

# L'atome d'hélium : propriétés de structure et applications à l'ionisation par impact électronique.

Auteur : T. MONTAGNESE

Directeur : J. HANSEN Co-directeur : L.U. ANCARANI

Université Paul Verlaine de Metz - Ecole doctorale SESAMES

Laboratoire de Physique Moléculaire et des Collisions

## Résumé de la thèse :

L'atome d'hélium (He) est en mécanique quantique l'équivalent du problème à trois corps en mécanique classique : il est constitué d'un noyau de charge  $Z$  et de deux électrons de charge  $-e$ . Depuis 1928 et les travaux précurseurs de Hylleraas [1, 2], la fonction d'onde analytique exacte de l'état fondamental de l'atome d'hélium n'est toujours pas connue. Bien que de nombreuses tentatives encourageantes ont été réalisées depuis (notamment [3, 4]), ce sont souvent des fonctions d'onde numériques — qui reproduisent très bien l'énergie moyenne variationnelle  $\langle E \rangle$  — que l'on retrouve dans la littérature (par exemple [5, 6]), au détriment des propriétés physiques intrinsèques au système. Le but de cette étude est donc de contribuer à l'étude mathématique du problème, d'une part en recherchant des propriétés analytiques issues de la mécanique quantique adaptées au problème et d'autre part en essayant de construire, à partir de ces propriétés, des fonctions d'onde de l'état  $^1S_0$  de l'atome d'hélium. Finalement, les fonctions ainsi construites sont soumises à une application de double ionisation ( $e, 3e$ ) par impact électronique.

Dans cette perspective, nous réalisons au premier chapitre une analyse de l'équation de Schrödinger non-relativiste de l'hélium dans l'état fondamental. Nous montrons que la fonction d'onde  $\Psi$  satisfaisant à l'équation  $\widehat{H}\Psi = E\Psi$  — où  $\widehat{H}$  est l'opérateur hamiltonien total et  $E$  la valeur propre représentant l'énergie — peut être décrite avec trois variables indépendantes. En l'occurrence, les variables radiales  $r_1, r_2$  et  $r_{12}$  représentant respectivement les distances  $e_1^-$ -noyau,  $e_2^-$ -noyau et  $e_1^- - e_2^-$  sont particulièrement bien adaptées à notre travail. Ensuite nous nous intéressons aux points singuliers de l'hamiltonien ( $r_1 = 0, r_2 = 0, r_{12} = 0$ ) et une étude du potentiel coulombien ainsi que des *zones de potentiel* associées, permet d'établir la forme exacte de la fonction d'onde dans des cas limites. En fin de chapitre, nous nous intéressons à l'énergie  $\langle E \rangle$  du système et une attention particulière est portée à l'énergie locale  $E_{Loc} = (\widehat{H}\Psi)/\Psi$  qui dépend des trois variables radiales [7] :  $E_{Loc}$  est l'un des

principaux critères d'évaluation de la qualité des fonctions d'onde test.

Au cours des deux chapitres suivants, nous utilisons les variables  $r_1$ ,  $r_2$  et  $r_{12}$  pour découper l'espace total en plusieurs *régions*, dont nous étudions les propriétés physiques et mathématiques. Ainsi les *régions de coalescence simple*, pour lesquelles deux corps sont voisins l'un de l'autre, sont abordées au second chapitre selon plusieurs approches : le théorème de Kato [8] et ses relations de CUSP, les relations de Bingel [9], de Rassolov [10] et de Pupyshev [11]. Parallèlement, les *régions de double coalescence* sont l'occasion d'illustrer le point triple de coalescence (PTC) et une étude de l'opérateur  $\widehat{H}'_{12}$  — qui contient le caractère inséparable du système — est ensuite réalisée. Le troisième chapitre traite des *régions asymptotiques simples* et des *régions doublement asymptotiques* : la fonction simplement asymptotique [4, 12] et la fonction doublement asymptotique [13] renseignent sur les propriétés de la fonction d'onde  $\Psi$  dans ces régions éloignées du noyau.

Le quatrième chapitre est l'occasion de tester différentes fonctions d'ondes bien connues dans la littérature [2, 5, 6, 14]. Nous vérifions si ces fonctions respectent les propriétés analytiques énoncées dans les chapitres précédents et nous les soumettons toutes au test de l'énergie locale. De plus, nous présentons une nouvelle fonction d'onde  $\Psi_T$  que nous avons construit en respectant certaines de ces relations.

Dans le cinquième chapitre, le principal sujet concerne les fonctions d'onde diagonales  $\Psi_D$ . Nous nous intéressons d'abord à la diagonalisation de l'hamiltonien  $\widehat{H}_D$  correspondant à l'hamiltonien total  $\widehat{H}$  sans l'opérateur non-orthogonal  $\widehat{H}'_{12}$ . Nous montrons alors que les fonctions propres associées à l'opérateur  $\widehat{H}_D$  sont des coulombiennes et que la fonction d'onde de Pluvinage [3] n'est qu'un cas particulier des fonctions  $\Psi_D$  [15]. Ensuite nous construisons de nouvelles fonctions d'ondes inspirées du modèle bien connu de l'interaction de configuration [16] et possédant, terme à terme, les propriétés mathématiques des fonctions diagonales. L'énergie locale  $E_{Loc}$  s'avère alors très utile pour comprendre les propriétés physiques et mathématiques de ces fonctions.

Enfin dans le dernier chapitre, une application à la double ionisation  $(e, 3e)$  de l'atome d'hélium par impact électronique est proposée. Pour cela nous confrontons les sections efficaces différentielles quintuples, obtenues avec les fonctions d'ondes étudiées précédemment [15, 17], aux résultats expérimentaux existant dans la littérature [18]. Nous essayons alors de mettre en évidence l'influence des propriétés analytiques de la fonction d'onde sur la forme et l'amplitude des sections efficaces.

- 
- [1] E. A. Hylleraas, *Zeit. Phys.* **48**, 469 (1928).
- [2] E. A. Hylleraas, *Zeit. Phys.* **54**, 347 (1929).
- [3] P. Pluvinage, *Ann. Phys.* **5**, 145 (1950).
- [4] U. Kleinekathöfer *et al*, *Phys. Rev. A* **54**, 2840 (1996).
- [5] R. A. Bonham and D. A. Kohl, *J. Chem. Phys.* **45**, 2471 (1966).
- [6] T. Kinoshita, *Phys. Rev.* **105**, 1490 (1957).
- [7] J. H. Bartlett Jr, *Phys. Rev.* **51**, 661 (1937).
- [8] T. Kato, *Comm. P. A. Math.* **10**, 151 (1957).
- [9] W. A. Bingel, *Zeit. Nat.* **18a**, 1249 (1963).
- [10] V. A. Rassolov and D. M. Chipman, *J. Chem. Phys.* **104**, 9908 (1996).
- [11] V. V. Pupyshev, *Theor. Math. Phys.* **136**, 970 (2003).
- [12] S. H. Patil, *J. Chem. Phys.* **80**, 2689 (1984).
- [13] Y. V. Popov and L. U. Ancarani, *Phys. Rev. A* **62**, 042702 (2000).
- [14] C. L. Sech, *J. Phys. B* **30**, L47 (1997).
- [15] L. U. Ancarani, T. Montagnese, and C. Dal Cappello, *Phys. Rev. A* **70**, 012711 (2004).
- [16] A. W. Weiss, *Phys. Rev.* **122**, 1826 (1961).
- [17] S. Jones *et al*, *Phys. Rev. A* **70**, 012712 (2004).
- [18] A. Lahmam-Bennani *et al*, *Phys. Rev. A* **59**, 3548 (1999).