

GONTIER Y.

TRAHIN M. -

Ionisation des atomes hydrogénoïdes par un processus d'absorption multiphotonique.-

Commissariat à l'énergie atomique, Centre d'études nucléaires de Saclay (Essonne), 1967.-

27 cm, 29 p.

CEA-R 3192 - GONTIER Yves, TRAHIN Michel

IONISATION DES ATOMES HYDROGENOIDES PAR UN PROCESSUS D'ABSORPTION MULTIPHOTONIQUE

Sommaire. - On établit l'expression générale de l'amplitude de probabilité d'ionisation par un processus d'absorption multiphotonique. On en prend la limite non-relativiste et l'on utilise l'approximation dipolaire avant de calculer la section efficace d'ionisation d'atomes hydrogénoïdes. Cette dernière fait intervenir des sommes sur des états virtuels intermédiaires effectuées à l'aide :

- a) - d'une relation de récurrence qui concerne les fonctions angulaires
- b) - d'une technique particulière qui, appliquée aux fonctions radiales, conduit à résoudre un système d'équations différentielles inhomogènes du premier ordre.

1967

31 p.

Commissariat à l'Énergie Atomique - France

CEA-R 3192 - GONTIER Yves, TRAHIN Michel

IONIZATION OF HYDROGEN-LIKE ATOMS BY A MULTIPHOTON ABSORPTION PROCESS

Summary. - The general expression for the amplitude of the probability of ionization by a multiphoton absorption process is derived. In non-relativistic limit is taken and the dipolar approximation is used for calculating the ionization cross-section of hydrogen-like atoms. This latter involves the summation over intermediate virtual states by means of :

- a) - a recurrence relation concerning angular functions
- b) - a particular technique which, applied to radial functions, makes it possible to solve a system of inhomogeneous first-order differential equations.

1967

Commissariat à l'Énergie Atomique - France



**IONISATION DES ATOMES HYDROGENOÏDES PAR UN PROCESSUS
D'ABSORPTION MULTIPHOTONIQUE**

par

Yves GONTIER, Michel TRAHIN

Rapport CEA - R 3192

Services de Physique Appliquée
Service de Physique des Interactions Electroniques

**"IONISATION DES ATOMES HYDROGENOÏDES PAR UN PROCESSUS
D'ABSORPTION MULTIPHOTONIQUE"**

par

Yves GONTIER et Michel TRAHIN

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.

I - INTRODUCTION

II - PROBABILITE DE TRANSITION

A - Amplitude de probabilité

B - Probabilité d'ionisation

C - Section efficace

III - CALCUL DE L'ELEMENT DE MATRICE DIPOLAIRE

A - Expression des états

B - Etude des parties angulaires

C - Etude des parties radiales

D - Section efficace totale d'ionisation

IV - CONCLUSION

Appendice

I - INTRODUCTION

Dans un précédent rapport nous avons utilisé une méthode de calcul proposée par W. Zernik /1/2/ pour déterminer la section efficace d'ionisation d'un atome de césium /3/ par un processus d'absorption mettant en jeu deux photons.

Nous allons généraliser cette méthode pour traiter le cas des gaz qui ne peuvent être ionisés qu'après absorption d'un nombre élevé N de photons.

Des travaux théoriques, portant sur ce sujet, ont été publiés récemment par P. Nelson /4/, L. Keldysh /5/, H.B. Bebb - A. Gold /6/. Nous établissons par la méthode des diagrammes de Feynman-Dyson l'expression relativiste de l'amplitude de probabilité du processus dans le schéma d'interaction lié. Prenant ensuite la limite non relativiste et effectuant l'approximation dipolaire, nous retrouvons une expression formelle de la section efficace d'ionisation, identique à celle proposée par H.B. Bebb et A. Gold.

Contrairement à ces derniers auteurs nous ne faisons aucune approximation pour calculer l'élément de matrice de transition du N^{ième} ordre $K_{fg}^{(N)}$.

Pour évaluer la contribution des parties angulaires, nous établissons une relation de récurrence qui nous fixe automatiquement les états intermédiaires par lesquels chronologiquement passe le système, avant d'atteindre son état final. La méthode de Schwartz et Tieman /7/ nous permet d'effectuer successivement les (N-1) sommations qui portent sur les fonctions radiales.

Elle nous amène à résoudre un système de (N-1) équations différentielles inhomogènes du premier ordre, dans lequel la solution analytique d'une équation quelconque constitue le deuxième membre de l'équation suivante.

Une méthode faisant intervenir des développements de Taylor et des prolongements analytiques sera utilisée en vue d'une exploitation numérique.

II - PROBABILITES DE TRANSITION :

A - Amplitude de probabilité

L'électron lié occupe dans le spectre discret un état initial caractérisé par l'énergie E_g , le nombre quantique principal n, le nombre quantique orbital l et le nombre quantique magnétique m. Pendant son interaction avec le champ de photons, cet électron va acquérir de l'énergie grâce à l'apport d'un certain nombre de quanta.

L'atome sera ionisé lorsque l'énergie accumulée au cours de ces absorptions successives sera supérieure ou égale à son énergie d'ionisation. Si N photons d'énergie E_p sont nécessaires pour déclencher le mécanisme nous avons l'inégalité :

$$NE_p \geq E_i$$

où E_i désigne l'énergie d'ionisation de l'atome considéré.

Dans le cas le plus probable où $NE_p > E_i$ nous supposons que l'excédent d'énergie $NE_p - E_i = \Delta E$ sert uniquement à communiquer de l'énergie cinétique à l'électron libéré. Nous éliminons ainsi l'éventualité d'un effet RAMAN.

Les règles de Feynman-Dyson appliquées au diagramme suivant nous permettent

de trouver l'expression générale de l'élément de matrice R avec lequel nous calculons la probabilité de l'évènement. Nous remarquons que les lignes de Fermions (internes et externes) sont doublées. Cela traduit le fait que nous nous plaçons dans le schéma quantique dit "d'interaction lié" ou de Furry /8/. Une telle représentation est nécessaire pour l'étude d'une particule interagissante lorsque celle-ci se trouve soumise à l'action d'un champ e.m. extérieur. Dans le cas que nous traitons, l'électron étant soumis essentiellement à l'action du noyau, ce champ se réduit à un champ électrostatique central.



Fig. 1

Supposons qu'aucun photon n'est ré-émis au moment de l'ionisation et sachant que tous les photons sont dans le même état de polarisation et d'énergie, il n'existe pas d'autres diagrammes topologiquement différents de celui représenté (fig. 1).

Il apparaît, à l'examen de ce diagramme, que l'électron passe par une succession de N-1 états virtuels (lignes internes) dont certains peuvent coïncider avec des états excités observables de l'atome.

L'élément de matrice de transition où N^{ième} ordre $R_{fg}^{(N)}$ correspondant au diagramme (I) s'écrit dans le système d'unités naturelles ($\hbar = c = 1$)

$$R_{fg}^{(N)} = \langle f | R | g \rangle = (-ie)^N \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_N \Psi_f(x_N) \left\{ \langle 0 | [a(\vec{p})]^{n-N} \right.$$

$$(1) \quad \frac{1}{\sqrt{V}} \int \frac{a(\vec{k}_N)}{\sqrt{2k_{0N}}} \hat{e}(\vec{k}_N) e^{ik_N x_N} d\vec{k}_N K_F(x_N, x_{N-1}) \frac{1}{\sqrt{V}} \int \frac{a(\vec{k}_{N-1})}{\sqrt{2k_{0N-1}}} \hat{e}(\vec{k}_{N-1}) e^{ik_{N-1} x_{N-1}} d\vec{k}_{N-1}$$

$$\dots K_F(x_2, x_1) \frac{1}{\sqrt{V}} \int \frac{a(\vec{k}_1)}{\sqrt{2k_{01}}} \hat{e}(\vec{k}_1) e^{ik_1 x_1} [a^*(\vec{p})]^n | 0 \rangle \left. \right\} \Psi_g(x_1)$$

où : $\bar{\Psi}(x)$ est l'opérateur décrivant l'électron libre

- $|0\rangle$ représente l'état du vide des photons

- $a(\vec{p})$ est l'opérateur d'annihilation d'un photon d'impulsion P

- $\frac{1}{\sqrt{V}} \int \frac{a(\vec{k})}{\sqrt{2k_0}} \hat{\epsilon}(\vec{k}) e^{ikx_i} d\vec{k}$ est l'opérateur relatif au photon de quadrimpulsion

$k = (k_0, \vec{k})$, absorbé au point spatiotemporel x_i

- $\hat{\epsilon}(\vec{k}) = \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \epsilon_{\mu}(\vec{k})$; $\mu = (1,2,3,4)$

- $\epsilon_{\mu}(\vec{k})$ est le vecteur polarisation du photon d'impulsion \vec{k}

- γ_{μ} est la matrice de Dirac

- $K_F(x_i, x_j)$ décrit l'état virtuel créé entre les points d'interaction x_i et x_j c'est le propagateur de Feynman attaché au schéma de Furry.

- $\Psi_g(x)$ est l'opérateur relatif à l'électron atomique dans son état initial.

- L'état initial de n photons est construit en appliquant n fois l'opérateur de création d'un photon sur l'état du vide qui leur est propre :

$$\{ [a^*(\vec{p})]^n |0\rangle \}$$

- L'état final à $n-N$ photons est construit de façon identique.

- Nous normalisons les opérateurs relatifs aux photons dans un volume V et non pas dans un volume égal à $(2\pi)^3$.

- L'expression relativiste (1) est écrite dans la métrique $(-+++)$.

Nous appliquons successivement les opérateurs d'annihilation $a(\vec{k}_1), a(\vec{k}_2) \dots a(\vec{k}_N)$ sur l'état du vide en tenant compte des relations de commutation existant entre ces opérateurs. Ceci nous permet d'écrire (1) sous la forme :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-ie)^N}{(2V)^{N/2}} \sqrt{n(n-1) \dots [n-(N-1)]} \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_n \int d\vec{k}_1 \int d\vec{k}_2 \dots \int d\vec{k}_N$$

$$(2) \quad \bar{\Psi}_f(x_N) \left\{ \langle 0 | [a(\vec{p})]^{n-N} \frac{\hat{\epsilon}(\vec{k}_n)}{\sqrt{k_{0n}}} e^{ik_n x_n} K_F(x_n, x_{n-1}) \frac{\hat{\epsilon}(\vec{k}_{n-1})}{\sqrt{k_{0n-1}}} e^{ik_{n-1} x_{n-1}} \dots K_F(x_2, x_1) \frac{\hat{\epsilon}(\vec{k}_1)}{\sqrt{k_{01}}} e^{ik_1 x_1} [a^*(\vec{p})]^{n-N} |0\rangle \Psi_g(x_1) \delta(\vec{k}_1 - \vec{P}) \delta(\vec{k}_2 - \vec{P}) \dots \delta(\vec{k}_N - \vec{P}) \right\}$$

Intégrant sur $\vec{k}_1, \vec{k}_2 \dots \vec{k}_n$ l'expression (2) devient :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-ie)^N}{(2P_0 V)^{N/2}} \sqrt{n(n-1) \dots [n-(N-1)]} \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_N \int dt_1 \int dt_2 \dots \int dt_N$$

$$(3) \quad \bar{\Psi}_f(x_N) \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P} \cdot \vec{x}_N - t_N k_{0N})} K_F(x_N, x_{N-1}) \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P} \cdot \vec{x}_{N-1} - t_{N-1} k_{0N-1})} \dots K_F(x_2, x_1) \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P} \cdot \vec{x}_1 - t_1 k_{01})} \Psi_g(x_1)$$

Vu le très grand nombre n de photons constituant les faisceaux incident et émergent ($n > N$) on peut écrire :

$$(4) \quad \sqrt{n(n-1) \dots [n-(n-1)]} \neq n^{N/2}$$

Etant donné que $t_N > t_{N-1} \dots t_2 > t_1$ l'opérateur $K_F(x_m, x_n)$ peut se mettre sous la forme :

$$(5) \quad K_F(x_m, x_n) = \sum_i \Psi_i(\vec{x}_m) \bar{\Psi}_i(\vec{x}_n) e^{-i\omega_i(t_m - t_n)} \quad (t_m > t_n)$$

ω_i est l'énergie de l'état Ψ_i en unités naturelles

$\Psi_i(x)$ est solution de l'équation de Dirac en présence de potentiel

$\bar{\Psi}_i(x) = \Psi_i^*(x) \gamma_4$; $\Psi_i^*(x)$ est le conjugué hermitique de $\Psi_i(x)$ et γ_4 la matrice de Dirac.

Nous supposons que les photons sont dans un seul état de polarisation et que le champ e.m. qui leur est propre est transversal.

Dans ce cas, on a :

$$\vec{P} \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) = 0 \quad \epsilon_4(\vec{P}) = 0$$

d'où :

$$(6) \quad \hat{\epsilon}(\vec{P}) = \sum_l \gamma_l \epsilon_l(\vec{P}) - \gamma_4 \epsilon_4(\vec{P}) \rightarrow \sum_l \gamma_l \epsilon_l(\vec{P}) = \vec{\gamma} \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P})$$

L'expression (3) peut alors se mettre sous la forme :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-ie)^N}{(2P_0 V)^{N/2} (2\pi i)^{N-1}} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \int dt_1 \int dt_2 \dots \int dt_N \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_N$$

$$(7) \quad \bar{\Psi}_f(\vec{x}_N) \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_N - t_N k_{0N})} \Psi_{i_{N-1}}(\vec{x}_N) \bar{\Psi}_{i_{N-1}}(\vec{x}_{N-1}) e^{-i\omega_{i_{N-1}}(t_N - t_{N-1})}$$

$$\hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_{N-1} - t_{N-1} k_{0N-1})} \dots \Psi_{i_1}(\vec{x}_2) \Psi_{i_1}^*(\vec{x}_1) e^{-i\omega_{i_1}(t_2 - t_1)} \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_1 - t_1 k_{01})} \Psi_g(\vec{x}_1)$$

Définissant la matrice α_j de Dirac comme :

$$(8) \quad \alpha_j = i \gamma_4 \gamma_j \quad j = (1, 2, 3)$$

$$\vec{\alpha} = i \gamma_4 \vec{\gamma}$$

Et tenant compte de (6) il vient

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-ie)^N n^{\frac{N}{2}} (-i)^N}{(2P_0 V)^{\frac{N}{2}} (2\pi i)^{N-1}} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \int dt_1 \int dt_2 \dots \int dt_N \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \dots \int d\vec{x}_N$$

$$(9) \quad \Psi_f^*(\vec{x}_N) \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_N - t_N k_{0N})} \Psi_{i_{N-1}}(\vec{x}_N) \Psi_{i_{N-1}}^*(\vec{x}_{N-1}) e^{-i\omega_{i_{N-1}}(t_N - t_{N-1})} \hat{\epsilon}(\vec{P})$$

$$e^{i(\vec{P}\vec{x}_{N-1} - t_{N-1} k_{0N-1})} \dots \Psi_{i_1}(\vec{x}_2) \Psi_{i_1}^*(\vec{x}_1) e^{-i\omega_{i_1}(t_2 - t_1)} \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_1 - t_1 k_{01})} \Psi_g(\vec{x}_1)$$

Nous prenons la limite non relativiste de (9). A cette fin nous effectuons les substitutions suivantes :

- $\Psi(x)$, solution de l'équation de Dirac en présence de potentiel est remplacée par la solution de l'équation de Schrödinger $\varphi(x)$.

- Pour des raisons qui se justifieront ultérieurement, nous prenons $K_F(x_m, x_n)$ sous la forme :

$$K_F(x_m, x_n) = \frac{1}{2\pi i} \sum_j \int d\xi_{m,n} \varphi_j(x_m) \varphi_j^*(x_n) \frac{e^{i\xi_{m,n}(t_m - t_n)}}{\omega_j - \xi_{m,n}}$$

- Enfin $\vec{\alpha}$ est remplacé par $\frac{\vec{k}^e}{m}$ où $\vec{k}^e = -i \vec{\nabla}$; (Appendice I).

Moyennant cette approximation (9) devient :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-e)^N n^{\frac{N}{2}}}{(2\omega_p V)^{\frac{N}{2}} (2\pi i)^{N-1} m^N} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \dots \int d\vec{x}_N \int dt_1 \int dt_2 \dots \int dt_N$$

$$(10) \quad \int d\xi_{2,1} \int d\xi_{3,2} \dots \int d\xi_{N,N-1} \varphi_f^*(\vec{x}_N) \vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_N - t_N k_{0N})} \frac{\varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}_N) \varphi_{i_{N-1}}^*(\vec{x}_{N-1})}{\omega_{i_{N-1}} - \xi_{N,N-1}}$$

$$\vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_{N-1} - t_{N-1} k_{0N-1})} \dots \frac{\varphi_{i_1}(\vec{x}_2) \varphi_{i_1}^*(\vec{x}_1)}{\omega_{i_1} - \xi_{2,1}} \vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i(\vec{P}\vec{x}_1 - t_1 k_{01})} \varphi_g(\vec{x}_1)$$

$$e^{i[\xi_{2,1}(t_2 - t_1) + \dots + \xi_{N,N-1}(t_N - t_{N-1})]} \cdot e^{i(\omega_f t_N - \omega_g t_1)}$$

où $P_0 = \omega_p$ est la fréquence des photons / 10/.

Intégrant sur $\xi_{2,1}, \xi_{3,2} \dots \xi_{N,N-1}$ en ayant remplacé auparavant les intégrales sur $t_1, t_2 \dots t_N$ par leurs expressions équivalentes faisant intervenir des fonctions de Dirac de la forme :

$$\delta(\xi_{2,1} + k_{01} + \omega_g) = \frac{1}{2\pi} \int dt_1 e^{-i(k_{01} + \omega_g + \xi_{2,1})t_1}$$

On peut mettre (10) sous la forme :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-2\pi e)^N n^{\frac{N}{2}}}{(2\omega_p V)^{\frac{N}{2}} (2\pi i)^{N-1} m^N} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \int d\vec{x}_1 \int d\vec{x}_2 \dots \int d\vec{x}_N$$

$$(11) \quad \langle \varphi_f(\vec{x}_N) | \vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P}\vec{x}_N} \frac{|\varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}_N)\rangle \langle \varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}_{N-1})|}{\omega_g - \omega_{i_{N-1}} + (N-1)\omega_p} \vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P}\vec{x}_{N-1}} \dots$$

$$\frac{|\varphi_{i_2}(\vec{x}_3)\rangle \langle \varphi_{i_2}(\vec{x}_2)|}{\omega_g - \omega_{i_2} + 2\omega_p} \vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P}\vec{x}_2} \frac{|\varphi_{i_1}(\vec{x}_2)\rangle \langle \varphi_{i_1}(\vec{x}_1)|}{\omega_g - \omega_{i_1} + \omega_p} \vec{k}^e \cdot \hat{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P}\vec{x}_1} |\varphi_g(\vec{x}_1)\rangle \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

Appliquons à droite de chaque "Bra" et à gauche de chaque "Ket" la diade :

$$\sum_{j_n} |\varphi_{j_n}(\vec{x})\rangle \langle \varphi_{j_n}(\vec{x})| = 1$$

Si nous tenons compte de la relation d'orthonormalisation des fonctions :

$$\langle \varphi_m(\vec{x}_1) | \varphi_n(\vec{x}_2) \rangle = \delta_{mn} \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$$

L'expression (11), après intégration sur $\vec{x}_1, \vec{x}_2 \dots \vec{x}_N$, peut s'écrire :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-2\pi e)^N n^{\frac{N}{2}}}{(2\omega_p V)^{\frac{N}{2}} (2\pi i)^{N-1} m^N} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \langle \varphi_f(\vec{x}) | \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P} \cdot \vec{x}} \frac{|\varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}) \rangle \langle \varphi_{i_{N-1}}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_{N-1}} + (N-1)\omega_p}$$

$$(12) \quad \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P} \cdot \vec{x}} \dots \frac{|\varphi_{i_2}(\vec{x}) \rangle \langle \varphi_{i_2}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_2} + 2\omega_p} \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P} \cdot \vec{x}} \frac{|\varphi_{i_1}(\vec{x}) \rangle \langle \varphi_{i_1}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_1} + \omega_p} \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) e^{i\vec{P} \cdot \vec{x}} |\varphi_g(\vec{x}) \rangle \cdot \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

Etant donné que nous utilisons de grandes longueurs d'ondes nous pouvons effectuer l'approximation dipolaire. Cette dernière consiste à remplacer $e^{i\vec{P} \cdot \vec{x}}$ par l'unité /9/.

Nous avons alors :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-2\pi e)^N n^{\frac{N}{2}}}{(2\omega_p V)^{\frac{N}{2}} (2\pi i)^{N-1} m^N} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \langle \varphi_f(\vec{x}) | \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \frac{|\varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}) \rangle \langle \varphi_{i_{N-1}}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_{N-1}} + (N-1)\omega_p} \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \dots$$

$$(13) \quad \frac{|\varphi_{i_2}(\vec{x}) \rangle \langle \varphi_{i_2}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_2} + 2\omega_p} \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \frac{|\varphi_{i_1}(\vec{x}) \rangle \langle \varphi_{i_1}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_1} + \omega_p} \vec{k}^e \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) |\varphi_g(\vec{x}) \rangle \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

Utilisant la relation bien connue en mécanique ondulatoire / 10/

$$\vec{\epsilon} \cdot \langle \varphi_f, \vec{k} \varphi_a \rangle = -im(E_f - E_a) \vec{\epsilon} \cdot \langle \varphi_f, \vec{r} \varphi_a \rangle$$

On peut écrire (13) sous la forme :

$$R_{fg}^{(N)} = \frac{(-2\pi e)^N n^2 (-im\omega_p)^N}{(2\omega_p V)^2 (2\pi i)^{N-1} m^N} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \langle \varphi_f(\vec{x}) | \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \frac{|\varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}) \times \varphi_{i_{N-1}}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_{N-1}} + (N-1)\omega_p}$$

$$(14) \dots \frac{|\varphi_{i_2}(\vec{x}) \times \varphi_{i_2}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_2} + 2\omega_p} \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \frac{|\varphi_{i_1}(\vec{x}) \times \varphi_{i_1}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_1} + \omega_p} \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) |\varphi_g(\vec{x})\rangle \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

Etant donné que $\omega_{i_{N-1}} - \omega_{i_{N-2}} = \omega_{i_{N-2}} - \omega_{i_{N-3}} = \dots = P_0 = \omega_p$ (énergie d'un photon).

$\omega_f, \omega_g, \omega_{i_\alpha}, P_0 = \omega_p$ étant des fréquences dans le système d'unités naturelles il suffit, pour passer dans le système c.g.s. d'effectuer les substitutions :

$$\left\{ \omega_f, \omega_g, \omega_{i_\alpha}, P_0 \right\}_{\text{U.N.}} \rightarrow \left\{ \frac{\omega_f}{c}, \frac{\omega_g}{c}, \frac{\omega_{i_\alpha}}{c}, \frac{P_0}{c} = \frac{\omega_p}{c} \right\}_{\text{c.g.s.}}$$

C étant la vitesse de la lumière en cm/S.

Posant :

$$\alpha = e^2/4\pi = 1/137 \quad (\text{constante de structure fine})$$

$$F = nc\sqrt{\nu} \quad \text{le flux de photons par unité de surface}$$

$$\omega_p \quad \text{la fréquence des photons}$$

et :

$$K_{fg}^{(N)} = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_{N-1}} \langle \varphi_f(\vec{x}) | \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \frac{|\varphi_{i_{N-1}}(\vec{x}) \times \varphi_{i_{N-1}}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_{N-1}} + (N-1)\omega_p} \dots$$

$$(15) \frac{|\varphi_{i_2}(\vec{x}) \times \varphi_{i_2}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_2} + 2\omega_p} \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) \frac{|\varphi_{i_1}(\vec{x}) \times \varphi_{i_1}(\vec{x})|}{\omega_g - \omega_{i_1} + \omega_p} \vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P}) |\varphi_g(\vec{x})\rangle \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

L'expression (14) peut s'écrire :

$$(16) \quad R_{fg}^{(N)} = 2\pi i (-1)^N (2\pi \alpha F \omega_p)^{\frac{N}{2}} K_{fg}^{(N)} \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

B - Probabilité d'ionisation

La probabilité du processus $W_{fg}(\omega, \theta, \varphi)$ s'obtient en prenant le carré du module de (16) soit :

$$(17) \quad W_{fg}(\omega, \theta, \varphi) = |R_{fg}^{(N)}|^2 = (2\pi)^2 (2\pi \alpha F \omega_p)^N |K_{fg}^{(N)}|^2 \delta^2(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

Et la probabilité par unité de temps $W_{fg}^T(\omega, \theta, \varphi)$ est alors égale à / 10/ :

$$(18) \quad W_{fg}^T(\omega, \theta, \varphi) = 2\pi (2\pi \alpha F \omega_p)^N |K_{fg}^{(N)}|^2 \delta(\omega_f - \omega_g - N\omega_p)$$

Introduisant la densité des états électroniques libres / 11/ :

$$(19) \quad \rho(E) = \frac{m}{\hbar^2} \frac{k}{(2\pi)^3}$$

(17) se met sous la forme :

$$(20) \quad W_{fg}^T(E_{fg}, \theta, \varphi) = 2\pi (2\pi \alpha F E_p)^N \hbar^{N-1} |K_{fg}^{(N)}|^2 \delta(E_{fg}) \rho(E_{fg})$$

$$\rho(E_{fg}) = \rho(E_f - E_g - NE_p)$$

Où nous avons converti les fréquences en énergie au moyen de la relation :

$$E = \hbar \omega$$

Intégrant sur E_{fg} :

$$(21) \quad W_{fg}^T(\theta, \varphi) = 2\pi (2\pi \alpha F E_p)^N \hbar^{N-1} |K_{fg}^{(N)}|^2 \rho(0)$$

Sachant que :

$$(22) \quad E_{fg} = E_f - E_g - NE_p = E_I - N\hbar\omega_p + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

$\hbar^2 k^2 / 2m$ est l'énergie cinétique de l'électron libéré,

k étant son nombre d'onde.

On peut écrire l'expression (21) sous la forme :

$$(23) \quad W_{fg}^T(\theta, \varphi) = \frac{m}{(2\pi)^2} (2\pi\alpha F E_p)^N \hbar^{N-3} |K_{fg}^{(N)}|^2 k$$

k étant donné par l'équation :

$$(24) \quad E_I - N\hbar\omega_p + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 0$$

C - Section efficace

La section efficace différentielle s'obtient en divisant par le flux de photons F :

$$(25) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m}{(2\pi)^2} (2\pi\alpha E_p)^N F^{N-1} \hbar^{N-3} |K_{fg}^{(N)}|^2 k$$

Afin d'éviter l'apparition de termes dont les exposants risquent d'être exagérément grands dans l'évaluation numérique de (25), nous exprimons la section efficace différentielle dans le système d'unités atomiques /12/. On a alors :

$$(26) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\alpha}{2\pi} \left(\frac{I}{I_0} \right)^{N-1} |K_{fg}^{(N)}|^2 a^2 E_p k$$

Où :

$\alpha = 1/137$ est la constante de structure fine

$I = F\hbar\omega_p = F E_p$ est l'intensité du faisceau en W/cm^2

$I_0 = \hbar C^2 \alpha / 2\pi a^4 = 14,038 \cdot 10^{16} W/cm^2$

a est le rayon de la lère orbite de Bohr

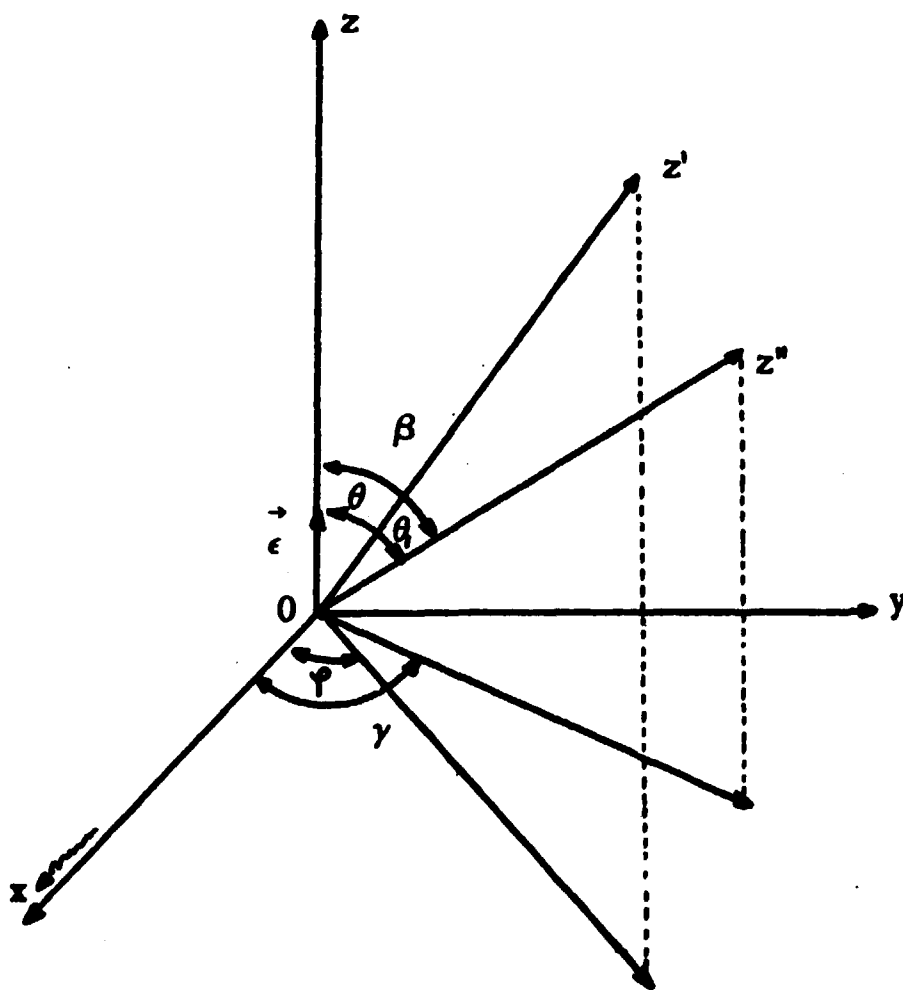
E_p est l'énergie d'un photon en multiple de $\frac{e^2}{a}$

$\langle \varphi_f | \vec{x} \cdot \vec{\epsilon} | \varphi_{i_{N-1}} \rangle \times \langle \varphi_{i_{N-1}} | \vec{x} \cdot \vec{\epsilon} | \varphi_{i_{N-1}} \rangle \dots \langle \varphi_1 | \vec{x} \cdot \vec{\epsilon} | \varphi_g \rangle$ est exprimé en unités de $a^{(2N+3)/2}$

III - CALCUL DE L'ELEMENT DE MATRICE DIPOLAIRE :

A - Expression des états

La position de l'électron est repérée dans le système d'axes $(0, x, y, z)$ qui est défini en plaçant l'origine 0 au centre de l'atome, en prenant l'axe \vec{ox} parallèle à la direction de propagation de la lumière et l'axe \vec{oz} parallèle au vecteur polarisation unité $\vec{\epsilon}$.



Dans ce système d'axes, les angles θ et φ désignent, d'une manière générale, la colatitude et l'azimut de la direction \vec{oz} du rayon vecteur \vec{r} de l'électron lié. Les fonctions propres du spectre discret, qui caractérisent l'état initial et les états intermédiaires, s'expriment suivant les notations classiques / 12/, par les fonctions normées :

$$(27) \quad \Psi_i = R_{n_i l_i}(r) Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi)$$

où $R_{n_i l_i}(r)$ est la fonction radiale du spectre discret :

$$(28) \quad R_{n_i l_i}(r) = \frac{1}{(2l_i + 1)} \left[\frac{(n_i + l_i)!}{(n_i - l_i - 1)! 2n} \right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{n_i} \right)^{3/2} e^{-\frac{Zr}{n_i}} \left(\frac{2Zr}{n_i} \right)^{l_i} {}_1F_1 \left[-(n_i - l_i - 1), 2l_i + 2, 2Zr/n_i \right]$$

dans laquelle ${}_1F_1 \left[-(n_i - l_i - 1), 2l_i + 2, 2Zr/n_i \right]$ est la fonction hypergéométrique confluente définie par :

$$(29) \quad {}_1F_1(\alpha, \beta, z) = 1 + \frac{\alpha}{\beta} z + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

$Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi)$ est l'harmonique sphérique :

$$(30) \quad Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{l_i m_i}(\cos \theta) e^{im_i \varphi}$$

Pour exprimer l'état final, nous utiliserons les angles β et γ pour désigner la colatitude et l'azimut de la direction $\vec{o}z''$ joignant l'origine à l'électron éjecté.

L'angle θ_1 des directions $\vec{o}z'$, et $\vec{o}z''$ vérifie la relation :

$$\cos \theta_1 = \sin \theta \sin \beta \cos(\varphi - \gamma) + \cos \theta \cos \beta$$

et le polynôme de Legendre $P_{L0}(\theta_1)$ est donné par la formule d'addition des harmoniques sphériques :

$$(31) \quad P_{L0}(\theta_1) = \sum_{M=-L}^{+L} \left(\frac{8\pi^2}{2L+1} \right)^{1/2} Y_{LM}(\theta, \varphi) Y_{LM}^*(\beta, \gamma)$$

Comme G. Breit et H.A. Bethe / 13/, nous prenons un état final normé tel que la forme asymptotique de la fonction d'onde soit constituée d'une onde plane de Coulomb modifiée et d'une onde sphérique entrante de Coulomb modifiée.

La fonction d'onde de l'électron dans l'état final s'écrit / 12/ :

$$(32) \quad \Psi_f = \sqrt{\frac{\pi}{2k}} \sum_L (-i)^L (2L+1) e^{-i\eta_L} R_L^c(r) P_L(\cos \theta)$$

où η_L est la phase complexe de la fonction Γ qui est donnée pour les ondes que nous considérons, par :

$$\eta_L = \arg \Gamma(L+1 - iz/k)$$

$R_L^c(r)$ est la solution régulière de l'équation de Schrödinger avec un potentiel coulombien.

Cette fonction propre du spectre continu est normée dans l'échelle des énergies suivant la règle :

$$\int_0^\infty r^2 R_{EL}^c(r) dr \int_{E-\Delta E}^{E+\Delta E} R_{E'L}^c(r) dE' = 1$$

On a :

$$(33) \quad R_L^c(r) = 2 \left(\frac{Z}{1 - e^{-2\pi Z/k}} \right)^{1/2} \frac{L}{\prod_{S=1}^L (S^2 + \frac{Z}{k})^{1/2}} \frac{(2kr)^L}{(2L+1)!} \cdot e^{ikr} {}_1F_1 \left(L+1 + i\frac{Z}{k}, 2L+2, 2ikr \right)$$

En utilisant la formule d'addition (31), la fonction d'onde Ψ_f prend la forme :

$$(34) \quad \Psi_f = \left(\frac{8\pi^3}{k} \right)^{1/2} \sum_L (-i)^L e^{-i\eta_L} R_L^c(r) \sum_M Y_{LM}(\theta, \varphi) Y_{LM}^*(\beta, \gamma)$$

Pour calculer l'élément de matrice $K_{fg}^{(N)}$ nous remplaçons dans l'expression (15), les fonctions d'onde Ψ par leurs valeurs données par les relations (27) et (34) et nous explicitons les produits scalaires $(\vec{X} \cdot \vec{\epsilon}(\vec{P})) = r \cos \theta$

$$K_{fg}^{(N)} = \left(\frac{8\pi^3}{k} \right)^{1/2} \sum_L \sum_M i^L e^{i\eta_L} Y_{LM}(\beta, \gamma) \int \int Y_{LM}^*(\theta_{N-1}, \varphi_{N-1}) \cos \theta_{N-1} Y_{LM}(\theta_{N-1}, \varphi_{N-1}) \sin \theta_{N-1} d\theta_{N-1} d\varphi_{N-1}$$

$$(35) \quad \dots \iint Y_{l_1 m_1}^* (\theta, \varphi) \cos \theta Y_{l_1, m} (\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^{n_1} (E_p)$$

La quantité $P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^{n_1} (E_p)$ représente la contribution des fonctions radiales :

$$(36) \quad P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^{n_1} (E_p) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_{N-1}} \int_0^\infty \frac{R_L^c(k, r_{N-1}) R_{n_{N-1} l_{N-1}}(r_{N-1}) r_{N-1}^3 dr_{N-1} \dots}{E_g - E_{n_{N-1}} + (N-1) E_p} \int_0^\infty \frac{R_{n_2 l_2}(r_1) R_{n_1 l_1}(r_1) r_1^3 dr_1}{E_g - E_{n_1} + E_p} \int_0^\infty R_{n_1 l_1}(r) R_{n_1 l_1}(r) r^3 dr$$

que nous déterminerons ultérieurement.

B - Etude des parties angulaires

On a vu que pour arriver à un état final libre $\Psi_f(k, L, M)$, caractérisé par l'énergie E_f et les nombres quantiques L et M , le système, qui se trouve dans un état initial $\Psi_g(n, l, m)$, doit passer par $(N - 1)$ états intermédiaires déterminés par les règles de sélection qui fixent les transitions permises.

Ainsi la transition entre deux états virtuels Ψ_{i_α} et Ψ_{i_β} , provoqués par l'absorption d'un photon, nous amènera à calculer des expressions de la forme :

$$(37) \quad \iint Y_{l_i \beta m_i \beta}^* (\theta, \varphi) \cos \theta Y_{l_i \alpha m_i \alpha} (\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$$

mais en rappelant que :

$$(38) \quad Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{lm}(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

l'expression (37) s'écrit encore :

$$(39) \quad \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(m_i \beta - m_i \alpha)\varphi} d\varphi \int_0^\pi P_{l_i \beta m_i \beta}(\cos \theta) \cos \theta P_{l_i \alpha m_i \alpha}(\cos \theta) \sin \theta d\theta$$

Comme $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i(m_i\beta - m_i\alpha)\varphi} d\varphi$ est nulle ou égale à l'unité dans le cas particulier où $(m_i\beta - m_i\alpha) = 0$, la règle de sélection sur le nombre quantique magnétique se réduit à :

$$(40) \quad m_i = 0$$

ce qui diminue le nombre de transitions permises.

Nous avons donc :

$$(41) \quad \iint Y_{l_i\beta}^{*m_i\beta}(\theta, \varphi) \cos\theta Y_{l_i\alpha}^{m_i\alpha}(\theta, \varphi) \sin\theta d\theta d\varphi = \int_0^\pi P_{l_i\beta}^{m_i\beta}(\cos\theta) \cos\theta P_{l_i\alpha}^{m_i\alpha}(\cos\theta) \sin\theta d\theta$$

La relation de récurrence :

$$(42) \quad \cos\theta P_{lm}(\cos\theta) = A_l P_{l+1,m} + B_l P_{l-1,m}$$

$$(43) \quad A_l = \left[\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right]^{1/2}; \quad B_l = \left[\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)} \right]^{1/2}$$

et la condition d'orthogonalité des fonctions de Legendre :

$$(44) \quad \int_0^\pi P_{l_i\beta}^{m_i\beta}(\cos\theta) P_{l_i\alpha}^{m_i\alpha}(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \delta_{l_i\beta}^{l_i\alpha} \delta_{m_i\beta}^{m_i\alpha}$$

permettent, compte tenu de condition (40), de transformer l'expression (41) qui s'écrit :

$$(45) \quad \int P_{l_i\beta}^{m_i\beta}(\cos\theta) \left[A_{l_i\alpha} P_{l_i\alpha+1,m}(\cos\theta) + B_{l_i\alpha} P_{l_i\alpha-1,m}(\cos\theta) \right] \sin\theta d\theta = A_{l_i\alpha} \delta_{l_i\beta}^{l_i\alpha+1} + B_{l_i\alpha} \delta_{l_i\beta}^{l_i\alpha-1}$$

La règle de sélection pour le nombre quantique orbital l_i est mise en évidence par les symboles de Kronecker.

On a :

$$(46) \quad \Delta l_i = \pm 1$$

A partir d'un état $|\varphi_{i\alpha}\rangle$ quelconque, deux transitions vers des états $|\varphi_{i\beta}\rangle$ sont possibles. Ceci nous conduit à prévoir la présence de 2^N états finals dans l'élément de matrice dipolaire $K_{fg}^{(N)}$.

Plusieurs de ces états finals pourront être identiques, bien que les étapes intermédiaires pour y parvenir soient différentes.

Finalement, après avoir moyenné sur le nombre quantique magnétique m , l'expression (35) s'écrit :

$$K_{fg}^{(N)} = \left(\frac{8\pi^3}{k} \right)^{1/2} e^{i\beta L} Y_{LM}(\beta, \gamma) \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} (A_l \delta_{l_1 l_1+1} + B_l \delta_{l_1 l_1-1})$$

$$(47) \quad (A_{l_1} \delta_{l_2 l_1+1} + B_{l_1} \delta_{l_2 l_1-1}) \dots (A_{l_{N-1}} \delta_{l_{N-1} l_{N-1}+1} + B_{l_{N-1}} \delta_{l_{N-1} l_{N-1}-1})$$

$$P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1}}^{n l} (E_p)$$

Comme nous nous intéressons au nombre d'atomes ionisés par l'action d'un rayonnement e.m. dans un volume élémentaire de gaz, nous calculerons la section efficace totale du processus.

En intégrant les fonctions angulaires contenues dans l'expression (26) de la section efficace différentielle, nous éliminons, compte tenu des relations d'orthonormalisation des fonctions sphériques, la dépendance en β et γ de notre formule. On a :

$$(48) \quad |K_{fg}^{(N)}|^2 = \frac{8\pi^3}{k} \left| \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} (A_l \delta_{l_1 l_1+1} + B_l \delta_{l_1 l_1-1}) \cdot (A_{l_1} \delta_{l_2 l_1+1} + B_{l_1} \delta_{l_2 l_1-1}) \dots (A_{l_{N-1}} \delta_{l_{N-1} l_{N-1}+1} + B_{l_{N-1}} \delta_{l_{N-1} l_{N-1}-1}) P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1}}^{n l} (E_p) \right|^2$$

C'est sous cette forme que nous utiliserons l'élément de matrice dipolaire, pour calculer la section efficace différentielle donnée par la relation (26)

C - Etude des parties radiales

Considérons la relation (36) donnant la valeur de la quantité $P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^{nl}(E_p)$ et mettons-la sous la forme :

$$(49) \quad P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^{nl}(E_p) = \int_0^\infty R_{nl}^{(r)} V_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(r, E_p) r^2 dr$$

en posant :

$$(50) \quad V_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(r, E_p) = \sum_{n_1 n_2 \dots n_{N-1}} \int_0^\infty \frac{R_{L}^{c(k, r_{N-1})} R_{n_{N-1} l_{N-1}}^{(r_{N-1})} r_{N-1}^3 dr_{N-1}}{E_g - E_{n_{N-1}} + (N-1) E_p} \dots \int_0^\infty \frac{R_{n_2 l_2}^{(r_2)} R_{n_1 l_1}^{(r_1)} r_1^3 dr_1}{E_g - E_{n_1} + E_p} R_{n_1 l_1}^{(r)} r$$

En explicitant la fonction $R_{n_1}^{(r)}$ donnée par (28) on obtient :

$$(51) \quad P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^{nl}(E_p) = \int_0^\infty \frac{1}{(2l+1)!} \left[\frac{(n+1)!}{(n-1)! 2^n} \right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{n} \right)^{l+3/2} r^{l+2} {}_1F_1 \left[-(n-1-1), 2l+2, \frac{2Z}{n} r \right] V_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(r, E_p) e^{-\frac{Z}{n} r} dr$$

Nous remarquons la présence, dans l'expression (51), d'une exponentielle :

$$\exp. \left(-\frac{Z}{n} r \right) = \left[\exp. (-pr) \right]_{p = \frac{Z}{n}}$$

et d'une série de puissances de r :

$$(52) \quad r^l {}_1F_1 \left[-(n-1-1), 2l+2, 2pr \right] = r^l - 2p \frac{n-1-1}{2l+2} r^{l+1} - 4p^2 \frac{(n-1-1)(1-(n-1-1))}{(2l+2)(2l+3)} \frac{r^{l+2}}{2!}$$

Il en résulte que, sous la forme (49), $P_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^{nl} (E_p)$ est égal à une somme de dérivées successives par rapport à p , de la transformée de Laplace $S_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (P, E_p)$ de la fonction $V_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (r, E_p) / 1/$

$$(53) \quad S_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (P, E_p) = \int_0^{\infty} V_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (r, E_p) e^{-Pr} dr$$

considérée au point $P = \frac{Z}{n}$. Le nombre et les ordres successifs de ces dérivées sont déterminés par les valeurs des nombres quantiques n et l de l'état initial qui fixent le nombre des termes qui constituent la fonction hypergéométrique ${}_1F_1$.

Nous calculerons la fonction $S_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (P, E_p)$ de préférence à la fonction $V_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (r, E_p)$.

Ces fonctions renferment $(N-1)$ sommations qui ne peuvent être effectuées exactement que grâce à la méthode de Schwartz et Tieman /7/ que nous avons déjà décrite en détail /3/, utilisée successivement $(N - 1)$ fois.

Appliquons cette méthode après avoir défini tout d'abord les fonctions :

$$V_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n (r, E_p) = \sum_{n_1 n_2 \dots n_{N-1}} \int_0^{\infty} \frac{R_L^c(k, r_{N-1}) R_{n_{N-1} 1_{N-1}} (r_{N-1}) r_{N-1}^3 dr_{N-1}}{E_g - E_{n_{N-1}} + (N-1) E_p}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{R_{n_{N-1} 1_{N-1}} (r_{N-2}) R_{n_{N-2} 1_{N-2}} (r_{N-2}) r_{N-2}^3 dr_{N-2}}{E_g - E_{n_{N-2}} + (N-2) E_p} \dots \int_0^{\infty} \frac{R_{n_2 1_2} (r_1) R_{n_1 1_1} (r_1) r_1^3 dr_1}{E_g - E_{n_1} + E_p} R_{n_1 1_1} (r) r$$

$$V_{1_2 1_3 \dots 1_{N-1} L}^n (r, E_p) = \sum_{n_2 n_3 \dots n_{N-1}} \int_0^{\infty} \frac{R_L^c(k, r_{N-1}) R_{n_{N-1} 1_{N-1}} (r_{N-1}) r_{N-1}^3 dr_{N-1}}{E_g - E_{n_{N-1}} + (N-1) E_p}$$

$$\int_0^{\infty} \frac{R_{n_{N-1} 1_{N-1}} (r_{N-2}) R_{n_{N-2} 1_{N-2}} (r_{N-2}) r_{N-2}^3 dr_{N-2}}{E_g - E_{n_{N-2}} + (N-2) E_p} \dots \int_0^{\infty} \frac{R_{n_3 1_3} (r_2) R_{n_2 1_2} (r_2) r_2^3 dr_2}{E_g - E_{n_2} + 2 E_p} R_{n_2 1_2} (r) r$$

(54)

$$V_{l_{N-2} l_{N-1} L}^n(r, E_p) = \sum_{n_{N-2} n_{N-1}} \int_0^\infty \frac{R_L^c(k, r_{N-1}) R_{n_{N-1} l_{N-1}}(r_{N-1}) r_{N-1}^3 dr_{N-1}}{E_g - E_{n_{N-1}} + (N-1) E_p} \int_0^\infty \frac{R_{n_{N-1} l_{N-1}}(r_{N-2}) R_{n_{N-2} l_{N-2}}(r_{N-2}) r_{N-2}^3 dr_{N-2}}{E_g - E_{n_{N-2}} + (N-2) E_p} R_{n_{N-2} l_{N-2}}(r) r$$

$$V_{l_{N-1} L}^n(r, E_p) = \sum_{n_{N-1}} \int_0^\infty \frac{R_L^c(k, r_{N-1}) R_{n_{N-1} l_{N-1}}(r_{N-1}) r_{N-1}^3 dr_{N-1}}{E_g - E_{n_{N-1}} + (N-1) E_p} R_{n_{N-1} l_{N-1}}(r) r$$

et leur transformée de Laplace :

$$S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p), S_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p), \dots, S_{l_{N-2} l_{N-1} L}^n(P, E_p), S_{l_{N-1} L}^n(P, E_p)$$

Définissons les opérateurs :

$$D_1 = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - \frac{l_1(l_1 + 1)}{2r^2}$$

$$D_2 = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - \frac{l_2(l_2 + 1)}{2r^2}$$

(55)

$$D_{N-2} = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - \frac{l_{N-2}(l_{N-2} + 1)}{2r^2}$$

$$D_{N-1} = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{Z}{r} - \frac{l_{N-1}(l_{N-1} + 1)}{2r^2}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$(56) \quad D_1 \{ r R_{n_1 l_1}^{(r)} \} = - E_{n_1} r R_{n_1 l_1}^{(r)}$$

Ajoutons aux deux membres la quantité :

$$(57) \quad (E_g + E_p) r R_{n_1 l_1}^{(r)}$$

et multiplions par :

$$(58) \quad r_1^2 R_{n_1 l_1}(r_1) V_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(r_1, E_p)$$

On obtient :

$$(59) \quad (E_g + E_p + D_1) r R_{n_1 l_1}^{(r)} r_1^2 R_{n_1 l_1}(r_1) V_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(r_1, E_p) = (E_g - E_{n_1} + E_p) r R_{n_1 l_1}^{(r)} r_1 R_{n_1 l_1}(r_1) r_1 V_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(r_1, E_p)$$

Divisons par $E_g - E_{n_1} + E_p$, sommions sur (n_1) et intégrons par rapport à la variable r_1 .

On a :

$$(E_g + E_p + D_1) \sum_{n_1} r R_{n_1 l_1}^{(r)} \int_0^\infty \frac{dr_1}{E_g - E_{n_1} + E_p} r_1^2 R_{n_1 l_1}(r_1) V_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(r_1, E_p) =$$

$$(60) \quad \int_0^\infty dr_1 \sum_{n_1} r R_{n_1 l_1}^{(r)} r_1 R_{n_1 l_1}(r_1) r_1 V_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(r_1, E_p)$$

Mais l'on remarque, d'après les expressions (54), que l'on a :

$$(61) \quad V_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(r, E_p) = \sum_{n_1} r R_{n_1 l_1}^{(r)} \int_0^\infty \frac{dr_1}{E_g - E_{n_1} + E_p} r_1^2 R_{n_1 l_1}(r_1) V_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(r_1, E_p)$$

cette dernière et la relation de fermeture :

$$\sum_{n_1} r R_{n_1 l_1}^{(r)} r_1 R_{n_1 l_1}(r_1) = \delta(r - r_1)$$

mais :

$$(68) \quad L \{ r^n f(r) \} = (-1)^n \frac{d^n F(P)}{dP^n} \quad F(P) = L \{ f(r) \}$$

et :

$$(69) \quad L \left\{ r^2 \frac{d^2}{dr^2} V^n(r, E_p) \right\} = 2 S^n(P, E_p) + 4P \frac{dS^n(P, E_p)}{dP} + P^2 \frac{d^2 S^n(P, E_p)}{dP^2}$$

La transformée de la 1ère équation (65) s'écrit :

$$(70) \quad (E_g + E_p + \frac{1}{2} P^2) \frac{d^2 S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)}{dP^2} + (2P - Z) \frac{d S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)}{dP} + \left(1 - \frac{l_1(l_1 + 1)}{2} \right) S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p) = - \frac{d^3 S_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)}{dP^3}$$

Elle se simplifie encore après $(l_1 - 1)$ dérivations par rapport à (P) .

$$(71) \quad (E_g + E_p + \frac{1}{2} P^2) \frac{d^{l_1+1}}{dP^{l_1+1}} S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p) + [(l_1+1)P - Z] \frac{d^{l_1}}{dP^{l_1}} S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p) = - \frac{d^{l_1+2}}{dP^{l_1+2}} S_{l_2 l_3 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)$$

Nous obtenons une équation différentielle inhomogène du premier ordre, dont l'intégrale représentée par la fonction $\frac{d^{l_1}}{dP^{l_1}} S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)$ n'est que la dérivée l_1 ième de la fonction $S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)$ que nous recherchons. Mais en considérant les expressions (49) et (52) nous pouvons noter que la fonction $V_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(r, E_p)$ est multipliée par un polynôme en puissances de r , dont le terme de plus bas degré est r^{l_1+2} . Ce sont donc les dérivés de la fonction $S_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(P, E_p)$ d'ordre égal ou supérieur à $l_1 + 2$, qui permettent de calculer la quantité $P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1} L}^n(E_p)$. Comme $l_1 + 2 > l_1$, nous les obtiendrons aisément à partir de la solution de l'équation (71).

De la même manière toutes les équations du système (65) seront transformées.

Afin de pouvoir simplifier les notations, nous rappelons l'inégalité $E_g + (N-1)E_p < 0$ qui nous permet de définir les quantités :

$$\begin{aligned} \alpha_1^2 &= -2(E_g + E_p) \\ \alpha_2^2 &= -2(E_g + 2E_p) \\ &\dots\dots\dots \\ \alpha_{N-1}^2 &= -2(E_g + (N-1)E_p) \end{aligned} \tag{72}$$

Posons :

$$\begin{aligned} y_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) &= \frac{d^{l_1}}{dP^{l_1}} S_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \\ y_{1_2 1_3 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) &= \frac{d^{l_2}}{dP^{l_2}} S_{1_2 1_3 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \\ &\dots\dots\dots \\ y_{1_{N-1} L}^n(P, E_p) &= \frac{d^{l_{N-1}}}{dP^{l_{N-1}}} S_{1_{N-1} L}^n(P, E_p) \end{aligned} \tag{73}$$

Le système (65) peut maintenant s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} (P^2 - \alpha_1^2) \frac{d}{dP} y_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) + 2[(l_1 + 1)P - Z] y_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \\ = -2 \frac{d^{l_1 - l_2 + 2}}{dP^{l_1 - l_2 + 2}} y_{1_2 1_3 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \\ (P^2 - \alpha_2^2) \frac{d}{dP} y_{1_2 1_3 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) + 2[(l_2 + 1)P - Z] y_{1_2 1_3 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \\ = -2 \frac{d^{l_2 - l_3 + 2}}{dP^{l_2 - l_3 + 2}} y_{1_3 1_4 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \\ \dots\dots\dots \\ (P^2 - \alpha_{N-1}^2) \frac{d}{dP} y_{1_{N-1} L}^n(P, E_p) + 2[(l_{N-1} + 1)P - Z] y_{1_{N-1} L}^n(P, E_p) = 2 F_{1_{N-1} L}(k, P) \end{aligned} \tag{74}$$

La fonction $F_{1_{N-1} L}(k, P)$ figurant au deuxième membre de la dernière équation est égale à :

$$F_{1_{N-1} L}(k, P) = (-1)^{l_{N-1} + 1} \int_0^\infty R_L^c(k, r) r^{l_{N-1} + 3} e^{-Pr} dr \tag{75}$$

elle se détermine comme nous l'avons montré dans un précédent rapport /1/ et /3/.

Notons aussi que l'ordre des dérivées $(l_i - l_{i+1} + 2)$ est égal à 3 ou à 1.

Pour résoudre le système des équations (74) il nous faut connaître des conditions initiales.

Par définition les fonctions analytiques $S^n(P, E_p)$ et leur dérivés successives sont finies pour toutes les valeurs de (P) telles que $Re P > 0$. Or, il existe une valeur réelle positive $P = \alpha$ annulant le coefficient de la dérivée $\frac{d y^n}{dP}$, pour chacune des équations composant le système (74). Celles-ci nous fournissent donc simplement les valeurs initiales de la fonction $y^n(P, E_p)$ qui nous sont nécessaires.

La résolution du système (74) sera effectuée par une méthode 2 faisant intervenir des développements de Taylor et des prolongements analytiques.

La quantité $P_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^{nl}(E_p)$ peut s'exprimer par l'intermédiaire de la fonction $y_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p)$ que nous venons de déterminer. Elle se met sous la forme :

$$\begin{aligned} P_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^{nl}(E_p) &= (-1)^l \frac{1}{(2l+1)!} \left[\frac{(n+1)!}{(n-l)! 2^n} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z}{n} \right)^{l + \frac{3}{2}} \\ (76) \quad \left\{ {}_1F_1 [-(n-l-1), 2l+2, -2P \frac{d}{dP}] \frac{d^{l-l_1+2}}{dP^{l-l_1+2}} y_{1_1 1_2 \dots 1_{N-1} L}^n(P, E_p) \right\}_P &= \frac{Z}{n} \end{aligned}$$

que nous utiliserons pour résoudre numériquement le problème.

D - Section efficace totale d'ionisation

Nous avons vu que la section efficace différentielle d'ionisation s'exprimait par la relation (26) :

$$\frac{d \sigma_{nl}}{d \Omega} = \frac{\alpha}{2\pi} \left(\frac{1}{I_0} \right)^{N-1} \left| K_{fg}^{(N)} \right|^2 a^2 E_p k \tag{77}$$

qui renferme des grandeurs que nous avons déjà précisées.

La section efficace totale est obtenue après intégration sur l'angle solide. En utilisant l'expression (48) donnant l'élément de matrice on arrive à la relation :

$$\sigma_{nl} = 4 \pi^2 \alpha a^2 E_p \left(\frac{I}{I_0}\right)^{N-1} \left[\frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} (A_l \delta_{l,l+1} + B_l \delta_{l,l-1}) \right. \\ (78) \quad \left. (A_{l_1} \delta_{l_2 l_1+1} + B_{l_1} \delta_{l_2 l_1-1}) \dots (A_{l_{N-1}} \delta_{l_{N-1} l_{N-2}+1} + B_{l_{N-1}} \delta_{l_{N-1} l_{N-2}-1}) P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1}}^{nl}(E_p) \right]^2$$

où les coefficients A, B et la quantité $P_{l_1 l_2 \dots l_{N-1}}^{nl}(E_p)$ sont donnés respectivement par les formules (43) et (77).

IV - CONCLUSION :

Nous avons montré comment on pouvait, par la méthode des diagrammes de Feynman-Dyson, trouver l'expression de la section efficace d'ionisation des gaz par un processus d'absorption multiphotonique.

L'usage que nous avons fait de l'équation de Schrödinger avec potentiel coulombien et des fonctions d'onde de l'hydrogène, nous a permis de traiter rigoureusement le cas des atomes à un électron.

Ce modèle atomique pourra également être utilisé pour déterminer l'ordre de grandeur des sections efficaces relatives aux alcalins. Les valeurs numériques ainsi obtenues seront comparées aux résultats d'un programme de mesures expérimentales en voie de réalisation. Un calcul plus précis nous amènera, dans une prochaine étape, à introduire des formes de potentiel mieux adaptés à la structure propre des divers atomes complexes que nous considérerons.

REMERCIEMENTS -

Nous remercions Monsieur MANUS et Monsieur BONNAL pour l'intérêt et les encouragements qu'ils nous ont prodigués.

APPENDICE

L'expression relativiste du courant utilisée implicitement dans notre calcul de perturbation est / 10/ :

$$\begin{aligned} J_{\mu}(\mathbf{x}) &= -\frac{ie}{2} [\bar{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}), \Psi_{\beta}(\mathbf{x})] (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} \\ &= -\frac{ie}{2} (\bar{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) - \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) \bar{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x})) (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

Etant donné que $\hat{\epsilon}(\vec{P}) = \sum_{\mu} \gamma_{\mu} e_{\mu}(\vec{P})$ se réduit à $\hat{\epsilon}(\vec{P}) = \sum_j \gamma_j e_j(\vec{P})$ ($\mu = 1, 2, 3, 4$; $j = 1, 2, 3$) nous n'avons à considérer que :

$$\begin{aligned} J_j(\mathbf{x}) &= -\frac{ie}{2} (\bar{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) - \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) \bar{\Psi}_{\alpha}(\mathbf{x})) (\gamma_j)_{\alpha\beta} \\ &= -\frac{ie}{2} \{ \Psi_{\sigma}^*(\mathbf{x}) (\gamma_4)_{\sigma\alpha} (\gamma_j)_{\alpha\beta} \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) - \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) (\gamma_j)_{\alpha\beta} \Psi_{\rho}^*(\mathbf{x}) (\gamma_4)_{\rho\alpha} \} \end{aligned}$$

Où nous convenons de sommer sur tous les indices deux fois répétés. Sachant que :

$$(\gamma_j)_{\alpha\beta} = (\gamma_j^T)_{\beta\alpha} = -(\gamma_j)_{\beta\alpha}$$

$$\gamma_4^T = \gamma_4; [\gamma_4 \gamma_j]_+ = 0$$

(où γ_j^T est la matrice transposée de γ_j)

Nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} J_j(\mathbf{x}) &= -\frac{ie}{2} \{ \Psi_{\rho}^*(\mathbf{x}) (\gamma_4)_{\rho\alpha} (\gamma_j)_{\alpha\beta} \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) + \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) (\gamma_j)_{\beta\alpha} (\gamma_4)_{\alpha\sigma} \Psi_{\sigma}^*(\mathbf{x}) \} \\ &= -\frac{ie}{2} \{ \Psi_{\rho}^*(\mathbf{x}) (\gamma_4 \gamma_j)_{\rho\beta} \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) + \Psi_{\beta}(\mathbf{x}) (\gamma_j \gamma_4)_{\beta\sigma} \Psi_{\sigma}^*(\mathbf{x}) \} \end{aligned}$$

Posant : $\alpha_j = i \gamma_4 \gamma_j$

$$J_j(x) = -\frac{c}{2} \{ \Psi^*(x) \alpha_j \Psi(x) - \Psi(x) \alpha_j \Psi^*(x) \}$$

Si l'on compare cette expression du courant à celle établit au moyen de fonctions d'onde non relativiste :

$$J_k(\vec{r}, t) = -\frac{c}{2m} (\Psi^*(\vec{r}, t) P_k \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) P_k \Psi^*(\vec{r}, t))$$

$$P_k = -i \frac{\delta}{\delta x_k}$$

On voit que l'on passe de l'une à l'autre en effectuant les substitutions :

$$\alpha_j \longleftrightarrow \frac{P_j}{m} \quad \Psi(x) \longleftrightarrow \varphi(\vec{r}, t)$$

REFERENCES

- [1] W. ZERNIK : Phys. Rev., 135, (1964), A 51.
- [2] W. ZERNIK : J. of Math. Phys., 6, (1965), 262.
- [3] Y. GONTIER, M. TRAHIN : Rapport CEA R 3113 (1967).
- [4] P. NELSON : Rapport CEA R 2888 (1965).
- [5] L.V. KELDYSH : Soviet Phys. JETP, 20 (1965). 1307.
- [6] H.B. BEBB, A. GOLD : Phys. Rev., 143, (1966), 1,
H.B. BEBB : Phys. Rev., 149, (1966), 25.
- [7] C. SCHWARTZ, T.J. TIEMAN : Ann. Phys. (N.Y.), 6, (1959), 178.
- [8] W.H. FURRY : Phys. Rev., 81, (1951), 115.
- [9] S.S. SCHWEBER : An introduction to relativistic quantum field theory
(chap. 15) - Harper and Row Pub. (N.Y.) (1961).
- [10] A. VISCONTI : Théorie quantique des champs (chap. VIII) Gauthier Villars
Villars (Paris) (1965).
- [11] A. MESSIAH : Mécanique quantique (chap. XVII, § 4) Dunod.
- [12] H.A. BETHE, E. SALPETER : Quantum mechanics of one and two electron atoms.
Academic Press Inc. (N.Y.) (1957).
- [13] G. BREIT, H.A. BETHE : Phys. Rev., 93, (1954), 888.

FIN

**IONISATION DES ATOMES HYDROGENOÏDES PAR UN PROCESSUS
D'ABSORPTION MULTIPHOTONIQUE**

par

Yves GONTIER, Michel TRAHIN

Rapport CEA - R 3192