CEA-R 3113

GONTIER Y. TRAHIN M. .-
Ionisation d'un atome de césium par un processus d'absorption à deux photons issus d'un faisceau Laser.-
Commissariat à l'énergie atomique, Centre d'études nucléaires de Saclay (Essonne), 1967.-
27 cm, 33 p.

CEA-R 3113 - GONTIER Yves, TRAHIN Michel

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

Sommaire.- La formule donnant la section efficace d'ionisation d'un atome, par un processus d'absorption mettant en jeu deux photons issus d'un faisceau Laser, est établie. On se place dans le cas non relativiste et l'on utilise l'approximation dipolaire. La sommation sur les états intermédiaires est effectuée rigoureusement au moyen d'une technique particulière qui est décrite en détail. On expose une méthode permettant d'obtenir la solution numérique.

1967 33 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-R 3113 - GONTIER Yves, TRAHIN Michel

IONISATION OF A CESIUM ATOM BY AN ABSORPTION PROCESS INVOLVING TWO PHOTONS FROM A LASER BEAM

Summary.- The expression giving the ionisation cross-section of an atom, by an absorption process involving two photons produced from a laser beam, is derived. The non-relativistic case is considered and the dipolar approximation used. The summation over the intermediate states is carried out rigorously by means of a special technique which is described in detail. A method is presented which makes it possible to obtain the numerical solution.

1967 33 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-R 3113

PREMIER MINISTRE
COMMISSARIAT A
L'ÉNERGIE ATOMIQUE

CEA-R 3113

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

par

Yves GONTIER, Michel TRAHIN

Rapport CEA - R 3113

1967

Da

CENTRE D'ETUDES
NUCLÉAIRES DE SACLAY

Les rapports du COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE sont, à partir du n° 2200, en vente à la Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VIIème.

The C.E.A. reports starting with n° 2200 are available at the Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VIIème.

- Rapport CEA-R 3113 -

Services de Physique Appliquée
Service de Physique des Interactions Electroniques

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

par

Yves GONTIER, Michel TRAHIN

- Janvier 1967 -

INTRODUCTION

I - EXPOSE DE LA METHODE

II - PROBABILITE DE TRANSITION

III - EFFET D'ECRAN

Modèle de Thomas-Fermi de l'Atome

IV - CALCUL DE L'ELEMENT DE MATRICE DIPOLAIRE Kfg

A) EXPRESSION DES ETATS

Etat initial
Etat intermédiaire
Etat final
Section efficace différentielle d'ionisation

B) ETUDE DES PARTIES ANGULAIRES

Transitions permises et Transitions interdites
Expression de la section efficace totale

C) ETUDE DES PARTIES RADIALES

Calcul du terme $p_{\lambda l}^{nl'}$ (E_p)

V - RESOLUTION NUMERIQUE

A) RAPPEL DES RESULTATS ETABLIS

B) EXPOSE DE LA METHODE

C) RECHERCHE D'UNE SOLUTION ANALYTIQUE

CONCLUSION

APPENDICES

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM
PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS
ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

INTRODUCTION

Les progrès de la technologie Laser, mettant à la disposition des expérimentateurs des appareils capables de produire des faisceaux lumineux de grande intensité, permettent de mettre en évidence des phénomènes physiques prévus depuis longtemps par l'électrodynamique quantique.

De nombreuses expériences permettant l'observation de l'interaction rayonnement-matière ont déjà été réalisées. Nous citerons entre autre les travaux de A.F. HAUGHT, R.G. MEYERAND et D.C. SMITH [1], R. PAPOULAR [2], RAMSDEN et SAVIC [3], R. TOMLINSON [4], M. BERRY, Y. DURAND, F. FLOUX, P. NELSON et P. VEYRIE [5] [6], G.S. VORONOV et G.A. DELONE [7].

Nous avons choisi d'étudier le mécanisme d'ionisation des atomes hydrogénoïdes, résultant de l'absorption de deux ou d'un nombre supérieur de photons.

Si nous considérons le cas du césium dont le potentiel d'ionisation (3,89 eV) est relativement faible, nous constatons qu'il est possible de déclencher le phénomène qui nous intéresse, à l'aide d'une absorption deux photons pour un faisceau dont l'énergie élémentaire peut être prise égale à 3,56 eV ou à 2,32 eV.

Le choix de telles conditions expérimentales nous a été dicté par la possibilité de pouvoir faire un calcul de la section efficace du processus, qui soit suffisamment rigoureux, pour nous permettre de confronter les évaluations numériques avec les résultats des mesures.

La première théorie mettant en jeu deux quanta a été proposée par M. GOEPPERT-MAYER [8] qui a examiné l'effet Raman. Plus récemment des travaux portant sur l'ionisation multiphotonique dans l'hydrogène et les gaz rares ont été effectués par L.V. KELDYSH [9], par P. NELSON [10] [11], par H.B. BEBB et A. GOLD [12] et par W. ZERNIK [13] [14].

En nous inspirant du plan exposé par ce dernier auteur, nous établirons dans un formalisme différent (FEYNMAN-DYSON), la probabilité de l'évènement dans le cas du césium. Cet élément ayant un numéro atomique relativement élevé, nous devrons tenir compte de l'effet d'écran produit par le nuage d'électrons (modèle statistique de THOMAS-FERMI).

L'atome considéré comme un état lié sera traité dans le schéma de FURRY, qui nous permet d'obtenir des expressions formelles analogues à celle figurant dans le schéma d'interaction libre.

Dans cette représentation nous établissons, par la méthode des diagrammes de FEYNMAN, l'expression générale donnant l'amplitude de probabilité. Afin d'exploiter ce résultat nous ferons deux approximations classiques, applicables au traitement de ce problème. Nous nous placerons dans le cas non relativiste et effectuerons l'approximation dipolaire. Partant d'un état initial atomique bien défini situé dans spectre discret en interaction le champ e. m. quantifié, nous atteindrons un état final situé dans le continu après être passé par tous les états intermédiaires possibles.

La sommation sur de tels états se décomposera en deux parties : la première, relative aux parties angulaires, ne fera intervenir que des coefficients de Clebsh-Gordan ; la seconde nécessitera une application concrète de la théorie proposée par SCHWARTZ et

TIEMAN [16] et utilisée par MITTLEMAN et WOLF [17]. La résolution numérique réclamera une utilisation judicieuse de la transformée de Laplace et de la méthode des prolongements analytiques.

I - EXPOSE DE LA METHODE

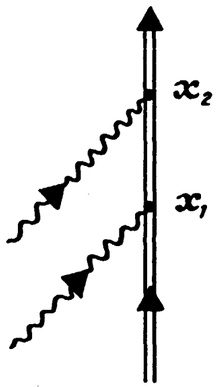


Figure I

La figure 1 constitue une transcription imagée du mécanisme d'ionisation d'un atome par absorption de deux photons.

Elle nous permet d'écrire, au moyen des règles de FEYNMAN, l'élément de matrice grâce auquel on peut calculer la probabilité de l'évènement.

On peut en donner l'interprétation suivante :

- un premier photon (représenté par une ligne ondulée) interagit avec l'électron lié au sein de l'atome au point spatio-temporel (double trait). Celui-ci se trouve alors dans l'un des états intermédiaires excités permis par les règles de sélection (segments x_1, x_2) jusqu'à ce que le deuxième photon absorbé au point x_2 déclanche l'ionisation en créant un état électronique libre

L'amplitude de probabilité s'écrit :

$$< k_f f_{n-2} \,|\, R \,|\, k_g g_n > = (-e)^2 \int dx_1 \int dx_2 \; \bar{\Psi}_F(x_2) \Big| < f_{n-2} \Big| \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d\vec{p}_2}{\sqrt{2p_{02}}} \cdot$$

$$a(\vec{p}_2)\, e^{\lambda 2}(p_2)\, e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{x}_2}\; K_F(x_1, x_2)\, \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d\vec{p}_1}{\sqrt{2p_{01}}}\; a(\vec{p}_1)\, e^{\lambda 1}(p_1)\, e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1} \Big| g_n > \Big| \Psi_F(x_1) \qquad (1)$$

où

- $|k_g g_n>$ représente l'état initial à un électron d'impulsion k_g et à n photons
- $|k_f f_{n-2}>$ représente l'état final à un électron d'impulsion k_f et à (n-2) photons.
- $\bar{\Psi}_F(x_2)$ est l'opérateur décrivant l'électron se trouvant dans l'état final.
- $\Psi_F(x_1)$ est l'opérateur décrivant l'électron se trouvant dans l'état initial.
- $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d\vec{p}}{\sqrt{2p_0}}\, a(\vec{p})\, e^{i\vec{p}.\vec{x}}$ représente la décomposition en intégrales de FOURIER (ondes planes) du potentiel correspondant au champ électromagnétique rayonné
- $a(\vec{p})$ est l'opérateur d'annihilation des photons d'impulsion $\vec{p}$
- $e^{\lambda}(\vec{p})$ est le vecteur polarisation des photons d'impulsion $\vec{p}$
- $\Psi_n(\vec{x})$ représente l'état intermédiaire par lequel passe le système
- $K_F^{NR}(x_2, x_1)$ est le propagateur de FEYNMAN dont l'expression non relativiste que nous utiliserons par la suite est :

$$K_F^{NR}(x_2, x_1) = \sum_n \Psi_n(\vec{x}_2)\, \Psi_n^*(\vec{x}_1)\, e^{-iE_n(t_2 - t_1)}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\; \Psi_n(\vec{x}_2)\, \Psi_n^*(\vec{x}_1) \cdot \frac{e^{i\omega(t_2 - t_1)}}{E_n + \omega}$$

Les quantités indicées en (F) sont relatives au schéma d'interaction lié ou de FURRY.

Développant les calculs d'une manière identique à celle qui permet de retrouver la formule de KRAMERS-HEISENBERG nous obtenons dans la limite non relativiste et dans le système d'unités naturelle ($\hbar = c = 1$)

$$< k_f f_{n-2} \,|R|\, k_g g_n > = -\frac{e^2}{2\pi i} \frac{n}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^2}{2\sqrt{k_{01} k_{02}}} \sum_n < k_f \Big| e^{\lambda 2}(\vec{k}_2)\, e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}}$$

$$\frac{|\Psi_n > < \Psi_n|}{E_n - E_{01} - k_{01}}\, e^{\lambda 1}(\vec{k}_1)\, e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \Big| kg > \delta(E_2 - k_{02} - E_1 - k_{01}) \qquad (2)$$

(E_1) est l'énergie de l'électron dans l'état initial (lié), (E_2) est l'énergie correspondante dans l'état final (libre), k_{01} et k_{02} sont les énergies des photons absorbés.

L'expression (2) donne, moyennant l'approximation dipolaire :

$$< k_f f_{n-2} \,|R|\, k_g g_n > = -\frac{i e^2 n}{2(2\pi)^2} \sqrt{|\vec{k}_1| |\vec{k}_2|} \sum_n < k_f \Big| \vec{x} \cdot \vec{\epsilon}_2 \frac{|\Psi_n > < \Psi_n|}{E_n - E_1 - k_{01}}$$

$$\vec{x} \cdot \vec{\epsilon}_1 \,|k_g > \delta(E_2 - k_{02} - E_1 - k_{01}) \qquad (3)$$

Etant donné que les deux photons ont la même énergie k_0 et que :

$$k_{01,2}^2 - \vec{k}_{1,2}^2 = 0$$

(3) peut s'écrire :

$$< k_2 f_{n-2} \,|R|\, k_1 g_n > = -i \frac{e^2 n}{2(2\pi)^2}\, k_0 \sum_n < k_f \Big| \vec{x} \cdot \vec{\epsilon}\, \frac{|\Psi_n > < \Psi_n|}{E_n - E_1 - k_0}\, \vec{x} \cdot \vec{\epsilon} \,|k_g > \delta(E_{fg}) \qquad (4)$$

$$E_{fg} = E_2 - E_1 - 2k_0 = \left\{ E_I - 2\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\}_{U.C.G.S.}$$

$$= \left\{ E_I - 2\omega + \frac{k^2}{2m} \right\}_{U.N.} \qquad (5)$$

E_I est l'énergie d'ionisation de l'atome

$\hbar\omega = k_0$ est l'énergie du photon en unités C.G.S.

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie cinétique de l'électron libre (k étant le nombre d'onde correspondant) en unités C.G.S.

II - PROBABILITE DE TRANSITION

On obtient la probabilité d'ionisation P_{fg} en prenant le module carré de (4)

Appelant

$$K_{fg} = \sum_n \langle k_f | \vec{x}.\vec{\varepsilon} \frac{|\psi_n\rangle\langle\psi_n|}{E_n - E_0 - k_0} \vec{x}.\vec{\varepsilon} | k_g \rangle$$

$$S_{fg} = \langle k_f f_{n-2} | R | k_g g_n \rangle$$

P_{fg} s'écrit

$$P_{fg} = |R_{fg}|^2 = \left(\frac{e^2}{2\pi} \frac{n}{(2\pi)^3} (2\pi)^2 \frac{k_0}{2} \right) |K_{fg}|^2 \delta^2 (E_{fg}) \qquad (6)$$

Cette formule est applicable dans le cas où l'on a affaire à des transitions atomiques. C'est-à-dire dans le cas où, partant d'un état initial d'énergie bien déterminée, on aboutit à un état final dont l'énergie est bien connue. Ce n'est pas tout à fait le problème que nous étudions ici puisque l'état final est un état non lié dont l'énergie est susceptible de prendre une suite continue de valeurs. On ne peut plus décrire le comportement final du système par un seul état d'énergie fixée mais par un groupe d'états dont chacun est affecté d'une énergie centrée autour d'une certaine valeur.

Le nombre des états contenus dans le volume de normalisation pris pour unité est appelé densité d'états continus.

On montre très simplement que le nombre d'états ayant une impulsion comprise entre $\vec{k}$ et $\vec{k} + d\vec{k}$ est :

$$\rho(\vec{k}) = \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

Donc la densité d'états ayant une impulsion comprise entre $\vec{k}$ et $\vec{k} + d\vec{k}$ est

$$\rho(k) = \frac{1}{(2\pi)^3}$$

De la même façon on trouve que la densité d'états ayant une énergie comprise entre E et E + dE est : (en U.C.G.S.)

$$\rho(E) = \frac{m}{h^2} \frac{k}{(2\pi)^3} \qquad (7)$$

k étant le nombre d'onde correspondant à l'impulsion $\vec{k}$

<u>Remarque</u> (I) Il est équivalent de partir de densité d'états finals $\rho(E_f)$ ou de densité d'états dont l'énergie subit la variation $E_f - E_g = E_{fg}$

$$\rho(E_f) = \rho(E_{fg})$$

La probabilité par unité de temps s'écrit :

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = (2\pi)^2 \left(2\pi\alpha \frac{nc}{(2\pi)^3} x\right)^2 |K_{fg}|^2 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \frac{1}{(2\pi)^2} \left[\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} e^{i(x_f - x_g)t} dt\right]^2 . \delta(E_{fg}) \qquad (8)$$

Moyennant cette autre représentation de la fonction $\delta(x)$

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \frac{\sin^2 xt}{x^2} \qquad (9)$$

(10) peut s'écrire sous la forme :

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = (2\pi)\left(2\pi\alpha x \frac{nc}{(2\pi)^3}\right)^2 |K_{fg}|^2 \delta(x_{fg}) \rho(E_{fg})$$
$$= 2\pi\hbar \left(2\pi\alpha x \frac{nc}{(2\pi)^3}\right)^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (10)$$

Afin de donner un sens physique à la quantité $\frac{nc}{(2\pi)^3}$ nous normons la fonction d'onde du photon non plus à $(2\pi)^{-3/2}$ mais dans un volume V. Cela revient à multiplier la quantité $\left((2\pi)^{3/2}/\sqrt{V}\right)^2$ vu la présence des deux opérateurs d'annihilation de photons dans (1). (10) peut s'écrire alors :

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = 2\pi\hbar \left(2\pi\alpha x \frac{nc}{V}\right)^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (11)$$

La quantité $\frac{nc}{V}$ a alors une signification immédiate (étant donné que V est par définition le volume unité) c'est le flux de photons par unité de surface.

Posant : $\frac{nc}{V} = F$

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = 2\pi\hbar (2\pi\alpha x F)^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (12)$$

La formule (12) nous permet de trouver la densité de probabilité de passage d'un état initial appartenant au spectre discret, à un groupe d'états finals dont l'énergie se situe dans l'intervalle $[E_f, E_f + dE_f]$ et dont le vecteur impulsion se trouve dans l'élément d'angle solide Ω, $\Omega + d\Omega$. La remarque (I) nous permet d'écrire :

$$W_{fg}(E_{fg}, \theta, \varphi) = 2\pi\hbar (2\pi\alpha F x)^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (13)$$

Intégrant sur E_{fg}

$$W_{fg}(\theta,\varphi) = \int W(E_{fg},\theta,\varphi)\, d E_{fg} = 2\pi\hbar (2\pi\alpha F x)^2 |K_{fg}|^2 \rho(0) \qquad (14)$$

Remplaçant ρ par son expression (7) et compte tenu de (5), on a :

$$W_{fg}(\theta, \varphi) = 2\pi\hbar\,(2\pi\alpha F\omega)^2 \left|K_{fg}\right|^2 \frac{m}{\hbar^2}\frac{k}{(2\pi)^3}$$

$$\boxed{W_{fg}(\theta, \varphi) = \frac{m}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}(2\pi\alpha F\omega)^2 \left|K_{fg}\right|^2 k} \qquad (15)$$

Le taux de transition total s'obtient en intégrant sur θ et φ

$$W_{fg} = \int d\Omega\, W_{fg}(\theta,\varphi) \qquad (16)$$

La section efficace différentielle du processus s'obtient en divisant $W_{fg}(\theta,\varphi)$ par le flux de photons F

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{(2\pi\alpha F\omega)^2}{F}\left|K_{fg}\right|^2 k$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\alpha^2 F\omega^2 \left|K_{fg}\right|^2 k} \qquad (17)$$

Afin d'éviter l'apparition de termes exagérément grands dans l'évaluation numérique de (17), nous allons exprimer celle-ci dans le système d'unités atomiques [15]

Pour simplifier l'écriture nous posons

$$K_{fg} = \sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{\omega_i - \omega_0 - \omega_p} = \hbar \sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p} \qquad (18)$$

Nous définissons l'intensité I par :

$$I = F\hbar\omega$$

Elle a pour dimension :

$$[I] = M\,T^{-3}$$

L'unité d'intensité dans le système d'unités atomiques a pour expression

$$I_{U.A.} = \frac{\alpha^2\hbar c^2}{a^4}\ \mathrm{W/cm^2}$$

α est la constante de structure fine
$\hbar$ la constante de Planck rationalisée
c la vitesse de la lumière
a est le rayon de la première orbite de Bohr.

On trouverait de même que :

$$[r_{fi}\cdot r_{ig}]^2 = [L]^7$$

Introduisant l'expression (18) dans (17) :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\alpha^2 F\omega\hbar \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 \hbar\omega k \qquad (19)$$

$$= \frac{m}{\hbar}\alpha^2 I \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k$$

E_p étant l'énergie des photons

Exprimons (19) en unités atomiques :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\frac{e^2}{\hbar c}\alpha\frac{a}{e^2}a^7 a^{-1} I \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k \qquad (20)$$

où :

I est exprimé en Watts/cm
σ en centimètres carrés
$r_{fi}\cdot r_{ig}$ en unités de a 7/2
E_i, E_0, E_p en unités de e^2/a
k en unités de a^{-1}

Après quelques calculs (20) se réduit à

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{a^4}{\hbar c^2\alpha}\right)a^2\alpha I \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k \qquad (21)$$

Nous voyons que le coefficient qui est situé dans la parenthèse assure l'homogénéité de la relation (21) et possède les dimensions de l'inverse d'une intensité.

Posant : $I'_0 = \left(\frac{\hbar c^2\alpha}{a^4}\right)$ Watt/cm^2

(21) s'écrit :

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{I'_0}\left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k a^2 \qquad (22)$$

(22) s'exprime encore sous la forme :

$$\boxed{\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\pi I_0}\left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k a^2} \qquad (22)$$

$$I_0 = \frac{1}{4\pi}\frac{\hbar c^2\alpha}{a^4} = 7{,}019.10^{16}\ \mathrm{W/cm^2} \qquad (23)$$

si : $\hbar = 1{,}05.10^{-34}$ J/sec
$a = 5{,}29.10^{-9}$ cm
$c = 3.10^{10}$ cm/s
$\alpha = \frac{1}{137}$

III - EFFET D'ECRAN

Pour évaluer l'expression (22) il nous faut expliciter les états initial, final et intermédiaire dans lesquels va se trouver tour à tour l'électron au cours du processus.

Si l'on connaît avec précision la fonction d'onde de l'électron lié au sein d'un atome d'hydrogène, par contre il est plus délicat de trouver l'expression rigoureuse de cette fonction lorsque l'on a affaire à un atome caractérisé par un nombre atomique élevé. La difficulté provient du fait que le potentiel auquel est soumis l'électron n'est plus dû à une charge ponctuelle mais résulte de la superposition de deux potentiels :

Celui dû au noyau et celui que crée le nuage électronique l'entourant, ces deux effets étant de signes contraires on dit alors que les électrons constituent un écran vis-à-vis de l'action du noyau.

Il existe deux méthodes permettant d'évaluer quantitativement cet effet d'écran. La première, semi-classique, est dûe à THOMAS et FERMI, la seconde, plus fine quant aux résultats obtenus, a été exposée par HARTREE et FOCK.

Nous utiliserons la première en raison de sa simplicité :

Modèle de THOMAS-FERMI de l'atome

On montre [18] que le noyau et le cortège électronique l'entourant ont pour effet de créer un potentiel donné par

$$\boxed{\phi = \frac{Ze}{r}\ \chi(r)} \qquad (24)$$

Posant :

$$r = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2}\ \frac{x}{Z^{1/3}} = 0{,}8853\ a\ \frac{x}{Z^{1/3}}$$

On voit que x est une variable sans dimension si l'on exprime (r) en unités atomique (a) étant alors l'unité de longueur . Dans ce système on a alors :

$$r = \frac{0{,}8853}{Z^{1/3}}\ x$$

χ est une fonction donnée par l'équation différentielle :

$$\boxed{\chi'' = x^{-1/2}\ \chi^{3/2}} \qquad (25)$$

qui a été résolue numériquement [19] et dont la courbe représentative à l'allure suivante :

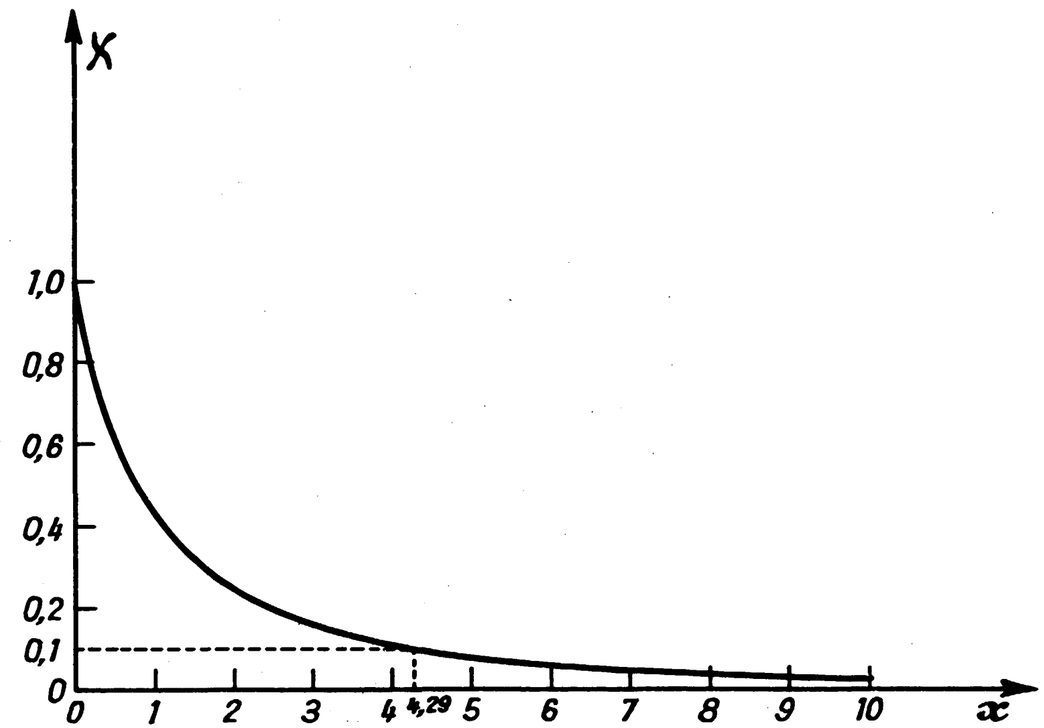


Figure II

En première approximation nous supposerons que χ garde une valeur constante. Cela pourra être par exemple la valeur prise par cette fonction à la distance (r) égale au rayon de l'atome. On peut trouver alors les fonctions d'ondes de l'électron avec une bonne approximation étant donné que l'on peut résoudre l'équation de SCHRODINGER radiale de la même façon que pour l'atome d'hydrogène. Il suffit d'effectuer la substitution $Z \to Z\ \chi$ pour obtenir les nouvelles fonctions d'ondes. Afin de simplifier l'écriture nous posons :

$$Z^* = Z\ \chi$$

IV - CALCUL DE L'ELEMENT DE MATRICE DIPOLAIRE K_{fg}

A) EXPRESSION DES ETATS

Nous allons expliciter les états dans lesquels l'électron va se trouver au cours du temps. Nous nous reporterons, pour effectuer les calculs, aux repères représentés figure III

L'origine des systèmes de coordonnées est le centre de l'atome

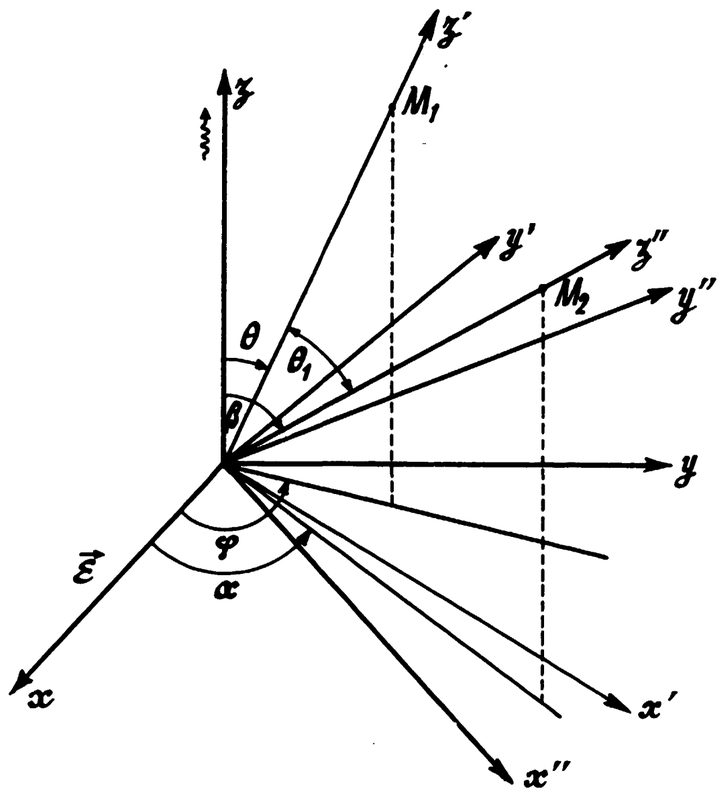


Figure III

Le trièdre Oxyz est déterminé par la direction de propagation de l'onde électromagnétique polarisée (axe $O\vec{z}$), par le vecteur polarisation $\vec{\varepsilon}$ qui lui est orthogonal (axe $O\vec{x}$), et par l'axe $O\vec{y}$ qui leur est perpendiculaire.

M_1 est la position de l'électron lié définie par les angles θ et φ, qui déterminent la direction $O\vec{z}'$; $O\vec{y}'$ est perpendiculaire au plan ZOZ' ; $O\vec{x}'$ complète le repère.

M_2 est la position de l'électron libre qui s'échappe dans la direction $O\vec{z}''$, définie par les angles β et α. Le repère est complété par l'axe $O\vec{y}''$, qui est perpendiculaire à Oz et Oz" et l'axe Ox".

θ_1 est l'angle des directions $O\vec{z}'$, $O\vec{z}''$, déterminé par $\cos\theta_1 = \sin\theta \sin\beta \cos(\varphi-\alpha) + \cos\theta\cos\beta$. Ces définitions nous permettent de rappeler la formule d'addition des fonctions sphériques dont nous ferons usage

$$Y_{LO}(\theta_1) = \sum_{M=-L}^{L} \left(\frac{4\pi}{2L+1}\right)^{1/2} Y_{LM}(\theta,\varphi) . Y^*_{LM}(\beta,\alpha)$$

ETAT INITIAL

Exprimé dans le repère (Oxyz) cet état s'écrit :

$$\varphi_g = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{26}$$

$R_{nl}(r)$ est la solution de l'équation de SCHRÖDINGER radiale

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ est un harmonique sphérique

n, l, m sont respectivement les nombres quantiques radial, orbital et magnétique.

ETAT INTERMEDIAIRE

De la même façon on peut écrire dans le système (Oxyz)

$$\varphi_i = R_{\nu\lambda}(r)\, Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) \tag{27}$$

ETAT FINAL

Cet état s'écrit dans le système (Ox'y'z') [15]

$$\varphi_f = \sum_L (2L+1)(-i)^L \sqrt{\frac{\pi}{2k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r)\, P_L(\cos\theta_1)$$

$$= \sum_L (2L+1)(-i)^L \sqrt{\frac{\pi}{2k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r) \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}}\, Y_{L0}(\theta_1)$$

$$= \sum_L (-i)^L \pi \sqrt{\frac{2(2L+1)}{k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r)\, Y_{L0}(\theta_1)$$

Soit dans le repère (Oxyz) qui nous intéresse : $\eta_L = \arg\Gamma(L+1-i/k)$

$$\varphi_f = \sum_L (-i)^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{\sqrt{k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r) \sum_M Y_{LM}(\theta,\varphi)\, Y^*_{LM}(\beta,\alpha) \tag{28}$$

Cette expression de l'état final nous permettra d'effectuer, dans le système d'axes (Oxyz), les opérations qui se présentent sur les fonctions $Y(\theta,\varphi)$ en utilisant les relations d'orthogonalité et de fermeture propres aux harmoniques sphériques.

Seules subsisteront dans le résultat final, les fonctions des angles α et β qui caractérisent l'électron libre.

SECTION EFFICACE DIFFERENTIELLE D'IONISATION

Dans l'élément d'angle solide $d\Omega = \sin\beta\, d\beta\, d\alpha$ elle est donnée par l'expression (22)

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\pi I_o} \left| \sum_i \frac{\langle\varphi_f|\vec{\varepsilon}.\vec{r}|\varphi_i\rangle \langle\varphi_i|\vec{\varepsilon}.\vec{r}|\varphi_g\rangle}{E_n - E_i + E_p} \right|^2 E_p\, k\, a^2$$

En explicitant les produits scalaires $(\vec{\varepsilon}.\vec{r}) = r\sin\theta\cos\varphi$ et en utilisant les expressions (26) (27) (28), il est possible d'exprimer la section efficace en séparant les opérations à effectuer sur les parties radiales et les parties angulaires .

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\pi I_o}\left|\sum_{\nu} \frac{\langle R_L^c(k,r)\,|r|\,R_{\nu\lambda}(r)\rangle\langle R_{\nu\lambda}(r)\,|r|\,R_{nl}(r)\rangle}{E_n - E_\nu + E_p}\right.$$

$$\cdot\sum_L\sum_M i^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{\sqrt{k}} e^{i\eta_L} Y_{LM}(\beta,\alpha)$$

$$\cdot\int Y^*_{LM}(\theta',\varphi')\sin\theta'\cos\varphi' Y_{\lambda\mu}(\theta',\varphi')\sin\theta' d\theta' d\varphi' \qquad (29)$$

$$\left.\cdot\int Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right|^2 E_p\, k\, a^2$$

Nous poserons

$$\boxed{P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \sum_\nu \frac{\langle R_L^c(k,r)\,|r|\,R_{\nu\lambda}(r)\rangle\langle R_{\nu\lambda}(r)\,|r|\,R_{nl}(r)\rangle}{E_n - E_\nu + E_p}} \qquad (30)$$

dont nous déterminerons ultérieurement la valeur, et nous ferons les calculs relatifs aux parties angulaires.

B) ETUDE DES PARTIES ANGULAIRES

TRANSITIONS PERMISES ET TRANSITIONS INTERDITES

Le système quantique ne peut changer d'état que dans la mesure où certaines règles de sélection sont respectées.

On montre que les seuls éléments de matrice dipolaire non nuls sont ceux pour lesquels :

1) - la variation du nombre quantique orbital l est

$$\Delta l = \pm 1$$

2) - la variation du nombre quantique magnétique m est, dans le cas d'une onde électromagnétique dont la polarisation est perpendiculaire à la direction de propagation

$$\Delta m = \pm 1$$

Si l'on part d'un état initial (l,m) l'état intermédiaire d'un atome pourra être l'un des 4 états suivants

$$\left(l+1 \left| \begin{matrix} m+1 \\ m-1 \end{matrix}\right.\right) \quad ; \qquad \left(l-1 \left| \begin{matrix} m+1 \\ m-1 \end{matrix}\right.\right)$$

et l'état final obtenu après absorption de 2 quanta se trouvera parmi les 16 possibilités suivantes :

$$\left(l+2 \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l+2 \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right) ; \left(l-2 \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l-2 \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right)$$

$$\left(l \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right) ; \left(l \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right)$$

Le dénombrement par les règles de sélection des états intermédiaires et des états finals possibles nous permettra d'effectuer la double sommation $\sum_L\sum_M$ figurant dans l'expression de K_{fg}

$$K_{fg} = \left| P^{nl}_{\lambda L}(E_p)\sum_L\sum_M i^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{\sqrt{k}} e^{i\eta_L} Y_{LM}(\beta,\alpha)\right.$$

$$\cdot\int Y^*_{LM}(\theta',\varphi')\sin\theta'\cos\varphi' Y_{\lambda\mu}(\theta',\varphi')\sin\theta' d\theta' d\varphi' \qquad (31)$$

$$\left.\cdot\int Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right|$$

Evaluons les intégrales en utilisant la forme suivante des harmoniques sphériques normés

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \qquad (32)$$

on a

$$\int Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \int P^*_{\lambda\mu}(\cos\theta)\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta.$$

$$\cdot\int \frac{e^{-i\mu\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\cos\varphi\,\frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\, d\varphi$$

mais

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-i\mu\varphi}\cos\varphi\, e^{im\varphi} d\varphi = \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\left\{ e^{-i\mu\varphi} e^{i\varphi} e^{im\varphi} + e^{-i\mu\varphi} e^{-i\varphi} e^{im\varphi}\right\} d\varphi = \frac{1}{2}$$

lorsque $m - \mu = +1$ pour la vibration circulaire droite
$m - \mu = -1$ pour la vibration circulaire gauche

Ce qui correspond aux règles de sélection, sur le nombre quantique magnétique m, que nous avons mentionnées plus haut.

L'élément de matrice K_{fg} s'écrira maintenant

$$K_{fg} = \left| P^{nl}_{\lambda L}(E_p)\sum_L\sum_M i^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{4\sqrt{k}} e^{i\eta_L}\right.$$

$$\left.\cdot\int P^*_{LM}(\cos\theta')\sin\theta' P_{\lambda\mu}(\cos\theta')\sin\theta' d\theta' \int P^*_{\lambda\mu}(\cos\theta)\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta\right| \qquad (33)$$

En employant les relations de transformation connues

$$\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta) = -\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\, P_{l+1,m+1}(\cos\theta) + \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\, P_{l-1,m-1}(\cos\theta)$$

$$\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta) = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\, P_{l+1,m-1}(\cos\theta) - \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\, P_{l-1,m-1}(\cos\theta)$$

on fait apparaître des produits de polynomes de LEGENDRE associés, qui s'expriment simplement grâce à la relation d'orthogonalité

$$\int_{\pi}^{2\pi} P_{lm}(\cos\theta)\, P_{l'm'}(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'} \tag{35}$$

Les relations de transformations (34) utilisées à partir de l'état (l,m) introduisent toutes les possibilités qui peuvent se présenter pour l'état final et pour cette raison permettent d'effectuer la double somme $\sum_L \sum_M$

L'expression (33) donnant la section efficace différentielle se met sous la forme :

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi^2 \alpha}{8 I_0} \left| M_{l+2} + M_l + M_{l-2} \right|^2 E_p a^2 \tag{36}$$

ou

$$M_{l+2} = P^{nl}_{l+1,l+2}(E_p)\, e^{i\eta_{l+2}} \frac{1}{(2l+3)(2l+5)^{1/2}(2l+1)^{1/2}} \Bigg\{ \Big((l-m+1)(l-m+2)(l-m+3)(l-m+4)\Big)^{1/2}$$

$$Y_{l+2,m-2}(\beta,\alpha) + \Big[(l+m+1)(l+m+2)(l+m+3)(l+m+4)\Big]^{1/2} Y_{l+2,m+2}(\beta,\alpha) \tag{37}$$

$$-2\Big[(l-m+1)(l+m+1)(l-m+2)(l+m+2)\Big]^{1/2} Y_{l+2,m}(\beta,\alpha) \Bigg\}$$

$$M_{l-2} = P^{nl}_{l-1,l-2}(E_p)\, e^{i\eta_{l-2}} \frac{1}{(2l-1)(2l+1)^{1/2}(2l-3)^{1/2}} \Bigg\{ \Big[(l+m)(l+m-1)(l+m-2)(l+m-3)\Big]^{1/2}$$

$$Y_{l-2,m-2}(\beta,\alpha) + \Big[(l-m)(l-m-1)(l-m-2)(l-m-3)\Big]^{1/2} Y_{l-2,m+2}(\beta,\alpha) \tag{38}$$

$$-2\Big[(l+m)(l-m)(l+m-1)(l-m-1)\Big]^{1/2} Y_{l-2,m}(\beta,\alpha) \Bigg\}$$

$$M_l = -P^{nl}_{l+1,l}(E_p)\, e^{i\eta_l} \frac{1}{(2l+1)(2l+3)} \Bigg\{ \Big[(l+m)(l+m-1)(l-m+1)(l-m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m-2}(\beta,\alpha)$$

$$+\Big[(l-m)(l-m-1)(l+m+1)(l+m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m+2}(\beta,\alpha)$$

$$-\Big[(l-m+1)(l-m+2) + (l+m+1)(l+m+2)\Big] Y_{l,m}(\beta,\alpha) \Bigg\}$$

$$- P^{nl}_{l-1,l}(E_p)\, e^{i\eta_l} \frac{1}{(2l-1)(2l+1)} \Bigg\{ \Big[(l+m)(l+m-1)(l-m+1)(l-m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m-2}(\beta,\alpha)$$

$$+\Big[(l-m)(l-m-1)(l+m+1)(l+m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m+2}(\beta,\alpha) \tag{39}$$

$$-\Big[(l+m)(l+m-1) + (l-m)(l-m-1)\Big] Y_{l,m}(\beta,\alpha) \Bigg\}$$

SECTION EFFICACE TOTALE D'IONISATION PAR ABSORPTION DE 2 PHOTONS

L'expression (36) fournit immédiatement la section efficace totale :

$$\frac{\sigma}{I} = \frac{\pi^2 \alpha}{8 I_0} E_p a^2 \int \left| M_{l+2} + M_l + M_{l-2} \right|^2 \sin\beta \, d\beta \, d\alpha \tag{40}$$

Les relations d'orthogonalité des harmoniques sphériques $Y_{lm}(\beta,\alpha)$ montrent clairement qu'il ne subsiste que des termes de la forme

$$M_L M_L^* = \left| P^{nl}_{\lambda,L}(E_p) \right|^2 Q_L(l,m)$$

$Q_L(l,m)$ étant un polynome en (m) facilement identifiable, dont les coefficient dépendent de l

Si le nombre quantique magnétique (m) prend une valeur qui est la moyenne des (2l + 1) valeurs possibles, les relations

$$(2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^{l} m^2 = \frac{1}{3} l(l+1) \tag{41}$$

$$(2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^{l} m^4 = \frac{1}{15} l(l+1)(3l^2+3l-1)$$

permettent d'exprimer la section efficace totale sous la forme

$$\boxed{\frac{\sigma_{nl}}{I} = \frac{2\pi^2 \alpha}{15 I_0} E_p a^2 \Bigg\{ \frac{2(l+1)(l+2)}{(2l+3)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l+1,l+2} \right|^2 + \frac{2l(l-1)}{(2l-1)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l-1,l-2} \right|^2 + \frac{(l+1)(4l^2+8l+5)}{(2l+1)^2(2l+3)} \left| P^{nl}_{l+1,l} \right|^2 + \frac{l(4l^2+1)}{(2l+1)^2(2l-1)} \left| P^{nl}_{l-1,l} \right|^2 \Bigg\}} \tag{42}$$

Pour pouvoir utiliser cette formule il nous faudra maintenant déterminer les valeurs des termes $\left| P^{nl}_{\lambda,l} \right|^2$ car les autres paramètres sont maintenant tous connus

- I est l'intensité du faisceau en Watt/cm^2
- E_p est l'énergie des photons incidents en unité e^2/a
- a est le rayon de BOHR égal à $5{,}29.10^{-9}$cm
- α est la constante de structure fine égale à 1/137

$I_0 = 7{,}019 \cdot 10^{16}$ Watt/cm^2 est un facteur assurant l'homogénéité des formules.

$$\frac{2\pi^2 \alpha a^2}{15\, I_0} = 3{,}831.10^{-36}\ \mathrm{cm}^4/\mathrm{W}$$

C) ETUDE DES PARTIES RADIALES

CALCUL DU TERME $P^{nl}_{\lambda,L}(E_p)$

Nous avons vu que la section efficace différentielle faisait intervenir des expressions de la forme (30)

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \sum_\nu \frac{\langle R^c_L | r | R_{\nu\lambda}\rangle \langle R_{\nu\lambda} | r | R_{nl}\rangle}{E_n - E_\nu + E_p}$$

$$= \sum_\nu \frac{\int R^c_L(r')\, r'\, R_{\nu\lambda}(r')\, r'^2 dr' \int R_{\nu\lambda}(r)\, r\, R_{nl}(r)\, r^2 dr}{E_n - E_\nu + E_p}$$

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \sum_\nu \frac{\int R_{nl}(r) \left| r\, R_{\nu\lambda}(r) \int R^c_L(r')\, R_{\nu\lambda}(r')\, r'^3 dr' \right| r^2 dr}{E_n - E_\nu + E_p} \qquad (43)$$

Celles-ci ne peuvent se calculer par des techniques classiques. Elles nécessitent l'utilisation d'une méthode particulière que nous allons développer.

Soit $\chi_{\nu\lambda}(r)$ la solution régulière de l'équation de SCHRÖDINGER radiale :

$$\chi_{\nu\lambda}(r) = r\, R_{\nu\lambda}(r) \qquad (44)$$

Elle vérifie donc l'équation :

$$\frac{1}{2}\frac{d^2 \chi_{\nu\lambda}}{dr^2} + \left[\frac{Z^*}{r} - \lambda\frac{(\lambda+1)}{2r^2} \right] \chi_{\nu\lambda}(r) = -E_\nu\, \chi_{\nu\lambda}(r) \qquad (45)$$

Ou ce qui revient au même :

$$\frac{1}{2}\frac{d^2(rR_{\nu\lambda}(r))}{dr^2} + \left[\frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right] \left(r\, R_{\nu\lambda}(r) \right) = -E_\nu\, r\, R_{\nu\lambda}(r) \qquad (46)$$

Multiplions par $(R_{\nu\lambda}(r')\, R^c_L(k,r')\, r'^3)$ et intégrons les deux membres sur (r')

$$\left(\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) \int_0^\infty rR_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' = -\int_0^\infty E_\nu\, rR_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' \qquad (47)$$

Ajoutons aux deux membres de cette équation la quantité :

$$\int_0^\infty (E_n + E_p)\ r\, R_{\nu\lambda}(r)\, R_{\nu\lambda}(r')\, R^c_L(k,r')\, r'^3\, dr'$$

Il vient :

$$\left(E_n + E_p + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) \int_0^\infty rR_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' =$$
$$\int_0^\infty (E_n + E_p - E_\nu)\ rR_{\nu\lambda}(r)\, R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(kr') r'^3 dr'$$

$$\left(E_n + E_p + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) \int_0^\infty \frac{rR_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr'}{E_n + E_p - E_\nu} = \int_0^\infty rR_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' \qquad (48)$$

Sommons sur (ν) et posons :

$$\boxed{U^n_{\lambda L}(r,E_p) = \sum_{\nu=\lambda+1}^\infty rR_{\nu\lambda}(r) \int_0^\infty \frac{R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r')\, r'^3 dr'}{E_n - E_\nu + E_p}} \qquad (49)$$

L'équation (48) se réduit à :

$$\left(E_n + E_p + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) U^n_{\lambda L}(r,E_p) = \sum_\nu \int_0^\infty rR_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' \qquad (50)$$

Le deuxième membre de cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\sum_\nu \int_0^\infty rR_{\nu\lambda}(r).\ r'R_{\nu\lambda}(r')\ .\ R^c_L(k,r')\, r'^2\, dr' \qquad (51)$$

La relation de fermeture des fonctions $\chi = r\, R(r)$

$$\sum_\nu rR_{\nu\lambda}(r).\ r'R_{\nu\lambda}(r') = \delta(r-r') \qquad (52)$$

nous permet d'écrire (51) sous la forme :

$$\int_0^\infty \delta(r-r')\, R^c_L(k,r')\, r'^2 dr' = R^c_L(k,r).\ r^2 \qquad (53)$$

Finalement l'équation (50) s'écrit :

$$\boxed{\left(E_n + E_p + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) U^n_{\lambda L}(r,E_p) = r^2 R^c_L(k,r)} \qquad (54)$$

Une application directe de la méthode de SCHWARTZ et TIEMAN [16], aurait conduit à la même équation.

Si l'on se reporte à l'expression de $P^{nl}_{\lambda L}(E_p)$ donnée par (43) on remarque que :

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \int_0^\infty R_{nl}(r)\, U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, r^2\, dr \qquad (55)$$

Etant donné que :

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{(2l+1)!}\left(\frac{(n+1)!}{(n-l-1)!\,2n}\right)^{1/2}\left(\frac{2Z^*}{n}\right)^{3/2} e^{-\frac{Z^* r}{n}}\left(\frac{2Z^* r}{n}\right)^{l} {}_1F_1\left(-(n-l-1),2l+2,\frac{2Z^* r}{n}\right) \qquad (56)$$

Ou ${}_1F_1\left(-(n-l-1),2l+2,\frac{2Z^* r}{n}\right)$ est la fonction hypergéométrique confluente

$${}_1F_1(\alpha,\beta,z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots\ldots \qquad (57)$$

Si l'on pose

$$\frac{Z^*}{n} = p_n$$

$$C(l,n,P) = \frac{1}{(2l+1)!}\left(\frac{(n+1)!}{(n-l-1)!\,2n}\right)^{1/2}(2p)^{3/2}(2p)^{l} \qquad (58)$$

(55) peut s'écrire :

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \int_0^\infty C(l,n,p)\, r^{l+2}\, {}_1F_1(-(n-l-1),2l+2,2pr)\, U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, e^{-pr} dr \qquad (59)$$

et on voit que $P^{nl}_{\lambda L}$ est donné par la somme des dérivées successives par rapport à p de la transformée de LAPLACE de la fonction $U^n_{\lambda L}(r,E_p)$ à condition de les prendre toutes au point $p_n = \frac{Z^*}{n}$. La dérivée d'ordre le plus bas étant la dérivée $(l+2)^{\text{ième}}$. Nous désignerons par $S^n_{\lambda L}(p,E_p)$ la transformée de LAPLACE de $U^n_{\lambda L}(r,E_p)$

$$S^n_{\lambda L}(p,E_p) = \int_0^\infty U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, e^{-pr} dr \qquad (60)$$

Substituant à ${}_1F_1$ la série équivalente on trouve que :

$$r^{l+2}\, {}_1F_1\left(-(n-l-1),2l+2,2pr\right) = r^{l+2} - 2p\frac{n-l-1}{2l+2} r^{l+3} - \frac{4Z^{*2}}{n^2}\frac{(n-l-1)(1-(n-l-1))}{(2l+2)(2l+3)} r^{l+4} \ldots \qquad (61)$$

Ce qui nous permet de réécrire $P^{nl}_{\lambda L}(E_p)$ sous la forme

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = C(l,n,p)\int_0^\infty \left\{ r^{l+2} - 2p\left(\frac{n-l-1}{2l+2}\right) r^{l+3} - 4p^2\frac{(n+l-1)(1-(n-l-1)}{(2l+2)(2l+3)2!} r^{l+4} + \ldots\ldots \right\} \cdot U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, e^{-pr} dr$$

$$\boxed{P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = (-1)^l C(n,l,p)\left\{\left[\frac{d^{l+2}S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^{l+2}}\right]_{p=\frac{Z^*}{n}} - \frac{n-l-1}{2l+2}\left[2p\frac{d^{l+3}S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^{l+3}}\right]_{p=\frac{Z^*}{n}} - \frac{(n-l-1)(1-(n-l-1)}{(2l+2)(2l+3)2!}\left[4p^2\frac{d^{l+4}S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^{l+4}}\right]_{p=\frac{Z^*}{n}} + \ldots\ldots\right\}} \qquad (62)$$

La fonction $S^n_{\lambda L}(p,E_p)$ et par conséquent ses dérivées successives est donnée par la transformée de LAPLACE de l'équation (54). Afin d'obtenir cette dernière multiplions (54) par $(r^2 e^{-pr})$ et intégrons sur (r) :

$$\int_0^\infty \left\{ E_n + E_p + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right\} U^n_{\lambda L}(r,E_p) r^2 e^{-pr} dr = \int_0^\infty R^c_L(k,r) r^4 e^{-pr} dr \qquad (63)$$

On a alors :

$$\left(E_n+E_p\right) L\left\{ U^n_{\lambda L}(r,E_p) r^2 \right\} + Z^* L\left\{ U^n_{\lambda L}(r,E_p) r \right\} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2} L\left\{ U^n_{\lambda L}(r,E_p) \right\}$$

$$+ \frac{1}{2} L\left\{ \frac{d^2}{dr^2}\left(U^n_{\lambda L}(r,E_p)\right) r^2 \right\} = \int_0^\infty R^c_L(k,r) r^4 e^{-pr} dr \qquad (64)$$

Sachant que

$$L\left\{ U^n_{\lambda L}(r,E_p) \right\} = S^n_{\lambda L}(p,E_p)$$

$$L\left\{ r U^n_{\lambda L}(r,E_p) \right\} = -\frac{d S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp}$$

$$L\left\{ r^2 U^n_{\lambda L}(r,E_p) \right\} = \frac{d^2 S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^2}$$

$$L\left\{ r^2 \frac{d^2 U^n_{\lambda L}(r,E_p)}{dp^2} \right\} = \int_0^\infty \frac{d^2 U^n_{\lambda L}(r,E_p)}{dr^2} r^2 e^{-pr} dr$$

$$= \left[\frac{dU^n_{\lambda L}}{dr} r^2 e^{-pr}\right]_0^\infty - \int_0^\infty \frac{dU^n_{\lambda L}}{dr}(2r - r^2 p)\, e^{-pr} dr$$

$$= \int_0^\infty U^n_{\lambda L}(r,E_p)\,(2 - 4rp + r^2 p^2)\, e^{-pr} dr$$

$$= 2 S^n_{\lambda L}(p,E_p) + 4p\frac{dS^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp} + p^2\frac{d^2 S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^2}$$

La transformée de LAPLACE de l'équation (54) est alors :

$$(E_n+E_p)\frac{d^2 S^n_{\lambda L}}{dp^2} - Z^*\frac{dS^n_{\lambda L}}{dp} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2} S^n_{\lambda L} + S^n_{\lambda L} + 2p\frac{dS^n_{\lambda L}}{dp} + \frac{1}{2} p^2\frac{d^2 S^n_{\lambda L}}{dp^2} = \int_0^\infty R^c_L(k,r)\, r^4 e^{-pr} dr$$

Soit :

$$\boxed{(E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2)\ \frac{d^2S^n_{\lambda L}}{dp^2}+(2p-Z^*)\ \frac{dS^n_{\lambda L}}{dp}+(1-\frac{\lambda(\lambda+1)}{2})\ S^n_{\lambda L}=\int_0^\infty R^c_L(k,r)r^4e^{-pr}dr} \quad (65)$$

Dérivons $(\lambda-1)$ fois cette équation par rapport à (p). On vérifie aisément que

$$(E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2)\ \frac{d^{\lambda+1}S^n_{\lambda L}}{dp^{\lambda+1}}+\left[(\lambda+1)\,p-Z^*\right]\frac{d^\lambda S^n_{\lambda L}}{dp^\lambda}+\frac{1}{2}\left[\lambda(\lambda+1)-\lambda(\lambda+1)\right]\frac{d^{\lambda-1}S^n_{\lambda L}}{dp^{\lambda-1}}$$

$$=(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty R^c_L(k,r)\,r^{\lambda+3}e^{-pr}dr$$

et l'équation nous donnant la dérivée $\lambda^{\text{ième}}$ de la fonction $S^n_{\lambda L}$ s'écrit :

$$\boxed{(E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2)\ \frac{d^{\lambda+1}S^n_{\lambda L}}{dp^{\lambda+1}}+\left[(\lambda+1)p-Z^*\right]\frac{d^\lambda S^n_{\lambda L}}{dp^\lambda}=(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty R^c_L(k,r)r^{\lambda+3}e^{-pr}dr} \quad (66)$$

Cette équation ne nous donne pas la valeur des dérivées de $S^n_{\lambda L}$ d'ordre inférieur à λ. Cela n'a aucune importance étant donné que le calcul de $P^{nl}_{\lambda L}(E_p)$ ne met en jeu que les dérivées d'ordre supérieur ou égal à (l+2). On rappelle à ce propos que $\lambda = \begin{cases} l+1 \\ l-1 \end{cases}$

Afin d'évaluer le deuxième membre de l'équation (66) nous utilisons la formule suivante (Appendice I)

$$\int_0^\infty r^{L+1}R^c_L(k,r)e^{-pr}dr=\frac{2^{L+1}Z^{*L+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}}\left[(1+\frac{k^2}{Z^{*2}})(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}})\ldots\ldots(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}})\right]^{1/2}. \quad (67)$$

$$\cdot\left(\frac{1}{(p^2+k^2)^{L+1}}\ e^{-\frac{2Z^*}{k}\text{Arc tg } k/p}\right)$$

On vérifie que :

$$(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty r^{\lambda+3}R^c_L(k,r)\,e^{-pr}dr=(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty r^{L+1+\lambda-L+2}R^c_L(k,r)\,e^{-pr}dr$$

$$=(-1)^{L+1}\ \frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}}\int_0^\infty r^{L+1}R^c_L(k,r)\,e^{-pr}dr$$

$$F_{\lambda L}(p,k)=\frac{(-2)^{L+1}Z^{*L+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}}\left[(1+\frac{k^2}{Z^{*2}})(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}})\ldots(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}})\right]^{1/2}\frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}}\left\{\frac{e^{-\frac{2Z^*}{k}\text{Arc tg } k/p}}{(p^2+k^2)^{L+1}}\right\} \quad (68)$$

Afin de mettre l'équation (66) sous une forme condensée nous considérons la quantité $E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2$

E_n est l'énergie de liaison de l'électron se trouvant sur le niveau n. En unités atomiques elle est égale à

$$E_n=-\frac{Z^{*2}}{2n^2} \quad (69)$$

E_p est l'énergie d'un photon incident. L'énergie mise en jeu lors de l'absorption de deux photons par l'électron lié est utilisé pour extraire celui-ci de sa couche, puis pour lui communiquer l'énergie cinétique $k^2/2$ (En unités atomiques)

$$2\ E_p=\frac{k^2}{2}+\frac{Z^{*2}}{2n^2} \quad (70)$$

dès lors :

$$E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2=\frac{1}{2}\left(p^2-\frac{Z^{*2}}{n^2}+\frac{k^2}{2}+\frac{Z^{*2}}{2n^2}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(p^2+\frac{k^2}{2}-\frac{Z^{*2}}{2n^2}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(p^2-\alpha^2\right) \quad (71)$$

ou

$$\alpha^2=\frac{Z^{*2}}{2n^2}-\frac{k^2}{2} \quad (72)$$

Posant :

$$y_{\lambda L}=\frac{d^\lambda S^n_{\lambda L}}{dp^\lambda}$$

l'équation (65) s'écrit :

$$\boxed{(p^2-\alpha^2)\frac{d\,y_{\lambda L}}{dp}+2\left[(\lambda+1)\,p-Z^*\right]y_{\lambda L}=2\,F_{\lambda L}\,(p,k)} \quad (73)$$

V - RESOLUTION NUMERIQUE

A) RAPPELS DES RESULTATS ETABLIS

On a vu que la section efficace pouvait se mettre sous la forme :

$$\frac{\sigma_{nl}}{I} = \frac{2\pi^2 \alpha}{15\, I_0} E_p\, a^2 \left\{ \frac{2\,(l+1)(l+2)}{(2l+3)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l+1,l+2} \right|^2 \right.$$

$$+ \frac{2l(l-1)}{(2l-1)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l-1,l-2} \right|^2 + \frac{(l+1)(4l^2+8l+5)}{(2l+1)^2(2l+3)} \left| P^{nl}_{l+1,l} \right|^2 \qquad (74)$$

$$\left. + \frac{l(4l^2+1)}{(2l+1)^2(2l-1)} \left| P^{nl}_{l-1,l} \right|^2 \right\}$$

I étant l'intensité du rayonnement incident en Watt/cm^2

I_0 une constante égale $7{,}019.10^{16}$ Watt/cm^2

α la constante de structure fine 1/137

a le rayon de la première orbite de BOHR : $5{,}29.10^{-9}$cm

E_p l'énergie des photons incidents exprimée en unité $\frac{e^2}{a}$

La valeur du coefficient constant est donc

$$\frac{2\pi^2 \alpha\, a^2}{15\, I_0} = 3{,}831\ 10^{-36}\ \text{cm}^4/\text{Watt}$$

Au paragraphe (IV C) nous avons défini le facteur $P^{nl}_{\lambda,L}(E_p)$ (équations 43 et 62) nous le reécrirons sous une forme équivalente.

$$P^{nl}_{\lambda,L}(E_p) = (-1)^l \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+1)!}{(n-l-1)!\,2n}} \left(\frac{2Z^*}{n}\right)^{l+\frac{3}{2}} \qquad (75)$$

$$\left\{ {}_1F_1 \left[-(n-l-1),\ (2l+2),\ -2p\frac{d}{dp} \right] \frac{d^{l-\lambda+2}}{dp^{l-\lambda+2}}\, y_{\lambda,L} \right\}_{p = \frac{Z^*}{n}}$$

avec

$$\lambda = \begin{cases} l+1 \\ l-1 \end{cases} \qquad L = \begin{cases} l+2 \\ l \\ l-2 \end{cases}$$

On remarquera que lorsque n est fixé, la série ${}_1F_1$ ne possède qu'un nombre limité de termes $n' = n-l$, l prenant alors toutes les valeurs entières de 0 à n-1.

Nous avons vu que $y_{\lambda,L}$ était solution de l'équation

$$(p^2 - \alpha^2)\frac{dy_{\lambda,L}}{dp} + 2\left[(\lambda+1)\,p - Z^* \right] y_{\lambda,L} = 2\, F_{\lambda,L}(p,k) \qquad (76)$$

ou

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\, \frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}} \frac{\exp\left[-\frac{2Z^*}{k} \operatorname{arcotg}\left(\frac{p}{k}\right) \right]}{(p^2+k^2)^{L+1}} \qquad (77)$$

avec

$$A_L(k) = \frac{(-2)^{L+1} Z^{*L+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+\frac{4k^2}{Z^{*2}}\right)\cdots\left(1+\frac{L^2k^2}{Z^{*2}}\right) \right]^{1/2} \qquad (78)$$

$$\alpha^2 = \frac{Z^{*2}}{n^2} - 2E_p = \frac{1}{2}\left(\frac{Z^{*2}}{n^2} - k^2\right) \qquad (79)$$

$$k^2 = 4E_p - \frac{Z^{*2}}{n^2} \qquad (80)$$

Comme nous ne nous intéressons ici qu'au cas de l'ionisation d'atomes par absorption nécessaire de 2 photons

$E_p < \frac{Z^{*2}}{2n^2} \longrightarrow \alpha^2 > 0$ et α est réel; puisqu'il faut aussi que $k^2 \geqslant 0$:

$$E_p > \frac{Z^{*2}}{4n^2}$$

nous ne considérons donc que l'éventualité

$$\frac{Z^{*2}}{4n^2} < E_p < \frac{Z^{*2}}{2n^2}$$

L'utilisation de la transformation de LAPLACE que nous avons faite nous impose

$$\text{Re}\ p > 0$$

Il faudra de plus que $y_{\lambda,L}$ et toutes ses dérivées soient finies pour toutes les valeurs de p situées sur l'axe réel positif.

B) EXPOSE DE LA METHODE

Nous allons chercher une solution analytique de l'équation (76) qui nous permette de calculer les dérivées successives de $y_{\lambda,L}$ au point $p_n = \frac{Z^*}{n}$

Nous connaissons une solution analytique $y_{\lambda,L}$ lorsque $\frac{Z^*}{\lambda+1} \neq \alpha$ dans ce cas le coefficient de $y_{\lambda,L}$ est différent de zéro.

Il est possible de faire un développement de Taylor autour du point $p = \alpha$ à l'intérieur d'un cercle de rayon R_k ou R_α limité par les singularités :

a) $\underline{p = \pm\, i\, k}$

si $R_k^2 = k^2 + \alpha^2 < 4\alpha^2 = R_\alpha^2$

c'est-à-dire si :

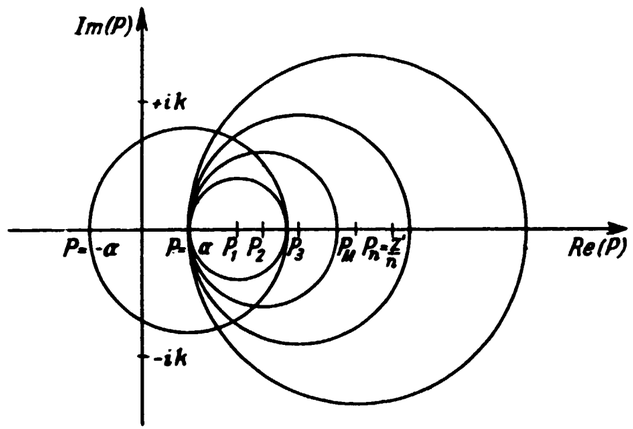
$$E_p \leqslant \frac{2\, Z^{*2}}{5\, n^2}$$

b) $\underline{p = -\alpha}$

si $\frac{2Z^{*2}}{5n^2} \leqslant E_p < \frac{Z^{*2}}{2n^2}$

Nous remarquerons d'autre part que $p_n - \alpha$ est toujours positif.

Par conséquent si nous voulons prolonger le domaine où nous connaissons une solution analytique de l'équation (76), de manière à approcher puis à englober le point $p_n = \frac{Z^*}{n}$, il faudra reévaluer les termes d'une nouvelle série développée autour d'un point p_1 du segment $[\alpha, p_n]$. Cette opération sera renouvelée autour de points p_1, p_2, p_M ... jusqu'à ce que $y_{\lambda,L}$ et ses dérivées puissent être calculées au point $p_n = \frac{Z^*}{n}$



Puisque nous effectuons des développements de TAYLOR dans lesquels nous ne conservons qu'un nombre fini de termes, nous n'obtiendrons qu'une approximation de la solution correcte. L'erreur introduite dans la première série se répercutera dans la seconde et ainsi de suite. Pour éviter l'amplification de cette erreur nous traiterons le point $p_0 = \alpha$ comme une singularité qui limitera le rayon de convergence de la 2ème série et ceux des suivantes.

Figure IV

Nous pouvons déterminer le nombre M de séries nécessaires pour obtenir un domaine dans lequel $y_{\lambda,L}(p_n)$ soit calculable et dont le centre p_M soit voisins de p_n

Soient R le rayon de convergence de la première série et r la fraction du rayon de convergence utilisée à chaque fois.

Le rayon de convergence de la $M^{\text{ième}}$ série est (appendice 2)

$$\varphi_n = (1+r)^{M-1}\varphi_1 = (1+r)^{M-1}\, r\, R\, \frac{k}{\alpha} \tag{81}$$

l'abscisse du point $p_0 = p_M$ autour duquel on effectue le $M^{\text{ième}}$ développement est :

$$p_M = \alpha + (1+r)^{M-1}\, r\, R\, \frac{k}{\alpha} \neq \frac{Z^*}{n}$$

si $\quad \frac{Z^*}{4n^2} < E_p < \frac{2Z^{*2}}{5n^2} \qquad R_k = \sqrt{\frac{Z^{*2} - n^2\alpha^2}{n^2}}$

$$M = 2 + \left[\left[\frac{\mathrm{Log}\left| \frac{1}{r}\left(\frac{Z^* - n|\alpha|}{Z^* + n|\alpha|}\right)^{1/2}\right|}{\mathrm{Log}\,(1+r)} \right]\right] \tag{82}$$

ou $[\lceil x \rceil]$ représente le premier entier supérieur à x

si $\quad \frac{2Z^*}{5n^2} \leq E_p < \frac{Z^*}{2n^2} \qquad R = 2\alpha$

$$M = 2 + \left[\left[\frac{\mathrm{Log}\left| \frac{1}{2r}\left(\frac{Z^* - n|\alpha|}{n|\alpha|}\right)\right|}{\mathrm{Log}\,(1+r)} \right]\right] \tag{83}$$

C) RECHERCHE D'UNE SOLUTION ANALYTIQUE

Soit p_0 un point quelconque du plan complexe p et $y_{\lambda,L}(p_0) = y_0$ la valeur de la fonction $y_{\lambda,L}(p)$ supposée parfaitement connue en ce point.

Nous définirons la variable complexe

$$\xi = p - p_0 \tag{84}$$

et nous introduirons les séries de TAYLOR

$$y_{\lambda,L}(p) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m \tag{85}$$

$$F_{\lambda,L}(p,k) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m \xi^m \tag{86}$$

qui vont nous permettre de résoudre l'équation différentielle (76)

Puisque les séries (85) et (86) satisfont à l'équation (76) celle-ci va nous fournir une identité vérifiée quelque soit ξ

$$\sum_{m=2}^{\infty} \Big\{ (p_0^2 - \alpha^2)(m+1)a_{m+1} + 2\Big[\big[(\lambda+1)+m\big]p_0 - Z^*\Big]a_m + (m + 2\lambda + 1)a_{m-1} - 2b_m \Big\}\xi^m \tag{87}$$

$$+ \Big\{ 2(p_0^2 - \alpha^2)a_2 + 2\big[(\lambda+2)p_0 - Z^*\big]a_1 + 2(\lambda+1)a_0 - 2b_1 \Big\}\xi$$

$$+ \Big\{ (p_0^2 - \alpha^2)a_1 + 2\big[(\lambda+1)p_0 - Z^*\big]a_0 - 2b_0 \Big\} \equiv 0$$

a) Expressions des coefficients a_m de la série $y_{\lambda,L} = \sum_0^{\infty} a_m \xi^m$

Lorsque $p_0 \neq \alpha$ l'identité (87) conduit à :

$$a_0 = y_0$$

$$a_1 = 2\big(b_0 - [(\lambda+1)p_0 - Z^*]a_0\big) / (p_0^2 - \alpha^2)$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{88}$$

$$a_{m+1} = \frac{2b_m - (m+2\lambda+1)a_{m-1} - 2\big[[\lambda+1+m]p_0 - Z^*\big]a_m}{(m+1)(p_0^2 - \alpha^2)} \qquad m \geq 1$$

Au point initial $p_0 = \alpha$ l'équation (76) conduit à :

$$a_0 = y_0 = \frac{F_{\lambda,L}(\alpha,k)}{(\lambda+1)\alpha - Z^*} = \frac{b_0}{(\lambda+1)\alpha - Z^*}$$

et l'indentité (87) donne

$$a_{m+1} = \frac{2\, b_{m+1} - (m + 2\lambda + 2)\, a_m}{2\,[\,(\lambda+m+2)\,\alpha - Z^*\,]} \qquad m \geq 0 \tag{89}$$

b) Calcul des coefficients b_m de la série $F_{\lambda,L}(p,k) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m \xi^m$

Considérons la fonction

$$G_L(p,k) = \frac{\exp\left[-\frac{2Z^*}{k}\,\mathrm{arcotg}\left(\frac{p}{k}\right)\right.}{(p^2+k^2)^{L+1}} \tag{90}$$

En différentiant une première fois par rapport à P obtient

$$(p^2+k^2)\,G_L^{(1)}(p,k) = 2\,[\,Z^* - (L+1)p\,]\,G_L(p,k) \tag{91}$$

Poursuivant la différentiation on est conduit à la relation générale (appendice n° 3)

$$(p^2+k^2)\,G_L^{(S+1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+S)\,p\,]\,G_L^{(S)} - S\,(2L+S+1)\,G_L^{(S-1)} \qquad S \geq 0 \tag{92}$$

Revenons à la fonction $F_{\lambda,L}(p,k)$ qui s'écrit

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\,\frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}}\,(G_L(p,k) \tag{93}$$

Suivant les états intermédiaires $\lambda = \left|\begin{matrix} l+1 \\ l-1 \end{matrix}\right.$ et les états finals $L = \left\{\begin{matrix} l+2 \\ l \\ l-2 \end{matrix}\right.$ qui interviennent dans le processus d'absorption, la quantité $\lambda - L + 2$ peut prendre les valeurs 1 ou 3

- si $\lambda - L + 2 = 1$ nous pourrons calculer $P^{nl}_{l+1,l+2}$ et $P^{nl}_{l-1,l}$

on a

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\,\frac{d}{dp}\,(G_L(p,k)) \tag{94}$$

la quantité au second membre de l'équation (94) se développe en série de TAYLOR autour du point p_0, ce qui permet d'écrire:

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k) \sum_{S=0}^{\infty} \frac{G^{S+1}(p_0)}{S!}\,\xi^S = \sum_{m=0}^{\infty} b_m\,\xi^m \tag{95}$$

La relation (92) nous donne :

$$(p_0^2+k^2)\,G_L^{S+2} = 2\,[\,Z^* - (L+2+S)\,p_0]\,G_L^{(S+1)} - (S+1)(2L+S+2)\,G_L^{(S)} \tag{96}$$

si bien qu'une identification dans l'équation (95) nous conduit à

$$b_{m+1} = \frac{1}{p_0^2+k^2}\left\{\frac{2\,[\,Z^* - (L+2+m)\,p_0\,]}{m+1}\,b_m - \frac{2L+m+2}{m}\,b_{m-1}\right\} \tag{97}$$

$$b_1 = A_L(k)\,G_L^{(2)}(p_0) \tag{98}$$

$$b_0 = A_L(k)\,G_L^{(1)}(p_0) \tag{99}$$

- si $\lambda - L + 2 = 3$ nous pourrons calculer $P^{nl}_{l-1,l-2}$ et $P^{nl}_{l+1,l}$

on a $$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\,\frac{d^3}{dp^3}\,(G_L(p,k)) \tag{100}$$

Comme précédemment la quantité au second membre de l'équation (100) se développe en série de TAYLOR autour du point p_0

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k) \sum_{S=0}^{\infty} \frac{G_L^{(S+3)}(p_0)}{S!}\,\xi^S = \sum_{m=0}^{\infty} b_m\,\xi^m \tag{101}$$

La relation (92) nous donne l'expression

$$(p_0^2+k^2)\,G_L^{(S+4)} = 2\,[\,Z^* - (L+4+S)\,p_0\,]\,G_L^{(S+3)} - (S+3)(2L+S+4)\,G_L^{(S+2)} \tag{102}$$

qui nous permet, par une identification dans l'équation (101), d'exprimer les coefficients b_m

$$b_{m+1} = \frac{1}{p_0^2+k^2}\left\{\frac{2\,[\,Z^* - (L+4+m)\,p_0\,]}{m+1}\,b_m - \frac{(m+3)(2L+m+4)}{m\,(m+1)}\,b_{m-1}\right\} \tag{103}$$

$$b_1 = A_L(k)\,G_L^{(4)}(p_0) \tag{104}$$

$$b_0 = A_L(k)\,G^{(3)}(p_0) \tag{105}$$

Si nous résumons maintenant l'organisation des calculs nous constatons que :

nous connaissons :

- L'intensité I du faisceau de photons et l'énergie E_p de ces derniers.

- La nature du gaz considéré, c'est-à-dire la valeur du nombre atomique *effectif* Z^* (compte tenu de l'effet d'écran); le nombre quantique principal n et le nombre quantique orbital l de l'électron ionisé par absorption de 2 photons (l variant par valeurs entières de 0 à n-1).

nous déduisons :

- La valeur L du nombre quantique orbital final

- Les valeurs de $k, \alpha, A_L(k)$ par les équations (78), (79), (80)

- $G_L(p,k)$ et ses dérivées $G_L^{(n)}(p,k)$ sont connues par les relations (90) et (91)

- Les expressions (97), (98), (99) d'une part et (103), (104), (105) d'autre part, nous fournissent respectivement les valeurs de coefficients b_m du développement de $F_{\lambda,L}(p,k)$ lorsque $\lambda - L + 2 = 1$ ou 3

- Les relations (88) et (89) nous donnent les valeurs des coefficients a_m du développement de la fonction $y_{\lambda,L}(p) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m$

L'expression (75) nous fournit enfin la valeur des différents facteurs $P^{nl}_{\lambda,L}(E_p)$

Tous les éléments sont alors connus pour calculer à l'aide de la relation (74) la section efficace d'ionisation σ_{nl}, relative à l'électron pour la sous couche (n,l).

Il est cependant plus utile de calculer la section efficace d'ionisation par absorption de deux photons pour un électron de la couche (n).

$$\sigma_n = \frac{1}{n^2} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)\, \sigma_{nl}$$

Nous tiendrons compte de ces deux éventualités dans la présentation des résultats numériques.

CONCLUSION

L'expression de la section efficace totale d'ionisation à laquelle nous sommes arrivés, a été obtenue à l'aide de la méthode de perturbation, en utilisant l'approximation dipolaire dans le cas non relativiste. Exception faite de ces approximations, qui sont d'ailleurs justifiées par les valeurs des grandeurs physiques qui interviennent dans ce problème, les calculs ont été effectués rigoureusement. Ils nous permettront de déterminer numériquement la section efficace pour un atome de faible potentiel d'ionisation tel que le césium. Des comparaisons avec les résultats de mesures expérimentales portant sur les phénomènes d'absorption de 2 photons seront effectuées dans un proche avenir. Il serait cependant intéressant d'étendre le domaine de cette étude aux gaz rares, qui ne peuvent s'ioniser qu'à l'aide d'un nombre élevé de photons. Aussi, la prochaine étape de notre travail consistera à essayer de généraliser la méthode de calcul des sections efficaces que nous avons décrite, au cas d'un processus multiphotonique.

APPENDICE 1 - Etablissement de la formule (67)

soit :

$$R_L^c(k,r) = \frac{2\sqrt{Z^*}}{(1-e^{-2\pi n'})^{1/2}} \prod_{S=1}^{l} \sqrt{S^2+n'^2}\, \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} e^{-ikr}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

$$= \frac{2^{l+1} Z^{*1/2}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} \prod_{S=1}^{l} \sqrt{S^2+\frac{Z^{*2}}{k^2}}\, e^{-ikr}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

$$= \frac{2^{l+1} Z^{*1/2}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} \prod_{S=1}^{l} \frac{\left(1+\frac{S^2k^2}{Z^{*2}}\right)}{k/Z^*}\, e^{-ikr}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

$$= \frac{2^{l+1} Z^{*1/2}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \frac{r^l}{(2l+1)!} Z^{*l} \left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}}\right) \ldots \left(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\right]^{1/2} e^{-ikr} \cdot$$

$$\cdot\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

Nous allons calculer l'intégrale :

$$I = \int_0^{\infty} r^{l+1} R_L^c(k,r)\, e^{-pr} dr$$

Posant :

$$K = \frac{2^{l+1} Z^{*l+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}}\right) \ldots \left(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\right]^{1/2}$$

$$I = K \int_0^{\infty} \frac{r^{2l+1}}{(2l+1)!} e^{-(ik+p)r}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)\, dr$$

Connaissant la transformée de LAPLACE de la fonction hypergéométrique confluente ${}_1F_1$.

$$\int_0^{\infty} e^{-St}\, t^{b-1}\, {}_1F_1(a,c,kt) = \Gamma(b)\, S^{-b}\, {}_2F_1\left(a,b,c,\frac{k}{s}\right)$$

On a dans le cas que nous étudions :

$$I = K \int_0^{\infty} \frac{r^{2l+1}}{(2l+1)!} e^{-(ik+p)r}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr) =$$

$$K \frac{\Gamma(2l+2)}{(2l+1)!} (ik+p)^{-(2l+2)}\, {}_2F_1\left(in'+l+1, 2l+2, 2l+2, \frac{2ik}{ik+p}\right)$$

Pour n entier on a :

$$\Gamma(n+1) = n!$$

D'autre part

$$_2F_1(a, b, b, z) = (1-z)^{-a}$$

Il en résulte :

$$I = K\,(ik+p)^{-(2l+2)}\left(1 - \frac{2ik}{ik+p}\right)^{-(in'+l+1)}$$

$$= K\,(ik+p)^{-(l+1)}\,(p-ik)^{-(l+1)}\left(\frac{p-ik}{p+ik}\right)^{-i\frac{Z^*}{k}} \qquad \left(n' = \frac{Z^*}{k}\right)$$

$$= K\,\frac{1}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left(\frac{p-ik}{p+ik}\right)^{-i\frac{Z^*}{k}}$$

$$= K\,\frac{1}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\left(\frac{p-ik}{\sqrt{p^2+k^2}}\right)^2\right]^{-i\frac{Z^*}{k}} = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\frac{p-ik}{\sqrt{p^2+k^2}}\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

$$= \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\frac{p}{\sqrt{p^2+k^2}} - i\,\frac{k}{\sqrt{p^2+k^2}}\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

Posons :

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{k}{p}$$

$$I = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} - i\,\frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{ctg}^2\varphi}}\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

$$= \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\cos\varphi - i\sin\varphi\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}} = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left(e^{-i\varphi}\right)^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

$$= \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\,e^{-\frac{2Z^*\varphi}{k}} = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\,e^{-\frac{2Z^*}{k}\operatorname{Arctg} k/p}$$

On obtient finalement

$$\boxed{I = \frac{2^{l+1}\,Z^{*\,l+\frac{1}{2}}}{\left(1 - e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}}\left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\ldots\left(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\right]^{1/2}\frac{1}{(p^2+k^2)^{l+1}}\,e^{-\frac{2Z^*}{k}\operatorname{Arctg} k/p}}$$

APPENDICE 2 - Expression des rayons de convergence

R est le rayon de convergence de la série développée autour du point particulier $p = \alpha$

r sera la fraction de ce rayon, (et de ceux engendrés par la suite) qui nous permettra d'obtenir le rayon de convergence de la série suivante .

On a successivement les rayons :

$$R$$

$$\varphi_1 = r\,R$$

$$\varphi_2 = \varphi_1 + r\,\varphi_1 = (1+r)\,\varphi_1 = (1+r)\,r\,R$$

$$\varphi_3 = \varphi_2 + r\,\varphi_2 = (1+r)^2\,\varphi_1$$

.....

$$\varphi_M = (1+r)^{M-1}\,\varphi_1$$

APPENDICE 3 - Etablissement de la relation (92)

La dérivation de (90) donne

$$(p^2+k^2)\,G_L^{(1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1)\,p\,]\,G_L^0$$

En dérivant successivement =

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(2)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+1)\,p\,]\,G_L^{(1)\prime} - 2\,(L+1)\,G_L^0$$

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(3)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+1+1)\,p\,]\,G_L^{(2)} - 2\,(L+1+1)\,G_L^{(1)} - 2\,(L+1)\,G_L^{(1)}$$

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(4)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+1+1+1)p\,]\,G_L^{(3)} - 2\,(L+1+1+1)\,G_L^{(2)} - 2\,(L+1+1)G_L^{(2)} - 2(L+1)\,G_L^{(1)}$$

Finalement on s'aperçoit

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(n+1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+n)\,p\,]\,G_L^n - 2\,[\,nL + \tfrac{n}{2}(n+1)\,]\,G_L^{(n-1)}$$

en rappelant que la somme des entiers

$$1 + 2 + 3 + \ldots + n = \frac{n}{2}\,(n+1)$$

Par conséquent on obtient bien la relation cherchée

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(n+1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+n)\,p\,]\,G_L^{(n)} - n\,(2L+n+1)\,G_L^{(n-1)}$$

Manuscrit reçu le 13 octobre 1966

BIBLIOGRAPHIE

[1] HAUGHT A.F., MEYERAND R.G., SMITH D.C.
Conf. San Juan, Puerto Rico, 1965, 28-30 Juin

[2] PAPOULAR R.
Le Journ. de Phys , 1965, Août-Septembre

[3] RAMSDEN, SAVIC
Nature, 1964, 19 Septembre

[4] TOMLINSON R.
Phys. Rev. Letters 14, 1965, 489

[5] BERRY M., DURAND Y., NELSON P., VEYRIE P.
C.R. Acad. Sc., Octobre 1964

[6] FLOUX F., VEYRIE P.
C.R. Acad. Sc. Novembre 1965

[7] VORONOV G.S., DELONE G.A., DELONE N.B.
KUDREVATOVA O.V.
Soviet Phys.Jetp, 1965, 2, 377

[8] GOEPPERT-MAYER M.
Ann. Phys., 1931, 9, 273

[9] KELDYSH L.V.
Soviet Phys., JETP 47, 1964, 1945

[10] NELSON P.
C.R. Acad. Sc., Octobre 1964

[11] NELSON P.
Rapport C.E.A. R 2888, 1965

[12] BEBB H.B., GOLD A.
Phys. Rev., 1966, 1, 143

[13] ZERNIK W.
Phys. Rev., 1964, A 51, 135

[14] ZERNIK W.
J. of Math. Phys., 1965, 6, 262

[15] BETHE H.A., SALPETER E.
Quantum Mechanics of one and two electron Atoms.
(Academic Press Inc. New York, 1957

[16] SCHWARTZ C., TIEMAN T.J.
Ann. Phys. New York, 1959, 6, 178

[17] MITTLEMAN M.H., WOLF F.A.
Phys. Rev., 1962, 128, 2686

[18] MESSIAH A.
Mécanique quantique (Dunod), Vol. II

[19] BUSH V., CALDWELL S.H.
Phys. Rev., 1931, 38, 1898

CEA-R 3113

GONTIER Y. TRAHIN M. .-
Ionisation d'un atome de césium par un processus d'absorption à deux photons issus d'un faisceau Laser.-
Commissariat à l'énergie atomique, Centre d'études nucléaires de Saclay (Essonne), 1967.-
27 cm, 33 p.

CEA-R 3113 - GONTIER Yves, TRAHIN Michel

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

Sommaire. - La formule donnant la section efficace d'ionisation d'un atome, par un processus d'absorption mettant en jeu deux photons issus d'un faisceau Laser, est établie. On se place dans le cas non relativiste et l'on utilise l'approximation dipolaire. La sommation sur les états intermédiaires est effectuée rigoureusement au moyen d'une technique particulière qui est décrite en détail. On expose une méthode permettant d'obtenir la solution numérique.

1967 37 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-R 3113 - GONTIER Yves, TRAHIN Michel

IONISATION OF A CESIUM ATOM BY AN ABSORPTION PROCESS INVOLVING TWO PHOTONS FROM A LASER BEAM

Summary. - The expression giving the ionisation cross-section of an atom, by an absorption process involving two photons produced from a laser beam, is derived. The non-relativistic case is considered and the dipolar approximation used. The summation over the intermediate states is carried out rigorously by means of a special technique which is described in detail. A method is presented which makes it possible to obtain the numerical solution.

1967 37 p.

Commissariat à l'Energie Atomique - France

CEA-R 3113

PREMIER MINISTRE
COMMISSARIAT A
L'ÉNERGIE ATOMIQUE

CEA-R 3113

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

par

Yves GONTIER, Michel TRAHIN

Rapport CEA - R 3113

1967
Da

CENTRE D'ETUDES
NUCLÉAIRES DE SACLAY

Les rapports du COMMISSARIAT A L'ENERGIE ATOMIQUE sont, à partir du n° 2200, en vente à la Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VIIème.

The C.E.A. reports starting with n° 2200 are available at the Documentation Française, Secrétariat Général du Gouvernement, Direction de la Documentation, 31, quai Voltaire, PARIS VIIème.

- Rapport CEA-R 3113 -

Services de Physique Appliquée
Service de Physique des Interactions Electroniques

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

par

Yves GONTIER, Michel TRAHIN

- Janvier 1967 -

INTRODUCTION

I - EXPOSE DE LA METHODE

II - PROBABILITE DE TRANSITION

III - EFFET D'ECRAN

Modèle de Thomas-Fermi de l'Atome

IV - CALCUL DE L'ELEMENT DE MATRICE DIPOLAIRE Kfg

A) EXPRESSION DES ETATS

Etat initial
Etat intermédiaire
Etat final
Section efficace différentielle d'ionisation

B) ETUDE DES PARTIES ANGULAIRES

Transitions permises et Transitions interdites
Expression de la section efficace totale

C) ETUDE DES PARTIES RADIALES

Calcul du terme $p^{nl}_{\lambda i}$ (E_p)

V - RESOLUTION NUMERIQUE

A) RAPPEL DES RESULTATS ETABLIS

B) EXPOSE DE LA METHODE

C) RECHERCHE D'UNE SOLUTION ANALYTIQUE

CONCLUSION

APPENDICES

IONISATION D'UN ATOME DE CESIUM
PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION A DEUX PHOTONS
ISSUS D'UN FAISCEAU LASER

INTRODUCTION

Les progrès de la technologie Laser, mettant à la disposition des expérimentateurs des appareils capables de produire des faisceaux lumineux de grande intensité, permettent de mettre en évidence des phénomènes physiques prévus depuis longtemps par l'électrodynamique quantique.

De nombreuses expériences permettant l'observation de l'interaction rayonnement-matière ont déjà été réalisées. Nous citerons entre autre les travaux de A.F. HAUGHT, R.G. MEYERAND et D.C. SMITH [1], R. PAPOULAR [2], RAMSDEN et SAVIC [3], R. TOMLINSON [4], M. BERRY, Y. DURAND, F. FLOUX, P. NELSON et P. VEYRIE [5] [6], G.S. VORONOV et G.A. DELONE [7].

Nous avons choisi d'étudier le mécanisme d'ionisation des atomes hydrogénoïdes, résultant de l'absorption de deux ou d'un nombre supérieur de photons.

Si nous considérons le cas du césium dont le potentiel d'ionisation (3,89 eV) est relativement faible, nous constatons qu'il est possible de déclencher le phénomène qui nous intéresse, à l'aide d'une absorption deux photons pour un faisceau dont l'énergie élémentaire peut être prise égale à 3,56 eV ou à 2,32 eV.

Le choix de telles conditions expérimentales nous a été dicté par la possibilité de pouvoir faire un calcul de la section efficace du processus, qui soit suffisamment rigoureux, pour nous permettre de confronter les évaluations numériques avec les résultats des mesures.

La première théorie mettant en jeu deux quanta a été proposée par M. GOEPPERT-MAYER [8] qui a examiné l'effet Raman. Plus récemment des travaux portant sur l'ionisation multiphotonique dans l'hydrogène et les gaz rares ont été effectués par L.V. KELDYSH [9], par P. NELSON [10] [11], par H.B. BEBB et A. GOLD [12] et par W. ZERNIK [13] [14].

En nous inspirant du plan exposé par ce dernier auteur, nous établirons dans un formalisme différent (FEYNMAN-DYSON), la probabilité de l'évènement dans le cas du césium. Cet élément ayant un numéro atomique relativement élevé, nous devrons tenir compte de l'effet d'écran produit par le nuage d'électrons (modèle statistique de THOMAS-FERMI).

L'atome considéré comme un état lié sera traité dans le schéma de FURRY, qui nous permet d'obtenir des expressions formelles analogues à celle figurant dans le schéma d'interaction libre.

Dans cette représentation nous établissons, par la méthode des diagrammes de FEYNMAN, l'expression générale donnant l'amplitude de probabilité. Afin d'exploiter ce résultat nous ferons deux approximations classiques, applicables au traitement de ce problème. Nous nous placerons dans le cas non relativiste et effectuerons l'approximation dipolaire. Partant d'un état initial atomique bien défini situé dans spectre discret en interaction le champ e. m. quantifié, nous atteindrons un état final situé dans le continu après être passé par tous les états intermédiaires possibles.

La sommation sur de tels états se décomposera en deux parties : la première, relative aux parties angulaires, ne fera intervenir que des coefficients de Clebsh-Gordan ; la seconde nécessitera une application concrète de la théorie proposée par SCHWARTZ et

TIEMAN [16] et utilisée par MITTLEMAN et WOLF [17]. La résolution numérique réclamera une utilisation judicieuse de la transformée de Laplace et de la méthode des prolongements analytiques.

1 - EXPOSE DE LA METHODE

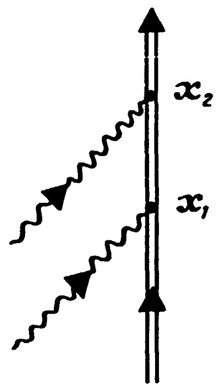


Figure I

La figure 1 constitue une transcription imagée du mécanisme d'ionisation d'un atome par absorption de deux photons.

Elle nous permet d'écrire, au moyen des règles de FEYNMAN, l'élément de matrice grâce auquel on peut calculer la probabilité de l'évènement.

On peut en donner l'interprétation suivante :

- un premier photon (représenté par une ligne ondulée) interagit avec l'électron lié au sein de l'atome au point spatio-temporel (double trait). Celui-ci se trouve alors dans l'un des états intermédiaires excités permis par les règles de sélection (segments x_1, x_2) jusqu'à ce que le deuxième photon absorbé au point x_2 déclanche l'ionisation en créant un état électronique libre

L'amplitude de probabilité s'écrit :

$$< k_f f_{n-2} \,|R|\, k_g g_n > = (-e)^2 \int dx_1 \int dx_2 \; \bar{\Psi}_F(x_2) \Big| < f_{n-2} \Big| \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d\vec{p}_2}{\sqrt{2p_{02}}} \cdot$$

$$a(\vec{p}_2)\, e^{\lambda 2}(p_2)\, e^{i\vec{p}_2 \cdot \vec{x}_2}\; K_F(x_1, x_2) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d\vec{p}_1}{\sqrt{2p_{01}}}\; a(\vec{p}_1)\, e^{\lambda 1}(p_1)\, e^{i\vec{p}_1 \cdot \vec{x}_1} \Big| g_n > \Big| \Psi_F(x_1) \qquad (1)$$

où

- $|k_g g_n >$ représente l'état initial à un électron d'impulsion k_g et à n photons
- $|k_f f_{n-2} >$ représente l'état final à un électron d'impulsion k_f et à (n-2) photons.
- $\bar{\Psi}_F(x_2)$ est l'opérateur décrivant l'électron se trouvant dans l'état final.
- $\Psi_F(x_1)$ est l'opérateur décrivant l'électron se trouvant dans l'état initial.
- $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d\vec{p}}{\sqrt{2p_0}}\, a(\vec{p})\, e^{i\vec{p}.\vec{x}}$ représente la décomposition en intégrales de FOURIER (ondes planes) du potentiel correspondant au champ électromagnétique rayonné
- $a(\vec{p})$ est l'opérateur d'annihilation des photons d'impulsion $\vec{p}$
- $e^{\lambda}(\vec{p})$ est le vecteur polarisation des photons d'impulsion $\vec{p}$
- $\Psi_n(\vec{x})$ représente l'état intermédiaire par lequel passe le système
- $K_F^{NR}(x_2, x_1)$ est le propagateur de FEYNMAN dont l'expression non relativiste que nous utiliserons par la suite est :

$$K_F^{NR}(x_2, x_1) = \sum_n \Psi_n(\vec{x}_2)\, \Psi_n^*(\vec{x}_1)\, e^{-iE_n(t_2 - t_1)}$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, \Psi_n(\vec{x}_2)\, \Psi_n^*(\vec{x}_1) \cdot \frac{e^{i\omega(t_2 - t_1)}}{E_n + \omega}$$

Les quantités indicées en (F) sont relatives au schéma d'interaction lié ou de FURRY.

Développant les calculs d'une manière identique à celle qui permet de retrouver la formule de KRAMERS-HEISENBERG nous obtenons dans la limite non relativiste et dans le système d'unités naturelle ($\hbar = c = 1$)

$$< k_f f_{n-2} \,|R|\, k_g g_n > = -\frac{e^2}{2\pi i} \frac{n}{(2\pi)^3} \frac{(2\pi)^2}{2\sqrt{k_{01} k_{02}}} \sum_n < k_f \Big| e^{\lambda 2}(\vec{k}_2)\, e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}}$$

$$\frac{|\Psi_n > < \Psi_n|}{E_n - E_{01} - k_{01}}\, e^{\lambda 1}(\vec{k}_1)\, e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \Big| kg > \delta(E_2 - k_{02} - E_1 - k_{01}) \qquad (2)$$

(E_1) est l'énergie de l'électron dans l'état initial (lié), (E_2) est l'énergie correspondante dans l'état final (libre), k_{01} et k_{02} sont les énergies des photons absorbés.

L'expression (2) donne, moyennant l'approximation dipolaire :

$$< k_f f_{n-2} \,|R|\, k_g g_n > = -\frac{i e^2 n}{2(2\pi)^2} \sqrt{|\vec{k}_1| |\vec{k}_2|} \sum_n < k_f \Big| \vec{x} \cdot \vec{\epsilon}_2 \frac{|\Psi_n > < \Psi_n|}{E_n - E_1 - k_{01}}$$

$$\vec{x} \cdot \vec{\epsilon}_1 \,|k_g > \delta(E_2 - k_{02} - E_1 - k_{01}) \qquad (3)$$

Etant donné que les deux photons ont la même énergie k_0 et que :

$$k_{01,2}^2 - \vec{k}_{1,2}^2 = 0$$

(3) peut s'écrire :

$$< k_2 f_{n-2} \,|R|\, k_1 g_n > = -i \frac{e^2 n}{2(2\pi)^2}\, k_0 \sum_n < k_f \Big| \vec{x} \cdot \vec{\epsilon}\, \frac{|\Psi_n > < \Psi_n|}{E_n - E_1 - k_0}\, \vec{x} \cdot \vec{\epsilon} \,|k_g > \delta(E_{fg}) \qquad (4)$$

$$E_{fg} = E_2 - E_1 - 2k_0 = \Big\{ E_I - 2\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Big\}_{U.C.G.S.}$$

$$= \Big\{ E_I - 2\omega + \frac{k^2}{2m} \Big\}_{U.N.} \qquad (5)$$

E_I est l'énergie d'ionisation de l'atome

$\hbar\omega = k_0$ est l'énergie du photon en unités C.G.S.

$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie cinétique de l'électron libre (k étant le nombre d'onde correspondant) en unités C.G.S.

II - PROBABILITE DE TRANSITION

On obtient la probabilité d'ionisation P_{fg} en prenant le module carré de (4)

Appelant

$$K_{fg} = \sum_n \langle k_f | \vec{x}.\vec{\varepsilon} \frac{|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|}{E_n - E_0 - k_0} \vec{x}.\vec{\varepsilon} | k_g \rangle$$

$$S_{fg} = \langle k_f f_{n-2} | R | k_g g_n \rangle$$

P_{fg} s'écrit

$$P_{fg} = |R_{fg}|^2 = \left(\frac{e^2}{2\pi} \frac{n}{(2\pi)^3} (2\pi)^2 \frac{k_0}{2} \right) |K_{fg}|^2 \delta^2 (E_{fg}) \qquad (6)$$

Cette formule est applicable dans le cas où l'on a affaire à des transitions atomiques. C'est-à-dire dans le cas où, partant d'un état initial d'énergie bien déterminée, on aboutit à un état final dont l'énergie est bien connue. Ce n'est pas tout à fait le problème que nous étudions ici puisque l'état final est un état non lié dont l'énergie est susceptible de prendre une suite continue de valeurs. On ne peut plus décrire le comportement final du système par un seul état d'énergie fixée mais par un groupe d'états dont chacun est affecté d'une énergie centrée autour d'une certaine valeur.

Le nombre des états contenus dans le volume de normalisation pris pour unité est appelé densité d'états continus.

On montre très simplement que le nombre d'états ayant une impulsion comprise entre $\vec{k}$ et $\vec{k} + d\vec{k}$ est :

$$\rho(\vec{k}) = \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3}$$

Donc la densité d'états ayant une impulsion comprise entre $\vec{k}$ et $\vec{k} + d\vec{k}$ est

$$\rho(k) = \frac{1}{(2\pi)^3}$$

De la même façon on trouve que la densité d'états ayant une énergie comprise entre E et E + dE est : (en U.C.G.S.)

$$\rho(E) = \frac{m}{h^2} \frac{k}{(2\pi)^3} \qquad (7)$$

k étant le nombre d'onde correspondant à l'impulsion $\vec{k}$

<u>Remarque</u> (I) Il est équivalent de partir de densité d'états finals $\rho(E_f)$ ou de densité d'états dont l'énergie subit la variation $E_f - E_g = E_{fg}$

$$\rho(E_f) = \rho(E_{fg})$$

La probabilité par unité de temps s'écrit :

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = (2\pi)^2 \left(2\pi\alpha \frac{nc}{(2\pi)^3} x\right)^2 |K_{fg}|^2 \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \frac{1}{(2\pi)^2} \left[\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} e^{i(x_f - x_g)t} dt \right]^2 . \delta(E_{fg}) \qquad (8)$$

Moyennant cette autre représentation de la fonction $\delta(x)$

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \frac{\sin^2 xt}{x^2} \qquad (9)$$

(10) peut s'écrire sous la forme :

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = (2\pi)(2\pi\alpha x \frac{nc}{(2\pi)^3})^2 |K_{fg}|^2 \delta(x_{fg}) \rho(E_{fg})$$
$$= 2\pi\hbar (2\pi\alpha x \frac{nc}{(2\pi)^3})^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (10)$$

Afin de donner un sens physique à la quantité $\frac{nc}{(2\pi)^3}$ nous normons la fonction d'onde du photon non plus à $(2\pi)^{-3/2}$ mais dans un volume V. Cela revient à multiplier la quantité $\left((2\pi)^{3/2}/\sqrt{V}\right)^2$ vu la présence des deux opérateurs d'annihilation de photons dans (1). (10) peut s'écrire alors :

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = 2\pi\hbar (2\pi\alpha x \frac{nc}{V})^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (11)$$

La quantité $\frac{nc}{V}$ a alors une signification immédiate (étant donné que V est par définition le volume unité) c'est le flux de photons par unité de surface.

Posant : $\frac{nc}{V} = F$

$$\left[P_{fg}\right]_{temps} = 2\pi\hbar (2\pi\alpha x F)^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (12)$$

La formule (12) nous permet de trouver la densité de probabilité de passage d'un état initial appartenant au spectre discret, à un groupe d'états finals dont l'énergie se situe dans l'intervalle $[E_f, E_f + dE_f]$ et dont le vecteur impulsion se trouve dans l'élément d'angle solide Ω, $\Omega + d\Omega$. La remarque (I) nous permet d'écrire :

$$W_{fg}(E_{fg}, \theta, \varphi) = 2\pi\hbar (2\pi\alpha F x)^2 |K_{fg}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg}) \qquad (13)$$

Intégrant sur E_{fg}

$$W_{fg}(\theta,\varphi) = \int W(E_{fg},\theta,\varphi)\, dE_{fg} = 2\pi\hbar (2\pi\alpha F x)^2 |K_{fg}|^2 \rho(0) \qquad (14)$$

Remplaçant ρ par son expression (7) et compte tenu de (5), on a :

$$W_{fg}(\theta, \varphi) = 2\pi\hbar\,(2\pi\alpha F\omega)^2 \left|K_{fg}\right|^2 \frac{m}{\hbar^2}\frac{k}{(2\pi)^3}$$

$$\boxed{W_{fg}(\theta, \varphi) = \frac{m}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}(2\pi\alpha F\omega)^2 \left|K_{fg}\right|^2 k} \qquad (15)$$

Le taux de transition total s'obtient en intégrant sur θ et φ

$$W_{fg} = \int d\Omega\, W_{fg}(\theta,\varphi) \qquad (16)$$

La section efficace différentielle du processus s'obtient en divisant $W_{fg}(\theta,\varphi)$ par le flux de photons F

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{(2\pi\alpha F\omega)^2}{F}\left|K_{fg}\right|^2 k$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\alpha^2 F\omega^2 \left|K_{fg}\right|^2 k} \qquad (17)$$

Afin d'éviter l'apparition de termes exagérément grands dans l'évaluation numérique de (17), nous allons exprimer celle-ci dans le système d'unités atomiques [15]

Pour simplifier l'écriture nous posons

$$K_{fg} = \sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{\omega_i - \omega_0 - \omega_p} = \hbar \sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p} \qquad (18)$$

Nous définissons l'intensité I par :

$$I = F\hbar\omega$$

Elle a pour dimension :

$$[I] = M\,T^{-3}$$

L'unité d'intensité dans le système d'unités atomiques a pour expression

$$I_{U.A.} = \frac{\alpha^2\hbar c^2}{a^4} \quad W/cm^2$$

α est la constante de structure fine
$\hbar$ la constante de Planck rationalisée
c la vitesse de la lumière
a est le rayon de la première orbite de Bohr.

On trouverait de même que :

$$[r_{fi}\cdot r_{ig}]^2 = [L]^7$$

Introduisant l'expression (18) dans (17) :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\alpha^2 F\omega\hbar \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 \hbar\omega k \qquad (19)$$

$$= \frac{m}{\hbar}\alpha^2 I \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k$$

E_p étant l'énergie des photons

Exprimons (19) en unités atomiques :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{\hbar}\frac{e^2}{\hbar c}\alpha\,\frac{a}{e^2}\,a^7 a^{-1}\, I \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k \qquad (20)$$

où :

I est exprimé en Watts/cm
σ en centimètres carrés
$r_{fi}\cdot r_{ig}$ en unités de a 7/2
E_i, E_0, E_p en unités de e^2/a
k en unités de a^{-1}

Après quelques calculs (20) se réduit à

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{a^4}{\hbar c^2\alpha}\right) a^2\alpha I \left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k \qquad (21)$$

Nous voyons que le coefficient qui est situé dans la parenthèse assure l'homogénéité de la relation (21) et possède les dimensions de l'inverse d'une intensité.

Posant : $$I'_0 = \left(\frac{\hbar c^2\alpha}{a^4}\right) \quad Watt/cm^2$$

(21) s'écrit :

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{I'_0}\left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k\, a^2 \qquad (22)$$

(22) s'exprime encore sous la forme :

$$\boxed{\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\pi I_0}\left|\sum_i \frac{r_{fi}\cdot r_{ig}}{E_i - E_0 - E_p}\right|^2 E_p k\, a^2} \qquad (22)$$

$$I_0 = \frac{1}{4\pi}\frac{\hbar c^2\alpha}{a^4} = 7{,}019.10^{16}\ W/cm^2 \qquad (23)$$

si : $\hbar = 1{,}05.10^{-34}$ J/sec
$a = 5{,}29.10^{-9}$ cm
$c = 3.10^{10}$ cm/s
$\alpha = \frac{1}{137}$

III - EFFET D'ECRAN

Pour évaluer l'expression (22) il nous faut expliciter les états initial, final et intermédiaire dans lesquels va se trouver tour à tour l'électron au cours du processus.

Si l'on connaît avec précision la fonction d'onde de l'électron lié au sein d'un atome d'hydrogène, par contre il est plus délicat de trouver l'expression rigoureuse de cette fonction lorsque l'on a affaire à un atome caractérisé par un nombre atomique élevé. La difficulté provient du fait que le potentiel auquel est soumis l'électron n'est plus dû à une charge ponctuelle mais résulte de la superposition de deux potentiels :

Celui dû au noyau et celui que crée le nuage électronique l'entourant, ces deux effets étant de signes contraires on dit alors que les électrons constituent un écran vis-à-vis de l'action du noyau.

Il existe deux méthodes permettant d'évaluer quantitativement cet effet d'écran. La première, semi-classique, est dûe à THOMAS et FERMI, la seconde, plus fine quant aux résultats obtenus, a été exposée par HARTREE et FOCK.

Nous utiliserons la première en raison de sa simplicité :

Modèle de THOMAS-FERMI de l'atome

On montre [18] que le noyau et le cortège électronique l'entourant ont pour effet de créer un potentiel donné par

$$\boxed{\phi = \frac{Ze}{r}\,\chi(r)} \qquad (24)$$

Posant :

$$r = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{me^2}\,\frac{x}{Z^{1/3}} = 0{,}8853\ a\ \frac{x}{Z^{1/3}}$$

On voit que x est une variable sans dimension si l'on exprime (r) en unités atomique (a) étant alors l'unité de longueur . Dans ce système on a alors :

$$r = \frac{0{,}8853}{Z^{1/3}}\,x$$

χ est une fonction donnée par l'équation différentielle :

$$\boxed{\chi'' = x^{-1/2}\,\chi^{3/2}} \qquad (25)$$

qui a été résolue numériquement [19] et dont la courbe représentative à l'allure suivante :

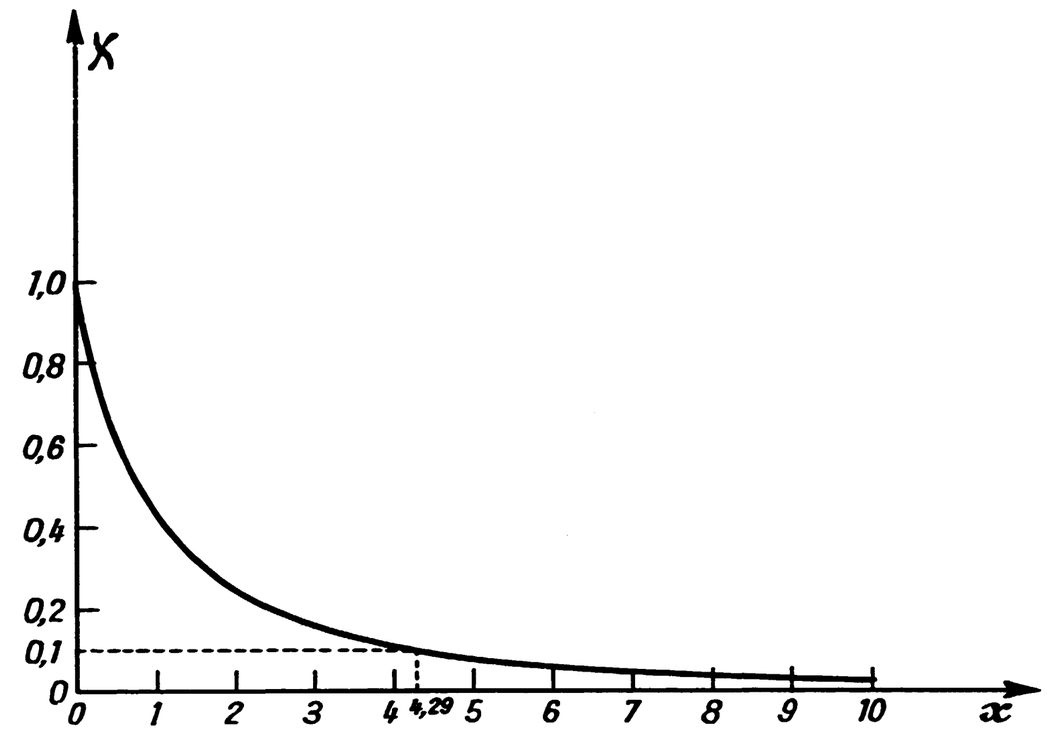


Figure II

En première approximation nous supposerons que χ garde une valeur constante. Cela pourra être par exemple la valeur prise par cette fonction à la distance (r) égale au rayon de l'atome. On peut trouver alors les fonctions d'ondes de l'électron avec une bonne approximation étant donné que l'on peut résoudre l'équation de SCHRODINGER radiale de la même façon que pour l'atome d'hydrogène. Il suffit d'effectuer la substitution $Z \to Z\,\chi$ pour obtenir les nouvelles fonctions d'ondes. Afin de simplifier l'écriture nous posons :

$$Z^* = Z\,\chi$$

IV - CALCUL DE L'ELEMENT DE MATRICE DIPOLAIRE K_{fg}

A) EXPRESSION DES ETATS

Nous allons expliciter les états dans lesquels l'électron va se trouver au cours du temps. Nous nous reporterons, pour effectuer les calculs, aux repères représentés figure III

L'origine des systèmes de coordonnées est le centre de l'atome

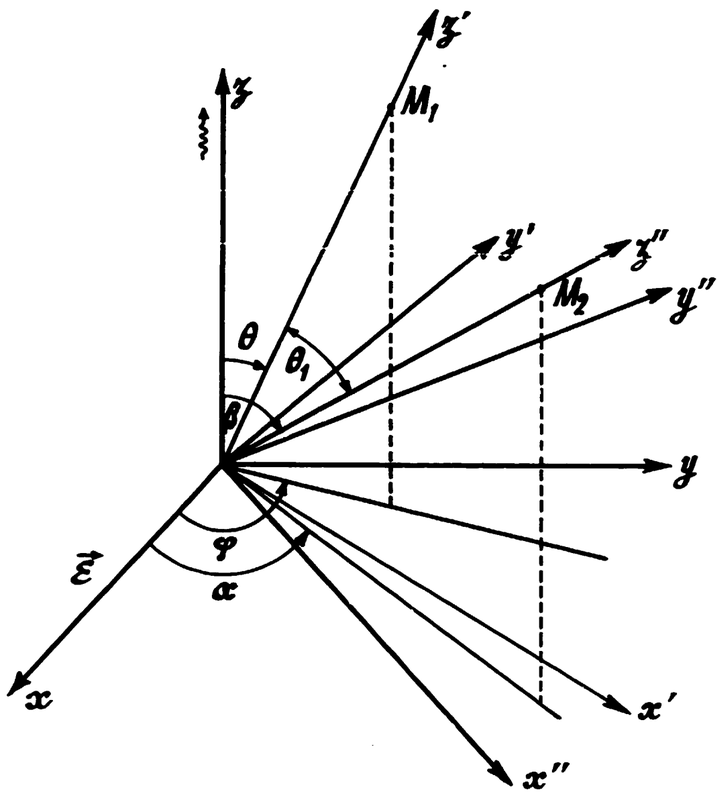


Figure III

Le trièdre Oxyz est déterminé par la direction de propagation de l'onde électromagnétique polarisée (axe $O\vec{z}$), par le vecteur polarisation $\vec{\varepsilon}$ qui lui est orthogonal (axe $O\vec{x}$), et par l'axe $O\vec{y}$ qui leur est perpendiculaire.

M_1 est la position de l'électron lié définie par les angles θ et φ, qui déterminent la direction $O\vec{z}'$; $O\vec{y}'$ est perpendiculaire au plan ZOZ' ; $O\vec{x}'$ complète le repère.

M_2 est la position de l'électron libre qui s'échappe dans la direction $O\vec{z}''$, définie par les angles β et α. Le repère est complété par l'axe $O\vec{y}''$, qui est perpendiculaire à Oz et Oz" et l'axe Ox".

θ_1 est l'angle des directions $O\vec{z}'$, $O\vec{z}''$, déterminé par $\cos\theta_1 = \sin\theta \sin\beta \cos(\varphi-\alpha) + \cos\theta \cos\beta$. Ces définitions nous permettent de rappeler la formule d'addition des fonctions sphériques dont nous ferons usage

$$Y_{LO}(\theta_1) = \sum_{M=-L}^{L} \left(\frac{4\pi}{2L+1}\right)^{1/2} Y_{LM}(\theta,\varphi) . Y^*_{LM}(\beta,\alpha)$$

ETAT INITIAL

Exprimé dans le repère (Oxyz) cet état s'écrit :

$$\varphi_g = R_{nl}(r)\, Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{26}$$

$R_{nl}(r)$ est la solution de l'équation de SCHRÖDINGER radiale

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ est un harmonique sphérique

n, l, m sont respectivement les nombres quantiques radial, orbital et magnétique.

ETAT INTERMEDIAIRE

De la même façon on peut écrire dans le système (Oxyz)

$$\varphi_i = R_{\nu\lambda}(r)\, Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) \tag{27}$$

ETAT FINAL

Cet état s'écrit dans le système (Ox'y'z') [15]

$$\varphi_f = \sum_L (2L+1)(-i)^L \sqrt{\frac{\pi}{2k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r)\, P_L(\cos\theta_1)$$

$$= \sum_L (2L+1)(-i)^L \sqrt{\frac{\pi}{2k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r) \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}}\, Y_{LO}(\theta_1)$$

$$= \sum_L (-i)^L \pi \sqrt{\frac{2(2L+1)}{k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r)\, Y_{LO}(\theta_1)$$

Soit dans le repère (Oxyz) qui nous intéresse : $\eta_L = \arg\Gamma(L+1-i/k)$

$$\varphi_f = \sum_L (-i)^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{\sqrt{k}}\, e^{-i\eta_L} R^c_L(r) \sum_M Y_{LM}(\theta,\varphi)\, Y^*_{LM}(\beta,\alpha) \tag{28}$$

Cette expression de l'état final nous permettra d'effectuer, dans le système d'axes (Oxyz), les opérations qui se présentent sur les fonctions $Y(\theta,\varphi)$ en utilisant les relations d'orthogonalité et de fermeture propres aux harmoniques sphériques.

Seules subsisteront dans le résultat final, les fonctions des angles α et β qui caractérisent l'électron libre.

SECTION EFFICACE DIFFERENTIELLE D'IONISATION

Dans l'élément d'angle solide $d\Omega = \sin\beta\, d\beta\, d\alpha$ elle est donnée par l'expression (22)

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\pi I_o} \left| \sum_i \frac{\langle\varphi_f|\vec{\varepsilon}.\vec{r}|\varphi_i\rangle \langle\varphi_i|\vec{\varepsilon}.\vec{r}|\varphi_g\rangle}{E_n - E_i + E_p} \right|^2 E_p\, k\, a^2$$

En explicitant les produits scalaires $(\vec{\varepsilon}.\vec{r}) = r \sin\theta \cos\varphi$ et en utilisant les expressions (26) (27) (28), il est possible d'exprimer la section efficace en séparant les opérations à effectuer sur les parties radiales et les parties angulaires .

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{4\pi I_o}\left|\sum_{\nu} \frac{\langle R_L^c(k,r)\,|r|\,R_{\nu\lambda}(r)\rangle\langle R_{\nu\lambda}(r)\,|r|\,R_{nl}(r)\rangle}{E_n - E_\nu + E_p}\right.$$

$$\cdot\sum_L\sum_M i^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{\sqrt{k}} e^{i\eta_L} Y_{LM}(\beta,\alpha)$$

$$\cdot\int Y^*_{LM}(\theta',\varphi')\sin\theta'\cos\varphi' Y_{\lambda\mu}(\theta',\varphi')\sin\theta' d\theta' d\varphi' \qquad (29)$$

$$\left.\cdot\int Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right|^2 E_p\, k\, a^2$$

Nous poserons

$$\boxed{P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \sum_\nu \frac{\langle R_L^c(k,r)\,|r|\,R_{\nu\lambda}(r)\rangle\langle R_{\nu\lambda}(r)\,|r|\,R_{nl}(r)\rangle}{E_n - E_\nu + E_p}} \qquad (30)$$

dont nous déterminerons ultérieurement la valeur, et nous ferons les calculs relatifs aux parties angulaires.

B) ETUDE DES PARTIES ANGULAIRES

TRANSITIONS PERMISES ET TRANSITIONS INTERDITES

Le système quantique ne peut changer d'état que dans la mesure où certaines règles de sélection sont respectées.

On montre que les seuls éléments de matrice dipolaire non nuls sont ceux pour lesquels :

1) - la variation du nombre quantique orbital l est

$$\Delta l = \pm 1$$

2) - la variation du nombre quantique magnétique m est, dans le cas d'une onde électromagnétique dont la polarisation est perpendiculaire à la direction de propagation

$$\Delta m = \pm 1$$

Si l'on part d'un état initial (l,m) l'état intermédiaire d'un atome pourra être l'un des 4 états suivants

$$\left(l+1 \left| \begin{matrix} m+1 \\ m-1 \end{matrix}\right.\right) \quad ; \quad \left(l-1 \left| \begin{matrix} m+1 \\ m-1 \end{matrix}\right.\right)$$

et l'état final obtenu après absorption de 2 quanta se trouvera parmi les 16 possibilités suivantes :

$$\left(l+2 \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l+2 \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right) ; \left(l-2 \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l-2 \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right)$$

$$\left(l \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right) ; \left(l \left| \begin{matrix} m+2 \\ m \end{matrix}\right.\right) ; \left(l \left| \begin{matrix} m \\ m-2 \end{matrix}\right.\right)$$

Le dénombrement par les règles de sélection des états intermédiaires et des états finals possibles nous permettra d'effectuer la double sommation $\sum_L\sum_M$ figurant dans l'expression de K_{fg}

$$K_{fg} = \left| P^{nl}_{\lambda L}(E_p)\sum_L\sum_M i^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{\sqrt{k}} e^{i\eta_L} Y_{LM}(\beta,\alpha)\right.$$

$$\cdot\int Y^*_{LM}(\theta',\varphi')\sin\theta'\cos\varphi' Y_{\lambda\mu}(\theta',\varphi')\sin\theta' d\theta' d\varphi' \qquad (31)$$

$$\left.\cdot\int Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi\right|$$

Evaluons les intégrales en utilisant la forme suivante des harmoniques sphériques normés

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos\theta)\, e^{im\varphi} \qquad (32)$$

on a

$$\int Y^*_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\sin\theta\cos\varphi Y_{lm}(\theta,\varphi)\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \int P^*_{\lambda\mu}(\cos\theta)\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta.$$

$$\cdot\int \frac{e^{-i\mu\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\cos\varphi\frac{e^{-im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} d\varphi$$

mais

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} e^{-i\mu\varphi}\cos\varphi\, e^{im\varphi} d\varphi = \frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\left\{ e^{-i\mu\varphi} e^{i\varphi} e^{im\varphi} + e^{-i\mu\varphi} e^{-i\varphi} e^{im\varphi}\right\} d\varphi = \frac{1}{2}$$

lorsque $m - \mu = +1$ pour la vibration circulaire droite
$m - \mu = -1$ pour la vibration circulaire gauche

Ce qui correspond aux règles de sélection, sur le nombre quantique magnétique m, que nous avons mentionnées plus haut.

L'élément de matrice K_{fg} s'écrira maintenant

$$K_{fg} = \left| P^{nl}_{\lambda L}(E_p)\sum_L\sum_M i^L \frac{\pi\sqrt{8\pi}}{4\sqrt{k}} e^{i\eta_L}\right.$$

$$\left.\cdot\int P^*_{LM}(\cos\theta')\sin\theta' P_{\lambda\mu}(\cos\theta')\sin\theta' d\theta' \int P^*_{\lambda\mu}(\cos\theta)\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta)\sin\theta d\theta\right| \qquad (33)$$

En employant les relations de transformation connues

$$\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta) = -\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} P_{l+1,m+1}(\cos\theta) + \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} P_{l-1,m-1}(\cos\theta)$$

$$\sin\theta\, P_{lm}(\cos\theta) = \sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} P_{l+1,m-1}(\cos\theta) - \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} P_{l-1,m-1}(\cos\theta)$$

on fait apparaître des produits de polynomes de LEGENDRE associés, qui s'expriment simplement grâce à la relation d'orthogonalité

$$\int_{\pi}^{2\pi} P_{lm}(\cos\theta)\, P_{l'm'}(\cos\theta) \sin\theta \, d\theta = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'} \tag{35}$$

Les relations de transformations (34) utilisées à partir de l'état (l,m) introduisent toutes les possibilités qui peuvent se présenter pour l'état final et pour cette raison permettent d'effectuer la double somme $\sum_L \sum_M$

L'expression (33) donnant la section efficace différentielle se met sous la forme :

$$\frac{1}{I}\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\pi^2 \alpha}{8 I_0} \left| M_{l+2} + M_l + M_{l-2} \right|^2 E_p a^2 \tag{36}$$

ou

$$M_{l+2} = P^{nl}_{l+1,l+2}(E_p)\, e^{i\eta_{l+2}} \frac{1}{(2l+3)(2l+5)^{1/2}(2l+1)^{1/2}} \Big\{ \Big((l-m+1)(l-m+2)(l-m+3)(l-m+4)\Big)^{1/2}$$

$$Y_{l+2,m-2}(\beta,\alpha) + \Big[(l+m+1)(l+m+2)(l+m+3)(l+m+4)\Big]^{1/2} Y_{l+2,m+2}(\beta,\alpha) \tag{37}$$

$$-2\Big[(l-m+1)(l+m+1)(l-m+2)(l+m+2)\Big]^{1/2} Y_{l+2,m}(\beta,\alpha) \Big\}$$

$$M_{l-2} = P^{nl}_{l-1,l-2}(E_p)\, e^{i\eta_{l-2}} \frac{1}{(2l-1)(2l+1)^{1/2}(2l-3)^{1/2}} \Big\{ \Big[(l+m)(l+m-1)(l+m-2)(l+m-3)\Big]^{1/2}$$

$$Y_{l-2,m-2}(\beta,\alpha) + \Big[(l-m)(l-m-1)(l-m-2)(l-m-3)\Big]^{1/2} Y_{l-2,m+2}(\beta,\alpha) \tag{38}$$

$$-2\Big[(l+m)(l-m)(l+m-1)(l-m-1)\Big]^{1/2} Y_{l-2,m}(\beta,\alpha) \Big\}$$

$$M_l = -P^{nl}_{l+1,l}(E_p)\, e^{i\eta_l} \frac{1}{(2l+1)(2l+3)} \Big\{ \Big[(l+m)(l+m-1)(l-m+1)(l-m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m-2}(\beta,\alpha)$$

$$+\Big[(l-m)(l-m-1)(l+m+1)(l+m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m+2}(\beta,\alpha)$$

$$-\Big[(l-m+1)(l-m+2) + (l+m+1)(l+m+2)\Big] Y_{l,m}(\beta,\alpha) \Big\}$$

$$- P^{nl}_{l-1,l}(E_p)\, e^{i\eta_l} \frac{1}{(2l-1)(2l+1)} \Big\{ \Big[(l+m)(l+m-1)(l-m+1)(l-m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m-2}(\beta,\alpha)$$

$$+\Big[(l-m)(l-m-1)(l+m+1)(l+m+2)\Big]^{1/2} Y_{l,m+2}(\beta,\alpha) \tag{39}$$

$$-\Big[(l+m)(l+m-1) + (l-m)(l-m-1)\Big] Y_{l,m}(\beta,\alpha) \Big\}$$

SECTION EFFICACE TOTALE D'IONISATION PAR ABSORPTION DE 2 PHOTONS

L'expression (36) fournit immédiatement la section efficace totale :

$$\frac{\sigma}{I} = \frac{\pi^2 \alpha}{8 I_0} E_p a^2 \int \left| M_{l+2} + M_l + M_{l-2} \right|^2 \sin\beta \, d\beta \, d\alpha \tag{40}$$

Les relations d'orthogonalité des harmoniques sphériques $Y_{lm}(\beta,\alpha)$ montrent clairement qu'il ne subsiste que des termes de la forme

$$M_L M_L^* = \left| P^{nl}_{\lambda,L}(E_p) \right|^2 Q_L(l,m)$$

$Q_L(l,m)$ étant un polynome en (m) facilement identifiable, dont les coefficient dépendent de l

Si le nombre quantique magnétique (m) prend une valeur qui est la moyenne des (2l + 1) valeurs possibles, les relations

$$(2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^{l} m^2 = \frac{1}{3} l(l+1) \tag{41}$$

$$(2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^{l} m^4 = \frac{1}{15} l(l+1)(3l^2+3l-1)$$

permettent d'exprimer la section efficace totale sous la forme

$$\boxed{\frac{\sigma_{nl}}{I} = \frac{2\pi^2 \alpha}{15 I_0} E_p a^2 \Big\{ \frac{2(l+1)(l+2)}{(2l+3)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l+1,l+2} \right|^2 + \frac{2l(l-1)}{(2l-1)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l-1,l-2} \right|^2 + \frac{(l+1)(4l^2+8l+5)}{(2l+1)^2(2l+3)} \left| P^{nl}_{l+1,l} \right|^2 + \frac{l(4l^2+1)}{(2l+1)^2(2l-1)} \left| P^{nl}_{l-1,l} \right|^2 \Big\}} \tag{42}$$

Pour pouvoir utiliser cette formule il nous faudra maintenant déterminer les valeurs des termes $\left| P^{nl}_{\lambda,l} \right|^2$ car les autres paramètres sont maintenant tous connus

- I est l'intensité du faisceau en Watt/cm^2
- E_p est l'énergie des photons incidents en unité e^2/a
- a est le rayon de BOHR égal à $5{,}29.10^{-9}$cm
- α est la constante de structure fine égale à 1/137

$I_0 = 7{,}019 \cdot 10^{16}$ Watt/cm^2 est un facteur assurant l'homogénéité des formules.

$$\frac{2\pi^2 \alpha a^2}{15\, I_0} = 3{,}831 . 10^{-36}\ \mathrm{cm}^4/\mathrm{W}$$

C) ETUDE DES PARTIES RADIALES

CALCUL DU TERME $P^{nl}_{\lambda,L}(E_p)$

Nous avons vu que la section efficace différentielle faisait intervenir des expressions de la forme (30)

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \sum_\nu \frac{\langle R^c_L | r | R_{\nu\lambda} \rangle \langle R_{\nu\lambda} | r | R_{nl} \rangle}{E_n - E_\nu + E_p}$$

$$= \sum_\nu \frac{\int R^c_L(r')\, r'\, R_{\nu\lambda}(r')\, r'^2 dr' \int R_{\nu\lambda}(r)\, r R_{nl}(r)\, r^2 dr}{E_n - E_\nu + E_p}$$

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \sum_\nu \frac{\int R_{nl}(r) \left\{ r R_{\nu\lambda}(r) \int R^c_L(r')\, R_{\nu\lambda}(r')\, r'^3 dr' \right\} r^2 dr}{E_n - E_\nu + E_p} \qquad (43)$$

Celles-ci ne peuvent se calculer par des techniques classiques. Elles nécessitent l'utilisation d'une méthode particulière que nous allons développer.

Soit $\chi_{\nu\lambda}(r)$ la solution régulière de l'équation de SCHRÖDINGER radiale :

$$\chi_{\nu\lambda}(r) = r R_{\nu\lambda}(r) \qquad (44)$$

Elle vérifie donc l'équation :

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 \chi_{\nu\lambda}}{dr^2} + \left[\frac{Z^*}{r} - \lambda \frac{(\lambda+1)}{2r^2} \right] \chi_{\nu\lambda}(r) = - E_\nu \chi_{\nu\lambda}(r) \qquad (45)$$

Ou ce qui revient au même :

$$\frac{1}{2} \frac{d^2 (r R_{\nu\lambda}(r))}{dr^2} + \left[\frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right] \left(r R_{\nu\lambda}(r) \right) = - E_\nu\, r R_{\nu\lambda}(r) \qquad (46)$$

Multiplions par $(R_{\nu\lambda}(r')\, R^c_L(k,r')\, r'^3)$ et intégrons les deux membres sur (r')

$$\left(\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) \int_0^\infty r R_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' = - \int_0^\infty E_\nu\, r R_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' \qquad (47)$$

Ajoutons aux deux membres de cette équation la quantité :

$$\int_0^\infty (E_n + E_p)\ r R_{\nu\lambda}(r)\, R_{\nu\lambda}(r')\, R^c_L(k,r')\, r'^3\, dr'$$

Il vient :

$$\left(E_n + E_p + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) \int_0^\infty r R_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' = \int_0^\infty (E_n + E_p - E_\nu)\ r R_{\nu\lambda}(r)\, R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(kr') r'^3 dr'$$

$$\left(E_n + E_p + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) \int_0^\infty \frac{r R_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr'}{E_n + E_p - E_\nu} = \int_0^\infty r R_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' \qquad (48)$$

Sommons sur (ν) et posons :

$$\boxed{U^n_{\lambda L}(r, E_p) = \sum_{\nu=\lambda+1}^{\infty} r R_{\nu\lambda}(r) \int_0^\infty \frac{R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r')\, r'^3 dr'}{E_n - E_\nu + E_p}} \qquad (49)$$

L'équation (48) se réduit à :

$$\left(E_n + E_p + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) U^n_{\lambda L}(r, E_p) = \sum_\nu \int_0^\infty r R_{\nu\lambda}(r) R_{\nu\lambda}(r') R^c_L(k,r') r'^3 dr' \qquad (50)$$

Le deuxième membre de cette équation peut se mettre sous la forme :

$$\sum_\nu \int_0^\infty r R_{\nu\lambda}(r) .\ r' R_{\nu\lambda}(r') .\ R^c_L(k,r')\, r'^2\, dr' \qquad (51)$$

La relation de fermeture des fonctions $\chi = r R(r)$

$$\sum_\nu r R_{\nu\lambda}(r) .\ r' R_{\nu\lambda}(r') = \delta(r - r') \qquad (52)$$

nous permet d'écrire (51) sous la forme :

$$\int_0^\infty \delta(r - r')\, R^c_L(k,r')\, r'^2 dr' = R^c_L(k,r) .\ r^2 \qquad (53)$$

Finalement l'équation (50) s'écrit :

$$\boxed{\left(E_n + E_p + \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z^*}{r} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2} \right) U^n_{\lambda L}(r, E_p) = r^2 R^c_L(k,r)} \qquad (54)$$

Une application directe de la méthode de SCHWARTZ et TIEMAN [16], aurait conduit à la même équation.

Si l'on se reporte à l'expression de $P^{nl}_{\lambda L}(E_p)$ donnée par (43) on remarque que :

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \int_0^\infty R_{nl}(r)\, U^n_{\lambda L}(r, E_p)\, r^2\, dr \qquad (55)$$

Etant donné que :

$$R_{nl}(r)=\frac{1}{(2l+1)!}\left(\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!\,2n}\right)^{1/2}\left(\frac{2Z^*}{n}\right)^{3/2}e^{-\frac{Z^*r}{n}}\left(\frac{2Z^*r}{n}\right)^{l}{}_1F_1\left(-(n-l-1),2l+2,\frac{2Z^*r}{n}\right) \qquad (56)$$

Ou ${}_1F_1\left(-(n-l-1),2l+2,\frac{2Z^*r}{n}\right)$ est la fonction hypergéométrique confluente

$${}_1F_1(\alpha,\beta,z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta}z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\frac{z^2}{2!} + \ldots\ldots \qquad (57)$$

Si l'on pose

$$\frac{Z^*}{n} = p_n$$

$$C(l,n,P) = \frac{1}{(2l+1)!}\left(\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!\,2n}\right)^{1/2}(2p)^{3/2}(2p)^{l} \qquad (58)$$

(55) peut s'écrire :

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = \int_0^\infty C(l,n,p)\, r^{l+2}\,{}_1F_1(-(n-l-1),2l+2,2pr)\, U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, e^{-pr}dr \qquad (59)$$

et on voit que $P^{nl}_{\lambda L}$ est donné par la somme des dérivées successives par rapport à p de la transformée de LAPLACE de la fonction $U^n_{\lambda L}(r,E_p)$ à condition de les prendre toutes au point $p_n = \frac{Z^*}{n}$. La dérivée d'ordre le plus bas étant la dérivée $(l+2)^{\text{ième}}$. Nous désignerons par $S^n_{\lambda L}(p,E_p)$ la transformée de LAPLACE de $U^n_{\lambda L}(r,E_p)$

$$S^n_{\lambda L}(p,E_p) = \int_0^\infty U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, e^{-pr}\, dr \qquad (60)$$

Substituant à ${}_1F_1$ la série équivalente on trouve que :

$$r^{l+2}\,{}_1F_1\left(-(n-l-1),2l+2,2pr\right) = r^{l+2} - 2p\frac{n-l-1}{2l+2}r^{l+3} - \frac{4Z^{*2}}{n^2}\frac{(n-l-1)(1-(n-l-1))}{(2l+2)(2l+3)}r^{l+4}\ldots. \qquad (61)$$

Ce qui nous permet de réécrire $P^{nl}_{\lambda L}(E_p)$ sous la forme

$$P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = C(l,n,p)\int_0^\infty\left\{r^{l+2} - 2p\left(\frac{n-l-1}{2l+2}\right)r^{l+3} - 4p^2\frac{(n+l-1)(1-(n-l-1)}{(2l+2)(2l+3)2!}r^{l+4} + \ldots\ldots\right\}$$

$$\cdot\, U^n_{\lambda L}(r,E_p)\, e^{-pr}dr$$

$$\boxed{P^{nl}_{\lambda L}(E_p) = (-1)^l C(n,l,p)\left\{\left[\frac{d^{l+2}S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^{l+2}}\right]_{p=\frac{Z^*}{n}} - \frac{n-l-1}{2l+2}\left[2p\frac{d^{l+3}S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^{l+3}}\right]_{p=\frac{Z^*}{n}} - \frac{(n-l-1)(1-(n-l-1)}{(2l+2)(2l+3)2!}\left[4p^2\frac{d^{l+4}S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^{l+4}}\right]_{p=\frac{Z^*}{n}} + \ldots\ldots\right\}} \qquad (62)$$

La fonction $S^n_{\lambda L}(p,E_p)$ et par conséquent ses dérivées successives est donnée par la transformée de LAPLACE de l'équation (54). Afin d'obtenir cette dernière multiplions (54) par (r^2e^{-pr}) et intégrons sur (r) :

$$\int_0^\infty\left\{E_n+E_p+\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{Z^*}{r}-\frac{\lambda(\lambda+1)}{2r^2}\right\}U^n_{\lambda L}(r,E_p)r^2e^{-pr}dr = \int_0^\infty R^c_L(k,r)r^4e^{-pr}dr \qquad (63)$$

On a alors :

$$\left(E_n+E_p\right)L\left\{U^n_{\lambda L}(r,E_p)r^2\right\} + Z^*L\left\{U^n_{\lambda L}(r,E_p)r\right\} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2}L\left\{U^n_{\lambda L}(r,E_p)\right\}$$

$$+\frac{1}{2}L\left\{\frac{d^2}{dr^2}\left(U^n_{\lambda L}(r,E_p)\right)r^2\right\} = \int_0^\infty R^c_L(k,r)r^4e^{-pr}dr \qquad (64)$$

Sachant que

$$L\left\{U^n_{\lambda L}(r,E_p)\right\} = S^n_{\lambda L}(p,E_p)$$

$$L\left\{rU^n_{\lambda L}(r,E_p)\right\} = -\frac{d\,S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp}$$

$$L\left\{r^2U^n_{\lambda L}(r,E_p)\right\} = \frac{d^2S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^2}$$

$$L\left\{r^2\frac{d^2U^n_{\lambda L}(r,E_p)}{dp^2}\right\} = \int_0^\infty\frac{d^2U^n_{\lambda L}(r,E_p)}{dr^2}r^2e^{-pr}dr$$

$$= \left[\frac{dU^n_{\lambda L}}{dr}r^2e^{-pr}\right]_0^\infty - \int_0^\infty\frac{dU^n_{\lambda L}}{dr}(2r-r^2p)\,e^{-pr}dr$$

$$= \int_0^\infty U^n_{\lambda L}(r,E_p)\,(2-4rp+r^2p^2)\,e^{-pr}dr$$

$$= 2S^n_{\lambda L}(p,E_p) + 4p\frac{dS^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp} + p^2\frac{d^2S^n_{\lambda L}(p,E_p)}{dp^2}$$

La transformée de LAPLACE de l'équation (54) est alors :

$$(E_n+E_p)\frac{d^2S^n_{\lambda L}}{dp^2} - Z^*\frac{dS^n_{\lambda L}}{dp} - \frac{\lambda(\lambda+1)}{2}S^n_{\lambda L} + S^n_{\lambda L} + 2p\frac{dS^n_{\lambda L}}{dp} + \frac{1}{2}p^2\frac{d^2S^n_{\lambda L}}{dp^2} =$$

$$\int_0^\infty R^c_L(k,r)\,r^4e^{-pr}dr$$

Soit :

$$\boxed{(E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2)\ \frac{d^2S^n_{\lambda L}}{dp^2}+(2p-Z^*)\ \frac{dS^n_{\lambda L}}{dp}+(1-\frac{\lambda(\lambda+1)}{2})\ S^n_{\lambda L}=\int_0^\infty R^c_L(k,r)r^4e^{-pr}dr} \quad (65)$$

Dérivons $(\lambda-1)$ fois cette équation par rapport à (p). On vérifie aisément que

$$(E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2)\ \frac{d^{\lambda+1}S^n_{\lambda L}}{dp^{\lambda+1}}+\left[(\lambda+1)\,p-Z^*\right]\frac{d^\lambda S^n_{\lambda L}}{dp^\lambda}+\frac{1}{2}\left[\lambda(\lambda+1)-\lambda(\lambda+1)\right]\frac{d^{\lambda-1}S^n_{\lambda L}}{dp^{\lambda-1}}$$

$$=(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty R^c_L(k,r)\,r^{\lambda+3}e^{-pr}dr$$

et l'équation nous donnant la dérivée $\lambda^{\text{ième}}$ de la fonction $S^n_{\lambda L}$ s'écrit :

$$\boxed{(E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2)\ \frac{d^{\lambda+1}S^n_{\lambda L}}{dp^{\lambda+1}}+\left[(\lambda+1)p-Z^*\right]\frac{d^\lambda S^n_{\lambda L}}{dp^\lambda}=(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty R^c_L(k,r)r^{\lambda+3}e^{-pr}dr} \quad (66)$$

Cette équation ne nous donne pas la valeur des dérivées de $S^n_{\lambda L}$ d'ordre inférieur à λ. Cela n'a aucune importance étant donné que le calcul de $P^{nl}_{\lambda L}(E_p)$ ne met en jeu que les dérivées d'ordre supérieur ou égal à (l+2). On rappelle à ce propos que $\lambda = \begin{cases} l+1 \\ l-1 \end{cases}$

Afin d'évaluer le deuxième membre de l'équation (66) nous utilisons la formule suivante (Appendice I)

$$\int_0^\infty r^{L+1}R^c_L(k,r)e^{-pr}dr = \frac{2^{L+1}Z^{*L+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}}\left[(1+\frac{k^2}{Z^{*2}})\,(1+4\,\frac{k^2}{Z^{*2}})\,.....(1+L^2\,\frac{k^2}{Z^{*2}})\right]^{1/2}. \quad (67)$$

$$\cdot\left(\frac{1}{(p^2+k^2)^{L+1}}\ e^{-\frac{2Z^*}{k}\text{Arc tg } k/p}\right)$$

On vérifie que :

$$(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty r^{\lambda+3}R^c_L(k,r)\,e^{-pr}dr=(-1)^{\lambda+1}\int_0^\infty r^{L+1+\lambda-L+2}R^c_L(k,r)\,e^{-pr}dr$$

$$=(-1)^{L+1}\ \frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}}\int_0^\infty r^{L+1}R^c_L\,(k,r)\,e^{-pr}dr$$

$$F_{\lambda L}(p,k)=\frac{(-2)^{L+1}Z^{*L+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}}\left[(1+\frac{k^2}{Z^{*2}})(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}})....(1+L^2\,\frac{k^2}{Z^{*2}})\right]^{1/2}\frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}}\left\{\frac{e^{-\frac{2Z^*}{k}\text{Arc tg } k/p}}{(p^2+k^2)^{L+1}}\right\} \quad (68)$$

Afin de mettre l'équation (66) sous une forme condensée nous considérons la quantité $E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2$

E_n est l'énergie de liaison de l'électron se trouvant sur le niveau n. En unités atomiques elle est égale à

$$E_n=-\frac{Z^{*2}}{2n^2} \quad (69)$$

E_p est l'énergie d'un photon incident. L'énergie mise en jeu lors de l'absorption de deux photons par l'électron lié est utilisé pour extraire celui-ci de sa couche, puis pour lui communiquer l'énergie cinétique $k^2/2$ (En unités atomiques)

$$2\ E_p=\frac{k^2}{2}+\frac{Z^{*2}}{2n^2} \quad (70)$$

dès lors :

$$E_n+E_p+\frac{1}{2}p^2=\frac{1}{2}\left(p^2-\frac{Z^{*2}}{n^2}+\frac{k^2}{2}+\frac{Z^{*2}}{2n^2}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(p^2+\frac{k^2}{2}-\frac{Z^{*2}}{2n^2}\right)$$

$$=\frac{1}{2}\left(p^2-\alpha^2\right) \quad (71)$$

ou

$$\alpha^2=\frac{Z^{*2}}{2n^2}-\frac{k^2}{2} \quad (72)$$

Posant :

$$y_{\lambda L}=\frac{d^\lambda S^n_{\lambda L}}{dp^\lambda}$$

l'équation (65) s'écrit :

$$\boxed{(p^2-\alpha^2)\frac{d\,y_{\lambda L}}{dp}+2\left[(\lambda+1)\,p-Z^*\right]y_{\lambda L}=2\,F_{\lambda L}\,(p,k)} \quad (73)$$

V - RESOLUTION NUMERIQUE

A) RAPPELS DES RESULTATS ETABLIS

On a vu que la section efficace pouvait se mettre sous la forme :

$$\frac{\sigma_{nl}}{I} = \frac{2\pi^2 \alpha}{15\, I_0} E_p\, a^2 \left\{ \frac{2\,(l+1)(l+2)}{(2l+3)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l+1,l+2} \right|^2 \right.$$

$$+ \frac{2l(l-1)}{(2l-1)(2l+1)} \left| P^{nl}_{l-1,l-2} \right|^2 + \frac{(l+1)(4l^2+8l+5)}{(2l+1)^2(2l+3)} \left| P^{nl}_{l+1,l} \right|^2 \qquad (74)$$

$$\left. + \frac{l(4l^2+1)}{(2l+1)^2(2l-1)} \left| P^{nl}_{l-1,l} \right|^2 \right\}$$

I étant l'intensité du rayonnement incident en Watt/cm^2

I_0 une constante égale $7{,}019.10^{16}$ Watt/cm^2

α la constante de structure fine 1/137

a le rayon de la première orbite de BOHR : $5{,}29.10^{-9}$cm

E_p l'énergie des photons incidents exprimée en unité $\frac{e^2}{a}$

La valeur du coefficient constant est donc

$$\frac{2\pi^2 \alpha\, a^2}{15\, I_0} = 3{,}831\ 10^{-36}\ \text{cm}^4/\text{Watt}$$

Au paragraphe (IV C) nous avons défini le facteur $P^{nl}_{\lambda,L}(E_p)$ (équations 43 et 62) nous le reécrirons sous une forme équivalente.

$$P^{nl}_{\lambda,L}(E_p) = (-1)^l \frac{1}{(2l+1)!} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!\,2n}} \left(\frac{2Z^*}{n}\right)^{l+\frac{3}{2}} \qquad (75)$$

$$\left\{ {}_1F_1 \left[-(n-l-1),\ (2l+2),\ -2p\frac{d}{dp} \right] \frac{d^{l-\lambda+2}}{dp^{l-\lambda+2}}\, y_{\lambda,L} \right\}_{p = \frac{Z^*}{n}}$$

avec

$$\lambda = \begin{cases} l+1 \\ l-1 \end{cases} \qquad L = \begin{cases} l+2 \\ l \\ l-2 \end{cases}$$

On remarquera que lorsque n est fixé, la série ${}_1F_1$ ne possède qu'un nombre limité de termes $n' = n-l$, l prenant alors toutes les valeurs entières de 0 à n-1.

Nous avons vu que $y_{\lambda,L}$ était solution de l'équation

$$(p^2 - \alpha^2)\frac{dy_{\lambda,L}}{dp} + 2\left[(\lambda+1)\,p - Z^*\right] y_{\lambda,L} = 2\,F_{\lambda,L}(p,k) \qquad (76)$$

ou

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\, \frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}} \frac{\exp\left[-\frac{2Z^*}{k}\,\text{arcotg}\left(\frac{p}{k}\right)\right]}{(p^2+k^2)^{L+1}} \qquad (77)$$

avec

$$A_L(k) = \frac{(-2)^{L+1} Z^{*L+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+\frac{4k^2}{Z^{*2}}\right)\cdots\left(1+\frac{L^2k^2}{Z^{*2}}\right) \right]^{1/2} \qquad (78)$$

$$\alpha^2 = \frac{Z^{*2}}{n^2} - 2E_p = \frac{1}{2}\left(\frac{Z^{*2}}{n^2} - k^2\right) \qquad (79)$$

$$k^2 = 4E_p - \frac{Z^{*2}}{n^2} \qquad (80)$$

Comme nous ne nous intéressons ici qu'au cas de l'ionisation d'atomes par absorption nécessaire de 2 photons

$E_p < \frac{Z^{*2}}{2n^2} \longrightarrow \alpha^2 > 0$ et α est réel; puisqu'il faut aussi que $k^2 \geqslant 0$:

$$E_p > \frac{Z^{*2}}{4n^2}$$

nous ne considérons donc que l'éventualité

$$\frac{Z^{*2}}{4n^2} < E_p < \frac{Z^{*2}}{2n^2}$$

L'utilisation de la transformation de LAPLACE que nous avons faite nous impose

$$\text{Re}\ p > 0$$

Il faudra de plus que $y_{\lambda,L}$ et toutes ses dérivées soient finies pour toutes les valeurs de p situées sur l'axe réel positif.

B) EXPOSE DE LA METHODE

Nous allons chercher une solution analytique de l'équation (76) qui nous permette de calculer les dérivées successives de $y_{\lambda,L}$ au point $p_n = \frac{Z^*}{n}$

Nous connaissons une solution analytique $y_{\lambda,L}$ lorsque $\frac{Z^*}{\lambda+1} \neq \alpha$ dans ce cas le coefficient de $y_{\lambda,L}$ est différent de zéro.

Il est possible de faire un développement de Taylor autour du point $p = \alpha$ à l'intérieur d'un cercle de rayon R_k ou R_α limité par les singularités :

a) $\underline{p = \pm\, i\, k}$

si $R_k^2 = k^2 + \alpha^2 < 4\alpha^2 = R_\alpha^2$

c'est-à-dire si :

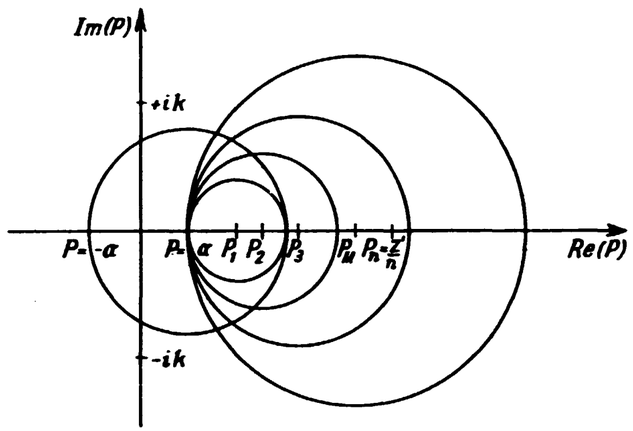
$$E_p \leqslant \frac{2\,Z^{*2}}{5\,n^2}$$

b) $\underline{p = -\alpha}$

si $\frac{2Z^{*2}}{5n^2} \leqslant E_p < \frac{Z^{*2}}{2n^2}$

Nous remarquerons d'autre part que $p_n - \alpha$ est toujours positif.

Par conséquent si nous voulons prolonger le domaine où nous connaissons une solution analytique de l'équation (76), de manière à approcher puis à englober le point $p_n = \frac{Z^*}{n}$, il faudra reévaluer les termes d'une nouvelle série développée autour d'un point p_1 du segment $[\alpha, p_n]$. Cette opération sera renouvelée autour de points p_1, p_2, p_M ... jusqu'à ce que $y_{\lambda,L}$ et ses dérivées puissent être calculées au point $p_n = \frac{Z^*}{n}$



Puisque nous effectuons des développements de TAYLOR dans lesquels nous ne conservons qu'un nombre fini de termes, nous n'obtiendrons qu'une approximation de la solution correcte. L'erreur introduite dans la première série se répercutera dans la seconde et ainsi de suite. Pour éviter l'amplification de cette erreur nous traiterons le point $p_0 = \alpha$ comme une singularité qui limitera le rayon de convergence de la 2ème série et ceux des suivantes.

Figure IV

Nous pouvons déterminer le nombre M de séries nécessaires pour obtenir un domaine dans lequel $y_{\lambda,L}(p_n)$ soit calculable et dont le centre p_M soit voisins de p_n

Soient R le rayon de convergence de la première série et r la fraction du rayon de convergence utilisée à chaque fois.

Le rayon de convergence de la $M^{ième}$ série est (appendice 2)

$$\varphi_n = (1+r)^{M-1}\varphi_1 = (1+r)^{M-1}\, r\, R\, \frac{k}{\alpha} \tag{81}$$

l'abscisse du point $p_0 = p_M$ autour duquel on effectue le $M^{ième}$ développement est :

$$p_M = \alpha + (1+r)^{M-1}\, r\, R\, \frac{k}{\alpha} \neq \frac{Z^*}{n}$$

si $\quad \frac{Z^*}{4n^2} < E_p < \frac{2Z^{*2}}{5n^2} \qquad R_k = \sqrt{\frac{Z^{*2} - n^2\alpha^2}{n^2}}$

$$M = 2 + \left[\left[\frac{\mathrm{Log}\left| \frac{1}{r}\left(\frac{Z^* - n|\alpha|}{Z^* + n|\alpha|}\right)^{1/2}\right|}{\mathrm{Log}\,(1+r)} \right]\right] \tag{82}$$

ou $[\lceil x \rceil]$ représente le premier entier supérieur à x

si $\quad \frac{2Z^*}{5n^2} \leqslant E_p < \frac{Z^*}{2n^2} \qquad R = 2\alpha$

$$M = 2 + \left[\left[\frac{\mathrm{Log}\left| \frac{1}{2r}\left(\frac{Z^* - n|\alpha|}{n|\alpha|}\right)\right|}{\mathrm{Log}\,(1+r)} \right]\right] \tag{83}$$

C) RECHERCHE D'UNE SOLUTION ANALYTIQUE

Soit p_0 un point quelconque du plan complexe p et $y_{\lambda,L}(p_0) = y_0$ la valeur de la fonction $y_{\lambda,L}(p)$ supposée parfaitement connue en ce point.

Nous définirons la variable complexe

$$\xi = p - p_0 \tag{84}$$

et nous introduirons les séries de TAYLOR

$$y_{\lambda,L}(p) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m \tag{85}$$

$$F_{\lambda,L}(p,k) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m \xi^m \tag{86}$$

qui vont nous permettre de résoudre l'équation différentielle (76)

Puisque les séries (85) et (86) satisfont à l'équation (76) celle-ci va nous fournir une identité vérifiée quelque soit ξ

$$\sum_{m=2}^{\infty} \Big\{ (p_0^2 - \alpha^2)(m+1)a_{m+1} + 2\Big[\big[(\lambda+1)+m\big]p_0 - Z^*\Big]a_m + (m+2\lambda+1)a_{m-1} - 2b_m \Big\}\xi^m$$
$$+ \Big\{ 2(p_0^2 - \alpha^2)a_2 + 2\big[(\lambda+2)p_0 - Z^*\big]a_1 + 2(\lambda+1)a_0 - 2b_1 \Big\}\xi$$
$$+ \Big\{ (p_0^2 - \alpha^2)a_1 + 2\big[(\lambda+1)p_0 - Z^*\big]a_0 - 2b_0 \Big\} \equiv 0 \tag{87}$$

a) Expressions des coefficients a_m de la série $y_{\lambda,L} = \sum_0^{\infty} a_m \xi^m$

Lorsque $p_0 \neq \alpha$ l'identité (87) conduit à :

$$a_0 = y_0$$
$$a_1 = 2\big(b_0 - [(\lambda+1)p_0 - Z^*]a_0\big) / (p_0^2 - \alpha^2)$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \tag{88}$$
$$a_{m+1} = \frac{\big|2b_m - (m+2\lambda+1)a_{m-1} - 2\big[[\lambda+1+m]p_0 - Z^*\big]a_m}{(m+1)(p_0^2 - \alpha^2)} \qquad m \geqslant 1$$

Au point initial $p_0 = \alpha$ l'équation (76) conduit à :

$$a_0 = y_0 = \frac{F_{\lambda,L}(\alpha,k)}{(\lambda+1)\alpha - Z^*} = \frac{b_0}{(\lambda+1)\alpha - Z^*}$$

et l'indentité (87) donne

$$a_{m+1} = \frac{2\, b_{m+1} - (m + 2\lambda + 2)\, a_m}{2\,[\,(\lambda+m+2)\,\alpha - Z^*\,]} \qquad m \geq 0 \tag{89}$$

b) Calcul des coefficients b_m de la série $F_{\lambda,L}(p,k) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m \xi^m$

Considérons la fonction

$$G_L(p,k) = \frac{\exp\left[-\frac{2Z^*}{k}\,\mathrm{arcotg}\left(\frac{p}{k}\right)\right]}{(p^2+k^2)^{L+1}} \tag{90}$$

En différentiant une première fois par rapport à P obtient

$$(p^2+k^2)\,G_L^{(1)}(p,k) = 2\,[\,Z^* - (L+1)\,p\,]\,G_L(p,k) \tag{91}$$

Poursuivant la différentiation on est conduit à la relation générale (appendice n° 3)

$$(p^2+k^2)\,G_L^{(S+1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+S)\,p\,]\,G_L^{(S)} - S\,(2L+S+1)\,G_L^{(S-1)} \qquad S \geq 0 \tag{92}$$

Revenons à la fonction $F_{\lambda,L}(p,k)$ qui s'écrit

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\,\frac{d^{\lambda-L+2}}{dp^{\lambda-L+2}}\,(G_L(p,k) \tag{93}$$

Suivant les états intermédiaires $\lambda = \left|\begin{matrix} l+1 \\ l-1 \end{matrix}\right.$ et les états finals $L = \left\{\begin{matrix} l+2 \\ l \\ l-2 \end{matrix}\right.$ qui interviennent dans le processus d'absorption, la quantité $\lambda - L + 2$ peut prendre les valeurs 1 ou 3

- si $\lambda - L + 2 = 1$ nous pourrons calculer $P^{nl}_{l+1,l+2}$ et $P^{nl}_{l-1,l}$

on a

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\,\frac{d}{dp}\,(G_L(p,k)) \tag{94}$$

la quantité au second membre de l'équation (94) se développe en série de TAYLOR autour du point p_0, ce qui permet d'écrire:

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k) \sum_{S=0}^{\infty} \frac{G^{S+1}(p_0)}{S!}\,\xi^S = \sum_{m=0}^{\infty} b_m\,\xi^m \tag{95}$$

La relation (92) nous donne :

$$(p_0^2+k^2)\,G_L^{S+2} = 2\,[\,Z^* - (L+2+S)\,p_0\,]\,G_L^{(S+1)} - (S+1)(2L+S+2)\,G_L^{(S)} \tag{96}$$

si bien qu'une identification dans l'équation (95) nous conduit à

$$b_{m+1} = \frac{1}{p_0^2+k^2}\left\{\frac{2\,[\,Z^* - (L+2+m)\,p_0\,]}{m+1}\,b_m - \frac{2L+m+2}{m}\,b_{m-1}\right\} \tag{97}$$

$$b_1 = A_L(k)\,G_L^{(2)}(p_0) \tag{98}$$

$$b_0 = A_L(k)\,G_L^{(1)}(p_0) \tag{99}$$

- si $\lambda - L + 2 = 3$ nous pourrons calculer $P^{nl}_{l-1,l-2}$ et $P^{nl}_{l+1,l}$

on a $$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k)\,\frac{d^3}{dp^3}\left(G_L(p,k)\right) \tag{100}$$

Comme précédemment la quantité au second membre de l'équation (100) se développe en série de TAYLOR autour du point p_0

$$F_{\lambda,L}(p,k) = A_L(k) \sum_{S=0}^{\infty} \frac{G_L^{(S+3)}(p_0)}{S!}\,\xi^S = \sum_{m=0}^{\infty} b_m\,\xi^m \tag{101}$$

La relation (92) nous donne l'expression

$$(p_0^2+k^2)\,G_L^{(S+4)} = 2\,[\,Z^* - (L+4+S)\,p_0\,]\,G_L^{(S+3)} - (S+3)(2L+S+4)\,G_L^{(S+2)} \tag{102}$$

qui nous permet, par une identification dans l'équation (101), d'exprimer les coefficients b_m

$$b_{m+1} = \frac{1}{p_0^2+k^2}\left\{\frac{2\,[\,Z^* - (L+4+m)\,p_0\,]}{m+1}\,b_m - \frac{(m+3)(2L+m+4)}{m\,(m+1)}\,b_{m-1}\right\} \tag{103}$$

$$b_1 = A_L(k)\,G_L^{(4)}(p_0) \tag{104}$$

$$b_0 = A_L(k)\,G^{(3)}(p_0) \tag{105}$$

Si nous résumons maintenant l'organisation des calculs nous constatons que :

nous connaissons :

- L'intensité I du faisceau de photons et l'énergie E_p de ces derniers.

- La nature du gaz considéré, c'est-à-dire la valeur du nombre atomique effectif Z^* (compte tenu de l'effet d'écran); le nombre quantique principal n et le nombre quantique orbital l de l'électron ionisé par absorption de 2 photons (l variant par valeurs entières de 0 à n-1).

nous déduisons :

- La valeur L du nombre quantique orbital final

- Les valeurs de $k, \alpha, A_L(k)$ par les équations (78), (79), (80)

- $G_L(p,k)$ et ses dérivées $G_L^{(n)}(p,k)$ sont connues par les relations (90) et (91)

- Les expressions (97), (98), (99) d'une part et (103), (104), (105) d'autre part, nous fournissent respectivement les valeurs de coefficients b_m du développement de $F_{\lambda,L}(p,k)$ lorsque $\lambda - L + 2 = 1$ ou 3

- Les relations (88) et (89) nous donnent les valeurs des coefficients a_m du développement de la fonction $y_{\lambda,L}(P) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \xi^m$

L'expression (75) nous fournit enfin la valeur des différents facteurs $P^{nl}_{\lambda,L}(E_p)$

Tous les éléments sont alors connus pour calculer à l'aide de la relation (74) la section efficace d'ionisation σ_{nl}, relative à l'électron pour la sous couche (n,l).

Il est cependant plus utile de calculer la section efficace d'ionisation par absorption de deux photons pour un électron de la couche (n).

$$\sigma_n = \frac{1}{n^2} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)\, \sigma_{nl}$$

Nous tiendrons compte de ces deux éventualités dans la présentation des résultats numériques.

CONCLUSION

L'expression de la section efficace totale d'ionisation à laquelle nous sommes arrivés, a été obtenue à l'aide de la méthode de perturbation, en utilisant l'approximation dipolaire dans le cas non relativiste. Exception faite de ces approximations, qui sont d'ailleurs justifiées par les valeurs des grandeurs physiques qui interviennent dans ce problème, les calculs ont été effectués rigoureusement. Ils nous permettront de déterminer numériquement la section efficace pour un atome de faible potentiel d'ionisation tel que le césium. Des comparaisons avec les résultats de mesures expérimentales portant sur les phénomènes d'absorption de 2 photons seront effectuées dans un proche avenir. Il serait cependant intéressant d'étendre le domaine de cette étude aux gaz rares, qui ne peuvent s'ioniser qu'à l'aide d'un nombre élevé de photons. Aussi, la prochaine étape de notre travail consistera à essayer de généraliser la méthode de calcul des sections efficaces que nous avons décrite, au cas d'un processus multiphotonique.

APPENDICE 1 - Etablissement de la formule (67)

soit :

$$R_L^c(k,r) = \frac{2\sqrt{Z^*}}{(1-e^{-2\pi n'})^{1/2}} \prod_{S=1}^{l} \sqrt{S^2+n'^2}\, \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} e^{-ikr}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

$$= \frac{2^{l+1} Z^{*1/2}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} \prod_{S=1}^{l} \sqrt{S^2+\frac{Z^{*2}}{k^2}}\, e^{-ikr}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

$$= \frac{2^{l+1} Z^{*1/2}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \frac{(kr)^l}{(2l+1)!} \prod_{S=1}^{l} \frac{\left(1+\frac{S^2k^2}{Z^{*2}}\right)}{k/Z^*}\, e^{-ikr}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

$$= \frac{2^{l+1} Z^{*1/2}}{\left(1-e^{\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \frac{r^l}{(2l+1)!} Z^{*l} \left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}}\right) \ldots \left(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\right]^{1/2} e^{-ikr}.$$

$$\cdot\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)$$

Nous allons calculer l'intégrale :

$$I = \int_0^{\infty} r^{l+1} R_L^c(k,r)\, e^{-pr} dr$$

Posant :

$$K = \frac{2^{l+1} Z^{*l+\frac{1}{2}}}{\left(1-e^{\frac{-2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}} \left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}}\right) \ldots \left(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\right]^{1/2}$$

$$I = K \int_0^{\infty} \frac{r^{2l+1}}{(2l+1)!} e^{-(ik+p)r}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr)\, dr$$

Connaissant la transformée de LAPLACE de la fonction hypergéométrique confluente ${}_1F_1$.

$$\int_0^{\infty} e^{-St}\, t^{b-1}\, {}_1F_1(a,c,kt) = \Gamma(b)\, S^{-b}\, {}_2F_1\left(a,b,c,\frac{k}{s}\right)$$

On a dans le cas que nous étudions :

$$I = K \int_0^{\infty} \frac{r^{2l+1}}{(2l+1)!} e^{-(ik+p)r}\, {}_1F_1(in'+l+1, 2l+2, 2ikr) =$$

$$K \frac{\Gamma(2l+2)}{(2l+1)!} (ik+p)^{-(2l+2)}\, {}_2F_1\left(in'+l+1, 2l+2, 2l+2, \frac{2ik}{ik+p}\right)$$

Pour n entier on a :

$$\Gamma(n+1) = n!$$

D'autre part

$${}_2F_1(a, b, b, z) = (1-z)^{-a}$$

Il en résulte :

$$I = K\,(ik+p)^{-(2l+2)}\left(1 - \frac{2ik}{ik+p}\right)^{-(in'+l+1)}$$

$$= K\,(ik+p)^{-(l+1)}\,(p-ik)^{-(l+1)}\left(\frac{p-ik}{p+ik}\right)^{-i\frac{Z^*}{k}} \qquad \left(n' = \frac{Z^*}{k}\right)$$

$$= K\,\frac{1}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left(\frac{p-ik}{p+ik}\right)^{-i\frac{Z^*}{k}}$$

$$= K\,\frac{1}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\left(\frac{p-ik}{\sqrt{p^2+k^2}}\right)^2\right]^{-i\frac{Z^*}{k}} = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\frac{p-ik}{\sqrt{p^2+k^2}}\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

$$= \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\frac{p}{\sqrt{p^2+k^2}} - i\,\frac{k}{\sqrt{p^2+k^2}}\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

Posons :

$$\operatorname{tg}\varphi = \frac{k}{p}$$

$$I = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} - i\,\frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{ctg}^2\varphi}}\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

$$= \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left[\cos\varphi - i\sin\varphi\right]^{-\frac{2Z^*i}{k}} = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\left(e^{-i\varphi}\right)^{-\frac{2Z^*i}{k}}$$

$$= \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\,e^{-\frac{2Z^*\varphi}{k}} = \frac{K}{(p^2+k^2)^{l+1}}\,e^{-\frac{2Z^*}{k}\operatorname{Arctg} k/p}$$

On obtient finalement

$$\boxed{I = \frac{2^{l+1}\,Z^{*l+\frac{1}{2}}}{\left(1 - e^{-\frac{2\pi Z^*}{k}}\right)^{1/2}}\left[\left(1+\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\left(1+4\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\ldots\left(1+L^2\frac{k^2}{Z^{*2}}\right)\right]^{1/2}\frac{1}{(p^2+k^2)^{l+1}}\,e^{-\frac{2Z^*}{k}\operatorname{Arctg} k/p}}$$

APPENDICE 2 - Expression des rayons de convergence

R est le rayon de convergence de la série développée autour du point particulier $p = a$

r sera la fraction de ce rayon, (et de ceux engendrés par la suite) qui nous permettra d'obtenir le rayon de convergence de la série suivante .

On a successivement les rayons :

$$R$$

$$\varphi_1 = r\,R$$

$$\varphi_2 = \varphi_1 + r\,\varphi_1 = (1+r)\,\varphi_1 = (1+r)\,r\,R$$

$$\varphi_3 = \varphi_2 + r\,\varphi_2 = (1+r)^2\,\varphi_1$$

.....

$$\varphi_M = (1+r)^{M-1}\,\varphi_1$$

APPENDICE 3 - Etablissement de la relation (92)

La dérivation de (90) donne

$$(p^2+k^2)\,G_L^{(1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1)\,p\,]\,G_L^0$$

En dérivant successivement =

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(2)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+1)\,p\,]\,G_L^{(1)\prime} - 2\,(L+1)\,G_L^0$$

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(3)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+1+1)\,p\,]\,G_L^{(2)} - 2\,(L+1+1)\,G_L^{(1)} - 2\,(L+1)\,G_L^{(1)}$$

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(4)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+1+1+1)p\,]\,G_L^{(3)} - 2\,(L+1+1+1)\,G_L^{(2)} - 2\,(L+1+1)G_L^{(2)} - 2(L+1)\,G_L^{(1)}$$

Finalement on s'aperçoit

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(n+1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+n)\,p\,]\,G_L^n - 2\,[\,nL + \tfrac{n}{2}(n+1)\,]\,G_L^{(n-1)}$$

en rappelant que la somme des entiers

$$1 + 2 + 3 + \ldots + n = \frac{n}{2}\,(n+1)$$

Par conséquent on obtient bien la relation cherchée

$$(k^2+p^2)\,G_L^{(n+1)} = 2\,[\,Z^* - (L+1+n)\,p\,]\,G_L^{(n)} - n\,(2L+n+1)\,G_L^{(n-1)}$$

Manuscrit reçu le 13 octobre 1966

BIBLIOGRAPHIE

[1] HAUGHT A.F., MEYERAND R.G., SMITH D.C.
Conf. San Juan, Puerto Rico, 1965, 28-30 Juin

[2] PAPOULAR R.
Le Journ. de Phys , 1965, Août-Septembre

[3] RAMSDEN, SAVIC
Nature, 1964 , 19 Septembre

[4] TOMLINSON R.
Phys. Rev. Letters 14, 1965, 489

[5] BERRY M., DURAND Y., NELSON P., VEYRIE P.
C.R. Acad. Sc., Octobre 1964

[6] FLOUX F., VEYRIE P.
C.R. Acad. Sc. Novembre 1965

[7] VORONOV G.S., DELONE G.A., DELONE N.B.
KUDREVATOVA O.V.
Soviet Phys.Jetp, 1965, 2, 377

[8] GOEPPERT-MAYER M.
Ann. Phys., 1931, 9, 273

[9] KELDYSH L.V.
Soviet Phys., JETP 47, 1964, 1945

[10] NELSON P.
C.R. Acad. Sc., Octobre 1964

[11] NELSON P.
Rapport C.E.A. R 2888, 1965

[12] BEBB H.B., GOLD A.
Phys. Rev., 1966, 1, 143

[13] ZERNIK W.
Phys. Rev., 1964, A 51, 135

[14] ZERNIK W.
J. of Math. Phys., 1965, 6, 262

[15] BETHE H.A., SALPETER E.
Quantum Mechanics of one and two electron Atoms.
(Academic Press Inc. New York, 1957

[16] SCHWARTZ C., TIEMAN T.J.
Ann. Phys. New York, 1959, 6, 178

[17] MITTLEMAN M.H., WOLF F.A.
Phys. Rev., 1962, 128, 2686

[18] MESSIAH A.
Mécanique quantique (Dunod), Vol. II

[19] BUSH V., CALDWELL S.H.
Phys. Rev., 1931, 38, 1898