ions héliumoides doublement excités [52]. Les calculs ont été effectués par I. K. Dmitrieva et G. I. Plindov.

D'autres calculs sur la base de la méthode des coordonnées hypersphériques [37 - 40] ont permis d'étudier les corrélations électroniques, de classer les supermultiplets, et d'obtenir les énergies des états doublement excités dans les systèmes héliumoides.

I.2.4. La théorie variationnelle des perturbations dépendantes du temps

Dans la théorie variationnelle des perturbations dépendantes du temps, en anglais : a time dependent variation-perturbation theory (TDVPT), on considère l'évolution en fonction du temps de la fonction d'onde Ψ du système atomique initialement à l'état fondamental correspondant à l'Hamiltonien H' qui peut s'écrire sous la forme suivante [59, 60] :

$$H'(r,t) = G(r) \exp(-i\omega t) + G'(r) \exp(i\omega t) \quad (\text{I-34})$$

Dans cette expression, ω est la fréquence de la fonction de perturbation ; $G(r)$ est la partie de la perturbation spatiale tenant compte de la structure symétrique des perturbations et opérant simultanément aussi bien sur les coordonnées radiales que sur les coordonnées angulaires des deux électrons ; r représente les coordonnées r_1 et r_2 des deux électrons.

La fonction $G(r)$ admet la forme générale :

$$G(r) = \lambda \left[f(r_1, r_2) \times F(\Omega_1, \Omega_2) + f(r_2, r_1) \times F(\Omega_2, \Omega_1) \right] \quad (\text{I-35})$$

où ;

λ est un paramètre décrivant l'importance des perturbations ;

$f(r_1, r_2)$ et $f(r_2, r_1)$ sont des opérateurs à deux variables agissant sur les fonctions radiales des deux électrons. Chacun d'eux peut être mis sous la forme d'un produit de deux opérateurs agissant chacun sur une coordonnée de l'un des deux électrons :

$$f(r_1, r_2) = h(r_1) \times h'(r_2) \quad (\text{I-36})$$

La partie angulaire de $G(r)$ est représenté par l'opérateur $F(\Omega_1, \Omega_2)$ qui s'écrit sous la forme :

$$F(\Omega_1, \Omega_2) = Y_{l_0}(1) \times Y_{l_0}(2) \quad (I-37)$$

ou Y_{lm} est une harmonique sphérique.

L'action de ces deux opérateurs se traduit par une double excitation correspondante aux états excités de moments angulaires orbitaux l et l' des électrons 1 et 2.

L'évolution en fonction du temps de la fonction d'onde totale perturbée ϕ en présence d'une perturbation périodique, est écrite au premier ordre de la manière suivante ;

$$\phi = N \left[\Psi + \delta \Psi^- \exp(-i\omega t) + \delta \Psi^+ \exp(i\omega t) \right] \exp(iE_0 t) \quad (I-38)$$

où

N est la constante de normalisation que l'on peut déterminer au second ordre ;

Ψ est la fonction d'onde totale non perturbée de l'état fondamental et d'énergie E_0 ;

$\delta \Psi^\pm$ est la perturbation sur la fonction d'onde au premier ordre.

La partie angulaire de la fonction $\delta \Psi^\pm$ est proportionnelle à $G\Psi$ et la partie radiale peut écrire sous la forme :

$$\delta \Psi^\pm = \sum C^\pm \eta_j(1,2) \quad (I-39)$$

où

$\eta_j(1,2)$ sont des fonctions de bases tenant compte des corrélations radiales.

Les coefficients inconnus C^\pm sont déterminés par la condition d'optimisation :

$$\frac{\delta J(\phi)}{\delta C^\pm} = 0 \quad (\text{I-40})$$

où

$J(\phi)$ est une valeur moyenne définie par :

$$J(\phi) = \frac{1}{T} \int \langle \phi | H_0 + H' - i \frac{\delta}{\delta t} | \phi \rangle dt \quad (\text{I-41})$$

Dans cette équation T est la période du champ externe.

Sur la base de cette méthode D. Ray et P. K. Mukherjī ont calculé les énergies des états doublement excités $^1S^e$, $^1D^e$, et $^1G^e$ de hélium et des ions Li^+ , Be^{2+} et B^{3+} [59].

I.2.5. La méthode des opérateurs de projection de Feshbach

Cette méthode a été développée par Feshbach dans ses travaux sur la théorie unifiée des résonances nucléaires[45, 106]. Le formalisme a par la suite été utilisée par Hahn et al [107] dans la description des phénomènes de résonances dans les collisions atomiques. Dans le formalisme de Feshbach, les réactions énergétiquement permises sont considérées dans le sous espace des canaux ouverts, tandis que les autres réactions sont représentées dans le sous espace des canaux fermés.

Les opérateurs de projection P et Q introduit par Feshbach obéissent aux relations suivantes :

$$P^2 = P ; Q^2 = Q ; PQ = 0 ; P + Q = 1 \quad (\text{I-42})$$

ou P est l'opérateur de projection dans le sous espace des canaux ouverts et Q l'opérateur de projection dans le sous espace des canaux fermés.

A l'aide de ces opérateurs de projection, l'équation de Schrödinger du système atomique « projectile +cible » est transformée en deux équations couplées :

$$(E - H_{PP})P\psi = H_{PQ}Q\psi \quad (\text{I-43a})$$

$$(E - H_{QQ})Q\psi = H_{QP}P\psi \quad (\text{I-43b})$$

$$H_{PP} = PHP ; H_{PQ} = PHQ \quad (\text{I-43c})$$

$$H_{QQ} = QHQ ; H_{QP} = QHP . \quad (\text{I-43d})$$

Sachant que $Q\psi$ projetée dans le sous espace des canaux fermés, $Q\psi$ peut être déduit de (I-6) et exprimé en fonction de $P\psi$:

$$Q\psi = \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP} P\psi \quad (\text{I-44})$$

En remplaçant cette dernière expression dans l'équation (I-6), on obtient l'équation de Schrödinger en $P\psi$:

$$(H_{eff} - E) P\psi = 0 \quad (\text{I-45})$$

Où la quantité H_{eff} appelée Hamiltonien effectif ou encore potentiel optique généralisée, est définie par la relation suivante :

$$H_{eff} = H_{PP} + H_{QP} \frac{1}{E - H_{QQ}} H_{QP} \quad (\text{I-46})$$

Les résonances apparaissent ainsi comme des singularités du potentiel optique généralisé. Par conséquent en faisant une première approximation, les états d'autoionisation peuvent être décrits par les solutions des équations aux valeurs propres suivantes :

$$H_{QQ} \phi_s = \varepsilon_s \phi_s \quad (\text{I-47})$$

Les valeurs exactes des paramètres de la résonance c'est-à-dire l'énergie E_s et la largeur Γ_s sont donnés par les équations :

$$E_s = \varepsilon_s + \Delta_s \quad (\text{I-48a})$$

$$\Gamma_s = 2\pi \langle \phi_s | QHP \delta(E - PHP) PHQ | \phi_s \rangle \quad (\text{I-48b})$$

où

$$\Delta_s = \langle \phi_s | QHP \rho (E - PHP)^{-1} PHQ | \phi_s \rangle \quad (\text{I-49})$$

est le décalage en énergie dû au couplage entre état discret et le continuum par la perturbation QHQ et ρ la partie principale de l'intégrale .

Dans le cadre du formalisme des opérateurs de projection de Feshbach plusieurs résultats ont été obtenus dans l'étude des résonances autoionisantes de hélium et des ions heliumoïdes [46, 47, 108, 109].

I.2.6. La méthode de la rotation complexe

La méthode de la rotation complexe ou méthode de dilatation est basée sur le théorème de Balslev et al [110] concernant l'étude des systèmes régis par des interactions coulombiennes. Cette méthode est très utilisée en physique atomique pour la détermination des paramètres des résonances autoionisantes dans les systèmes atomiques à deux électrons [68-76]. L'application de ce théorème dans l'étude des résonances atomiques consiste en une transformation de l'Hamiltonien réel du système $\hat{H}(r)$ en un Hamiltonien complexe $\hat{H}(r, \theta)$.

D'après ce théorème [110], l'Hamiltonien complexe $\hat{H}(r, \theta)$ obtenu après transformation des coordonnées réelles en coordonnées complexes, comprend en plus des états résonants, un spectre continu formé d'une série de raies dans le plan complexe commençant au seuil d'ionisation de l'ion résiduel du système atomique étudié, mais aussi des états discrets liés qui restent invariants dans la rotation. Cette transformation se traduit par un changement de la variable radiale r en une variable complexe $r \exp(i\theta)$, où θ est un réel positif désignant l'angle de rotation. Par cette transformation, l'Hamiltonien dans le cas des systèmes à interaction Coulombienne s'écrit :

$$\hat{H}(r, \theta) = \hat{T} \exp(-2i\theta) + \hat{V} \exp(-i\theta) \quad (\text{I. 50})$$

Où \hat{T} et \hat{V} désignent respectivement les opérateurs de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle.

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

$$\left\langle \psi_{\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left| \hat{H}(\vec{r}, \theta) - W \right| \psi_{\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle = 0 \quad (\text{I. 51})$$

ou $W = E_r - \frac{1}{2}\Gamma$ représente la valeur propre complexe dont la partie réelle E_r donne la position et la partie imaginaire Γ , la largeur de la résonance

$\psi_{\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est une fonction d'onde d'essai. Elle est souvent une fonction de carré intégrable de type Hylleraas [111, 112] :

$$\psi_{\mu}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{k,m,n} C_{kmn} \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] r_{12}^n \left[r_1^k r_2^{m+L} Y_{00}^{(1)} Y_{L0}^{(2)} + (-1)^S r_2^k r_1^{m+L} Y_{L0}^{(1)} Y_{00}^{(2)} \right] \quad (\text{I.52})$$

où $k + m + n \leq \Omega$, Ω étant un entier positif ;

L étant le moment angulaire total ; pour les termes $L = 0, k \geq m$;

α est le paramètre non linéaire et S le spin total du système atomique.

Le choix d'une fonction d'essai de carré sommable pour la description de l'état quasi stationnaire ne se justifie pas à priori, car à l'énergie de résonance, la fonction d'onde contient une composante divergente de la forme :

$$u(r)_{r \rightarrow \infty} \approx e^{ikr} \quad (\text{I-53})$$

$$\text{avec } k = |k| e^{-i\beta} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{1}{2} \arg(W) \quad (\text{I-54})$$

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

$$f \approx e^{i|k|r} e^{-i(\theta-\beta)} = e^{i|k|r \cos(\theta-\beta)} e^{-|k|r \sin(\theta-\beta)} . \quad (\text{I-55})$$

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

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

$$\frac{\partial |W|}{\partial \alpha} = 0 ; \quad \frac{\partial |W|}{\partial \theta} = 0 ; \quad \frac{\partial |W|}{\partial \Omega} = 0 .$$

Dans son utilisation pratique, la méthode de la rotation complexe consiste à déterminer les paramètres de la résonance à partir du comportement de la trajectoire de la rotation des valeurs propres. Pour cela trois étapes sont nécessaires :

1. On applique la méthode de stabilisation[54] à l'Hamiltonien réel pour la recherche de valeurs propres réelles qui sont stables par rapport à la variation du paramètre non linéaire α .
2. on applique la méthode de la rotation complexe ($\theta \neq 0$) aux fonctions d'onde qui sont restées stables par rapport à α . Dans cette zone de stabilisation les trajectoires des rotations, pour différentes valeurs de α se croisent en un point du plan complexe déterminant ainsi la position et la largeur de la résonance

3. les deux premières étapes sont répétées avec des bases de différentes dimensions pour l'étude de la convergence des résultats.

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

CHAPITRE II

CALCULS DES ENERGIES ET DE QUELQUES VECTEURS
PROPRES DES ETATS SINGULETS DOUBLEMENT
EXCITES $(nl)^2$ DE L'HELIUM ET DES IONS
HELIUMOIDES DE CHARGE
NUCLEAIRE $Z \leq 12$

II . 1 . Fonctions d'ondes des états singulets doublement excités (nl)²

II . 1 . 1 . Construction des fonctions d'onde

Nous avons construit les fonctions d'ondes Φ_{jkmnl} des états singulets doublement excités (nl)² de l'hélium et des ions heliomoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$ à partir des fonctions d'ondes de type Hylleraas de l'état fondamental de l'hélium [111-113]. Ces fonctions d'ondes Φ_{jkmnl} ont été construit en faisant le produit des fonctions d'ondes radiales hydrogéniques incomplètes avec les fonctions d'ondes de type Hylleraas de l'état fondamental de l'hélium. Ces fonctions d'ondes de type Hylleraas obtenues, de par leur forme spéciale, constituent une première à notre connaissance dans la construction des fonctions d'onde des états doublement excités de l'hélium et des ions heliomoïdes.

II . 1 . 2 . Expressions des fonctions d'ondes

Ces fonctions d'ondes Φ_{jkmnl} peuvent se mettre sous la forme générale suivante :

$$\Phi_{jkmnl}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2r_1 2r_2)^l \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \\ \times \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^m \exp \langle -\lambda (r_1 + r_2) \rangle \quad (\text{II-1})$$

Avec,

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

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

n est le nombre quantique principal ;

l est le moment angulaire orbital ;

$$\lambda = \frac{Z}{\alpha n r_0}; \quad (\text{II-2})$$

où Z, α et r_0 sont respectivement la charge nucléaire, le paramètre variationnel et le rayon de Bohr.

Les fonctions d'onde totale du système à deux électrons dans une base de dimension D dans les états singulets doublement excités $(nl)^2$ sont une combinaison linéaire des fonctions de base Φ_{jkmnl} et s'écrivent de la manière suivante :

$$\Psi_{nl} = \sum_{j,k,m} a_{jkm} \Phi_{jkmnl}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (\text{II-3})$$

où

a_{jkm} sont des coefficients à déterminer.

L'intérêt des fonctions d'onde $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, s'explique par le fait qu'elles contiennent le terme de corrélation électronique: $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, qui représente la partie angulaire de la fonction d'onde à la place des harmoniques sphériques comme c'est le cas des autres fonctions d'onde utilisées dans la description des états excités.

L'autre avantage, est que les minima de la fonction $E = f(\alpha)$ convergent rapidement à partir des dimensions D faibles ($D = 13$), au moment où cette fonction $E = f(\alpha)$ exhibe un plateau. Cela n'est pas le cas des fonctions d'onde utilisées par les autres méthodes théoriques comme la méthode de la rotation complexe où la convergence a lieu à partir des bases de très grandes dimensions.

II . 2 . Calculs des éléments matriciels et de l'énergie totale

II . 2 . 1 . Définitions

On peut décomposer l'Hamiltonien H en trois termes permettant de séparer l'énergie cinétique T , l'énergie d'interaction Coulombienne entre le noyau et les deux électrons C et l'énergie d'interaction Coulombienne entre les deux électrons W :

$$H = T + C + W \quad (\text{II-4})$$

Avec :

$$T = - \frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) \quad (\text{II-5})$$

$$C = - \frac{Z e^2}{r_1} - \frac{Z e^2}{r_2} \quad (\text{II-6})$$

$$W = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (\text{II-7})$$

Pour obtenir les coefficients a_{jkm} , il faut résoudre l'équation de Schrödinger dans une base non orthogonale. Cette résolution conduit à l'équation générale aux valeurs propres suivante :

$$\sum_{q, q'} (H_{JKM} - E N_{JKM}) = 0 \quad (\text{II-8})$$

où

q et q' constituent l'ensemble des paramètres (j, k, m) et (j', k', m') respectivement,

$$J = j + j' \quad ; \quad K = k + k' \quad ; \quad M = m + m' \quad (\text{II-9})$$

E est la valeur propre de l'énergie du système atomique à deux électrons

N_{JKM} sont des éléments matriciels de la constante de normalisation N

H_{JKM} sont des éléments matriciels de l'Hamiltonien total H

avec

$$H_{JKM} = T_{jkmj'k'm'} + C_{JKM} + W_{JKM} \quad (\text{II-10})$$

où

$T_{jkmj'k'm'}$ sont les éléments matriciels de l'opérateur d'énergie cinétique des deux électrons,

C_{JKM} sont les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre le noyau et les deux électrons,

W_{JKM} sont les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre les deux électrons

II. 2. 2. Les éléments matriciels de la constante de normalisation

Les éléments matriciels N_{JKM} de la constante de normalisation sont définis par l'expression suivante :

$$N_{JKM} = \left\langle \Phi_{jkm} \mid \Phi_{j'k'm'} \right\rangle \quad (\text{II-11})$$

$$= \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_{jkm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times \Phi_{j'k'm'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{II-12})$$

$$= \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^l \times (2r_1 2r_2)^{l'} \times \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle$$

$$\times \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle \times (r_1 + r_2)^{j+j'} (r_1 - r_2)^{k+k'} \mid \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \mid^{m+m'}$$

$$\times \exp \left\langle -\lambda (r_1 + r_2) \right\rangle \times \exp \left\langle -\lambda (r_1 + r_2) \right\rangle \quad (\text{II-13})$$

$$\begin{aligned}
&= \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \times \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle^2 \times (r_1 + r_2)^j \\
&\times (r_1 - r_2)^k \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^M \times \exp \left\langle - 2 \lambda (r_1 + r_2) \right\rangle \quad (\text{II-14})
\end{aligned}$$

II. 2. 3 . Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons

Les éléments matriciels $T_{jkmj'k'm'n l}$ de énergie cinétique des deux électrons sont définis par :

$$\begin{aligned}
T_{jkmj'k'm'n l} &= \left\langle \Phi_{jkmnl} \left| -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) \right| \Phi_{jkmnl} \right\rangle \quad (\text{II-15}) \\
&= \frac{\hbar^2}{2m} \left[- \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^l \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle \right. \\
&\times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^m \times \exp(-\lambda (r_1 + r_2)) \times (\Delta_1 + \Delta_2) \\
&\times (2r_1 2r_2)^l \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle \\
&\left. \times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^{m'} \times \exp(-\lambda (r_1 + r_2)) \right] \quad (\text{II-16})
\end{aligned}$$

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

$$T_{jkmj'k'm'n l} = T'_{jkmj'k'm'n l} + T''_{jkmj'k'm'n l} \quad (\text{II-17})$$

où

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}'_{j k m j' k' m'} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[- \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle^2 \right. \\
&\times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \vec{r}_1 - r_2 \right|^m \times \exp(-\lambda (r_1 + r_2)) \times (\Delta_1 + \Delta_2) \\
&\times (r_1 + r_2)^{j'} (r_1 - r_2)^{k'} \left| \vec{r}_1 - r_2 \right|^{m'} \times \exp(-\lambda (r_1 + r_2)) \left. \right] \quad (\text{II-18})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}''_{j k m j' k' m'} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[- \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (r_1 + r_2)^{j+j'} (r_1 - r_2)^{k+k'} \left| r_1 - r_2 \right|^{m+m'} \right. \\
&\times \exp(-2\lambda (r_1 + r_2)) (2r_1 2r_2)^l \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle \\
&\times (\Delta_1 + \Delta_2) (2r_1 2r_2)^l \left. \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle \right] \quad (\text{II-19})
\end{aligned}$$

II. 2. 4. Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre le noyau et les deux électrons

$$\mathbf{C}_{J K M} = \left\langle \Phi_{j k m} \left| C \right| \Phi_{j' k' m'} \right\rangle \quad (\text{II-20})$$

$$\mathbf{C}_{J K M} = \left\langle \Phi_{j k m} \left| -Z e^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right| \Phi_{j' k' m'} \right\rangle \quad (\text{II-21})$$

$$\mathbf{C}_{J K M} = -Z e^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_{j k m}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \Phi_{j' k' m'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{II-22})$$

$$\mathbf{C}_{J K M} = -Z e^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle^2$$

$$\times \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) (r_1 + r_2)^{j+j'} (r_1 - r_2)^{k+k'} \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^{m+m'} \exp(-2\lambda(r_1 + r_2))$$

(II-23)

$$C_{JKM} = -Ze^2 \iiint d^3r_1 d^3r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^\nu \right\rangle^2$$

$$\times \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^M \exp(-2\lambda(r_1 + r_2))$$

(II-24)

II. 2 . 5 . Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre les deux électrons

Les éléments matriciels W_{JKM} de l'opérateur d'énergie cinétique d'interaction Coulombienne entre les deux électrons sont définis par :

$$W_{JKM} = \langle \Phi_{jkm} | W | \Phi_{j'k'm'} \rangle \quad (\text{II-25})$$

$$W_{JKM} = \langle \Phi_{jkm} | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \Phi_{j'k'm'} \rangle \quad (\text{II-26})$$

$$W_{JKM} = e^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_{jkm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Phi_{j'k'm'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{II-27})$$

$$W_{JKM} = e^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle^2$$

$$\times (r_1 + r_2)^{j+j'} (r_1 - r_2)^{k+k'} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{m+m'} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-1}$$

$$\times \exp(-2\lambda(r_1 + r_2)) \quad (\text{II-28})$$

$$W_{JKM} = e^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \left\langle \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right\rangle^2$$

$$\times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{M-1}$$

$$\times \exp(-2\lambda(r_1 + r_2)) \quad (\text{II-29})$$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JKM-1} \quad (\text{II-30})$$

Les résultats des calculs des expressions de quelques éléments matriciels sont donnés dans l'annexe 1.

II. 2 . 6 . Procédure de calcul de l'énergie totale

On calcule les éléments matriciels et l'énergie totale E des états doublement excités à partir de plusieurs bases d'états électroniques (j, k, m) de dimension D variable avec le paramètre variationnel α , en se conformant au théorème de Hylleraas et de Undheim [111-113]. D'après ce théorème, pour le calcul des valeurs propres E de l'Hamiltonien total, on procède de la manière suivante :

-pour une dimension bien déterminée de la base définie par les valeurs des paramètres (j, k, m) , on fait varier le paramètre α jusqu'à l'obtention de la plus petite valeur propre de l'énergie E définie par le minimum de la courbe $E = f(\alpha, D)$ correspondant aux énergies des états doublement excités ;

-en outre il faut que la courbe $E = f(\alpha, D)$ présente un plateau au fur et à mesure que la dimension D de la base augmente.

Ces deux conditions réunies permettent d'obtenir la valeur propre E de l'Hamiltonien qui se rapproche le plus de la valeur exacte.

Dans ce travail les calculs ont été effectués en utilisant la base de dimension $D = 13$ qui contient les éléments suivants :

$(0,0,0)$; $(0,0,1)$; $(1,0,0)$; $(1,0,1)$; $(0,2,0)$;

$(2,0,0)$; $(0,0,2)$; $(1,0,2)$; $(2,0,1)$; $(1,2,0)$

$(0,2,1)$; $(3,0,0)$; $(0,0,3)$

II. 3 . Résultats et discussions

Nous présentons dans cette partie les résultats de notre étude sur les calculs des énergies des états singulets doublement excités $(nl)^2$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$ ainsi que les valeurs de quelques vecteurs propres.

Pour comparer nos résultats avec d'autres valeurs théoriques, nous utilisons les conversions suivantes : 1 a.u. = 27,211396 eV = 2Ry.

Pour comparer nos résultats avec les valeurs expérimentales, nous utilisons pour l'état fondamental de l'hélium : $E = 2,9037$ a.u. et pour l'ion Li^+ : $E = 7,2799$ a.u. [114].

Nous présentons dans le tableau **1** les résultats de nos calculs sur les énergies totales E et les coefficients λ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$. Ces résultats ont été obtenus pour les neuf états singulets correspondants aux valeurs du nombre quantique principal $n = 2, 3$ et 4 .

Dans les tableaux **2**, **3** et **4** nous reportons les composantes des vecteurs propres a_{jkm} dans une base de dimension $D = 13$ pour les états doublement excités $2p^2 \ ^1D^e$, $3d^2 \ ^1G^e$ et $4f^2 \ ^1I^e$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$.

Tableau 1. Energies et coefficients λ pour les états singulets $(nl)^2$ des systèmes héliumoides ($Z = 2 - 12$). Les énergies sont en eV.

States		Z = 2	Z = 3	Z = 4	Z = 5	Z = 6	Z = 7	Z = 8	Z = 9	Z = 10	Z = 11
$s^2 \ ^1S^e$	E	-20,772742	-51,115662	-96,455947	-156,100725	-227,230776	-312,137931	-410,371537	-523,055453	-649,162578	-790,377861
	λ	0,9946	1,3062	1,8083	2,2823	2,7927	3,3574	3,837	4,2733	4,6545	5,1709
$d^2 \ ^1D^e$	E	-19,185957	-48,395497	-91,152274	-147,487388	-217,413461	-300,936520	-398,059797	-508,785175	-633,113826	-771,046513
	λ	1,7997	2,9223	3,8964	4,8705	5,8446	6,8187	7,7928	8,7669	9,741	10,7151
$s^2 \ ^1S^e$	E	-9,261874	-23,410986	-44,112955	-71,381625	-105,226912	-145,650725	-192,652236	-246,238001	-306,407864	-373,156724
	λ	0,696	1,0798	1,4735	1,8636	2,2631	2,6723	3,0541	3,478	3,8645	4,2509
$d^2 \ ^1D^e$	E	-8,669772	-21,808647	-41,035917	-66,379054	-97,849785	-135,455285	-179,198501	-229,081397	-285,105201	-347,270709
	λ	0,8688	1,2855	1,691	2,1138	2,571	2,9996	3,4281	3,8566	4,2851	4,7136
$d^2 \ ^1G^e$	E	-8,584179	-21,54976	-40,49834	-65,457328	-96,440669	-133,456129	-176,508344	-225,600244	-280,733765	-341,910234
	λ	1,2988	1,9482	2,5976	3,247	3,8964	4,5458	5,1952	5,8445	6,494	7,1434
$d^2 \ ^1S^e$	E	-4,894009	-12,236744	-22,941575	-37,025518	-54,498825	-75,368163	-99,638261	-127,31191	-158,391391	-192,877685
	λ	0,8512	1,2324	1,6151	1,9522	2,3045	2,6456	3,0236	3,4015	3,7199	4,0919
$d^2 \ ^1D^e$	E	-4,894008	-12,23674	-22,941568	-37,025502	-54,498795	-75,368116	-99,638195	-127,311816	-158,389496	-192,877535
	λ	0,8512	1,2324	1,6151	1,9522	2,3045	2,6456	3,0236	3,3479	3,7795	4,0919
$d^2 \ ^1G^e$	E	-4,893937	-12,236476	-22,940963	-37,024296	-54,496798	-75,365158	-99,634028	-127,306036	-158,383939	-192,868466
	λ	0,8512	1,2324	1,6151	1,9522	2,3045	2,6886	3,0236	3,3479	3,7199	4,0919
$f^2 \ ^1I^e$	E	-4,886681	-12,216097	-22,898477	-36,949751	-54,379617	-75,194344	-99,398149	-126,993967	-157,983895	-192,369467
	λ	0,9741	1,4611	1,9482	2,4352	2,9223	3,4093	3,8964	4,3834	4,8705	5,3575

Tableau 2. Les composantes des vecteurs propres a_{jkm} en dimension 13 de l'état doublement excité $2p^2$ $^1D^e$ des systèmes héliumoïdes de charge $Z = 2 - 12$.

Z	a_{000}	a_{001}	a_{100}	a_{101}	a_{020}	a_{200}	a_{002}	a_{102}	a_{201}	a_{120}	a_{021}	a_{300}
2	0,000667	0,001042	-0,000299	-0,000255	-0,000089	0,000073	0,000146	-0,000014	0,000022	0,000005	0,000017	-0,000000
3	0,019931	0,35021	-0,006571	-0,010964	-0,004467	0,003011	0,005666	-0,000071	0,001717	0,000349	0,001158	-0,000000
4	0,205703	0,360531	-0,043082	-0,13257	-0,059986	0,037194	0,063981	-0,012515	0,032601	0,005683	0,020086	-0,000000
5	1,185875	2,083742	-0,097362	-0,86832	-0,429185	0,246001	0,393591	-0,121598	0,306854	0,046071	0,178345	-0,037000
6	4,899432	8,382344	0,024365	-3,825243	-2,026613	1,185649	1,645021	-0,764282	1,785143	0,242667	1,004605	-0,174000
7	15,85309	26,887445	1,702249	-13,318863	-7,499553	4,367167	5,426216	-3,59026	7,896519	0,981461	4,333818	-0,500000
8	43,263923	73,155995	9,382837	-39,03613	-23,16495	13,346442	15,094136	-13,594307	28,476212	3,270805	15,319193	-1,156000
9	104,522468	174,952771	32,033037	-99,315208	-61,638231	36,542898	36,472394	-43,079545	86,170548	9,394127	45,811492	-1,611000
10	229,133651	379,171112	88,358485	-227,21336	-146,63618	91,010727	79,169869	-119,18346	228,943289	24,087122	120,846845	-0,155000
11	465,005373	758,88282	208,885897	-476,45399	-318,13435	210,986395	156,993181	-294,75264	545,763251	56,404074	287,324779	6,420000
12	883,719686	1427,122293	455,544102	-936,5599	-644,64236	452,980919	291,455089	-670,93164	1205,03773	122,685031	633,20913	29,885000

Tableau 3. Les composantes des vecteurs propres a_{jkm} en dimension 13 de l'état doublement excité $3d^2$ $^1G^e$ des systèmes héliumôides de charge $Z = 2 - 12$.

Z	a_{000}	a_{001}	a_{100}	a_{101}	a_{020}	a_{200}	a_{002}	a_{102}	a_{201}	a_{120}	a_{021}	a_{300}
2	0,000667	0,001042	-0,000299	-0,000255	-0,000089	0,000073	0,000146	-0,000014	0,000022	0,000005	0,000017	-0,000000
3	0,019931	0,35021	-0,006571	-0,010964	-0,004467	0,003011	0,005666	-0,000071	0,001717	0,000349	0,001158	-0,000000
4	0,205703	0,360531	-0,043082	-0,13257	-0,059986	0,037194	0,063981	-0,012515	0,032601	0,005683	0,020086	-0,000000
5	1,185875	2,083742	-0,097362	-0,86832	-0,429185	0,246001	0,393591	-0,121598	0,306854	0,046071	0,178345	-0,037000
6	4,899432	8,382344	0,024365	-3,825243	-2,026613	1,185649	1,645021	-0,764282	1,785143	0,242667	1,004605	-0,174000
7	15,85309	26,887445	1,702249	-13,318863	-7,499553	4,367167	5,426216	-3,59026	7,896519	0,981461	4,333818	-0,500000
8	43,263923	73,155995	9,382837	-39,03613	-23,16495	13,346442	15,094136	-13,594307	28,476212	3,270805	15,319193	-1,156000
9	104,522468	174,952771	32,033037	-99,315208	-61,638231	36,542898	36,472394	-43,079545	86,170548	9,394127	45,811492	-1,611000
10	229,133651	379,171112	88,358485	-227,21336	-146,63618	91,010727	79,169869	-119,18346	228,943289	24,087122	120,846845	-0,155000
11	465,005373	758,88282	208,885897	-476,45399	-318,13435	210,986395	156,993181	-294,75264	545,763251	56,404074	287,324779	6,420000
12	883,719686	1427,122293	455,544102	-936,5599	-644,64236	452,980919	291,455089	-670,93164	1205,03773	122,685031	633,20913	29,885000

Tableau 4. Les composantes des vecteurs propres a_{jkm} en dimension 13 de l'état doublement excité $4f^2$ $^1I^e$ des systèmes héliumoïdes de charge $Z = 3-12$.

Z	a_{000}	a_{001}	a_{100}	a_{101}	a_{020}	a_{200}	a_{002}	a_{102}	a_{201}	a_{120}	a_{021}	a_{300}
3	0,000042	0,000129	-0,000027	-0,000034	-0,000012	0,000008	0,000002	-0,000002	0,000003	0,000001	0,000002	-0,000001
4	0,000882	0,002651	-0,000412	-0,000834	-0,000315	0,000187	0,000431	-0,000046	0,000102	-0,000004	0,000079	-0,000001
5	0,008759	0,025722	-0,002734	-0,00936	-0,003798	0,001988	0,004606	-0,000573	0,00155	-0,000115	0,001206	-0,000001
6	0,056194	0,157716	-0,010417	-0,064412	-0,027798	0,013273	0,030574	-0,004695	0,013765	-0,00134	0,010751	-0,000001
7	0,260127	0,717738	-0,014195	-0,323766	-0,147278	0,06317	0,148316	-0,028612	0,086453	-0,009986	0,07502	-0,009986
8	0,954648	2,640172	0,088547	-1,30261	-0,619259	0,231607	0,576001	-0,139459	0,423978	-0,055204	0,329642	-0,032964
9	3,07113	8,150276	0,534766	-4,316182	-2,140411	0,772878	1,866216	-0,56449	1,656633	-0,229172	1,288783	-0,094172
10	8,687783	22,134386	2,052457	-12,458078	-6,422788	2,315823	5,27928	-1,96376	5,523076	-0,794225	4,305987	-0,228076
11	21,667638	54,830098	7,509288	-32,850168	-17,481193	5,81774	13,572631	-6,095111	16,705614	-2,509579	12,988647	-0,285168
12	49,959665	124,697405	21,888865	-78,943513	-43,269527	13,728038	31,899494	-17,047043	45,349962	-7,017302	35,225008	0,166952

Tableau 5. Comparaison des résultats de nos calculs avec d'autres résultats théoriques concernant les énergies des états doublement excités $2 p^2 \ ^1D^e$, $3 s^2 \ ^1S^e$, $3 p^2 \ ^1D^e$, $3 d^2 \ ^1G^e$, $4 p^2 \ ^1D^e$, $4 d^2 \ ^1G^e$ et $4 f^2 \ ^1I^e$ des systèmes héliumoides de charge $Z = 2- 5$. Les résultats sont donnés en eV. 1 a.u. = 2 Ry = 27,211396 eV.

States	Z = 2			Z = 3		Z = 4		Z = 5	
	Present	Ray	Other theore-	Present	Ray	Present	Ray	Present	Ray
	results	et al (1991)	tical results	results	et al (1991)	results	et al (1991)	results	et al (1991)
E	E	E	E	E	E	E	E	E	
$2 p^2 \ ^1D^e$	-19,185957	-18,688786	-19,241053a	-48,395497	-47,421299	-91,152274	-89,743183	-147,48739	-145,654439
$3 s^2 \ ^1S^e$	-9,261874	-9,583853	-9,815025b	-23,410986	-22,838524	-44,112955	-42,256576	-71,38163	-67,859779
$3 p^2 \ ^1D^e$	-8,669772	-8,944385	-9,673526a	-21,808647	-22,117422	-41,035917	-41,451119	-66,37905	-66,172672
$3 d^2 \ ^1G^e$	-8,584179	-8,489955	-8,351052c	-21,54976	-21,154139	-40,49834	-39,840205	-65,45733	-64,564479
$4 p^2 \ ^1D^e$	-4,894008	-5,428673	-5,697941a	-12,23674	-12,710443	-22,941568	-23,603165	-37,02550	-37,900032
$4 d^2 \ ^1G^e$	-4,893937	-5,311664		-12,236476	-12,517242	-22,940963	-23,331051	-37,02430	-37,554447
$4 f^2 \ ^1I^e$	-4,886681		-4,637258d						

a Fukuda et al 1987 [115]

b Koyama et al 1986 [116]

c Sinanoglu and Herrick 1975 [117]

d Ho (1989) [118]

bleau 6. Comparaison des résultats de nos calculs avec d'autres résultats théoriques concernant les énergies des états doublement excités $2s^2\ ^1S^e$ et $4s^2\ ^1S^e$ des systèmes héliumoiques de charge $Z = 2 - 10$, les résultats sont donnés en eV, $1\ \text{a.u.} = 2\ \text{Ry} = 27,211396\ \text{eV}$

Z	$2s^2\ ^1S^e$			$4s^2\ ^1S^e$		
	Present	Ray	Ho (1980)	Present	Ray	Ho (1980)
	results	et al (1991)	[69]	results	et al (1991)	[69]
	[59]			[59]		
E	E	E	E	E	E	
2	-20,772742	-20,367729	-21,166928	-4,894009	-5,591942	-5,470158
3	-51,115662	-50,332919	-51,860703	-12,236744	-13,102287	-13,259795
4	-96,455947	-93,906527	-96,150379	-22,941575	-24,052153	-24,453146
5	-156,100725	-151,07767	-154,040447	-37,025518	-38,395279	-39,043411
6	-227,230776		-225,533492	-54,498825		-57,027867
7	-312,137931		-310,630603	-75,368163		-78,426921
8	-410,371537		-409,331778	-99,538261		-103,213365
9	-523,055453		-521,637971	-127,31191		-131,414408
10	-649,162578		-647,549318	-158,391391		-163,009642

Tableau 7. Comparaison des résultats de nos calculs avec quelques résultats expérimentaux concernant les énergies des états doublement excité $2s^2\ ^1S$ et $2p^2\ ^1D$ de l'atome He et de l'ion Li^+ , Les résultats sont donnés en eV, L'énergie est mesurée à partir de l'état fondamental de chaque système atomique, $1\ a.u. = 27,211396\ eV$,

States	Z = 2			Z = 3	
	Present results	Hicks and Comer (1975) [5]	Gelebart et al (1976) [8]	Present results	Diehl et al (1999) [19]
	E	E	E	E	E
$2s^2\ ^1S^e$	58,25	57,82	57,78	147,01	146,12
$2p^2\ ^1D^e$	59,83	59,89		149,72	149,94

Figure 3. Courbes de comparaison entre les valeurs des énergies totales du présent travail et celles obtenues par Ray et al pour les états $2p^2\ ^1D^e$ et $3p^2\ ^1D^e$

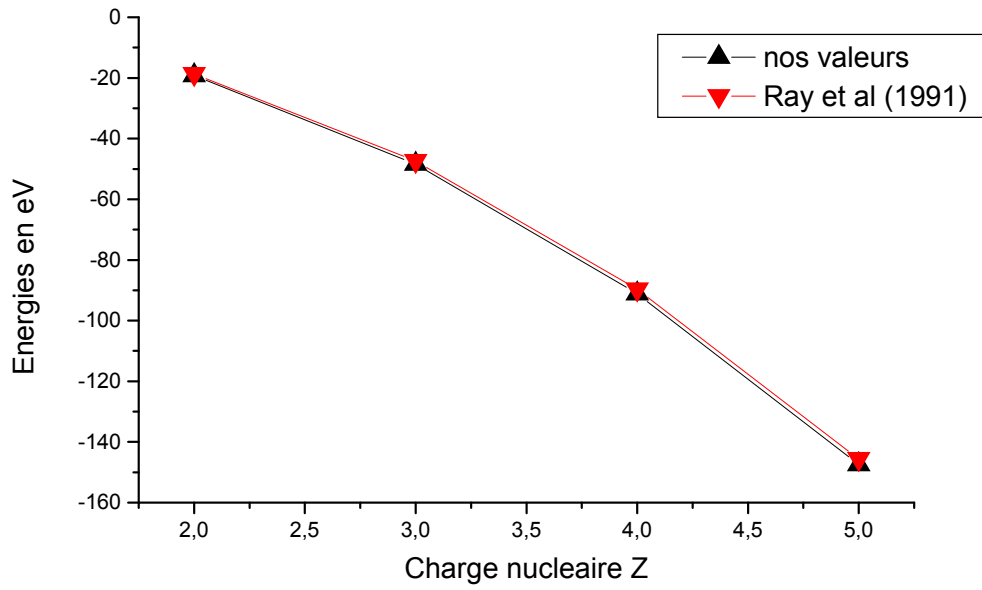


Figure 3a : Etat $2p^2\ ^1D^e$

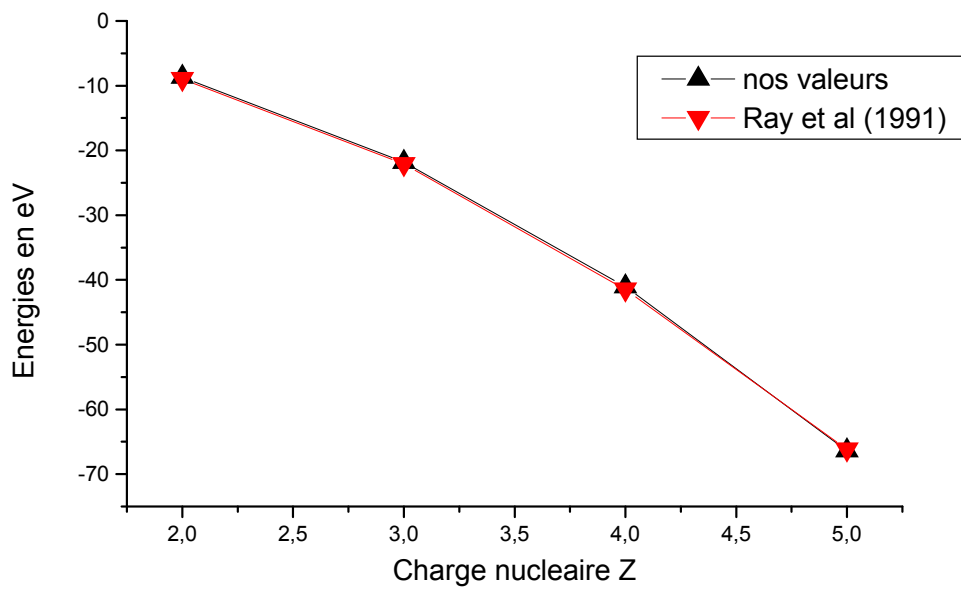


Figure 3b : Etat $3p^2\ ^1D^e$

Figures 3c et 4. Courbes de comparaison entre les valeurs des énergies totales du présent travail et celles obtenues par Ho, Ray et al.

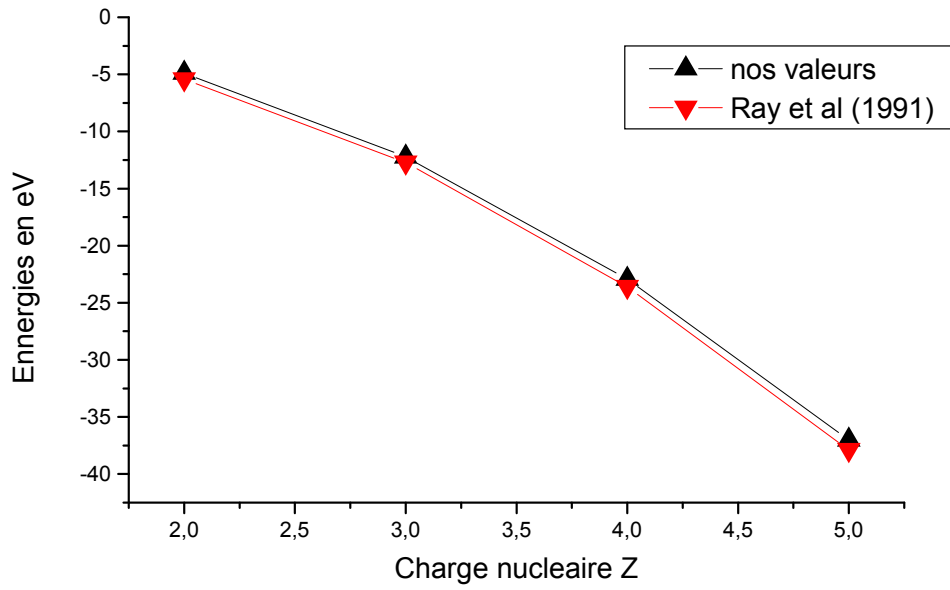


Figure 3c : Etat $4p^2 \ ^1D^e$

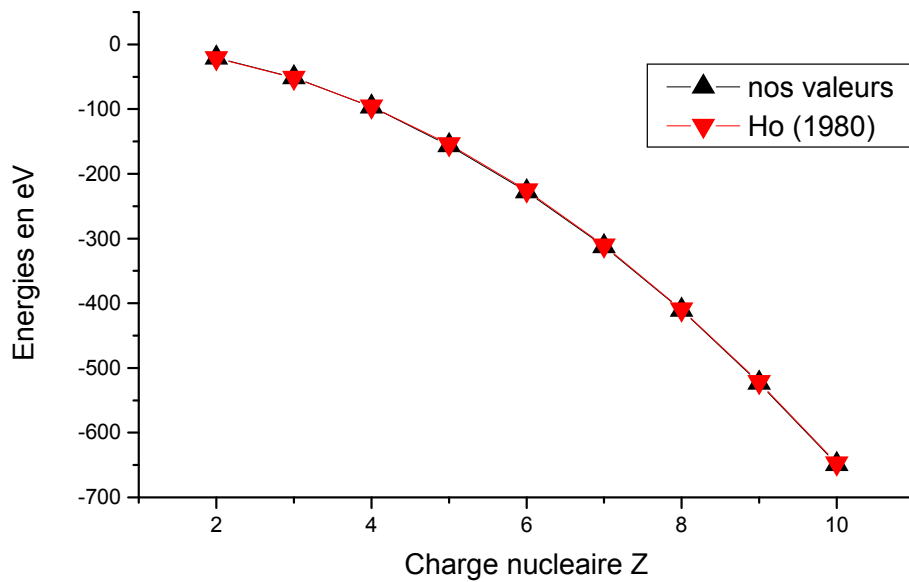
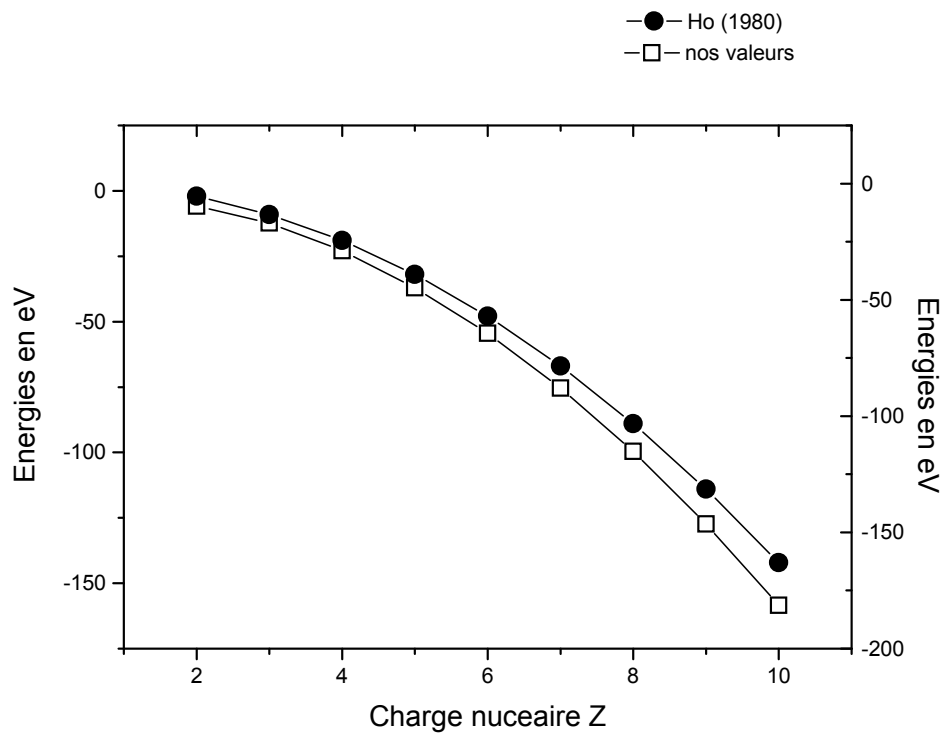


Figure 4 : Etat $2s^2 \ ^1S^e$

Figure 5. Courbes de comparaison entre les valeurs des énergies totales du présent travail avec celles obtenues par Ho (1980) pour l'état $4s^2 \ ^1S^e$



Dans le tableau 5 nous comparons nos résultants aux autres valeurs théoriques trouvées dans la littérature.

Concernant les états singulets doublement excités de l'hélium, des calculs ont été effectués par Fukuda et ses collaborateurs [115], ainsi que par Koyama et ses collaborateurs [116] sur la base de la méthode des coordonnées hypersphériques. Sinanoglu et Herrick [117] en utilisant la méthode de la théorie des groupes combinée au mixage des configurations, de même que Ho [118] en utilisant la méthode de la rotation complexe, ont eux aussi calculé les énergies des états singulets doublement excités de hélium.

Dans ce tableau 5 nous comparons d'abord nos résultats théoriques à ceux de Fukuda et ses collaborateurs, Koyama et ses collaborateurs, Ho et ainsi qu'à ceux de Sinanoglu et Herrick concernant les états doublement excités $2 p^2 \ ^1D^e$, $3 s^2 \ ^1S^e$, $3 p^2 \ ^1D^e$, $3 d^2 \ ^1G^e$, $4 p^2 \ ^1D^e$ et $4 f^2 \ ^1I^e$ de l'hélium. Nous remarquons que nos résultants sont en bon accord avec ceux de Fukuda, Koyama et leurs collaborateurs, Ho, Sinanoglu et Herrick.

Dans le tableau 5, nous comparons également nos résultats à ceux de Ray et ses collaborateurs qui ont utilisé la théorie variationnelle des perturbations dépendantes du temps [59] pour calculer les énergies des états singulets doublement excités $2 p^2 \ ^1D^e$, $3 s^2 \ ^1S^e$, $3 p^2 \ ^1D^e$, $3 d^2 \ ^1G^e$ et $4 p^2 \ ^1D^e$ des systèmes héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2, 3, 4$ et 5 . Leurs résultats qui ont été reporté dans ce tableau, proviennent des valeurs qui ont été publiées en unités atomiques (a.u.) et ceux relativement à l'état fondamental. Nous notons en général que la plupart de leurs résultats théoriques est en très bon accord avec les nôtres.

Dans le tableau 6, des comparaisons ont été faites concernant les états $2 s^2 \ ^1S^e$ et $4 s^2 \ ^1S^e$ où des résultats théoriques ont été obtenus par Ray et ses collaborateurs, ainsi que par Ho. Ce dernier a appliqué la méthode de la rotation complexe à quelques systèmes héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2-10$. Comme nous pouvons le remarquer, concernant l'état $2 s^2 \ ^1S^e$, nos résultats sont en meilleur accord avec ceux de Ho qu'avec ceux de Ray pour de faibles valeurs de Z . Pour des valeurs élevées de Z , la différence entre nos valeurs et celles de Ho ne dépasse pas 1,96 eV, Concernant l'état $4s^2 \ ^1S$, nos résultats sont en accord avec ceux de Ho et de Ray et ses collaborateurs pour de faibles valeurs

de Z . En revanche pour les valeurs élevées de Z , nous notons un faible désaccord entre nos résultats et ceux de Ho.

Ces désaccords peuvent s'expliquer par le choix que nous avons fait sur la partie angulaire de nos fonctions d'ondes qui décrivent mieux les systèmes atomiques ayant une faible valeur de la charge nucléaire Z . Ces désaccords peuvent être dus également au fait que nous avons négligé dans nos calculs les déplacements d'énergie de Feshbach dus aux interactions entre les canaux ouverts et les canaux fermés.

Dans le tableau 7 nous comparons nos résultats à ceux obtenus expérimentalement par l'analyse des électrons éjecté lors des collisions électroniques par Hicks et Comers [5], ainsi que par Gelebart et al [8] concernant les états $2s^2\ ^1S^e$ et $2p^2\ ^1D^e$ de l'atome He et de l'ion Li^+ ,

Nous comparons également nos résultats dans le tableau 7 à ceux obtenus expérimentalement par photoionisation par Diehl et ses collaborateurs [19] concernant toujours les états $2s^2\ ^1S^e$ et $2p^2\ ^1D^e$ de l'atome He et de l'ion Li^+ . Nous remarquons que nos résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux obtenus par Hicks et Comers, ainsi que par Gelebart et ses collaborateurs concernant les états $2s^2\ ^1S^e$ et $2p^2\ ^1D^e$ de l'atome He.

Pour l'état $2s^2\ ^1S^e$ de l'ion Li^+ , nos résultats sont en assez bon accord avec les valeurs expérimentales obtenues par Diehl et ses collaborateurs, tandis que pour l'état $2p^2\ ^1D^e$ nos résultats sont en très bon accord avec ceux de Diehl et ses collaborateurs.

Dans cette partie nous avons donc étudié les états singulets doublement excités $(nl)^2$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2 - 12$ et de nombre quantique principal $n = 2-4$ en utilisant la méthode variationnelle combinée à l'interaction des configurations. Nous avons alors obtenu à la suite de nos calculs les énergies totales des états singulets doublement excités $(nl)^2$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2- 12$ en utilisant des fonctions d'ondes de formes spéciales.

Ces calculs ont été effectués en employant un Hamiltonien réel et des bases de dimensions faibles contenant au maximum treize (13) fonctions. Nous avons également obtenu les composantes des vecteurs propres de quelques états singulets doublement excités $(nl)^2$. Les résultats de nos calculs

sur les énergies totales ont été comparés à d'autres valeurs théoriques et expérimentales disponibles dans la littérature. Ces comparaisons ont montré un bien meilleur accord pour des valeurs faibles de la charge nucléaire Z entre nos résultats et ces valeurs théoriques et expérimentales. Certains résultats de notre étude au niveau de ce chapitre, ont déjà fait l'objet d'une publication dans un journal international [123] et ont montré qu'il est possible avec l'approche théorique que nous avons utilisé, de décrire les états singulets de plus en plus fortement excités.

CHAPITRE III

CALCULS DES ENERGIES DES ETATS SINGULETS DOUBLEMENT
EXCITES $nlnl'$ DE L'HELIUM ET DES IONS HELIUMOIDES
DE CHARGE NUCLEAIRE $Z \leq 12$

III . 1 . Expressions de fonctions d'ondes des états singulets doublement excités $nlnl'$

Nous avons construit les fonctions d'ondes $\Phi_{jkmnll'}$ des états singulets doublement excités $nlnl'$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$ à partir d'une généralisation des fonctions d'ondes de type Hylleraas $\Phi_{jk mnl}$ des états singulets doublement excités $(nl)^2$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z \leq 12$ dont nous avons décrit les caractéristiques dans le chapitre précédent.

Ces fonctions d'ondes $\Phi_{jkmnll'}$ peuvent se mettre sous la forme générale suivante :

$$\begin{aligned} \Phi_{jkmnll'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right. \\ & \left. + (2r_1 2r_2)^{l'} \times \sum_{v'=0}^{v'=n-l'-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^{v'} \right\rangle \\ & \times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^m \exp(-\lambda (r_1 + r_2)); \quad (\text{III-1}) \end{aligned}$$

Avec,

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

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

n est le nombre quantique principal ;

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

$$\lambda = \frac{Z}{\alpha n r_0} ; \quad (\text{III-2})$$

où Z, α et r_0 sont respectivement la charge nucléaire, le paramètre variationnel et le rayon de Bohr.

Les fonctions d'onde totales du système à deux électrons dans une base de dimension D dans les états singulets doublement excités nl^2 sont des combinaisons linéaires des fonctions de base Φ_{jkmnl} et s'écrivent de la manière suivante :

$$\Psi_{nl^2} = \sum_{j,k,m} a_{jkm} \Phi_{jkmnl}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) ; \quad (\text{III-3})$$

où

a_{jkm} sont des coefficients à déterminer (voir chapitre II).

III . 2 . Calculs des éléments matriciels et de l'énergie totale

L'Hamiltonien H , et les opérateurs de l'énergie cinétique T des deux électrons, de l'énergie d'interaction Coulombienne entre le noyau et les deux électrons C , de l'énergie d'interaction Coulombienne entre les deux électrons W ainsi que les éléments matriciels correspondant à ces opérateurs, sont définis de la même manière que dans le cas des états $(nl)^2$ décrit dans le chapitre précédent.

III . 2 . 1 . Les éléments matriciels de la constante de normalisation

Les éléments matriciels N_{JKMnl^2} de la constante de normalisation sont donnés par l'expression suivante :

$$N_{JKMnl^2} = \left\langle \Phi_{jkmnl} \left| \Phi_{j'k'm'nl} \right. \right\rangle \quad (\text{III-4})$$

$$= \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_{j k m n l l'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times \Phi_{j' k' m' n l l'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (\text{III-5})$$

$$= \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^v + (2r_1 2r_2)^l \right. \\ \times \left. \sum_{v'=0}^{v'=n-l'-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^{v'} \right\rangle^2 \times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^m \\ \times \exp \left\langle - 2 \lambda (r_1 + r_2) \right\rangle \quad (\text{III-6})$$

III . 2 . 2 . Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons.

Les éléments matriciels $T_{j k m j' k' m' n l l'}$ de l'opérateur de l'énergie cinétique des deux électrons sont donnés par l'expression suivante :

$$T_{j k m j' k' m' n l l'} = \left\langle \Phi_{j k m n l l'} \left| -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_1 + \Delta_2) \right| \Phi_{j' k' m' n l l'} \right\rangle \quad (\text{III-7}) \\ = \frac{\hbar^2}{2m} \left[- \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^v + (2r_1 2r_2)^l \right. \right. \\ \times \left. \left. \sum_{v'=0}^{v'=n-l'-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^{v'} \right\rangle \times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^m \right]$$

$$\begin{aligned}
& \times \exp(-\lambda(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) \times (\Delta_1 + \Delta_2) \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right. \\
& + (2r_1 2r_2)^l \times \left. \sum_{v'=0}^{v'=n-l'-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^{v'} \right\rangle \\
& \times (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)^j (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^{k'} \left| \vec{r}_1 - \mathbf{r}_2 \right|^{m'} \times \exp(-\lambda(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) \Big] \quad (\text{III-8})
\end{aligned}$$

On peut écrire $T_{jkmj'k'm'nll'}$ sous la forme générale suivante :

$$T_{jkmj'k'm'nll'} = T'_{jkmj'k'm'nll'} + T''_{jkmj'k'm'nll'} \quad (\text{III-9})$$

où

$$\begin{aligned}
T_{jkmj'k'm'nll'} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[- \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v + (2r_1 2r_2)^l \right. \right. \\
& \times \left. \sum_{v'=0}^{v'=n-l'-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^{v'} \right\rangle^2 \times (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)^j (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^k \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^m \\
& \times \exp(-\lambda(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) (\Delta_1 + \Delta_2) (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)^j (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^{k'} \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^{m'} \\
& \times \exp(-\lambda(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) \Big] \quad (\text{III-10})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T''_{jkmj'k'm'nll'} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[- \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)^{j+j'} (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^{k+k'} \left| \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \right|^{m+m'} \right. \\
& \times \exp(-2\lambda(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)) \left. \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v'=0}^{v=n-l'-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^{v'} \rangle (\Delta_1 + \Delta_2) \langle (2r_1 2r_2)^l \\
& \times \left[\sum_{v=0}^{v=n-l-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^v + (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v'=0}^{v=n-l'-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^{v'} \right] \rangle \quad (III-11)
\end{aligned}$$

III . 2 . 3 . Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre le noyau et les deux électrons

$$C_{JKMnl'l'} = \left\langle \Phi_{jkmnl'l'} \left| C \right| \Phi_{j'k'm'n'l'l'} \right\rangle \quad (III-12)$$

$$C_{JKMnl'l'} = \left\langle \Phi_{jkmnl'l'} \left| -Ze^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right| \Phi_{j'k'm'n'l'l'} \right\rangle \quad (III-13)$$

$$C_{JKMnl'l'} = -Ze^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_{jkmnl'l'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \Phi_{j'k'm'n'l'l'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (III-14)$$

$$C_{JKMnl'l'} = -Ze^2 \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^v \right.$$

$$\left. + (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v'=0}^{v=n-l-1} \left(n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right)^{v'} \right\rangle^2$$

$$\times \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) (r_1 + r_2)^{j+j'} (r_1 - r_2)^{k+k'} \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^{m+m'} \exp(-2\lambda(r_1 + r_2)) \quad (III-15)$$

$$\begin{aligned}
C_{JKMnll'} &= -Ze^2 \iiint d^3r_1 d^3r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right. \\
&+ \left. (2r_1 2r_2)^{l'} \times \sum_{v'=0}^{v'=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^{v'} \right\rangle^2 \\
&\times \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) (r_1 + r_2)^J (r_1 - r_2)^K \left| \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \right|^M \exp(-2\lambda(r_1 + r_2))
\end{aligned} \tag{III-16}$$

III . 2 . 4 . Les éléments matriciels de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre les deux électrons

Les éléments matriciels $W_{JKMnll'}$ de l'opérateur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre les deux électrons sont définis par :

$$W_{JKMnll'} = \left\langle \Phi_{jkmnll'} \left| W \right| \Phi_{j'k'm'nll'} \right\rangle \tag{III-17}$$

$$W_{JKMnll'} = \left\langle \Phi_{jkmnll'} \left| \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right| \Phi_{j'k'm'nll'} \right\rangle \tag{III-18}$$

$$W_{JKMnll'} = e^2 \iiint d^3r_1 d^3r_2 \Phi_{jkmnll'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left(\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \Phi_{j'k'm'nll'}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{III-19}$$

$$\begin{aligned}
W_{JKM} &= e^2 \iiint d^3r_1 d^3r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right. \\
&+ \left. (2r_1 2r_2)^{l'} \times \sum_{v'=0}^{v'=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^{v'} \right\rangle^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times (r_1 + r_2)^{j+j'} (r_1 - r_2)^{k+k'} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{m+m'} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-1} \\
& \times \exp(-2\lambda(r_1 + r_2)) \tag{III-20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
W_{JKMnI'} &= e^2 \iiint d^3r_1 d^3r_2 \left\langle (2r_1 2r_2)^l \times \sum_{v=0}^{v=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^v \right. \\
&+ \left. (2r_1 2r_2)^{l'} \times \sum_{v'=0}^{v'=n-l'-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^{v'} \right\rangle^2 \\
&\times (r_1 + r_2)^j (r_1 - r_2)^k |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{M-1} \times \exp(-2\lambda(r_1 + r_2)) \tag{III-21}
\end{aligned}$$

$$W_{JKMnI'} = e^2 N_{JKM-1nI'} \tag{III-22}$$

Les procédures de calculs des éléments matriciels ainsi que de l'énergie totale sont les mêmes que celles utilisées dans le chapitre II.

III. 3 . Résultats et discussions

Dans cette partie nous présentons et discutons les résultats de nos calculs sur les énergies totales E des états singulets doublement excités $nl'nl$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2 - 12$.

Nous avons reporté dans les tableaux **8** et **9**, les résultats de nos calculs sur les énergies totales E et les coefficients λ de dix (10) états singulets doublement excités $nl'nl$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2 - 12$ avec $n = 2,3,4$.

Dans les tableaux **10**, **11**, **12** nous comparons les résultats de nos calculs aux autres résultats théoriques que nous avons rencontrés dans la littérature.

Pour les calculs des caractéristiques des états $3p3d\ ^1F^o$, $4s4f\ ^1F^o$ et $4p4d\ ^1F^o$ de l'hélium des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2 - 10$, Bhatia et Ho [121] ont utilisé la méthode de la rotation complexe. De même, Ho [69, 118] a utilisé la méthode de la rotation complexe concernant les calculs des caractéristiques en 1980 des états $4d4f\ ^1H^o$, $2s2p\ ^1P^o$ et $4s4p\ ^1P^o$ et en 1989 pour les états $4p4f\ ^1G^e$ et $4s4d\ ^1D^e$ de l'hélium des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2 - 10$. L'état $4s4d\ ^1D^e$ a aussi été étudié par Ho et Bhatia [76] en utilisant la méthode de la rotation complexe.

Bachau et ses collaborateurs [109] ont utilisé la méthode des opérateurs de projection de Feschbach pour les calculs des caractéristiques des états $3p3d\ ^1F^o$ de l'hélium et des ions héliumoïdes. Concernant l'état $3s3d\ ^1D^e$, il a fait l'objet d'étude aussi bien par Ho et Bhatia [76] par l'utilisation de la méthode de la rotation complexe, que par Bachau et ses collaborateurs [109] utilisant la méthode des opérateurs de projection de Feschbach.

Concernant l'état $3s3p\ ^1P^o$, Lipsky et ses collaborateurs [52] ont eu à utiliser la méthode de diagonalisation tronquée, tandis que Wagué [23] a utilisé la méthode de diagonalisation.

Pour comparer nos résultats avec d'autres valeurs théoriques, nous utilisons les conversions suivantes : $1\text{ a.u.} = 27,211396\text{ eV} = 2Ry$.

Pour comparer nos résultats avec les valeurs expérimentales, nous utilisons pour l'état fondamental de l'hélium : $E = 2,9037$ a.u. et pour l'ion Li^+ : $E = 7,2799$ a.u. [114].

Dans le tableaux **10** nous comparons nos résultats à ceux de Bhatia et Ho, ainsi qu'à ceux de Bachau et de ses collaborateurs pour l'état $3p3d \ ^1F^o$. Nous comparons également nos résultats à ceux de Bhatia et Ho pour l'état $4p4d \ ^1F^o$, ainsi qu'à ceux de Ho pour les états $4p4f \ ^1G^e$ et $4d4f \ ^1H^o$.

Pour de faibles valeurs de Z , nous remarquons que nos résultats sont en général en bon accord avec les résultats obtenus par Bhatia et Ho, Bachau et ses collaborateurs, ainsi que par Ho. Pour des valeurs élevées de Z , nous notons un léger désaccord.

Dans le tableau 11, des comparaisons ont été faites entre nos résultats et ceux obtenus par Ho pour les états $2s2p \ ^1P^o$ et $4s4p \ ^1P^o$, par Lipsky et ses collaborateurs, ainsi que par Wagué pour l'état $3s3p \ ^1P^o$. L'accord entre nos résultats et ceux de Wagué, de Lipsky et de ses collaborateurs, est bon. L'accord entre nos résultats et ceux obtenus par Ho est en général meilleur pour de faibles valeurs de Z .

Dans le tableau 12, des comparaisons sont faites avec les résultats théoriques obtenus par Bachau et ses collaborateurs, ainsi que par Ho et Bhatia pour l'état $3s3d \ ^1D^e$. Nous comparons dans ce même tableau 12, nos résultats à ceux de Ho, Ho et Bhatia, pour l'état $4s4d \ ^1D^e$, ainsi qu'à ceux de Bhatia et Ho pour l'état $4s4f \ ^1F^o$. Nos résultats sont en très bon accord avec ceux de Bhatia et Ho pour l'état $4s4f \ ^1F^o$ aussi bien pour de faibles valeurs de Z que pour des valeurs élevées de Z .

Le tableau **12** met également en évidence pour de faibles valeurs de Z , un bon accord entre nos résultats et ceux de Ho et Bhatia, Bachau et de ses collaborateurs pour l'état $3s3d \ ^1D^e$; Ho et Bhatia, puis Ho pour l'état $4s4d \ ^1D^e$. Concernant les valeurs élevées de Z , nous notons un petit désaccord avec les résultats théoriques obtenus par Ho et Bhatia, ainsi que par Bachau et ses collaborateurs.

Les désaccords notés entre nos résultats et ceux obtenus par d'autres méthodes théoriques peuvent être expliqués par le fait que nous avons négligé dans nos calculs les déplacements d'énergie de Feschbach. Ces désaccords sont aussi dus au choix des fonctions d'onde qui décrivent mieux les états des systèmes atomiques dont la charge nucléaire est faible.

Tableau 8. Energies E et coefficients λ concernant les états singulets doublement excités $nlnl'$ des systèmes héliumoides ($Z = 2-7$). Les énergies E sont en eV.

States		Z = 2	Z = 3	Z = 4	Z = 5	Z = 6	Z = 7
2s2p $^1P^o$	E	-19,418652	-48,293578	-91,658726	-147,692648	-217,187922	-301,937734
	λ	0,8324	1,5158	1,7579	2,239	2,7125	3,1952
3s3p $^1P^o$	E	-9,016202	-22,775297	-42,914668	-69,452763	-102,397447	-141,753767
	λ	0,7199	1,718	1,5088	1,9088	2,2906	2,7052
3s3d $^1D^e$	E	-8,794035	-22,175118	-41,762535	-67,576303	-99,626221	-137,916907
	λ	0,7544	1,1453	1,5271	1,9562	2,3475	2,7732
3p3d $^1F^o$	E	-8,620291	-21,661076	-40,733562	-65,866736	-97,074241	-134,362752
	λ	0,9332	1,3793	1,8127	2,2337	2,6804	3,1272
4s4p $^1P^o$	E	-4,894006	-12,236742	-22,941449	-37,025508	-54,498242	-75,368139
	λ	0,859	1,2324	1,5748	1,9685	2,3622	2,6457
4s4d $^1D^e$	E	-4,893971	-12,23661	-22,941115	-37,024924	-54,497333	-75,366611
	λ	0,859	1,2324	1,5748	1,9685	2,3622	2,6457
4s4f $^1F^o$	E	-4,890187	-12,225434	-22,917302	-36,982449	-54,43135	-75,269948
	λ	0,8999	1,3498	1,718	2,1474	2,4649	2,8757
4p4d $^1F^o$	E	-4,893967	-12,236608	-22,941111	-37,024916	-54,49732	-75,366588
	λ	0,859	1,2324	1,5748	1,9685	2,3622	2,6457
4p4f $^1G^e$	E	-4,890175	-12,225433	-22,917299	-36,982444	-54,43134	-75,269934
	λ	0,8999	1,3498	1,718	2,1474	2,4649	2,8757
4d4f $^1H^o$	E	-4,890159	-12,225342	-22,917064	-36,982032	-54,430577	-75,268836
	λ	0,8999	1,3498	1,718	2,1474	2,4649	2,8757

Tableau 9. Energies E et coefficients λ concernant les états singulets doublement excités $nlnl'$ des systèmes héliumoides ($Z = 8-12$). Les énergies E sont en eV.

States		Z = 8	Z = 9	Z = 10	Z = 11	Z = 12
2s2p $^1P^o$	E	-399,282016	-509,739217	-633,027452	-771,967231	-923,481999
	λ	3,6517	4,1081	4,6091	5,07	5,5854
3s3p $^1P^o$	E	-187,520927	-239,703367	-298,304087	-363,317953	-434,745133
	λ	3,0916	3,5213	3,9125	4,3038	4,695
3s3d $^1D^e$	E	-182,451757	-232,229175	-288,255451	-353,530603	-423,052056
	λ	3,1694	3,5656	4,0122	4,4134	4,8146
3p3d $^1F^o$	E	-177,736257	-227,197137	-282,746902	-344,386551	-412,116770
	λ	3,5739	4,0207	4,4675	4,9142	5,361
4s4p $^1P^o$	E	-99,638228	-127,311348	-158,389552	-192,875421	-230,770816
	λ	3,0236	3,4016	3,7795	3,9976	4,361
4s4d $^1D^e$	E	-99,636144	-127,30862	-158,386092	-192,870498	-230,764850
	λ	3,0236	3,4016	3,7795	3,9976	4,361
4s4f $^1F^o$	E	-99,503098	-127,134111	-158,164411	-192,595506	-230,428530
	λ	3,1496	3,5433	3,937	4,3307	4,5454
4p4d $^1F^o$	E	-99,636111	-127,308577	-158,386036	-192,870414	-230,764747
	λ	3,0236	3,4016	3,7795	3,9976	4,361
4p4f $^1G^e$	E	-99,503072	-127,134077	-158,164368	-192,595452	-230,428449
	λ	3,1496	3,5433	3,937	4,3307	4,7244
4d4f $^1H^o$	E	-99,501306	-127,131766	-158,161436	-192,591824	-230,424051
	λ	3,1496	3,5433	3,937	4,3307	4,7244

Tableau 10. Comparaison des résultats de nos calculs avec d'autres résultats théoriques concernant les énergies des états doublement excités $3p3d\ ^1F^o$, $4p4d\ ^1F^o$, $4p4f\ ^1G^e$ et $4d4f\ ^1H^o$ des systèmes héliumoides ($Z = 2-10$). Les valeurs des énergies sont en eV.

Z	$3p3d\ ^1F^o$			$4p4d\ ^1F^o$		$4p4f\ ^1G^e$		$4d4f\ ^1H^o$	
	Present results	Bhatia and Ho (1998) [121]	Bachau et al (1991) [109]	Present results	Bhatia and Ho (1998) [121]	Present results	Ho (1989) [118]	Present results	Ho (1989) [69]
	E	E	E	E	E	E	E	E	E
2	-8,620291	-8,27892	-8,274985	-4,893967	-5,113347	-4,890175	-4,976596	-4,890159	-4,865
3	-21,661076	-21,007747	-20,980452	-12,236608	-12,628509	-12,225433		-12,225342	-12,204
4	-40,733562	-39,727417	-39,674215	-22,941111	-23,539163	-22,917299		-22,917064	-20,781
5	-65,866736	-64,465161	-64,382162	-37,024916	-37,852643	-36,982444		-36,982032	-34,143
6	-97,074241	-95,233379	-95,13104	-54,497320	-55,569058	-54,431340		-54,430577	
7	-134,362752	-132,038349	-131,920847	-75,366588	-76,687958	-75,269934		-75,268836	
8	-177,736257	-174,883546	-174,751585	-99,636111	-101,209113	-99,503072		-99,501306	
9	-227,197137	-223,771051	223,650463	-127,308577	-129,132346	-127,134077		-127,131766	
10	-282,746902	-278,675212	-278,644695	-158,386036	-160,457547	-158,164368		-158,161436	

Tableau 11. Comparaison des résultats de nos calculs avec d'autres résultats théoriques concernant les énergies des états doublement excités $2s2p\ ^1P^o$, $4s4p\ ^1P^o$ et $3s3p\ ^1P^o$ des systèmes héliumoides ($Z = 2-10$). Les valeurs des énergies sont en eV.

Z	$2s2p\ ^1P^o$		$3s3p\ ^1P^o$			$4s4p\ ^1P^o$	
	Present results	Ho (1980) [69]	Present results	Lipsky et al (1977) [52]	Wague (1987) [23]	Present results	Ho (1980) [69]
	E	E	E	E	E	E	E
2	-19,418652	-18,861171	-9,016202	-9,115681	-9,10373	-4,894006	-5,291946
3	-48,293578	-47,825661	-22,775297	-22,542437	-22,326241	-12,236742	-12,950985
4	-91,658726	-90,327684	-42,914668	-42,003646	-42,037939	-22,941449	-24,011017
5	-147,692648	-146,403025	-69,452763	-67,506901	-67,524265	-37,025508	-38,45844
6	-217,187922	-216,066103	-102,397447		-99,027941	-54,498242	-56,306856
7	-301,937734	-299,324404	-141,753767			-75,368139	-77,556267
8	-399,282016	-396,181317	-187,520927			-99,638228	-102,220275
9	-509,739217	-506,640138	-239,703367			-127,311348	-130,271674
10	-633,027452	-630,699614	-298,304087			-158,389552	-161,724066

Tableau 12. Comparaison des résultats de nos calculs avec d'autres résultats théoriques concernant les énergies des états doublement excités $3s3d\ ^1D^e$, $4s4d\ ^1D^e$ et $4s4f\ ^1F^o$ des systèmes héliumoides ($Z=2-10$). Les valeurs des énergies sont en eV.

Z	$3s3d\ ^1D^e$			$4s4d\ ^1D^e$			$4s4f\ ^1F^o$	
	Present results	Ho and Bhatia (1991) [76]	Bachau et al (1991) [109]	Present results	Ho and Bhatia (1991) [76]	Ho (1989) [118]	Present results	Bhatia and Ho (1998) [121]
	E	E	E	E	E	E	E	E
2	-8,794035	-9,338216	-8,958190	-4,893971		-5,223499	-4,890187	-4,8742
3	-22,175118	-22,916485	-22,316561	-12,236610	-12,623380		-12,225434	-12,2682
4	-41,762535	-42,544609	-41,715070	-22,941115	-23,542429		-22,917302	-23,0472
5	-67,576303	-68,220874	-67,157725	-37,024924	-37,859351		-36,982449	-37,2200
6	-99,626221	-99,94528	-98,668521	-54,497333	-55,579140		-54,431350	-54,7908
7	-137,916907	-137,716875	-136,193036	-75,366611	-76,698448		-75,269948	-75,7613
8	-182,451757	-181,537427	-179,785693	-99,636144	-101,237005		-99,503098	-100,1325
9	-232,229175	-231,403126	-229,419279	-127,308620	-129,153584		-127,134111	-127,9046
10	-288,255451	-287,315742	-285,175430	-158,386092	-160,470500		-158,164411	-159,0779

Tableau 13. Comparaison des résultats de nos calculs avec quelques résultats expérimentaux concernant les énergies des états doublement excités $2s2p\ ^1P^o$, $3s3p\ ^1P^o$ et $4s4p\ ^1P^o$ de l'atome He et de l'ion Li^+ . L'énergie est mesurée à partir de l'état fondamental de chaque système atomique. 1 a.u. = 2 Ry = 27,211396 eV

States	Z = 2					Z = 3		
	Present results	Dhez and Ederer (1973) [83]	Kossmann and al (1988) [84]	Woodruff and Samson (1982) [86]	other results	Present results	Diehl et al (1999) [19]	Carroll and Kennedy (1999) [89]
	E	E	E	E	E	E	E	E
$2s2p\ ^1P^o$	59,58		60,13		60,15 a	149,61	150,31	150,29
$3s3p\ ^1P^o$	70,01	69,92	69,91	69,92	69,88 b	175,35		
$4s4p\ ^1P^o$	74,12	73,76		73,66		185,88		

a Morgan and Ederer (1984) [119]

b Zubek et al (1989) [90]

Figure 6. Courbes de comparaison entre les valeurs des énergies totales du présent travail et celles obtenues par Bachau et al (1991) pour l'état $3p3d\ ^1F^0$

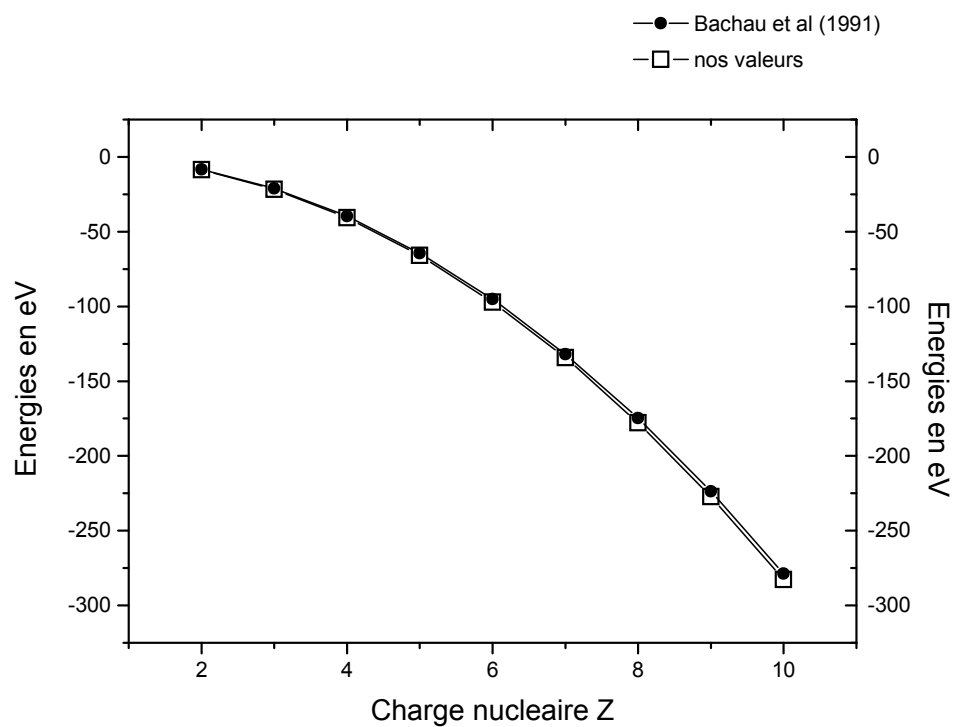


Figure 7. Courbes de comparaison entre les valeurs des énergies totales du présent travail et celles obtenues par Ho (1980) pour l'état $2s2p\ ^1P^o$

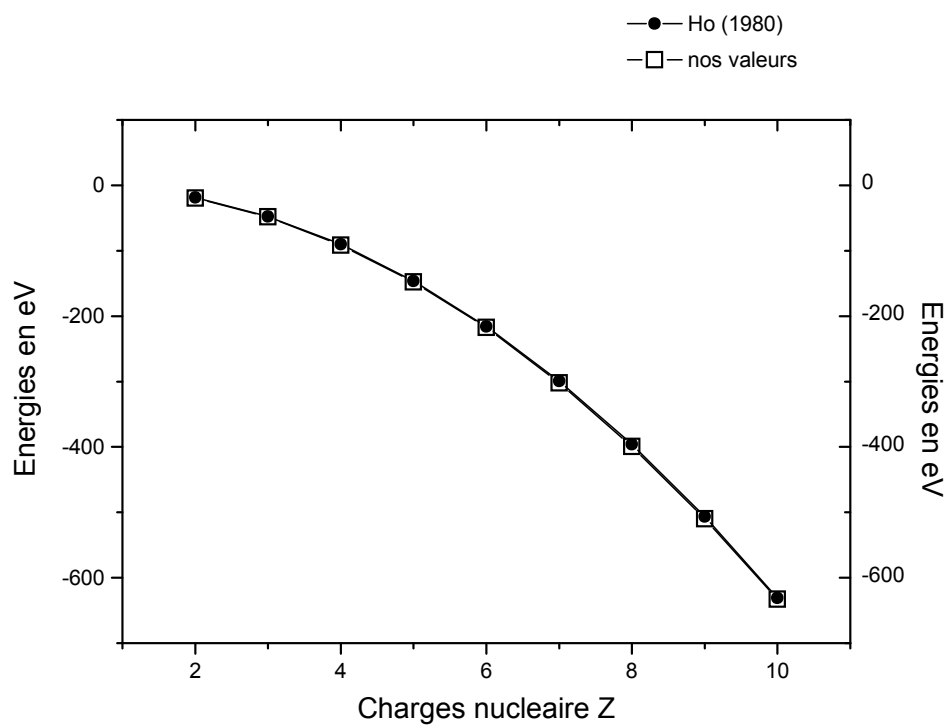
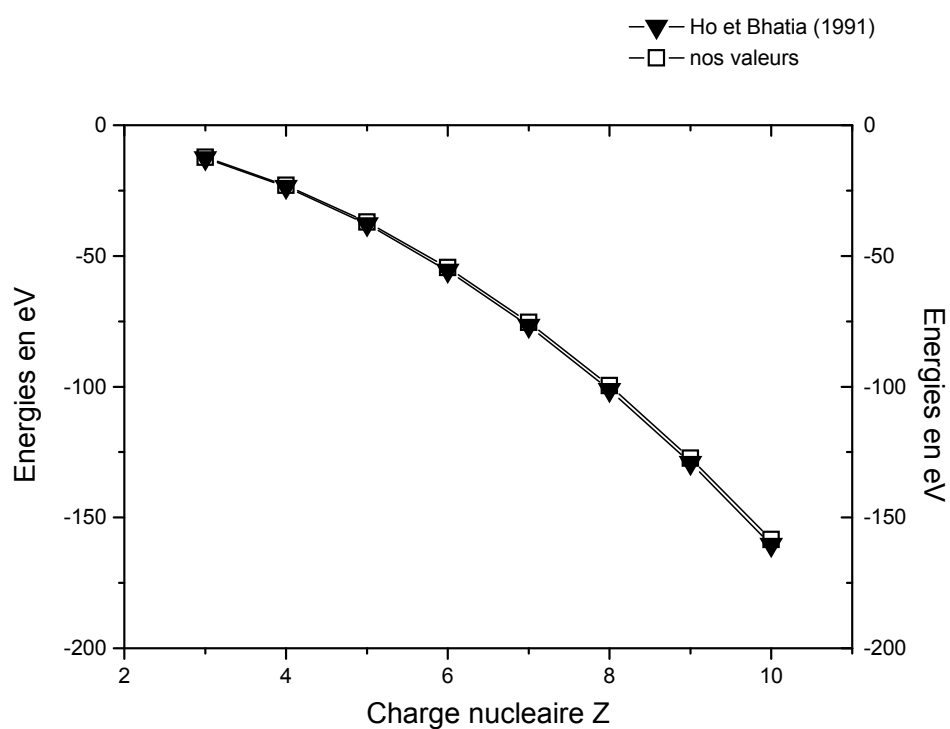


Figure 8. Courbes de comparaison entre les valeurs energies totales du présent travail et celles obtenues par Ho et Bhatia pour l'état $4s4d\ ^1D^e$



Dans le tableau **13** nous comparons nos résultats à ceux obtenus à l'aide des expériences de photoabsorption par Dhez et Ederer [83], Kossmann et al [84], Morgan et Ederer [119], Zubek et al [90], Woodruff et Samson [86] concernant les états $2s2p\ ^1P^o$, $3s3p\ ^1P^o$ et $4s4p\ ^1P^o$ de l'hélium. Pour l'état $2s2p\ ^1P^o$ de l'hélium, nous notons un accord satisfaisant entre nos résultats et ceux de Kossmann et de ses collaborateurs, Morgan et Ederer. Concernant l'état $3s3p\ ^1P^o$ de l'hélium nous trouvons un très bon accord entre nos résultats et ceux de Dhez et Ederer, Kossmann et ses collaborateurs, Woodruff et Samson, Zubek et ses collaborateurs. Pour l'état $4s4p\ ^1P^o$ de l'hélium nous remarquons que nos résultats sont en bon accord avec ceux de Dhez et Ederer, Woodruff et Samson.

Dans le tableau **13** nous comparons également nos résultats à ceux obtenus à l'aide des expériences de photoionisation par Diehl et ses collaborateurs [19], ainsi que de photoabsorption par Carroll et Kennedy [89] concernant l'état $2s2p\ ^1P^o$ de l'ion Li^+ . Comme on peut le remarquer, nous notons un accord satisfaisant entre nos résultats et ceux de Carroll et Kennedy, ainsi qu'avec ceux de Diehl et ses collaborateurs.

Nous avons donc présenté dans cette partie de notre travail les procédures de calculs et les résultats concernant les énergies totales des états singulets doublement excités $^1P^o$, $^1D^e$, $^1F^o$, $^1G^e$ et $^1H^o$ de l'hélium et de sa série isoélectronique de charge nucléaire $Z = 2-12$, en combinant de façon originale la méthode variationnelle et la théorie de l'interaction des configurations. Ces résultats, comme nous l'avons indiqué plus haut, ont l'avantage d'utiliser quelques formes spéciales de fonction d'ondes.

Les résultats que nous venons de présenter dans ce chapitre sont généralement en accord pour de faibles valeurs de Z avec les résultats théoriques et expérimentaux disponibles et ont fait l'objet d'un article déjà accepté pour publication dans le journal international *Physica Scripta* [124].

CONCLUSION GENERALE

Dans le présent travail, en combinant de façon originale la méthode variationnelle et la théorie de l'interaction des configurations, nous avons étudié les états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nl\bar{n}l'$ avec $n \leq 4$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2-12$. A la suite de cette étude, nous avons obtenu des résultats systématiques sur les énergies totales de ces états doublement excités. Nous avons ensuite comparé ces résultats avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux disponibles. Nous pouvons donc tirer de cette étude les conclusions suivantes :

- 1) Nous avons introduit pour la première fois des fonctions d'ondes de forme spéciale pour la description des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nl\bar{n}l'$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2-12$. Ces fonctions d'ondes ont été construites sur la base des fonctions d'onde hydrogénoïdes incomplètes et des fonctions d'ondes de type Hylleraas.
- 2) Pour les calculs des énergies totales des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nl\bar{n}l'$ de l'hélium et des ions héliumoïdes de charge nucléaire $Z = 2-12$, nous avons utilisé un Hamiltonien réel alors que la plupart des méthodes théoriques telles que la méthode de la rotation complexe ou la théorie variationnelle des perturbations dépendantes du temps, utilise un Hamiltonien complexe. De plus nous avons utilisé des bases de faibles dimensions contenant au maximum treize (13) fonctions pour obtenir des résultats comparables à ceux des autres méthodes théoriques qui utilisent des bases de plus d'une centaine de fonctions. Nous avons ainsi démontré la possibilité de faire des calculs très complexes sur les états atomiques excités avec des moyens de calculs limités à des ordinateurs de bureaux.
- 3) Cette étude nous a permis de montrer qu'il est possible avec l'approche théorique que nous avons utilisée, de décrire de manière très satisfaisante les états singulets de plus en plus fortement excités.

- 4) Les résultats que nous avons obtenus et dont certains ont fait l'objet de publications dans des revues internationales [122-124], peuvent aider au déchiffrement des spectres des ions multichargés.
- 5) Dans la perspective d'un travail futur, nous pensons qu'il serait intéressant d'explorer une possible extension des études que nous venons de faire aux autres états singulets doublement excités $nln'l'$ de valence différente (intershell states). Il est également envisageable d'étendre ces études à la description des états excités du lithium et des systèmes atomiques à trois électrons.

Annexes

Annexe 1 Calcul des expressions de quelques éléments matriciels

Annexe 1.1. Les détails des calculs des éléments matriciels de la constante de normalisation de l'état singulet doublement excité $2s^2 \ ^1S$

A titre d'exemple, nous mettons dans cet annexe les détails des calculs des éléments matriciels de la constante de normalisation N_{JKM} de la fonction d'onde de l'état singulet doublement excité $2s^2 \ ^1S$. Les calculs des autres éléments matriciels se font de la même manière.

L'expression générale de la constante de normalisation N_{JKM} est donnée par l'expression suivante :

$$N_{JKM} = \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 (2r_1 2r_2)^{2l} \times \left\langle \sum_{\nu=0}^{\nu=n-l-1} (n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2)^\nu \right\rangle^2 \times (r_1 + r_2)^Y \\ \times (r_1 - r_2)^K |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^M \times \exp\langle -2\lambda(r_1 + r_2) \rangle$$

Pour l'état singulet doublement excité $2s^2 \ ^1S$, on a :

$$N_{JKM} = \iiint d^3 r_1 d^3 r_2 \times \left\langle 1 + n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 \right\rangle^2 \times (r_1 + r_2)^Y \\ \times (r_1 - r_2)^K |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^M \times \exp\langle -2\lambda(r_1 + r_2) \rangle$$

L'intégrale dépend uniquement de r_1 et r_2 , ainsi que de l'angle γ entre r_1 et r_2 .

L'intégrale sur les autres coordonnées angulaires donne $8\pi^2$.

$$\begin{aligned}
N_{JKM} &= 8\pi^2 \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{-1}^1 d(\cos \gamma) \left\langle 1 + 2n^2 r_0^2 \lambda^2 2r_1 2r_2 + n^4 r_0^4 \lambda^4 4r_1^2 4r_2^2 \right\rangle \\
&\quad \times r_1^2 r_2^2 (r_1 + r_2)^J (r_1 - r_2)^K (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \gamma)^{M/2} \\
&\quad \times \exp \left\langle -2\lambda (r_1 + r_2) \right\rangle
\end{aligned}$$

posons $u = \cos \gamma$; $v = r_1 + r_2$; $w = r_1 - r_2$

L'intégrale devient :

$$\begin{aligned}
N_{JKM} &= 8\pi^2 \int_0^\infty dv \int_{-v}^v dw \int_{-1}^1 du \left\langle 1 + 2n^2 r_0^2 \lambda^2 (v^2 - w^2) + n^4 r_0^4 \lambda^4 (v^2 - w^2)^2 \right\rangle \\
&\quad \times \left(\frac{(v^2 - w^2)}{4} \right)^2 v^J w^K \left(\frac{v^2 + w^2 - u(v^2 - w^2)}{2} \right)^{M/2} \\
&\quad \times \exp(-2\lambda v)
\end{aligned}$$

L'intégrale sur u donne

$$\begin{aligned}
N_{JKM} &= \frac{\pi^2}{M+2} \int_0^\infty dv \int_{-v}^v dw \left\langle 1 + 2n^2 r_0^2 \lambda^2 (v^2 - w^2) + n^4 r_0^4 \lambda^4 (v^2 - w^2)^2 \right\rangle \\
&\quad \times (v^2 - w^2) v^J w^K \left(v^{M+2} - |w|^{M+2} \right) \times \exp(-2\lambda v)
\end{aligned}$$

L'intégrale sur w donne :

$$\begin{aligned}
N_{JKM} &= \frac{\pi^2}{M+2} \int_0^\infty dv \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \\
&\times v^{J+K+M+5} \times \exp(-2\lambda v) \\
&+ \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_0\lambda)^2 \int_0^\infty dv \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} - \frac{1}{K+M+7} \right] \\
&\times v^{J+K+M+7} \times \exp(-2\lambda v) \\
&+ \frac{\pi^2}{M+2} (nr_0\lambda)^4 \int_0^\infty dv \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} \right. \\
&\left. - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] \\
&\times v^{J+K+M+9} \times \exp(-2\lambda v)
\end{aligned}$$

L'intégrale sur v donne

$$N_{JKM} = \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right]$$

$$\begin{aligned}
& \times (J+K+M+5)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+6} \\
& + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} - \frac{1}{K+M+7} \right] \\
& \times (J+K+M+7)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+8} \\
& + \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+10}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

Annexe 1.2. Expressions de quelques éléments matriciels des états doublement excité (nl)²

Etat 2s²

$$\begin{aligned}
 N_{JKM} &= \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \\
 &\quad \times (J+K+M+5)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+6} \\
 &+ \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} - \frac{1}{K+M+7} \right] \\
 &\quad \times (J+K+M+7)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+8} \\
 &+ \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+10}
 \end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$\begin{aligned}
C_{JKM} &= \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+M+3} \right] \\
&\quad \times (J+K+M+4)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+5} \\
&\quad + \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \\
&\quad \times (J+K+M+6)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+7} \\
&\quad + \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{K+M+7} \right] (J+K+M+8)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+9}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$C_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $2p^2$

$$\begin{aligned}
N_{JKM} &= \\
&\quad \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
&\quad \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+10}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$C_{JKM} = -Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} - \frac{1}{K+M+7} \right] (J+K+M+8)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+9}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$C_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $3s^2$

$$N_{JKM} = \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \times (J+K+M+5)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+6} + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} - \frac{1}{K+M+7} \right]$$

$$\begin{aligned}
& \times (J + K + M + 7)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J + K + M + 8} \\
& + \frac{6\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J + K + M + 9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J + K + M + 10} \\
& + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^6 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J + K + M + 11)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J + K + M + 12} \\
& + \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^8 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J + K + M + 13)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J + K + M + 14}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6, \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7, \dots$

$$\begin{aligned}
C_{JKM} = & - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+M+3} \right] \\
& \times (J+K+M+4)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+5} \\
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \\
& \times (J+K+M+6)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+7} \\
& - Z e^2 \frac{24\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{1}{K+M+7} \right] (J+K+M+8)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+9} \\
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^6 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+10)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+11} \\
& - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^8 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+12)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+13}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$$C_{JKM} = 0 \text{ pour } K = 1, 3, 5, 7 \dots$$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $3p^2$

$$\begin{aligned}
N_{JKM} = & \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+10} \\
& + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+11)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+12} \\
& + \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J+K+M+13)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+14}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$\begin{aligned}
C_{JKM} = & -Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{1}{K+M+7} \right] (J+K+M+8)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+9} \\
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+10)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+11} \\
& - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} - \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+12)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+13}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$$C_{JKM} = 0 \text{ pour } K = 1, 3, 5, 7 \dots$$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $3d^2$

$$N_{JKM} = \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\ \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\ \times (J+K+M+13)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+14}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$$N_{JKM} = 0 \text{ pour } K = 1, 3, 5, 7 \dots$$

$$C_{JKM} = -Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} - \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right]$$

$$- \left[\frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+12)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+13}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$$C_{JKM} = 0 \text{ pour } K = 1, 3, 5, 7 \dots$$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $4s^2$

$$\begin{aligned} N_{JKM} &= \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \\ &\quad \times (J+K+M+5)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+6} \\ &+ \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} - \frac{1}{K+M+7} \right] \\ &\quad \times (J+K+M+7)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+8} \\ &+ \frac{6\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \Big] (J+K+M+9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+10} \\
& + \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^6 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right. \\
& - \left. \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+11)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+12} \\
& + \frac{6\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^8 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& + \left. \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J+K+M+13)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+14} \\
& + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^{10} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& + \left. \frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} - \frac{1}{K+M+15} \right] \\
& \times (J+K+M+15)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{7}{K+3} + \frac{21}{K+5} - \frac{35}{K+7} + \frac{35}{K+9} - \frac{21}{K+11} + \frac{7}{K+13} - \frac{1}{K+15} \right. \\
& - \frac{1}{K+M+3} + \frac{7}{K+M+5} - \frac{21}{K+M+7} + \frac{35}{K+M+9} - \frac{35}{K+M+11} + \frac{21}{K+M+13} \\
& \left. - \frac{7}{K+M+15} + \frac{1}{K+M+17} \right] (J+K+M+17)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+18}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$\begin{aligned}
C_{JKM} &= - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+M+3} \right] \\
&\quad \times (J+K+M+4)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+5} \\
&\quad - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{1}{K+3} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{1}{K+M+5} \right] \\
&\quad \times (J+K+M+6)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+7} \\
&\quad - Z e^2 \frac{24\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{K+M+7} \Big] (J+K+M+8)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+9} \\
& - Z e^2 \frac{32\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^6 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+10)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+11} \\
& - Z e^2 \frac{24\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^8 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+12)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+13} \\
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^{10} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J+K+M+14)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+15} \\
& - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^{12} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{K+M+3} + \frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} \\
& - \frac{1}{K+M+15} \Big] (J+K+M+16)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+17}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$C_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $4p^2$

$$\begin{aligned}
N_{JKM} &= \frac{6\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& \left. - \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+9)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+10} \\
& + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \Big] (J+K+M+11)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+12} \\
& + \frac{6\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J+K+M+13)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+14} \\
& + \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^6 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} - \frac{1}{K+M+15} \right] \\
& \times (J+K+M+15)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+16} \\
& + \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^8 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{7}{K+3} + \frac{21}{K+5} - \frac{35}{K+7} + \frac{35}{K+9} - \frac{21}{K+11} + \frac{7}{K+13} - \frac{1}{K+15} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{K+M+3} + \frac{7}{K+M+5} - \frac{21}{K+M+7} + \frac{35}{K+M+9} - \frac{35}{K+M+11} + \frac{21}{K+M+13} \\
& - \left[\frac{7}{K+M+15} + \frac{1}{K+M+17} \right] (J+K+M+17)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+18}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$\begin{aligned}
C_{JKM} &= - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{2}{K+3} + \frac{1}{K+5} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{2}{K+M+5} \right. \\
& - \left. \frac{1}{K+M+7} \right] (J+K+M+8)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+9} \\
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{3}{K+3} + \frac{3}{K+5} - \frac{1}{K+7} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{3}{K+M+5} \right. \\
& - \left. \frac{3}{K+M+7} + \frac{1}{K+M+9} \right] (J+K+M+10)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - Z e^2 \frac{24\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+} \right. \\
& \left. - \frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+12)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^6 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J+K+M+14)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+15}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^8 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} \right. \\
& \left. - \frac{1}{K+M+3} + \frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} \right]
\end{aligned}$$

$$- \frac{1}{K+M+15} \Big] (J+K+M+16)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+17}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6, \dots$

$C_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7, \dots$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $4d^2$

$$N_{JKM} = \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\ \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right]$$

$$\times (J+K+M+13)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+14}$$

$$+ \frac{4\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} - \frac{1}{K+M+3} \right]$$

$$\begin{aligned}
& + \left[\frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} - \frac{1}{K+M+15} \right] \\
& \times (J+K+M+15)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+16} \\
& + \frac{2\pi^2}{M+2} (nr_o\lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{7}{K+3} + \frac{21}{K+5} - \frac{35}{K+7} + \frac{35}{K+9} - \frac{21}{K+11} + \frac{7}{K+13} - \frac{1}{K+15} \right. \\
& - \frac{1}{K+M+3} + \frac{7}{K+M+5} - \frac{21}{K+M+7} + \frac{35}{K+M+9} - \frac{35}{K+M+11} + \frac{21}{K+M+13} \\
& \left. - \frac{7}{K+M+15} + \frac{1}{K+M+17} \right] (J+K+M+17)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+18}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6, \dots$

$N_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7, \dots$

$$C_{JKM} = -Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{4}{K+3} + \frac{6}{K+5} - \frac{4}{K+7} + \frac{1}{K+9} - \frac{1}{K+M+3} + \frac{4}{K+M+5} \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \left[\frac{6}{K+M+7} + \frac{4}{K+M+9} - \frac{1}{K+M+11} \right] (J+K+M+12)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+13} \\
& - Z e^2 \frac{16\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^2 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{5}{K+3} + \frac{10}{K+5} - \frac{10}{K+7} + \frac{5}{K+9} - \frac{1}{K+11} - \frac{1}{K+M+3} \right. \\
& \left. + \frac{5}{K+M+5} - \frac{10}{K+M+7} + \frac{10}{K+M+9} - \frac{5}{K+M+11} + \frac{1}{K+M+13} \right] \\
& \times (J+K+M+14)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+15} \\
& - Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} (nr_o \lambda)^4 \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} \right. \\
& \left. - \frac{1}{K+M+3} + \frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} \right. \\
& \left. - \frac{1}{K+M+15} \right] (J+K+M+16)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+17}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$$C_{JKM} = 0 \quad \text{pour } K = 1, 3, 5, 7 \dots$$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Etat $4f^2$

$$N_{JKM} = \frac{2\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{7}{K+3} + \frac{21}{K+5} - \frac{35}{K+7} + \frac{35}{K+9} - \frac{21}{K+11} + \frac{7}{K+13} - \frac{1}{K+15} \right. \\ \left. - \frac{1}{K+M+3} + \frac{7}{K+M+5} - \frac{21}{K+M+7} + \frac{35}{K+M+9} - \frac{35}{K+M+11} + \frac{21}{K+M+13} \right. \\ \left. - \frac{7}{K+M+15} + \frac{1}{K+M+17} \right] (J+K+M+17)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+18}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

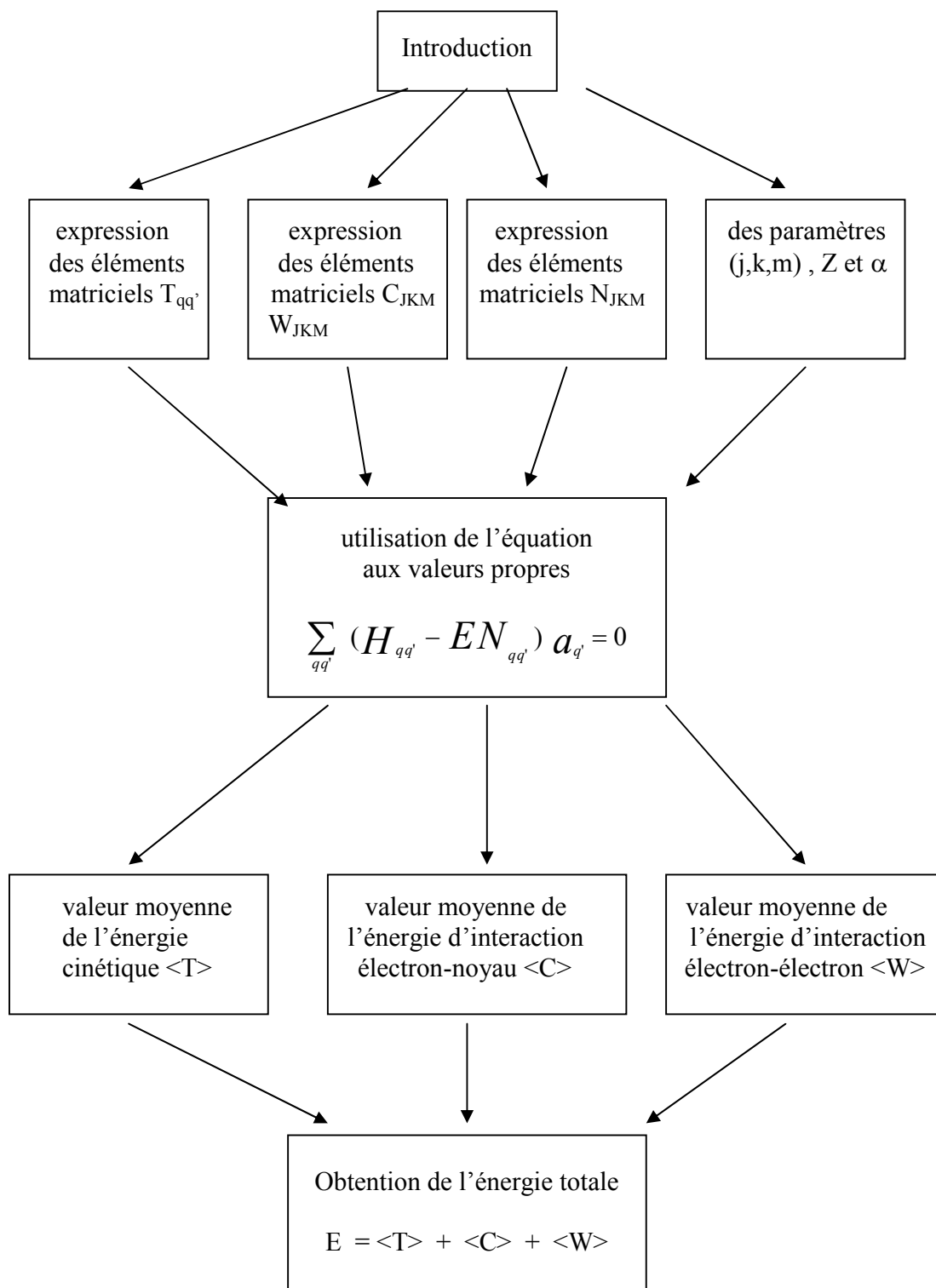
$$N_{JKM} = 0 \quad \text{pour } K = 1, 3, 5, 7 \dots$$

$$\begin{aligned}
C_{JKM} = & -Z e^2 \frac{8\pi^2}{M+2} \left[\frac{1}{K+1} - \frac{6}{K+3} + \frac{15}{K+5} - \frac{20}{K+7} + \frac{15}{K+9} - \frac{6}{K+11} + \frac{1}{K+13} \right. \\
& - \frac{1}{K+M+3} + \frac{6}{K+M+5} - \frac{15}{K+M+7} + \frac{20}{K+M+9} - \frac{15}{K+M+11} + \frac{6}{K+M+13} \\
& \left. - \frac{1}{K+M+15} \right] (J+K+M+16)! \left(\frac{1}{2\lambda} \right)^{J+K+M+17}
\end{aligned}$$

Pour $K = 0, 2, 4, 6 \dots$

$C_{JKM} = 0$ pour $K = 1, 3, 5, 7 \dots$

$$W_{JKM} = e^2 N_{JK, M-1}$$

Annexe 2. Organigramme et programme principal relatif aux calculs des énergies**Annexe 2.1.** Organigramme du programme des calculs

Annexe 2.2. Programme principal relatif aux calculs des énergies des états singulets doublement excités $(nl)^2$ et $nlnl'$ de l'hélium et des ions héliumoïdes.

Le programme principal en Fortran a été initialement conçu par Schmid et al [113] pour le calcul des énergies de l'état fondamental de l'hélium. Nous l'avons étendu aux calculs des énergies des états singulet doublement excités $(nl)^2$ et $nlnl'$ de l'hélium et des ions héliumoïdes. Les calculs ont été effectués à l'aide d'un micro-ordinateur IBM PS/2 selon l'organigramme précédent.

L'algorithme du programme principal est le suivant :

```

PROGRAM He_system
                                USE donnees
                                USE base_jkm
                                USE elts_matriciels
                                USE
MSIMSLMD, ONLY: DGVCSP, DSVRGN, DFAC, DCONST, DWRRRN
!-----
! Ce programme permet de calculer les energies des etats S doublement *
! excites de l'helium (particulierement les etats Se (ou e designe la *
! parite e= even = pair).
!
!
!
! La fonction d'onde utilisee est une fonction de type Hylleraas :
!
! R1^J*R2^K*R12^M*EXP(-Alpha*(R1+R2))
!
! R1:vecteur position de l'electron 1 / au noyau
!
! R2:vecteur position de l'electron 2 / au noyau
!
! R12: distance interelectronique
!
! J,K et M forment les differents termes de la base
!
! alpha est le parametre variationnel non lineaire
!
!
!-----
!
IMPLICIT NONE

CHARACTER (LEN=20)  fichier_ener

INTEGER :: i_alpha,j,ih, jh
REAL alpha

```

```

!REAL(8),DIMENSION(n_val):: Eval,E      ! E:Energie

! Appel du module donnees

      CALL entree_donnees                ! charge nucleaire n_z
                                          ! dimension n_dim
                                          ! nombre quantique
principal n_p
! Appel du module base_jkm   pour la formation des (j,k,m)

      CALL base(n_dim,n_base)           ! n_base nombre de (j,k,m)
!
! Variation du parametre non lineaire alpha   z

      boucle_lambda: DO i_alpha = 0,70
                      alpha= 0.77 + DPROD(REAL(i_alpha-1),0.05)
                      lambda = REAL(n_z)/(n_p*r0*alpha)
!
!                      lambda2 = 0.5.d0/lambda
!
! Appel du module elts_matriciels pour le calcul des elements matriciels
NN,CHAT,WHAT,THAT

      CALL eltmatrix(n_base)

! Appel du module de diagonalisation

      CALL DGVCSP (n_base, hmat, n_max, nmat, n_max, e_val, e_vec,
n_max)

      ! DGVCSP :Calcule toutes les valeurs propres et vecteurs
propres
      ! de l'equation generalisee aux valeurs propres Az = lBz,
avec B symmetrique.
!
! Recherche du minimum et de ses vecteurs propres
!
CALL SELECTMIN(e_min,e_val,i_alpha,n_base)

! Calcul des elements de l'hamiltonien
      erwt = 0.d0
      erwc = 0.d0
      erww = 0.d0
      DO ih = 1, n_base
        DO jh = 1, n_base
          erwt = erwt + e_vec(ih, indice)*tmat(ih,jh)*e_vec(jh,
indice)
          erwc = erwc + e_vec(ih, indice)*cmat(ih,jh)*e_vec(jh,
indice)
          erww = erww + e_vec(ih, indice)*wmat(ih,jh)*e_vec(jh,
indice)
        END DO
      END DO
      erwh = erwt + erwc + erww
!
!
```



```

!      CALL DWRRRN ('e_val', 1, n_base, e_val, 1, 0)
!      WRITE(*,*) 'lambda    =', lambda, ' e_min =', e_min(i_alpha), '
indice =', indice

!      Pause "appuyer sur entree pour continuer!"
!      CALL DWRRRN ('e_vec', n_base, n_base, e_vec, n_max, 0)

! Arrange en ordre croissant les elements d'un tableau.

!      CALL DSVRGN (n_base, e_val, e)

! Usage      : CALL SVRGN (N, RA, RB)
!
!      WRITE(*,*) (E(i_e), i_e=1, n_base)

!      WRITE(11, '(F6.4,1X,125F16.11)') lambda, (e(j), j=1, n_base)
!      WRITE(*, '(F6.4,5X,F17.11,5X,F16.11)') lambda, e_min(i_alpha),
erwt

! Ecriture des fichiers
energie

!      Pause "appuyer sur entree pour continuer!"
!      END DO boucle_lambda
!
! Recherche du minimum des minima
! i_alpha=i_alpha-1
! CALL SELECTMIN(e_fin, e_min, veclig, veccol, e_veclig, e_veccol, 1, i_alpha)
!
CONTAINS

SUBROUTINE SELECTMIN(E1, E2, i_a, n_b)
INTEGER :: i, i_a, n_b
!  INTEGER, PARAMETER :: n_m =200
REAL(8) E1(n_max), E2(n_max)

!e_min(n)=e1(n)
!e_val(n)=e2(n)
!i_alpha=i_a
!n_base=n_b
!e_veclig(i_alpha, i)= Vec1(n, n)
!e_vec(indice, i)= evec1(n, n)
!e_veccol(i_alpha, i)=Vec2(n, n)
!e_vec(i, indice)=evec2(n, n)

!e_min(i_alpha)=e_val(1)
E1(i_a)=E2(1)
! Recherche du minimum
boucle_emin:      DO i = 1, n_b
!                  IF(E1(i_a)>= E2(i)) THEN
!                    E1(i_a)= E2(i)
!                    indice=i
!                  ELSE
!                    CYCLE boucle_emin
!                  ENDIF
!                END DO boucle_emin

```

```
! Recherche des vecteurs propres correspondant au minimum trouve
!   boucle_evec:      DO i = 1,n_base
!                       vec1(i)=evec1(indice,i)
!                       vec2(i)=evec2(i,indice)
!                       END DO boucle_evec
!   WRITE(*,*) (vec1(j),j=1,n_base)
!   WRITE(*,*) (vec2(j),j=1,n_base)

RETURN
END SUBROUTINE SELECTMIN

! Ouverture du fichier energie de la forme *.dat

!   PRINT*,'Donner le nom du fichier avec l`extension .dat'
!   READ(*,'(A)')fichier_ener
!   OPEN(unit=11,file = fichier_ener,status='new')

END PROGRAM He_system
```

BIBLIOGRAPHIE

1. Fano U. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.* Vol. **124** 1866 (1961)
2. Madden R.P. and Codling K., *Phys. Rev. Lett.* **10**, 516 (1963)
3. Madden R.P. and Codling K., *Astrophys. J.* **141**, 364 (1965)
4. Oda N., Nishimura F., Tashira S., *Phys. Rev. Lett.* **24**, 42 (1970)
5. Hicks P. J., Comer J., *J. Phys. B* : **8** 1866 (1975)
6. Rudd M. E., *Phys. Rev. Lett.* **15**, 580 (1965)
7. Bordenave-Montesquieu A., Gleizes A., Rodiere M. and Benoit-Cattin P, *J. Phys. B* **6**, 1997 (1973)
8. Gelebart F., Tweed R. J. and Peresse J., *J. Phys. B* **9**, 1739 (1976)
9. Rodbro M., Bruch R. and Bisgaard P., *J. Phys. B* **12**, 2413 (1979)
10. Bruch R., Paul G., Andra J. and Lipsky L., *Phys. Rev. A* **12**, 1808 (1975)
11. Ziem P., Bruch R. and Stolterfoht N., *J. Phys. B* **8**, L480 (1975)
12. Doschek G. A., Meekins J. F., Kreplin R. W., Chubb T. A. and Friedman H., *Astrophys. J.* **164**, 165 (1971)
13. Walker A. B. C., Jr and Rugge H. R., *Astrophys. J.* **164**, 181 (1971)
14. Domke M., Xue C., Puschmann A., Mandel T., Hudson E., Shirley D., Kaindl G., Greene C., Sadeghpour H. R. and Petersen H., *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1306 (1991)
15. Domke M., Schulz K., Remmers G., Gutierrez A., Kaindl G. and Wintgen D., *Phys. Rev. A* **51**, R4309 (1995)
16. Domke M., Schulz K., Remmers G., Kaindl G. and Wintgen D., *Phys. Rev. A* **53**, 1424 (1996)
17. Menzel A., Frigo S. P., Whitfield S. B., Caldwell C. D. and Kraus M. O., *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1479 (1995)
18. Sokell E. Wills A. A., Comer J. and Hammond P., *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29**, L83 (1996)

19. Diehl S., Cubaynes D., Bizau J-P., Wuilleumier F. J., Kennedy E. T., Mosnier J-P. and Morgan T. J., *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32**, 4193 (1999)
20. Balashov V. V., Grishanova S. I., Kruglova I. M. and Senashenko V. S., *Opt. Spectrosc.* **28**, 859 (1970)
21. Senashenko V. S. and Wague A., *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **12**, L269 (1979)
22. Wague A., Safronova U. I. and Senashenko V. S., *Opt. Spectrosc.* **51**, 951 (1981)
23. Wague A., *Z. Phys. D : Atoms, Molecules and Clusters* **6**, 337 (1987)
24. Wague A., *Z. Phys. D : Atoms, Molecules and Clusters* **8**, 251 (1988)
25. Wague A., *Z. Phys. D : Atoms, Molecules and Clusters* **13**, 123 (1989)
26. Wague A., *Z. Phys. D : Atoms, Molecules and Clusters* **15**, 199 (1990)
27. Wague A., Thèse de Doctorat d'Etat, N 115, Université Paul Sabatier de Toulouse (1984)
28. Faye N. A. B. and Wague A., *Z. Phys. D* **31**, 37 (1994)
29. Faye N. A. B. and Wague A., *J. Phys. B* **28**, 1735 (1995)
30. Ndao A.S., Wague A., Faye N. A. B. and Konte A., *Eur. Phys. J. D* **5**, 327 (1999)
31. Rau A. R. P., Groupe theoretical treatment of strongly correlated atomic dynamics. *Rep. Prog. Phys.* **53**, 181 (1990)
32. Herrick D. R. and Sinanoglu O., *Phys. Rev. A* **11**, 97 (1975)
33. Lin C.D., *Phys. Rev. A* **10**, 1986 (1974)
34. Lin C. D., *Phys. Rev. A* **25**, 76 (1982)
35. Lin C. D., *Phys. Rev. A* **25**, 1535 (1982)
36. Lin C. D., *Phys. Rev. A* **26**, 2305 (1982)
37. Lin C. D., *Phys. Rev. A* **27**, 22 (1983)
38. Lin C.D., Classification and supermultiplet structure of doubly excited states. *Phys. Rev. A* **29**, 3 (1984)
39. Herrick D. R. and Kellman M. E., Novel supermultiplet energies levels for doubly excited He. *Phys. Rev. A* **21**, 2 (1980)
40. Herrick D. R. and Kellman M. E. and Poliak R. D., Supermultiplet classification of higher intrashell doubly excited of H⁻ and He. *Phys. Rev. A* **22**, 4 (1980)

41. Dmitrieva K. and Plindov G. I., Doubly excited inner-shell states of positive ions : exact energy values and wave functions in the large n limit. *Opt. Spectrosc.* **77**, 785 (1994)
42. Artemyev A., Grobe R. and Eberly J. H., Hyperspherical-coordinate approach to one dimensional models of two-electron quantum systems. *Phys. Rev. A* **51**, 1 (1995)
43. Macek J. H. and Burke P. G., *Proc. Phys. Soc. London* **92**, 351 (1967)
44. Macek J.H., *J. Phys. B* : **2**, 821 (1968)
45. Feschbach H., *Ann. Phys.* **19**, 287 (1962)
46. Oberoi R. S., *J. Phys. B* **5**, 1120 (1972)
47. Bhatia A. K. and Temkin A., *Phys. Rev. A* **11**, 2018 (1975)
48. Bhatia A. K. and Temkin A., *Phys. Rev. A* **29**, 1895 (1984)
49. Altick P. L. and Moore E. N., *Phys. Rev. Lett.* **15**, 100 (1965)
50. Lipsky L. and Russek A., *Phys. Rev.* **142**, 59 (1966)
51. Lipsky L. and Connely M.J., *Phys. Rev. A* **14**, 2193 (1976)
52. Lipsky L. Anana R. and Connely M. J., *At. Data nucl. Data tables* **20**, 127 (1977)
53. Connely M. J. and Lipsky L., *J. Phys. B* **11**, 4135 (1978)
54. Hazi A. U. and Taylor H. S., *Phys. Rev. A* **1**, 1109 (1970)
55. Hololen E. and Midtdal J., *J. Phys. B* **4**, 32 (1970)
56. Perkins J. F., *Phys. Rev.* **178A**, 89 (1969)
57. Hartree D. R., *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **24**, 111 (1928)
58. Stewart A. L., *J. Phys. B* **12**, 401 (1979)
59. Ray D. and Mukherjee P. K., *J. Phys. B* **19**, 1241 (1991)
60. Ray. D., Kundu B., Mukherjee P. K., Ohtsuki K. and Ohno K., *Phys. Lett.* **136A**, 423 (1989)
61. Chang K. T. and Davis B. F., *Phys. Rev. A* **22**, 835 (1980)
62. Chang K. T. and Davis B. F., *Phys. Rev. A* **24**, 1350 (1981)
63. Salomonson S. and Oster P., *Phys. Rev. A* **40**, 5548 (1989)
64. Salomonson S. and Oster P., *Phys. Rev. A* **41**, 4670 (1990)
65. Lindroth E. and Salomonson S., *Phys. Rev. A* **41**, 4659 (1990)
66. Lindroth E. and Ynnerman A., *Phys. Rev. A* **47**, 961 (1993)

67. Lindroth E., Phys. Rev. A **49**, 4473 (1994)
68. Ho Y. K., J. Phys. B **12**, 387 (1979)
69. Ho Y. K., Phys. Letts. **79A**, 44 (1980)
70. Ho Y. K., Phys. A. **23**, 2137 (1980)
71. Ho Y. K., Phys. Rev. A **23**, 2137 (1981)
72. Ho Y. K., Z. Phys. D **38**, 191 (1996)
73. Ho Y. K., Z. Phys. D **42**, 77 (1997)
74. Ho Y. K. and Callaway J., Phys. Rev. A **27**, 1882 (1983)
75. Callaway J. and Ho Y. K., J. Phys. B **18**, 3481 (1985)
76. Ho Y. K. and Bhatia A. K., Phys. Rev. A **44**, 2895 (1991)
77. Biaye M., thèse de doctorat de troisième cycle, Université Cheikh Anta Diop de Dakar (1997)
78. Kahn M. S., Physica Scripta. **T80A**, 23 (1999)
79. Keller S. and Dreizler R. M., Physica Scripta. **T80A**, 93 (1999)
80. Faenov A. Ya., Skobelev I. Yu. And Rosmej F. B., Physica Scripta. **T80A**, 43 (1999)
81. Harris S. E., Phys. Rev. Lett. **62**, 1033 (1989)
82. Letokhov V. S., in Laser photoionization Spectroscopy (Academic, New York 1987)
83. Dhez P. and Ederer D.L., J.Phys. B: Atom. Molec. Phys. **6**, L59 (1973)
84. Kossmann H., Krassig B. and Schmidt V., J.Phys. B: Atom. Molec. Phys. **21**, 1489 (1988)
85. Woodruff D. R. and Samson J. A. R., Phys. Rev. Lett. **45**, 110 (1980)
86. Woodruff D. R. and Samson J. A. R., Phys. Rev. Lett. **25**, 848 (1982)
87. Wuilleumier F., Adam M. Y., Sander N. and Schmidt V., J. Phys. Lett. **41**, L373 (1980)
88. Lindle D. W., Ferret T. A., Becker U., Kobrin P. H., Truesdale C. M., Kerkoff H. G. and Shirley D. A., Phys. Rev. A **31**, 714 (1985)
89. Carroll P. K. and Kennedy E. T., Phys. Rev. Lett. **38**, 1068 (1977)
90. Zubek M., King G. C., Rutter P. M. and Read F. H., J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **22**, 3411 (1989)

91. Silverman S. M. and Lassetre E. N., *J. Chem. Phys.* **40** 1265 (1964)
92. Daly N. R. and Powell R. E., *Phys. Rev. Lett.* **19**, 1165 (1967)
93. Delece G., Ambrico P. F. and De Benedictis S., *J. Phys. B* **25**, 2129 (1992)
94. Snegursky A. V., Remeta E., Xu, Zaviopulo A. N. and Shpenik O. B., *J. Phys. B* **27**, 1589 (1994)
95. Oza D. H., Benoit-Cattin P., Bordenave-Montesquieu A., Boudjema M and Gleizes A., *J. Phys. B* **21**, L131 (1988)
96. Stolterfoht N., Sommer K., Swenson J. K., Havener C. C. and Meyer F. W., *Phys. Rev. A* **42**, 5396 (1990)
97. Bordenave-Montesquieu A., Moretto-Capette P., Gonzalez A. Benhinni M., Bachau H. and Sanchez I., *J. Phys. B* **27**, 4243 (1994)
98. Bordenave-Montesquieu A., et al., *Physica Scripta* **T80**, 372 (1999)
99. Bruch R., Altick P. L., Trabert E. and Heckmann P. H., *J. Phys. B* **17**, L655 (1984)
100. Berry H. G., *Physica Scripta* **12**, 5 (1975)
101. Cederquist H., Kisielinski M. and Mannervik S., *J. Phys. B* **16**, L4679 (1983)
102. Fano U., Cooper J. W. and Prats F., *Phys. Rev. Lett.* **10**, 518 (1963)
103. Bether H. A. and Salpeter E. E., *Quantum mechanics of one and two electrons atoms*. Plenum Publishing corporation, New York (1977)
104. Altick P. L. and Moore E. N., *Phys. Rev.* **147**, 59 (1966)
105. Fano U., *Doubly excited states of atoms*. Atomic Physics. Plenum press New York (1969)
106. Feshbach H., *Unified theory of nuclear reactions*. *Ann. Phys.* **5**, 357 (1968)
107. Hahn Y., O'Malley T. F. and Spruch L., *Phys. Rev.* **128**, 932 (1962)
108. Bachau H., *J. Phys. B* **17**, 1771 (1984)
109. Bachau H., Martin F., Riere A. and Yanez M., *At. Dat. Nucl. Data Tables* **48**, 167 (1991)
110. Balslev E., Combes J. M., *Commun. Math. Phys.* **22**, 280 (1971)
111. Hylleraas E. A., *Z. Phys.* **48**, 469 [1928]
112. Hylleraas E. A. and Undheim B., *Z. Phys.* **65**, 759 [1930]

113. Schmid E. W., Spitz G. and Losch W., Theoretical physics on personal computer. Brelin Heidelberg, New York, London, Paris Tokyo (1987)
114. Uptal R. and Talukdar B., Phys. Scripta. **59**, 133 (1999)
115. Fukuda H., Koyama N. and Matsuzawa M., J. Phys. B **20**, 2959 (1987)
116. Koyama N., Fukuda H., Motoyama T. and Matsuzawa M., J. Phys. B **19**, L331 (1986)
117. Sinanoglu O. and Herrick D. R., J. Chem. Phys. **62**, 886 (1975)
118. Ho Y. K., Z. Phys. D- Atoms, Molecules and Clusters **11**, 277 (1989)
119. Morgan H. D. and Ederer D. L., Phys. Rev. A **29** 1901 (1984)
120. Ho Y. K. and Bhatia A. K., Phys. Rev. A **47**, 2628 (1993)
121. Bhatia A. K. and Ho Y. K., J. Phys. B **31**, 3307 (1998)
121. Biaye M., Konté A., Faye N. A. B and Wagué A, Eur. Phys. J. D **13**, 21 (2001)
123. Biaye M., Konté A., Ndao A. S., Faye N. A. B and Wagué A, Phys. Scripta. **71**, 39 (2005)
124. Biaye M., Konté A., Ndao A. S. and Wagué A., Calculations of doubly excited $^1P^o$, $^1D^o$, $^1F^o$, $^1G^o$, $^1H^o$ intrashell states of helium sequence using special forms of hylleraas-type wave functions (Physica Scripta, in press.)